UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

Luiz Felipe Guain Teixeira

**Calibração de Funcionais de Densidade
para Cálculos de Constante de
Acoplamento Indireto Spin-Spin**

Versão corrigida da Dissertação conforme Resolução CoPGr 5890

O original se encontra disponível na Secretaria de Pós-Graduação do IQ-USP

São Paulo

Data do Depósito na SPG:

30/11/2018

Luiz Felipe Guain Teixeira

Calibração de Funcionais de Densidade
para Cálculos de Constante de
Acoplamento Indireto Spin-Spin

Dissertação apresentada ao Instituto de Química
da Universidade de São Paulo para obtenção
do Título de Mestre em Ciências (Química)

Orientador: Lucas Colucci Ducati

São Paulo

2018

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Ficha Catalográfica elaborada eletronicamente pelo autor, utilizando o programa desenvolvido pela Seção Técnica de Informática do ICMC/USP e adaptado para a Divisão de Biblioteca e Documentação do Conjunto das Químicas da USP

Bibliotecária responsável pela orientação de catalogação da publicação:
Marlene Aparecida Vieira - CRB - 8/5562

G898c Guain Teixeira, Luiz Felipe
 Calibração de Funcionais de Densidade para
 Cálculos de Constante de Acoplamento Indireto Spin-
 Spin / Luiz Felipe Guain Teixeira. - São Paulo,
 2019.
 641 p.

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

Orientador: Ducati, Lucas Colucci

1. Teoria do Funcional da Densidade. 2. DFT. 3.
Ressonância Magnética Nuclear. 4. RMN. 5. Constantes
de Acoplamento Indireto Spin-Spin. I. T. II.
Ducati, Lucas Colucci, orientador.

*“If you don’t know where you are going,
any road will get you there.”*

Lewis Carroll

*“In the universe the difficult things
are done as if they were easy.”*

Lao-Tsu

*“It is a capital mistake to theorize
before one has data. Insensibly one
begins to twist facts to suit theories
rather than theories to suit facts.”*

Sherlock Holmes

*“Research is what I am doing when
I don’t know what I am doing.”*

Werner von Braun

*“The numbers are meaningless,
but the trends are important.”*

Larry Burggraf

Agradecimentos

À FAPESP, pelo apoio financeiro de minha bolsa de mestrado (#2016/19365-7), participação em congressos e ajuda financeira da infra-estrutura do laboratório; ao CNPq pela bolsa inicialmente concedida e ajuda financeira da infra-estrutura do programa; à CAPES pela ajuda financeira da infra-estrutura do programa; e ao LNCC pelo acesso ao supercomputador Santos Dumont.

Aos meus pais Denise e Wilson, e meu irmão Thiago, pelo imenso apoio e suporte recebido durante o mestrado, a graduação e toda a minha formação.

Ao professor e orientador Lucas Colucci Ducati, o qual eu sou imensamente grato pela orientação de meu mestrado, pela amizade e pela minha formação como pesquisador.

Ao Bruno, pelo carinho, pelo apoio e pelas várias horas que me ouviu falando sobre o desenvolvimento de todo o projeto até a dissertação.

Aos colegas de laboratório Marcelo e Patrick, pelas discussões científicas, pelas ótimas contribuições no projeto e na minha formação como pesquisador.

Aos meus colegas da Turma 22 do curso de Ciências Moleculares Artur, Estêvão, Felipe, Gabriel, Lucas, Paulo, Renzo, Rodolfo, Rodrigo e Thiago, pelos anos de graduação, pelas discussões científicas, pela amizade e pela troca de conhecimento.

Aos demais colegas do curso de Ciências Moleculares, pela troca de conhecimento, pelas conversas, pelas discussões científicas, e momentos juntos.

Aos colegas de pós-graduação Veronica, Antonio Ricardo e outros, pelas disciplinas juntos, pelas discussões científicas, pela amizade e pela troca de conhecimento.

Aos professores Kaline Coutinho, Sylvio Canuto, Fernando Ornellas, Ataulpa Braga, Antonio Carlos Borin, Fabio Rodrigues, Vitor Zamarion, Thiago Correra, Lucas Rodrigues e outros, pelas discussões científicas e pelo apoio na formação como mestre.

Aos demais professores que tive contato na graduação, no ensino médio e fundamental, e um abraço especial ao Maurício Rodrigues, pela inspiração, pelos ensinamentos, pelas

conversas e pela amizade.

Àqueles que indiretamente estiveram envolvidos, seja pela prestação de serviços que mantêm o instituto, a universidade e a cidade funcionando, pela contribuição indireta através da parcela dos impostos destinada à universidade e às agências de fomento à pesquisa, ou pela luta por um acesso gratuito aos conhecimentos, pela valorização da ciência brasileira, por uma educação mais justa, inclusiva e igualitária.

A todos um grande e sincero “muito obrigado”!

Resumo

Guain Teixeira, L. F. **Calibração de Funcionais de Densidade para Cálculos de Constante de Acoplamento Indireto Spin-Spin.** Dissertação - Programa de Pós-Graduação em Química. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.

O presente trabalho descreve a investigação de funcionais de densidade para os cálculos das constantes escalares de acoplamento indireto spin-spin para diferentes tipos de átomos. 26 DFTs são inicialmente avaliados para um conjunto de calibração contendo constantes de acoplamento indireto spin-spin das moléculas HF, CO, H₂O, NH₃, PH₃, PF₃, BHF₂, BF₃, F₂O, CH₄, C₂H₂, C₂H₄ e C₂H₆. As estratégias utilizadas envolvem principalmente o ajuste da porcentagem de troca orbital Hartree-Fock (E_X^{HF}), a fim de melhorar a precisão. Estudos anteriores sugeriram que a utilização de uma certa porcentagem de troca exata contribui para obter resultados mais precisos para as constantes de acoplamento. Do total, BHandH, B1B95, a família B97 e a família ω B97 forneceram bons resultados para o conjunto de calibração. Em geral, DFTs híbridos contendo entre 30% e 50% de E_X^{HF} em sua composição apresentam valores mais precisos para as constantes de acoplamento. Os funcionais modificados B1B95 40% E_X^{HF} , BHandH 40% E_X^{HF} e B972B95 60% E_X^{HF} apresentam ótima precisão para rotinas de otimização de geometria e cálculo da constante de acoplamento. Para funcionais corrigidos no longo alcance, a porcentagem E_X^{HF} não é bem definida, mas pode ser ajustada em termos de três parâmetros. Uma versão de ω B97XD com γ incrementado para 0,35 tem ótima precisão, assim como uma

versão de ω B97X com α incrementado para 0,2. Versões corrigidas no longo alcance de B1B95 e BHandH fornecem excelentes precisões com $\alpha=0,4$, $\alpha + \beta =1,0$ e γ ajustado ao funcional. Os funcionais de longo alcance e o B972B95 60% E_X^{HF} desafiam os níveis de teoria SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2), que apresentam boa precisão independente do tipo de núcleo envolvido no acoplamento. O termo do contato de Fermi está principalmente associado às diferenças nos resultados para as constantes de acoplamento calculadas entre os métodos. Segundo o teorema de Janak, os funcionais de longo alcance estão mais próximos do comportamento exato de um funcional; o aumento da troca exata em DFTs híbridos leva a um aumento da localização eletrônica, levando a concavidades menores. A utilização de um conjunto teste com mais tipos de acoplamento reforça a ótima precisão obtida com B1B95 40% E_X^{HF} , BHandH 40% E_X^{HF} e suas versões de longo alcance.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade, DFT, Ressonância Magnética Nuclear, RMN, Constantes de Acoplamento Indireto Spin-Spin, Calibração.

Abstract

Guain Teixeira, L. F. **Density Functional Calibration for Indirect Spin-Spin Coupling Constant Calculations.** Masters Thesis - Graduate Program in Chemistry. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.

This work seeks to describe the investigation of density functionals for calculating indirect spin-spin scalar coupling constants for different types of atoms. 26 DFTs are initially evaluated for a calibration set containing HF, CO, H₂O, NH₃, PH₃, PF₃, BHF₂, BF₃, F₂O, CH₄, C₂H₂, C₂H₄ and C₂H₆ indirect spin-spin coupling constants. The strategies used mainly involve adjusting the percentage of Hartree-Fock orbital exchange (E_X^{HF}) in order to increase accuracy. Previous studies have suggested that the use of a certain percentage of exact exchange contributes to obtain more accurate results for coupling constants. Overall, BHandH, B1B95, B97 family and ω B97 family have provided good results for the calibration set. In general, hybrid DFTs containing between 30% and 50% E_X^{HF} in their composition show more accurate values for the coupling constants. The modified functionals B1B95 40% E_X^{HF} , BHandH 40% E_X^{HF} and B972B95 60% E_X^{HF} have optimal accuracy for geometry optimization and coupling constant calculation routines. For long-range corrected functionals, E_X^{HF} percentage is not well defined but can be adjusted in terms of three parameters. A version of ω B97XD with γ increased to 0.35 has great accuracy, as well as a version of ω B97X with α increased to 0.2. Long-range corrected versions of B1B95 and BHandH provided excellent accuracies with $\alpha = 0.4$, $\alpha + \beta = 1.0$ and

γ adjusted to the functional. Long-range functionals and B972B95 60% E_X^{HF} challenge SOPPA(CCSD) and SOPPA(CC2) levels of theory, which have good accuracy regardless of the core type involved in the coupling. Fermi-contact term is mainly associated with the differences from results of calculated coupling constants between methods. According to Janak's theorem, long-range functionals are closest to the exact behavior of a functional; increasing exact exchange in hybrid DFTs leads to an increased electronic localization, leading to lower concavities. Using a test set with more coupling types reinforces the optimum accuracy obtained with B1B95 40% E_X^{HF} , BHandH 40% E_X^{HF} and their long-range versions.

Keywords: Density Functional Theory, DFT, Nuclear Magnetic Resonance, NMR, Indirect Spin-Spin Coupling Constant, Benchmark.

Sumário

1	Introdução	15
1.1	Ressonância Magnética Nuclear	15
1.2	Teoria do Funcional da Densidade	22
1.3	Funcionais e o cálculo de propriedades magnéticas	27
1.4	Exatidão e comportamento dos funcionais	30
2	Objetivos	35
3	Detalhes Computacionais	37
4	Resultados e Discussão	43
4.1	Precisão dos funcionais da literatura	43
4.2	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos	48
4.2.1	Geometrias experimentais	48
4.2.2	Geometrias otimizadas	51
4.3	Correções vibracionais para os funcionais testados	56
4.4	Geração de novos funcionais combinando E_X^{HF} , E_X^{DFT} e E_C^{DFT}	73
4.4.1	Geometrias experimentais	73
4.4.2	Geometrias otimizadas	81
4.5	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais de longo alcance . . .	87
4.5.1	Geometrias experimentais	87
4.5.2	Geometrias otimizadas	91
4.6	Geração de novos funcionais de longo alcance	96
4.6.1	Geometrias experimentais	96
4.6.2	Geometrias otimizadas	105
4.7	Comparação com SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD)	109

4.8	Análise dos termos FC, SD, PSO e DSO	115
4.9	Teste de precisão e Teorema de Janak	130
4.10	Teste com diferentes tipos de acoplamento	174
5	Recomendações para uso dos funcionais	179
6	Conclusões	183
7	Referências Bibliográficas	185
8	Anexos	193
8.1	Precisão dos funcionais da literatura	194
8.2	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos	198
8.2.1	Geometrias Experimentais	198
8.2.2	Geometrias Otimizadas	216
8.3	Correções vibracionais para os funcionais testados	222
8.3.1	Correções vibracionais das CAISS calculadas	224
8.3.1.1	Precisão dos funcionais da literatura	224
8.3.1.2	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbri- dos - Geometrias Experimentais	230
8.3.1.3	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbri- dos - Geometrias Otimizadas	284
8.3.2	Utilização de CAISS empíricas	302
8.3.2.1	Precisão dos funcionais da literatura	302
8.3.2.2	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbri- dos - Geometrias Experimentais	308
8.3.2.3	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbri- dos - Geometrias Otimizadas	362
8.4	Geração de novos funcionais combinando E_X^{HF} , E_X^{DFT} e E_C^{DFT}	380
8.4.1	Geometrias Experimentais	380
8.4.1.1	Troca B	380

8.4.1.2	Troca B971	389
8.4.1.3	Troca B972	398
8.4.1.4	Troca B98	407
8.4.1.5	Troca O	416
8.4.1.6	Troca PBE	425
8.4.1.7	Troca PW91	434
8.4.1.8	Troca S	443
8.4.1.9	Troca TPSS	452
8.4.2	Geometrias Otimizadas	461
8.5	Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais de longo alcance . . .	487
8.5.1	Geometrias Experimentais	487
8.5.2	Geometrias Otimizadas	511
8.6	Geração de novos funcionais de longo alcance	520
8.6.1	Geometrias Experimentais	520
8.6.1.1	B1B95 (LC-BB95)	540
8.6.1.2	BHandH (LC-SLYP)	564
8.6.2	Geometrias Otimizadas	588
8.7	Comparação com SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD)	609
8.8	Análise dos termos FC, SD, PSO e DSO	610
8.9	Teste de precisão e Teorema de Janak	620
8.10	Teste com diferentes tipos de acoplamento	633

1 Introdução

1.1 Ressonância Magnética Nuclear

A espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma indispensável ferramenta em química e bioquímica, sendo uma das técnicas mais utilizadas nos últimos anos na elucidação estrutural de moléculas orgânicas e inorgânicas em solução. Com o desenvolvimento de campos mais altos, sondas mais sensíveis e novas sequências de pulsos, hoje é possível obter espectros de RMN 1D, 2D e 3D com quantidades menores de amostra e maior rapidez.¹

Os níveis de energia estudados na espectroscopia RMN são os autoestados resultantes do hamiltoniano de spin efetivo da molécula, de acordo com a Equação 1.1, em que $\mathbf{B}$ é o campo magnético externo, $\mathbf{I}_K$ é o operador de spin nuclear, γ_K é a razão magnetogírica nuclear, σ_K é o tensor blindagem, $\mathbf{D}_{KL}$ é o acoplamento direto e $\mathbf{K}_{KL}$ é o acoplamento indireto.

$$H = - \sum_K \gamma_K \hbar \mathbf{B}^T (1 - \sigma_K) \mathbf{I}_K + \frac{1}{2} \sum_{K \neq L} \gamma_K \gamma_L \hbar^2 \mathbf{I}_K^T (\mathbf{D}_{KL} + \mathbf{K}_{KL}) \mathbf{I}_L \quad (1.1)$$

O momento de dipolo magnético nuclear, $\mathbf{M}_K$, está relacionado com o operador de spin nuclear através da razão magnetogírica nuclear, $\mathbf{M}_K = \gamma_K \hbar \mathbf{I}_K$. O acoplamento indireto também pode ser expresso em termos de γ_K , conforme a Equação 1.2. $\mathbf{K}_{KL}$ reflete mais diretamente o papel dos elétrons no acoplamento dos núcleos, enquanto $\mathbf{J}_{KL}$ considera a natureza dos núcleos e é mais utilizado para expressar o acoplamento indireto.

$$\mathbf{J}_{KL} = h \frac{\gamma_K}{2\pi} \frac{\gamma_L}{2\pi} \mathbf{K}_{KL} \quad (1.2)$$

Para sistemas isotrópicos, por exemplo moléculas com rápida reorientação, o acoplamento direto desaparece, e o tensor blindagem e o acoplamento indireto podem ser

tratados como grandezas escalares.

O tensor blindagem e o acoplamento indireto podem ser obtidos das derivadas de segunda ordem da energia $E = E(\mathbf{B}, \{\mathbf{M}_K\})$, obtidas em torno de $\mathbf{B} = 0$ e $\mathbf{M}_K = 0$, através do tratamento perturbativo, conforme a Equação 1.3. Os termos de primeira ordem são nulos para sistemas de camada fechada; termos de ordem superior são desprezados devido às diminutas perturbações.

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \mathbf{B}^T \left(\frac{d^2 E}{d\mathbf{B}^2} \right) \mathbf{B} + \sum_K \mathbf{B}^T \left(\frac{d^2 E}{d\mathbf{B} d\mathbf{M}_K} \right) \mathbf{M}_K + \frac{1}{2} \sum_{K \neq L} \mathbf{M}_K^T \left(\frac{d^2 E}{d\mathbf{M}_K d\mathbf{M}_L} \right) \mathbf{M}_L \quad (1.3)$$

O tensor blindagem e o acoplamento indireto, pela comparação entre as Equações 1.1 e 1.3, são obtidos por $\boldsymbol{\sigma}_K = \frac{d^2 E}{d\mathbf{B} d\mathbf{M}_K} + \mathbf{1}$ e $\mathbf{K}_{KL} = \frac{d^2 E}{d\mathbf{M}_K d\mathbf{M}_L} - \mathbf{D}_{KL}$. Desta forma, as propriedades de RMN podem ser obtidas a partir do hamiltoniano molecular, apresentado na Equação 1.4, em que $\mathbf{m}_i = g\mu_B \mathbf{s}_i$ é o dipolo magnético eletrônico, $\boldsymbol{\pi}_i = -i\nabla_i + \mathbf{A}^{\text{tot}}(\mathbf{r}_i)$ é o momento linear canônico eletrônico e $\mathbf{B}^{\text{tot}} = \nabla_i \times \mathbf{A}^{\text{tot}}$ é o campo magnético total.

$$\begin{aligned} H(\mathbf{B}, \{\mathbf{M}_K\}) = & \frac{1}{2} \sum_i \pi_i^2 - \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}^{\text{tot}}(\mathbf{r}_i) - \sum_K \frac{Z_K}{r_{iK}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{K \neq L} \frac{Z_K Z_L}{R_{KL}} - \sum_K \mathbf{M}_K \cdot \mathbf{B}^{\text{tot}}(\mathbf{R}_K) + \sum_{K > L} \mathbf{M}_K^T \mathbf{D}_{KL} \mathbf{M}_L \end{aligned} \quad (1.4)$$

Utilizando o potencial vetor $\mathbf{A}^{\text{tot}}(\mathbf{r}_i) = \mathbf{A}_O(\mathbf{r}_i) + \sum_K \mathbf{A}_K(\mathbf{r}_i)$ no calibre (*gauge*) de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), com $\mathbf{A}_O(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_{iO}$ e $\mathbf{A}_K(\mathbf{r}_i) = \alpha^2 \frac{\mathbf{M}_K \times \mathbf{r}_{iK}}{r_{iK}^3}$ na Equação 1.4, são obtidas as Equações 1.5, 1.6, 1.7 e 1.8 para as derivadas de $H(\mathbf{B}, \{\mathbf{M}_K\})$.

$$\frac{dH}{d\mathbf{B}} = \mathbf{h}_B^{\text{ORB}} + \mathbf{h}_B^{\text{SPN}} \quad (1.5) \quad \frac{d^2 H}{d\mathbf{B} d\mathbf{M}_K} = -\mathbf{1} + \mathbf{h}_{BK}^{\text{DIA}} \quad (1.7)$$

$$\frac{dH}{d\mathbf{M}_K} = \mathbf{h}_K^{\text{PSO}} + \mathbf{h}_K^{\text{SD}} + \mathbf{h}_K^{\text{FC}} \quad (1.6) \quad \frac{d^2 H}{d\mathbf{M}_K d\mathbf{M}_L} = \mathbf{D}_{KL} + \mathbf{h}_{KL}^{\text{DSO}} \quad (1.8)$$

O operador orbital (ORB) corresponde à soma dos momentos angulares eletrônicos

($\mathbf{l}_{iO}$), e o operador de spin (SPN) corresponde à soma dos spins eletrônicos.

$$\mathbf{h}_B^{ORB} = \frac{1}{2} \sum_i \mathbf{l}_{iO} = -\frac{i}{2} \sum_i \mathbf{r}_{iO} \times \nabla_i \quad (1.9)$$

$$\mathbf{h}_B^{SPN} = -\sum_i \mathbf{m}_i = \sum_i g\mu_B \mathbf{s}_i \quad (1.10)$$

O operador Paramagnético Spin-Órbita (PSO), ou operador Orbital Hiperfino (OH), acopla os momentos nucleares magnéticos com o movimento orbital eletrônico ($\mathbf{l}_{iK}$).

$$\mathbf{h}_K^{PSO} = \alpha^2 \sum_i \frac{\mathbf{l}_{iK}}{r_{iK}^3}. \quad (1.11)$$

Já os operadores Spin-Dipolar (SD) e Contato de Fermi (FC) acoplam os momentos magnéticos nucleares com o spin eletrônico, representados nas Equações 1.12 e 1.13, respectivamente:

$$\mathbf{h}_K^{SD} = \alpha^2 \sum_i \frac{r_{iK}^2 \mathbf{m}_i - 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{iK}) \mathbf{r}_{iK}}{r_{iK}^5} \quad (1.12)$$

$$\mathbf{h}_K^{FC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_i \delta(\mathbf{r}_{iK}) \mathbf{m}_i. \quad (1.13)$$

O operador FC representa a interação direta entre o momento dipolar eletrônico e a fonte de campo magnético (momento magnético nuclear) e tem contribuição significativa para o Hamiltoniano molecular eletrônico quando o elétron se encontra próximo ao núcleo.

O operador diamagnético (DIA) é expresso pela Equação 1.14.

$$\mathbf{h}_{BK}^{DIA} = \frac{\alpha^2}{2} \sum_i \frac{(\mathbf{r}_{iO} \cdot \mathbf{r}_{iK}) \mathbf{1} - \mathbf{r}_{iK} \mathbf{r}_{iO}^T}{r_{iK}^3} \quad (1.14)$$

O operador diamagnético spin-orbita (DSO) é expresso pela Equação 1.15, e é a resposta da função de onda não perturbada imersa no campo magnético.

$$\mathbf{h}_{KL}^{DSO} = \frac{\alpha^4}{2} \sum_i \frac{(\mathbf{r}_{iK} \cdot \mathbf{r}_{iL}) \mathbf{1} - \mathbf{r}_{iK} \mathbf{r}_{iL}^T}{r_{iK}^3 r_{iL}^3} \quad (1.15)$$

Dentro da aproximação não-relativística descrita por Ramsey,^{2,3} o tensor blindagem e tensor da constante de acoplamento nuclear indireta spin-spin ($\mathbf{J}$), pela teoria de perturbação independente do tempo não-degenerada, são dados pelas Equações 1.16 e 1.17 respectivamente, sendo $|n_S\rangle$ estado singleto, $|n_T\rangle$ estado tripleto.

$$\sigma_K = \langle 0 | \mathbf{h}_{BK}^{DIA} | 0 \rangle - 2 \sum_{n_S \neq 0} \frac{\langle 0 | \mathbf{h}_B^{orb} | n_S \rangle \langle n_S | (\mathbf{h}_K^{PSO})^T | 0 \rangle}{E_{n_S} - E_0} \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{KL} = h \frac{\gamma_K}{2\pi} \frac{\gamma_L}{2\pi} \left[\langle 0 | \mathbf{h}_{KL}^{DSO} | 0 \rangle - 2 \sum_{n_S \neq 0} \frac{\langle 0 | \mathbf{h}_K^{PSO} | n_S \rangle \langle n_S | (\mathbf{h}_L^{PSO})^T | 0 \rangle}{E_{n_S} - E_0} \right. \\ \left. - 2 \sum_{n_T \neq 0} \frac{\langle 0 | \mathbf{h}_K^{SD} + \mathbf{h}_K^{FC} | n_T \rangle \langle n_T | (\mathbf{h}_L^{SD})^T + (\mathbf{h}_L^{FC})^T | 0 \rangle}{E_{n_T} - E_0} \right] \quad (1.17) \end{aligned}$$

Assim a descrição da constante de acoplamento indireta spin-spin não relativística (Equação 1.17) é composta por quatro mecanismos distintos: FC (Contato de Fermi), SD (Spin Dipolar), PSO (Paramagnético Spin Órbita) e DSO (Diamagnético Spin Órbita) onde *a priori* todos os termos são importantes e nenhum deles pode ser ignorado.

Teoricamente, a estimativa dos parâmetros da RMN através de teoria da mecânica quântica, como o tensor de blindagem nuclear (σ) e a constante de acoplamento nuclear indireta ($\mathbf{J}$), tem se tornado rotina por proporcionar resultados detalhados da estrutura eletrônica e geometria de moléculas, sendo frequentemente usada como ferramenta complementar em interpretação e atribuição de espectros de RMN.⁴⁻⁷

Ambas as equações de Ramsey,^{2,3} apresentam uma parte diamagnética que corresponde ao valor obtido para a função de onda eletrônica no estado não perturbado; e uma parte paramagnética que representa a relaxação da função de onda em resposta a uma perturbação externa, nesse caso o campo magnético homogêneo $\mathbf{B}$.

No tensor blindagem nuclear (Equação 1.16) não há contribuição da parte de spin, diferentemente do tensor de constante de acoplamento spin-spin (Equação 1.17) em que o componente paramagnético geralmente é mais importante que o orbital. Entretanto, há casos em que a componente orbital pode ser significativa e dominante, apesar de raros.^{8,9}

Os primeiros dois termos da Equação 1.17 representam a contribuição orbital para o tensor de acoplamento, com a soma de todos os estados singletos excitados (n_S); o terceiro termo representa a contribuição de spin, com a soma sobre todos os estados tripletos (n_T).

Figura 1.1: Mecanismo de transmissão dos termos FC e SD

Figura 1.2: Mecanismo de transmissão dos termos PSO e DSO

A Figura 1.1 mostra o mecanismo de transmissão dos termos FC e SD e a Figura 1.2 ilustra o mecanismo de transmissão dos termos PSO e DSO.¹⁰ Nota-se que as contribuições DSO e PSO são originadas do movimento orbital eletrônico e as contribuições FC e SD e

SD-FC são originadas do spin eletrônico, ou seja, do momento magnético eletrônico.

Na maioria dos casos, o operador FC é o termo dominante na contribuição do valor da constante de acoplamento indireto spin-spin e desacopla spins eletrônicos emparelhados em um núcleo permitindo a interação com o momento magnético dipolar do núcleo vizinho. O termo SD-FC não contribui para a constante de acoplamento isotrópica, porém é importante para os acoplamentos anisotrópicos. O termo PSO se dá pela interação do momento magnético nuclear com o momento orbital eletrônico. Já a contribuição do termo DSO geralmente é a menor das quatro existentes.

Pela forma dos operadores que descrevem os mecanismos de acoplamento propostos por Ramsey, nota-se que DSO, PSO e SD tratam da parte externa ou de valência da função de onda eletrônica, enquanto que FC estima a qualidade da mesma na região próxima aos núcleos ou no caroço.

A estimativa das três contribuições PSO, FC e SD são muito custosas computacionalmente. O uso direto das expressões das somas sobre todos os estados (*Sum Over States*) requer conhecimento de todos os estados singletos e tripletos excitados, portanto não pode ser calculado na prática.⁴

Ao invés disso, as três contribuições para o acoplamento spin-spin são obtidas através da teoria da resposta linear, onde três equações de resposta singlete e sete equações de resposta tripleto para cada núcleo são resolvidas.^{11,12}

Mesmo com essas simplificações na estimativa dos estados singletos e tripletos, o cálculo das constantes de acoplamento tem alto custo computacional, pois além de envolver a perturbação de estados de campos magnéticos gerados pelo núcleo estacionário, necessita da perturbação de estados tripletos.¹³ Estes estados tripletos por sua vez dependem fortemente da qualidade da função de onda e conseqüentemente do conjunto de funções de base empregado e a precisão dos resultados requer uma alta flexibilidade na descrição dos estados eletrônicos.¹⁴⁻²¹

Para a descrição dos estados tripletos tem-se empregado vários funcionais de densidade e métodos *ab initio* correlacionados eletronicamente, por não apresentarem problemas de instabilidade tripleto como é característico no Hartree-Fock.²²

A Figura 1.3 ilustra os níveis de teoria disponíveis na literatura para estimar os parâmetros de J e σ .²³ Cada nível de teoria usa diferentes aproximações para estimar os operadores da energia de perturbação de segunda ordem (FC, SD e PSO). Em nível Hartree-Fock, por exemplo, apesar de não aconselhada, é utilizada a perturbação finita FP-HF, mais conhecida pelos físicos como RPA (*Random Phase Approximation*). Já em nível DFT usa-se a perturbação acoplada, CP-DFT, e em nível *Coupled Cluster* há disponível duas aproximações equivalentes: a Resposta Linear LR-CCSD ou a Equação de movimento (EOM - *Equation-of-Motion*) EOM-CCSD.

Figura 1.3: Níveis de teoria disponíveis para estimar constantes de acoplamento spin spin (J) e tensor blindagem (σ).

Embora os parâmetros de RMN para pequenas moléculas possam ser calculados por um grande número de métodos incluindo *Coupled Cluster* e *CAS* (Complete Active Space), funções de base grandes e flexíveis são necessárias para obtenção de valores precisos de tensor blindagem e acoplamento spin-spin para núcleos como ^{13}C , ^{19}F e ^{17}O .^{4,23,24} O método do funcional de densidade (DFT) é o único método capaz de tratar rotineiramente sistemas com mais de 20 átomos com razoável precisão²³ pois, as aproximações para os cálculos das constantes de acoplamento neste nível tem sido aprimoradas exaustivamente.^{22,25–28}

1.2 Teoria do Funcional da Densidade

O tempo gasto em função do custo computacional se comporta em uma escala linear em relação ao tamanho do sistema molecular, possibilitando o estudo dos acoplamento de estruturas biopoliméricas como a valinomicina, que contém 168 átomos e 7587 acoplamentos únicos com carbono.²⁹ Nestes sistemas as constantes de acoplamento têm um papel importante, como o caso dos acoplamentos vicinais (três ligações) na determinação de ângulos diedros desde os trabalhos clássicos de Karplus,^{30,31} do geminal (duas ligações), dos acoplamentos a uma ligação (especialmente envolvendo ^{13}C e ^{15}N) e ao longo alcance envolvendo núcleos de ^1H usados para determinação e elucidação de estruturas moleculares.^{24,32,33}

Isso faz do DFT um poderoso método em química quântica para cálculos de propriedade de estado fundamental e excitado em grandes sistemas moleculares. A descrição de correlação eletrônica dentro da teoria da mecânica quântica é imprescindível para predição de propriedades moleculares com boa precisão.

Em sua forma original, o método DFT associa a energia molecular como um funcional universal da densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$, com os orbitais moleculares calculados a partir de um potencial (semi)local.³⁴ De modo mais geral, esse potencial também pode ser não-local e depender explicitamente dos orbitais, fazendo com que as aproximações sejam desenvolvidas dentro desses critérios.

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \Psi | \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \Psi \rangle \quad (1.18)$$

A teoria do funcional de densidade utiliza a densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$, obtida a partir da função de onda de várias partículas $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ através da Equação 1.18. Desta maneira, em vez de resolver a equação de Schrödinger para obter a função de onda de muitas partículas, a resolução é feita para a densidade eletrônica, e é conhecida como equações de Kohn-Sham.³⁵

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (1.19)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (1.20)$$

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + E_H[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (1.21)$$

A Equação 1.19 envolve a solução dos orbitais ϕ_i para obtenção da densidade ρ através da Equação 1.20. Para a Equação 1.21, $T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right) \phi_i(\mathbf{r})$ é a energia cinética, $E_H[\rho] = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ é a energia coulômbica, $E_{XC}[\rho]$ é a energia de troca-correlação e $V_{ext}(\mathbf{r})$ é o potencial externo, que são as interações elétron-núcleo para sistemas moleculares. Desta forma, o potencial efetivo na Equação 1.19 é dado pela forma descrita na Equação 1.22.

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + e^2 \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{XC}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (1.22)$$

A determinação da energia de troca-correlação é um grande desafio na teoria do funcional densidade. A energia pode ser separada em um termo de troca e outro de correlação, conforme a Equação 1.23. Diversos funcionais de troca e correlação foram desenvolvidos para obter uma expressão da energia de troca-correlação.

$$E_{XC}[\rho] = E_X[\rho] + E_C[\rho] = \int d^3r \varepsilon_X[\rho]\rho(\mathbf{r}) + \int d^3r \varepsilon_C[\rho]\rho(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

Perdew sugeriu uma escada de funcionais atingindo o “paraíso da mecânica quântica”, em que cada degrau era representado por uma classe de funcionais: *local density approximation* LDA(degrau 1), *generalized gradient approximations* GGA(degrau 2), GGA híbrido(degrau 3), e assim por diante.³⁶ Dentro dessa hierarquia, propriedades moleculares estáticas podem ser calculadas por derivadas da energia. A classe de funcionais LDA (LSDA no caso geral) assume o tratamento local da densidade como um gás uniforme de elétrons, representada na Equação 1.24. O funcional energia de troca-correlação (E_{XC})

depende somente do valor da densidade em cada ponto do espaço.³⁷

$$E_X^{LSDA}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = -2^{1/3} C_X \int \left(\rho_\alpha^{4/3} + \rho_\beta^{4/3} \right) d\vec{r} \quad (1.24)$$

Em que a energia de troca é dada por $E_X[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_X[\rho(\vec{r})] d\vec{r}$. A aproximação por um gás uniforme de elétrons geralmente é válida para o tratamento da densidade eletrônica de metais simples, sendo o único caso em que é possível definir a energia de troca-correlação com grande precisão.³⁸ A energia de troca ε_X foi aproximada por Slater como $\varepsilon_X^{LDA} = -C_X \rho^{1/3}$, e diversas proposições, como *Perdew-Wang* (PW) e *Vosko-Wilk-Nusair* (VWN), foram feitas para a energia de correlação ε_C .³⁷

Os funcionais GGA consideram a não-uniformidade do gás de elétrons, e o tratamento dado leva em conta não apenas uma densidade ρ localmente constante, mas também seu gradiente $\nabla\rho$ (1º termo da expansão de Taylor), representado na Equação 1.25. A energia de troca-correlação é obtida através de um funcional F que depende de ρ e $\nabla\rho$.³⁸

$$E_{XC}^{GGA}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = \int F(\rho_\alpha(r), \rho_\beta(r), \nabla\rho_\alpha(r), \nabla\rho_\beta(r)) dr \quad (1.25)$$

Uma das primeiras propostas para o funcional F foi feita por *Becke* (apresentado na Equação 1.26), conhecida como B (ou B88), que apresenta um funcional de troca com comportamento assintótico correto para a densidade de energia, porém incorreto para o potencial de troca.³⁷

$$\varepsilon_X^{B88} = \varepsilon_X^{LDA} + \Delta\varepsilon_X^{B88} \quad , \quad \Delta\varepsilon_X^{B88} = -\beta \rho^{1/3} \frac{x^2}{1 + 6\beta x \sinh^{-1} x} \quad , \quad x = \frac{|\nabla\rho|}{\rho^{4/3}} \quad (1.26)$$

Um dos funcionais de correlação propostos mais popular foi desenvolvido por *Lee-Yang-Parr* (apresentado na Equação 1.27), conhecido como LYP, que não inclui correlação de spin paralelos pra situações com todos os spins alinhados.

$$\begin{aligned}
\varepsilon_C^{LYP} = & -4a \frac{\rho_\alpha \rho_\beta}{\rho^2(1 + d\rho^{-1/3})} - ab\omega \left\{ \frac{\rho_\alpha \rho_\beta}{18} \left[144(2^{2/3})C_F(\rho_\alpha^{8/3} + \rho_\beta^{8/3}) + (47 - 7\delta)|\nabla\rho|^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - (45 - \delta)(|\nabla\rho_\alpha|^2 + |\nabla\rho_\beta|^2) + 2\rho^{-1}(11 - \delta)(\rho_\alpha|\nabla\rho_\alpha|^2 + \rho_\beta|\nabla\rho_\beta|^2) \right] \right. \\
& \left. + \frac{2}{3}\rho^2(|\nabla\rho_\alpha|^2 + |\nabla\rho_\beta|^2 - |\nabla\rho|^2) - (\rho_\alpha^2|\nabla\rho_\alpha|^2 + \rho_\beta^2|\nabla\rho_\beta|^2) \right\} \quad , \\
\omega = & \frac{e^{-c\rho^{-1/3}}}{\rho^{14/3}(1 + d\rho^{-1/3})} \quad , \quad \delta = c\rho^{-1/3} + \frac{d\rho^{-1/3}}{(1 + d\rho^{-1/3})} \quad (1.27)
\end{aligned}$$

Das diversas outras propostas feitas para o funcional, encontram-se algumas populares como *OPTimized eXchange* (OPTX), *Perdew-Wang 1986* (PW86), *Perdew-Wang 1991* (PW91) e *Perdew-Burke-Ernzerhof* (PBE), bem como combinações delas (BLYP e OLYP, por exemplo).

Para ordens superiores do gradiente, também conhecido como meta-GGA, termos como o laplaciano ($\nabla^2\rho$) também aparecem nos funcionais. *Becke* propôs um funcional de correlação (B95) que não apresenta problema de auto interação. Também são meta-GGA funcionais como *Tao-Perdew-Staroverov-Scuseria* (TPSS), que pode ser considerado um aprimoramento do PBE.³⁷

Os funcionais GGA híbridos (também conhecidos como hiper-GGA) – como ACM, B3, B97 e PBE0 – apresentam a energia de troca-correlação como uma combinação linear de termos de troca-correlação obtidos por funcionais GGA, LSDA e termo de troca exata obtido por métodos HF. As contribuições de cada termo da combinação são determinadas para aproximar dos dados experimentais. Para o funcional GGA híbrido B3LYP, a energia de troca-correlação é dada pela Equação 1.28, com valores típicos de $a \sim 0,2$, $b \sim 0,7$ e $c \sim 0,8$. Já o funcional BHandH apresenta metade da energia de troca proveniente da troca exata, e a outra metade proveniente do modelo LSDA de Slater, conforme a Equação 1.29.³⁷

$$E_{XC}^{B3LYP} = (1 - a)E_X^{LSDA} + aE_X^{exato} + b\Delta E_X^{B88} + (1 - c)E_C^{LSDA} + cE_C^{LYP} \quad (1.28)$$

$$E_{XC}^{BHandH} = \frac{1}{2}E_X^{exata} + \frac{1}{2}(E_X^{LSDA} + E_C^{LYP}) \quad (1.29)$$

O funcional BHandH inicialmente proposto por Becke foi implementado em programas como o Gaussian 09 de acordo com a Equação 1.30.³⁹ A energia de correlação é incluída com fator de 1 ao invés de 1/2.

$$E_{XC}^{BHandH} = \frac{1}{2}E_X^{exata} + \frac{1}{2}E_X^{LSDA} + E_C^{LYP} \quad (1.30)$$

A teoria DFT dependente do tempo (TD-DFT), por sua vez, permite o cálculo de propriedades dinâmicas (dependente da frequência).⁴⁰ Contudo, ainda há vários casos em que o desempenho da teoria DFT é pouco satisfatório.⁴¹

1.3 Funcionais e o cálculo de propriedades magnéticas

Mesmo com auxílio de métodos teóricos, muitos dos comportamentos observados experimentalmente envolvendo tanto deslocamento químico, quanto constantes de acoplamento, não são claramente explicados, mas apenas observados e relatados sem maiores detalhes sobre sua origem e sobre os efeitos envolvidos no sistema molecular em questão. Por exemplo, somente em 2009 um efeito observado em vários compostos contendo átomos pesados, em especial iodo, foi explicado e teve sua origem elucidada;⁴² em 2012 foi verificada uma inesperada dependência geométrica dos tensores de segunda ordem nas constantes de acoplamento nunca antes observados, sugerindo afetar também as contribuições dos tensores de segunda ordem do tensor blindagem.⁴³

Os esforços computacionais para melhorar a precisão ainda são altos, podendo se tornar impraticável o uso do método DFT em sistemas de interesse na química, bioquímica e ciência de materiais, dependendo do tamanho do sistema molecular. Para propriedades moleculares de resposta, os problemas são severos, como por exemplo, o fato da resposta linear da teoria DFT dependente do tempo subestimar a transferência de carga das energias de excitação.⁴⁴ A ruim performance na predição do espectro eletrônico e de outras propriedades de resposta estão relacionadas, pois a primeira pode ser escrita na forma dependente da “soma sobre todos os estados” (SOS) das energias de excitação e momentos de transição. Isso leva a uma exaustiva procura por um funcional de densidade adequado para cada tipo de propriedade.

Embora possa ser insatisfatório o uso de diferentes funcionais de troca-correlação para os diferentes sistemas e propósitos, esta abordagem parece ser a solução mais prática para o momento. Deste modo, uma escolha pertinente sobre os funcionais de troca (E_X) e correlação (E_C) deve ser feita quando se utiliza o método do funcional de densidade. Nesse sentido, dentro dos cálculos de parâmetros da RMN, alguns estudos têm sido reportados com a finalidade de se encontrar o melhor funcional de densidade para a predição de valores precisos das constantes de acoplamento spin-spin e deslocamento químico.

Maximoff avaliou 96 acoplamentos $^1J_{CH}$ usando diferentes níveis de sofisticação com o

DFT (LDA, GGAs, *hybrid* GGAs e meta-GGAs), obtendo o menor erro absoluto para o não-empírico GGA PBE. Este funcional se mostrou ser mais eficiente que o popular funcional de densidade B3LYP, que é conhecido pela boa precisão em estimar acoplamentos do tipo J_{CH} e J_{HH} .⁴⁵ Contudo, Melo e Malkin apresentaram uma pobre performance do PBE e PW86 para o cálculo de acoplamentos spin-spin envolvendo tetraidretos de átomos pesados e átomos eletronegativos do primeiro período.^{25,46}

Tozer e colaboradores demonstraram que o PBE apresenta uma boa precisão na obtenção dos valores de acoplamentos $^1J_{\text{CH}}$ em comparação com o popular B3LYP, confirmando o que foi observado por Maximoff. Contudo, a mesma performance não é mantida quando átomos de ^{15}N , ^{17}O e ^{19}F estão envolvidos nos acoplamentos, tornando o PBE menos preciso que o funcional B3LYP. Além disso, os autores reportaram que os funcionais B972 e B973 demonstram ter uma boa qualidade para todos os tipos de acoplamentos estudados.⁴⁷

Os autores também apontaram a melhora na precisão dos valores obtidos principalmente para o acoplamento $^1J_{\text{HF}}$ da molécula de HF, com o aumento da porcentagem de troca orbital Hartree-Fock (E_X^{HF}), ao longo dos funcionais utilizados: PBE(0%), B3LYP(20%), B972(21%) e B973(27%).⁴⁸ Entretanto, não exploraram a idéia sobre a influência do termo E_X^{HF} na precisão dos acoplamentos calculados.

Kupka reportou uma série de trabalhos avaliando teoricamente os acoplamentos spin-spin existentes para moléculas simples como H_2O , HF, F_2 , F_2O , que apresentam valores com baixa precisão quando calculados em nível DFT.^{8,9,49,50} O autor obteve resultados precisos utilizando uma família de funcionais, BHandH e BHandHLYP, também chamada de “meio a meio” e que apresentam 50% de troca orbital Hartree-Fock (E_X^{HF}).

O mesmo autor estudou a precisão de 39 DFTs, juntamente com métodos *ab initio* SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2) para as mesmas moléculas previamente estudadas pelo autor.⁵⁰ Os acoplamentos mostraram uma boa precisão para a família de funcionais B97, além de suas versões com correção de longa escala (long-range-corrected). Acoplamentos $^1J_{\text{XH}}$ apresentam uma precisão em torno de 5% para ωB97XD . Para $^1J_{\text{NN}}$ o uso do mesmo funcional mostra resultados satisfatórios, mas não tão ruins como o caso do acoplamento

$^1J_{\text{CO}}$. O que mostra que nenhum único funcional pode ser recomendado como único para predição dos acoplamentos.

Esta maneira exaustiva de procurar um funcional adequado para a propriedade de interesse pode ser “perigoso”, pois é necessário evitar cancelamento de erros, no sentido de se evitar obter a “resposta correta pelo motivo errado”.

Falhas em propriedades de resposta e espectrais vão ao encontro com o errôneo comportamento assintótico e a falta de descontinuidade dos potenciais de troca e correlação aproximados para moléculas isoladas. Há uma relação entre a falha da teoria DFT dependente do tempo TD-DFT e a aproximação adiabática usada em praticamente todos os cálculos de propriedades dinâmicas e espectrais.

O comportamento assintótico de um potencial (não-local) sentido por um elétron é correto na teoria Hartree-Fock, por não haver problemas com erros de auto-interação. Essas características da teoria Hartree-Fock são originadas do exato cancelamento da repulsão Coulômbica pelo termo de troca na energia e no potencial, desejável em um funcional aproximado, pois é comportamento correto de um funcional exato. Isso é uma explicação plausível para o que Tozer e colaboradores observaram a respeito do aumento da troca E_X^{HF} na melhoria dos valores das propriedades de RMN. De alguma forma, o aumento da inclusão de E_X^{HF} pode anular/diminuir o problema de auto-interação. Deste modo é conveniente gerar funcionais objetivamente que comportem-se similarmente ao funcional de densidade exato.

Pesquisadores tem determinado importantes atributos para o funcional exato, sem conhecer sua real forma. Duas características são exploradas no nível DFT: o teorema equivalente ao “teorema de Koopman” e o “teorema da linha reta” de Janak.⁵¹

1.4 Exatidão e comportamento dos funcionais

O teorema de Koopman define que a energia do HOMO (orbital molecular ocupado de maior energia) é $\varepsilon^{\text{HOMO}} = -\text{IP}(N)$, para o qual IP é o potencial de ionização. Assumindo uma adição adiabática de elétrons, este teorema pode ser estendido como $\varepsilon^{\text{HOMO}^*} = -\text{IP}(N + 1)$, em que o HOMO* seria o LUMO (orbital molecular desocupado de menor energia) do sistema de N elétrons, ou seja, $\text{IP}(N + 1) = \text{EA}(N)$, em que EA é a afinidade eletrônica. O teorema pode ser aplicado a um sistema de N elétrons usando os seguintes critérios dados pelas equações 1.31 e 1.32, de modo que os HOMOs da espécie neutra e da espécie aniônica sejam ajustados para o melhor grau possível.

$$j^2 = \sum_{i=0}^1 [\varepsilon^{\text{HOMO}}(N + i) + \text{IP}(N + i)]^2, \quad (1.31)$$

$$\text{IP}(N) = E(N - 1) - E(N), \quad (1.32)$$

O funcional exato deve ter $j^2 = 0$ e um funcional aproximado $j^2 \simeq 0$. O teorema de Janak diz que para uma adição fracionada de elétrons em um sistema, a energia total deve variar linearmente entre os números inteiros e ser descontínua nos números inteiros de elétrons.

Para quantificar a linha reta ou a linearidade, um gráfico de ΔN versus energia relativa é gerado juntamente com um ajuste quadrático da função $f(x) = ax^2 + bx + c$. O termo a no intervalo $N \pm 1$ nos dá a curvatura, que será nulo para o funcional exato ou próximo de zero para o funcional aproximado. Adicionalmente, o termo b no intervalo $-1 < \Delta N < 0$ é o valor exato de $-\text{IP}$ e no intervalo $0 < \Delta N < 1$ é o valor de $-\text{EA}$. Usando a escala relativa de energia ($c = 0$ ou $c = E(N)$), é importante dizer que o ajuste do DFT é feito somente por primeiros princípios.

Esse critério para gerar um funcional aproximado pode ser utilizado para os funcionais de correção de longo alcance (LC) em que a repulsão eletrônica r_{12}^{-1} é um termo de troca separado por um intervalo de escala,⁵² que se torna a troca “exata” (E_X^{HF}) para grandes

valores de r_{12} , levando a um potencial com um perfil assintótico correto.

Uma maneira flexível para a descrição da repulsão eletrônica é dada pela expressão de três parâmetros da Equação 1.33, sendo γ o parâmetro de separação de intervalo de escala com valores típicos de 0,3 até 0,5 u.a. dentro de um funcional de troca com escala de separação (RSE), que por sua vez é parametrizado com uma separação função de erro *erf*. O termo de separação de longo alcance é o segundo termo do lado direito da Equação 1.33, em que α quantifica a fração do E_X no limite de curto alcance, enquanto $\alpha + \beta$ fornece a fração E_X no limite do longo alcance, com a correção de longo alcance (LC) respeitando a expressão $\alpha + \beta = 1$.

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1 - [\alpha + \beta \operatorname{erf}(\gamma r_{12})]}{r_{12}} + \frac{\alpha + \beta \operatorname{erf}(\gamma r_{12})}{r_{12}} \quad (1.33)$$

Funcionais LC híbridos podem melhorar significativamente as excitações de transferência de carga (CT). Contudo, nem toda excitação de transferência de carga leva a uma grande separação espacial dos orbitais. Nos métodos Coulomb-atenuados (CAM), a correção LC é incompleta. O funcional CAM-B3LYP leva a $\alpha + \beta = 0,65$. A parametrização global dos funcionais RSE desenvolvidos para excitações CT não são necessariamente precisas para outras propriedades e a sua performance é sensível aos valores de α , β e γ .⁵³

Os funcionais ω B97 e ω B97X apresentam 100% de troca exata para longo alcance, com troca B97 para curto alcance e correlação B97. O ω B97X difere do ω B97 basicamente pela adição de cerca de 16% de troca exata no curto alcance do primeiro, enquanto o segundo corresponde ao B97 puro no curto alcance.⁵⁴ O ω B97X-D apresenta correção de dispersão empírica para a energia, além de utilizar cerca de 22% de troca exata no curto alcance.⁵⁵

O parâmetro γ é um funcional da densidade e também dependente do sistema.⁵⁶ Um ajuste não empírico foi proposto de modo que γ leve a um funcional ajustado que apresente uma energia HOMO ($\varepsilon^{\text{HOMO}}$) que descreva a energia do potencial de ionização -IP.

A melhora na descrição de energias de transferência de carga e outros *gaps* de energia por funcionais LC ajustados e funcionais RSE com parametrização global fixa tem sido reportada na literatura.⁵⁶⁻⁶⁰

A energia DFT $E(N)$ varia linearmente com o número inteiro de elétrons N_i . Na falta de um tratamento explícito, funcionais aproximados geralmente não produzem um comportamento linear para $E(N)$ em moléculas, mesmo com valores de $E(N)$ sendo bem precisos. Ao invés disso, pode haver uma pronunciada curvatura em $E(N)$. Essa curvatura indica erro de deslocalização (DE), que está relacionada com a imprecisão das propriedades magnéticas por DFT.^{41,61,62} Há uma estreita relação entre o DE e o erro de auto-interação eletrônica. Curva positiva (perfil convexo) indica uma alta deslocalização eletrônica, que é obtida tipicamente com funcionais puros. Curva negativa (perfil côncavo) indica uma alta localização, que é tipicamente obtido para funcionais híbridos com altas frações de E_X e E_X^{HF} .

O erro DE afeta diretamente propriedades físicas e químicas moleculares, uma vez que covalência pode ser considerada como uma forma de deslocalização. Funcionais de longo alcance tendem a produzir comparativamente pequenas curvaturas de $E(N)$ e consequentemente, presumidamente pequenos valores de DE.

Autschbach e colaboradores utilizaram a idéia da descrição da repulsão eletrônica da expressão de três parâmetros para ajustar alguns funcionais já existentes com relação à γ e testar a acurácia dos mesmos para diversas propriedades moleculares como: dicroísmo circular, rotação óptica, hiperpolarizabilidade e acoplamento hiperfino da Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE), mas não foi testada para acoplamentos spin-spin em RMN.⁶¹

O ajuste foi baseado na predição correta do potencial de ionização, basendo-se na condição abaixo:

$$\varepsilon^{\text{HOMO}}(N) + \text{IP}(N) = 0 \quad (1.34)$$

sendo N o número do elétron referência do sistema molecular estudado.^{36,40,41,44}

Em um funcional RSE aproximado, $\varepsilon^{\text{HOMO}}$ e IP dependem fortemente de γ da Equação 1.33. Deste modo, pode-se achar um valor de γ que satisfaça a Equação 1.34 com um $\varepsilon^{\text{HOMO}}$ e $\text{IP} = E(N-1) - E(N)$, calculado com o mesmo funcional.⁵⁶ O correspondente valor de γ^* determina o funcional ajustado. Vale salientar que o mesmo valor de γ^* não

deve satisfazer a Equação 1.34 para diferentes valores de N , logo deve-se minimizá-la utilizando a sua forma representada pela Equação 1.31.⁵⁷

Assim o ajuste gerará um funcional híbrido com intervalo de troca com escala de separação que balanceie a troca HF e DFT, a fim de minimizar o erro de delocalização em um funcional com gap ótimo ΔE_{KS} , que está relacionado com o gap fundamental da derivada descontínua de Δ_{XC} .

$$\Delta\epsilon_F = EA - IP = \epsilon_{LUMO} - \epsilon_{HOMO} + \Delta_{XC} \quad (1.35)$$

Pelo Teorema de Janak, temos que $\frac{\partial E}{\partial n_i} = \epsilon_i$, em que $0 \leq n_i \leq 1$ é a ocupação eletrônica do orbital i e ϵ_i é a energia orbital correspondente. Para funcionais exatos, ϵ_i é constante, e portanto $\frac{\partial^2 E}{\partial n_i^2} = 0$. Assim, a energia total varia linearmente com a adição fracionada de um elétron no orbital i . Entretanto, muitos dos funcionais utilizados na literatura não possuem tal comportamento, sendo esperado que valores de $\frac{\partial^2 E}{\partial n_i^2}$ mais próximos a 0 correspondam a funcionais quase exatos e valores distantes de 0 a funcionais bastante inexatos.

A Equação 1.36 ajusta a energia total $E_+(n)$, com $0 \leq n \leq 1$, entre a forma neutra e o cátion a partir das energias moleculares E_{neutra} e $E_{\text{cátion}}$, e das energias orbitais $\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$ do orbital ocupado de maior energia (HOMO) e $\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$ do orbital desocupado de menor energia (LUMO).⁶²

$$E_+ = \{(E_0 - E_{\oplus})n + [(\epsilon_{\oplus}^{\text{LUMO}} - E_0 + E_{\oplus})(1 - n) + (E_0 - E_{\oplus} - \epsilon_0^{\text{HOMO}})n]n(1 - n)\} \quad (1.36)$$

Da mesma maneira, a Equação 1.37 ajusta a energia total $E_-(n)$, com $0 \leq n \leq 1$, entre o ânion e a forma neutra a partir das energias moleculares E_{neutra} e $E_{\text{ânion}}$, e das energias orbitais $\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$ e $\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$.⁶²

$$E_- = \{(E_{\ominus} - E_0)n + [(\epsilon_0^{\text{LUMO}} - E_{\ominus} + E_0)(1 - n) + (E_{\ominus} - E_0 - \epsilon_{\ominus}^{\text{HOMO}})n]n(1 - n)\} \quad (1.37)$$

Como apresentado anteriormente, não há um consenso sobre a característica que o funcional deve conter para prever as constantes de acoplamento indireto spin-spin com razoável precisão. Além disso, nenhum trabalho sistemático modificando as porcentagens de troca orbital Hartree-Fock (E_X^{HF}), comumente chamada de troca exata, foi reportado até agora. Somente alguns testes isolados foram feitos a fim de melhorar a precisão de algumas moléculas orgânicas e inorgânicas.

2 Objetivos

O objetivo deste trabalho é avaliar a precisão dos funcionais de densidade previamente utilizados ou não na literatura para estimar propriedades magnéticas, verificando a precisão nos valores das constantes de acoplamento indireto spin-spin obtidas pela comparação dos valores teóricos com os experimentais. Propor novos funcionais gerados a partir de funcionais existentes como tentativa de encontrar funcionais ainda mais precisos, mas que ainda possuam sentido físico. Os melhores funcionais serão comparados com métodos altamente correlacionados SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2), que apresentam bons resultados nos valores dos acoplamentos para todos os tipos de núcleos. Assim, será proposto um funcional que consiga descrever de forma satisfatória todos os tipos de constantes de acoplamento.

3 Detalhes Computacionais

A determinação de um conjunto de moléculas para calibração considerou o tratamento de diversos tipos de acoplamentos, envolvendo J_{HH} em diversos ambientes, J_{CH} , J_{NH} , J_{OH} , J_{FH} , J_{PH} , J_{BF} , J_{OF} , J_{PF} , J_{CC} e J_{CO} . Para tanto foram utilizadas para calibração 26 constantes de acoplamento indireto spin-spin (CAISS) encontradas dentre 13 moléculas: HF,^{63,64} CO,⁶³ H₂O,^{63,65} NH₃,⁶⁶ PH₃,⁶⁶ PF₃,^{66,67} BHF₂,^{68,69} BF₃,^{64,67} F₂O,⁷⁰ CH₄,^{66,71,72} C₂H₂,^{66,67} C₂H₄⁶⁶ e C₂H₆,^{66,67} todas com geometrias obtidas experimentalmente. As moléculas elencadas são usualmente presentes em diversos estudos na literatura para predição de diversas propriedades, inclusive constantes de acoplamento.^{45,47,50}

Os funcionais que apresentaram os melhores resultados após o conjunto de análises foram submetidos para teste com um conjunto maior de moléculas, envolvendo mais tipos de acoplamento. O conjunto-teste utilizado será detalhado abaixo.

Para analisar a precisão dos resultados teóricos das CAISS, foram utilizados critérios como o desvio médio (DM), o desvio médio absoluto (DMA) e a porcentagem de desvio médio absoluto (PDMA) (de acordo com as equações 3.1, 3.2 e 3.3, respectivamente) com o intuito de obter quais resultados com melhor precisão para o conjunto.

$$\text{DM} = \frac{1}{N} \sum_i^N J_{\text{calc}_i} - J_{\text{exp}_i} \quad (3.1)$$

$$\text{DMA} = \frac{1}{N} \sum_i^N |J_{\text{calc}_i} - J_{\text{exp}_i}| \quad (3.2)$$

$$\text{PDMA} = 100\% \times \frac{1}{N} \sum_i^N \left| \frac{J_{\text{calc}_i} - J_{\text{exp}_i}}{J_{\text{exp}_i}} \right| \quad (3.3)$$

Os critérios estatísticos foram obtidos considerando todas as 26 CAISS avaliadas. Também foram calculados apenas para as moléculas sem pares de elétrons isolados (SPI) - CH₄, C₂H₂, C₂H₄ e C₂H₆, totalizando 15 CAISS - e para as moléculas com pares de

elétrons isolados (CPI) - HF, CO, H₂O, NH₃, PH₃, PF₃, BHF₂, BF₃ e F₂O, totalizando 11 CAISS. Tal distinção foi feita na tentativa de associar a precisão da CAISS com a presença/ausência de par(es) de elétrons isolados, conforme já descrito por Seminario para a série H, C, N, O e F.⁷³ A diferença $\Delta(\text{CPI-SPI})$ entre os parâmetros estatísticos desses conjuntos também é exibida, de modo que valores próximos a zero indicam precisões similares para os conjuntos CPI e SPI.

Em uma primeira análise, foram selecionados os seguintes 26 DFTs disponíveis na literatura: B3LYP,⁷⁴ CAM-B3LYP,⁷⁵ B98,⁷⁶ B971,⁷⁷ B972,⁷⁸ B3PW91,^{74,79} PBE,⁸⁰ PBE0,⁸¹ TPSSh,⁸² ω B97,⁵⁴ ω B97X,⁵⁴ ω B97XD,⁵⁵ M05,⁸³ M05-2X,⁸⁴ M06,⁸⁵ M06-2X,⁸⁶ M06-HF,⁸⁷ BHandH,⁸⁸ BHandHLYP,⁸⁸ BP86,⁸⁹ B3P86,^{74,89} B1B95,⁹⁰ BMK,⁹¹ PW91,⁷⁹ O3LYP⁹² e X3LYP,⁹³ todos previamente utilizados com sucesso na obtenção de valores precisos para vários tipos de acoplamentos.

Os cálculos foram feitos com conjuntos de base aug-pcJ-2¹⁸ e HuzIII-su3⁹⁴ utilizando o Gaussian 09.³⁹ A base aug-pcJ-2 possui qualidade quádruplo- ζ e é contraída, enquanto a HuzIII-su3 possui triplo- ζ e é descontraída nas funções gaussianas do tipo “s”, ou seja, mais flexível, o que pode melhorar a descrição dos termos FC e SD dos acoplamentos em alguns casos. Ambas as bases apresentam qualidade mínima triplo- ζ e incluem expoentes orbitais extremamente grandes, que são necessários para uma descrição adequada de constantes de acoplamento.⁴

Os DFTs foram submetidos à variação da porcentagem de energia de troca Hartree-Fock (E_X^{HF}) de 0 a 100% em incrementos de 10% (do coeficiente α_{HF}) de acordo com a Equação 3.4 - que corresponde ao quanto de troca exata, obtida do método Hartree-Fock, é utilizada para computar a energia de troca. A modificação foi feita através dos IOp(3/76), IOp(3/77) e IOp(3/78) do pacote Gaussian 09.³⁹

$$E_X = \alpha_{\text{HF}} E_X^{\text{HF}} + \alpha_{\text{DFT}} E_X^{\text{DFT}} , \text{ em que } \alpha_{\text{HF}} + \alpha_{\text{DFT}} = 1 \quad (3.4)$$

Para os DFTs que possuem correção de longo alcance (CLA), a porcentagem de E_X^{HF} depende da distância radial, e portanto utiliza-se os parâmetros α , β e γ da Equação 1.33 para ajustar as correções. O parâmetro α determina a porcentagem de E_X^{HF} no

limite de curto alcance, e $\alpha + \beta$ no limite de longo alcance. As variações foram feitas considerando as restrições $0 \leq \alpha \leq 1$, $0 \leq \beta \leq 1$ e $\alpha + \beta \leq 1$. Separadamente foram feitas variações do parâmetro γ para ajustar a taxa de variação da função *erf* na Equação 1.33. As modificações foram feitas com os IOp(3/107), IOp(3/108), IOp(3/119), IOp(3/120), IOp(3/130) e IOp(3/131) do pacote Gaussian 09.³⁹

A Figura 3.1, adaptada do trabalho de Yanai *et al* sobre o método atenuado por Coulomb (CAM-B3LYP), apresenta 3 comportamentos distintos para porcentagem de troca exata nos DFTs. A maioria dos funcionais da literatura estudados, como o B3LYP, apresentam o comportamento da Figura 3.1a. Os funcional ω B97 tem comportamento similar à Figura 3.1b e o CAM-B3LYP à Figura 3.1c. O ω B97X e ω B97XD apresentam um comportamento que remetem à combinação das Figuras 3.1b e 3.1c.

Figura 3.1: Contribuições de E_X^{HF} e E_X^{DFT} em função da distância entre dois elétrons. O caso constante corresponde ao caso $\alpha E_X^{\text{HF}} + (1 - \alpha) E_X^{\text{DFT}}$, com α constante.

Utilizando a PDMA como critério, foram determinados os funcionais mais precisos para o conjunto de calibração com geometrias experimentais. A otimização das geome-

trias moleculares foi realizada para obter geometrias de equilíbrio, buscando diminuir a instabilidade tripleto.⁹⁵ As CAISS foram obtidas utilizando as geometrias otimizadas com os DFTs mais precisos. O cálculo de otimização foi feito com as versões original e modificadas dos DFTs, e a propriedade obtida com a versão modificada foi avaliada em ambos casos de geometria otimizada.

Os resultados obtidos para CAISS através do cálculos teóricos correspondem a valores na geometria de equilíbrio (estável), e portanto devem ser feitas correções para tratar adequadamente sistemas reais. Para tanto as correções consideram o efeito das vibrações (valor de ponto zero) e o efeito da temperatura. As correções de temperatura de 0 a 300 K são menores em magnitude do que as correções do valor de ponto zero.⁷ Levando isso em conta, apenas correções vibracionais foram calculadas.

A correção vibracional das CAISS foi feita utilizando a *keyword* .VIBANA do programa Dalton2016.⁹⁶ Apenas os funcionais BHandH e PBE0 foram avaliados, pois são os funcionais disponíveis, dentre os melhores obtidos sem CLA, no Dalton2016 para esta propriedade. Devido ao alto custo computacional do cálculo de correções vibracionais, operações de simetria foram utilizadas sempre que possível para simplificar o tratamento das estruturas moleculares.

Os resultados das correções vibracionais foram utilizados como tentativa de correção dos resultados previamente obtidos. Duas estratégias foram utilizadas para avaliar a influência das correções vibracionais nos resultados obtidos até este momento. A primeira adiciona as correções vibracionais às CAISS obtidas teoricamente, de acordo com a Equação 3.5. Já a segunda considera as CAISS empíricas como referência, subtraindo as correções vibracionais das CAISS experimentais, de acordo com a Equação 3.6. Em ambas, novos valores de DM, DMA e PDMA foram calculados considerando a substituição indicada pelas Equações 3.5 e 3.6 nas Equações 3.1, 3.2 e 3.3.

$$J_{corr_i} = J_{calc_i} + J_{vibcor_i} \implies \text{DM, DMA, PDMA: } J_{calc_i} \rightarrow J_{corr_i} \quad (3.5)$$

$$J_{emp_i} = J_{exp_i} - J_{vibcor_i} \implies \text{DM, DMA, PDMA: } J_{exp_i} \rightarrow J_{emp_i} \quad (3.6)$$

A combinação de diferentes funcionais de troca e correlação, juntamente à variação da E_X^{HF} através dos IOp(3/76), IOp(3/77) e IOp(3/78), permite obter diferentes funcionais. Desta forma, foram escolhidos 9 funcionais de troca - B,⁹⁷ B971,⁷⁷ B972,⁷⁸ B98,⁷⁶ O,⁹⁸ PBE,⁸⁰ PW91,⁷⁹ S⁹⁹ e TPSS⁸² - e 9 funcionais de correlação - B95,⁹⁰ B98,⁷⁶ B971,⁷⁷ B972,⁷⁸ LYP,¹⁰⁰ P86,⁸⁹ PBE,⁸⁰ PW91⁷⁹ e TPSS⁸² -, totalizando 81 funcionais (desse total, algumas combinações reproduziram resultados já obtidos com os funcionais da literatura, como o BHandH e o B1B95).

Os 2 melhores resultados para cada troca e cada correlação com os funcionais gerados foram utilizados para cálculo de otimização e da propriedade. A porcentagem de desvio absoluto (PDA) indica a contribuição de cada componente para cálculo da média (PDMA). Algumas das CAISS apresentam maior imprecisão do que outras para os diferentes DFTs. Os valores do DM, do DMA e da PDMA também foram recalculados, excluindo algumas das CAISS menos precisas, para os resultados dos funcionais de troca e correlação com geometrias otimizadas e com geometrias experimentais.

A estratégia de longo alcance pode ser aplicada a funcionais puros para obter DFTs com CLA.¹⁰¹ Desta forma, os funcionais LC-BLYP e LC-B98 foram utilizados como tentativa de reproduzir os resultados já obtidos para as variações de parâmetros dos funcionais CAM-B3LYP, ω B97, ω B97X e ω B97XD (os parâmetros fixos foram ajustados aos dos funcionais da literatura).

Os funcionais LC-B1B95 e LC-BHandH também foram construídos variando α de 0% a 50% (com incremento de 10%), $\alpha + \beta$ de 70% a 100% (também incrementado em 10%) e γ de 0,05 a 0,75 (com incremento de 0,05), de modo a obter cálculos precisos das CAISS com geometrias experimentais. A otimização de geometrias e cálculo das CAISS foi realizada para os melhores funcionais obtidos anteriormente.

Os métodos *ab initio* SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD),^{7,102} com base aug-cc-pVTZ-J,²¹ foram utilizados para obter as CAISS nas geometrias experimentais com o pacote Dalton2016.⁹⁶ Tais resultados foram comparados com os melhores resultados até então obtidos para os DFTs, de modo a avaliar se a teoria DFT, menos custosa computacionalmente, é vantajosa para calcular CAISS frente a métodos altamente correlacionados. O

valor total das CAISS foi comparado tanto com os métodos SOPPA quanto com os valores experimentais; por sua vez os componentes FC, SD, PSO e DSO não podem ser medidos experimentalmente. Desta forma os termos FC, SD, PSO e DSO dos melhores funcionais foram comparados com os termos FC, SD, PSO e DSO dos métodos SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSO).

Testes de precisão foram realizados a partir do Teorema de Janak para as concavidades da energia. Os cálculos da energia (cálculo de um único ponto) do cátion e do ânion moleculares de cada uma das 13 moléculas do conjunto de calibração foram feitos para os melhores funcionais. A curvatura média das curvas determinadas pelas Equações 1.36 e 1.37 foram obtidas para a determinação da exatidão dos funcionais avaliados.

O conjunto-teste utilizado envolve 33 moléculas: CH_3NH_2 ,¹⁰³ etanamida,¹⁰³ ureia,¹⁰³ CH_3F ,¹⁰⁴ CH_2F_2 ,¹⁰⁴ CHF_3 ,¹⁰⁴ CF_4 ,¹⁰⁴ HCCF ,¹⁰⁵ $\text{C}_2\text{H}_3\text{F}$,¹⁰³ *gem*- $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$,¹⁰³ *cis*- $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$,¹⁰³ *trans*- $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$,¹⁰³ C_2HF_3 ,¹⁰³ cicloexano,¹⁰³ benzeno,¹⁰⁶ piridina,¹⁰³ anilina,¹⁰³ fluorbenzeno,¹⁰⁶ 1,2-difluorbenzeno,¹⁰³ 1,3,5-trifluorbenzeno,¹⁰³ *cis*- N_2F_2 ,¹⁰⁷ *trans*- N_2F_2 ,¹⁰⁷ N_2F_4 ,¹⁰³ fosfirano,¹⁰³ PF_5 ,¹⁰³ PF_3O ,^{108,109} $\text{P}(\text{CH}_3)_3$,¹¹⁰ $\text{P}(\text{CH}_3)_3\text{O}$,¹⁰⁹ PCH_3Cl_2 ,¹⁰³ $\text{P}(\text{O})\text{CH}_3\text{Cl}_2$,¹⁰³ $\text{P}(\text{N}(\text{CH}_3)_2)_3$,¹¹¹ SiH_4 ¹¹² e SiF_4 ,¹¹² e totaliza 84 CAISS. Os valores foram obtidos com os conjuntos de base aug-pcJ-2 e HuzIII-su3. Alguns DFTs originais também foram submetidos ao conjunto teste para comparação.

Algumas das constantes experimentais tiveram seu sinal ajustado de acordo com o sinal obtido em todos os cálculos – são elas: $^3J_{\text{FF}}$ da molécula de *cis*- N_2F_2 , $^3J_{\text{FF}}$ da molécula de *trans*- N_2F_2 , $^1J_{\text{NF}}$ da molécula de N_2F_4 , $^1J_{\text{PC}}$ da molécula de PCH_3Cl_2 , $^2J_{\text{PH}}$ da molécula de $\text{P}(\text{O})\text{CH}_3\text{Cl}_2$, $^1J_{\text{PN}}$ da molécula de $\text{P}(\text{N}(\text{CH}_3)_2)_3$, $^1J_{\text{NC}}$ da molécula de CH_3NH_2 , $^1J_{\text{NC}}$ e $^2J_{\text{NC}}$ da molécula de etanamida, $^1J_{\text{CF}}$ da molécula de CH_3F , $^1J_{\text{CF}}$ da molécula de CH_2F_2 , $^1J_{\text{CF}}$ da molécula de CHF_3 , $^1J_{\text{CF}}$ da molécula de CF_4 , $^2J_{\text{FF}}$ da molécula de *gem*- $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$ e $^1J_{\text{NC}}$, $^2J_{\text{NC}}$ e $^3J_{\text{NH}}$ da molécula de anilina.

4 Resultados e Discussão

4.1 Precisão dos funcionais da literatura

Os valores das CAISS obtidos com os 26 DFTs encontrados na literatura, utilizando função de base aug-pcJ-2, estão apresentados nas Tabelas 8.1 e 8.2, assim como os valores de DM, DMA e PDMA. Os valores das CAISS também foram obtidos com função de base HuzIII-su3 para os 26 DFTs, e estão apresentados nas Tabelas 8.3 e 8.4.

Utiliza-se a PDMA total como principal critério para avaliar a diferença entre os valores calculados e os experimentais das CAISS. A Figura 4.1 apresenta os valores da PDMA para os DFTs da literatura testados utilizando as bases aug-pcJ-2 e HuzIII-su3.

Considerando a base aug-pcJ-2 (Figura 4.1a) dentre os DFTs da literatura, o BHandH apresentou o melhor resultado, seguido de ω B97X, ω B97XD, ω B97, B971, B98, PBE0, B972, CAM-B3LYP e B1B95. Os demais DFTs apresentam PDMA superior a 25%.

Para a base HuzIII-su3 (Figura 4.1b), os melhores resultados são obtidos com ω B97X, ω B97XD, BHandH, ω B97, B971, B972, B98 e B1B95. Os demais funcionais apresentam PDMA superior a 25%, incluindo o CAM-B3LYP e o PBE0.

(a) aug-pcJ-2

(b) HuzIII-su3

Figura 4.1: PDMA das CAISS utilizando funcionais da literatura. Os funcionais estão ordenados em ordem crescente de porcentagem de E_X^{HF} . O maior valor de PDMA é obtido com o funcional M06HF (149,27% para aug-pcJ-2 e 290,31% para HuzIII-su3).

Os valores de PDMA dos funcionais obtidos com cada uma das bases estão apresentados na Tabela 4.1. De maneira geral, os melhores DFTs contemplam os funcionais da família B97 (B971, B972 e B98), incluindo as versões de longo-alcance (ω B97, ω B97X e ω B97XD), o BHandH e o B1B95. De fato, a escolha adequada de base não altera significativamente os resultados (menos de 3% para os 10 melhores), e ao comparar as Figuras 4.1a e 4.1b é notável que o comportamento de cada funcional é similar.

Tabela 4.1: Valores de PDMA total para os melhores funcionais da literatura.

Funcional	aug-pcJ-2	HUzIII-su3
BHandH	12,21%	14,69%
ω B97X	14,49%	12,08%
ω B97XD	16,48%	14,22%
ω B97	19,64%	17,04%
B971	21,89%	21,98%
B98	22,55%	24,09%
PBE0	23,18%	25,82%
B972	23,84%	23,26%
CAM-B3LYP	23,87%	25,19%
B1B95	24,17%	24,59%

A Figura 4.2 apresenta os valores do DM para os DFTs da literatura testados utilizando

os conjuntos de base aug-pcJ-2 e HuzIII-su3, e a Figura 4.3 apresenta os valores do DMA. Nota-se que o DM apresenta valores próximos a zero que surgem, em geral, do cancelamento entre constantes superestimadas e constantes subestimadas. Além disso, as bases utilizadas resultam em valores de DM muito distintos, e portanto o DM não é bom para comparação.

Figura 4.2: DM (em Hz) das CAISS utilizando funcionais da literatura. Os funcionais estão ordenados em ordem crescente de porcentagem de E_X^{HF} .

Os valores de DMA (Figura 4.3) são mais adequados que o DM pois a média não possibilita cancelamentos. Nota-se que os funcionais ω B97, ω B97X, ω B97XD, B971, B972 e B1B95 apresentam valores de DMA menores que 20 Hz para ambos conjuntos de base, e os DMAs do B98 e do BHandH estão próximos de 20 Hz. Assim o DMA permite comparar a precisão do conjunto. Entretanto, o DMA não considera a magnitude da constante, e

portanto o desvio de, por exemplo, 1 Hz pode ser grande ou pequeno a depender da CAISS; por isso a PDMA é preferida.

Figura 4.3: DMA (em Hz) das CAISS utilizando funcionais da literatura. Os funcionais estão ordenados em ordem crescente de porcentagem de E_X^{HF} .

Os funcionais da literatura são, de modo geral, mais precisos para as CAISS de moléculas SPI do que para as CAISS de moléculas CPI. Tal comportamento se deve à presença dos pares de elétrons isolados.⁷³ Os funcionais M06 e BMK, entretanto, apresentam melhor precisão para o conjunto SPI para ambos conjuntos de base. O funcional M05 apresenta precisões similares para os conjuntos SPI e CPI com HuzIII-su3, sendo ligeiramente melhor para o SPI. E o funcional M06HF é mais impreciso para CPI do que SPI com HuzIII-su3, mas com aug-pcJ-2 ocorre o oposto; apesar disso o M06HF, dentre os funcionais da literatura, apresenta o resultado mais impreciso, sendo portanto não

recomendado para cálculo de CAISS. Os funcionais M05 e M06 também não são muito precisos, e portanto devem ser evitados, assim como os funcionais puros PBE, PW91 e BP86.

Funcionais puros ou com uma pequena porcentagem de troca exata não apresentam resultados muito precisos, assim como funcionais com uma elevada porcentagem de troca exata. A utilização de DFTs da literatura com um pouco de troca exata é bom para o cálculo de CAISS.^{47,95} Os DFTs mais precisos (ver Tabela 4.1) apresentam por volta de 20% a 50% de troca exata em sua composição. É importante destacar que os funcionais CAM-B3LYP, ω B97, ω B97X e ω B97XD apresentam uma porcentagem de troca exata para curto alcance representada pelo α (apresentada nas Tabelas 8.1 a 8.4), incrementando continuamente até $\alpha + \beta$ no longo alcance.

Com base nas melhores precisões entre 20% e 50% E_X^{HF} com os DFTs mencionados na Tabela 4.1, novos testes podem ser feitos variando a porcentagem de E_X^{HF} presente nos funcionais. Para tanto é necessário trabalhar CAM-B3LYP, ω B97, ω B97X e ω B97XD separadamente dos demais DFTs. Na próxima seção será discutida a variação da porcentagem de troca exata para os funcionais sem correção de longo alcance (CLA); e na Seção 4.5 será discutido para os funcionais de longo alcance.

4.2 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos

4.2.1 Geometrias experimentais

Os resultados da variação da porcentagem de E_X^{HF} para os DFTs da literatura testados com base aug-pcJ-2 estão apresentados nas Tabelas 8.5 a 8.22, e a PDMA total dos resultados com base HuzIII-su3 na Tabela 8.23. A Figura 4.4 apresenta os valores da PDMA dos funcionais da literatura variando a porcentagem de E_X^{HF} usando os conjuntos de base aug-pcJ-2 e HuzIII-su3.

Os funcionais PBE e PBE0, B3LYP e BHandHLYP, M05 e M05-2X, e M06 e M06-HF estão associados a uma mesma variação de porcentagem de E_X^{HF} pois possuem o mesmo funcional puro como origem, diferindo portanto apenas na composição de troca exata.

De maneira geral, os valores de PDMA são menores para funcionais com valores de E_X^{HF} entre 30% e 50%. De fato, certa porcentagem da energia de troca exata contribui para a obtenção de resultados mais precisos comparados com o uso apenas da E_X^{DFT} , como já observado na literatura.^{47,95} Entretanto, uma porcentagem elevada de E_X^{HF} piora consideravelmente a precisão dos resultados, conforme observado na Figura 4.4.

Ao comparar as Figuras 4.4a e 4.4b, de modo geral o comportamento de cada DFT é bastante similar entre as bases. A maior discrepância obtida refere-se aos funcionais da família M06 (M06, M06-2X e M06-HF). É possível que a utilização uma base contraída (aug-pcJ-2) e outra parcialmente descontraída e mais flexível (HuzIII-su3) acarretem as diferenças geradas. Apesar disso, essa família de funcionais não apresentou os resultados mais precisos dentre os DFTs estudados, e portanto essa diferença significativa de comportamento não foi investigada.

Os resultados mais precisos para a variação da porcentagem de E_X^{HF} com aug-pcJ-2 são obtidos com B1B95 50% E_X^{HF} , BHandH 50% E_X^{HF} (original), B98 50% E_X^{HF} , BHandH 40% E_X^{HF} , B1B95 40% E_X^{HF} , B971 50% E_X^{HF} , B971 40% E_X^{HF} , B98 40% E_X^{HF} , B972 40% E_X^{HF} e B972 50% E_X^{HF} – todos com PDMA inferior a 20%.

(b) HuzIII-su3

Figura 4.4: PDMA das CAISS com variação da porcentagem de E_X^{HF} para funcionais da literatura sem CLA. Valores de PDMA superiores a 200% estão expressos apenas até 200% na escala.

Os resultados mais precisos com a base HuzIII-su3 também são obtidos com os funcionais B1B95, B971, B972, B98 e BHandH com 40% E_X^{HF} e 50% E_X^{HF} ; além disso os funcionais O3LYP 30% E_X^{HF} , O3LYP 40% E_X^{HF} e O3LYP 50% E_X^{HF} também apresentam resultados com boa precisão.

A Tabela 4.2 apresenta os valores de PDMA para cada um desses funcionais. Os funcionais derivados de B1B95, B971, B972, B98 e BHandH têm PDMA's próximos entre as bases utilizadas. Por outro lado os funcionais derivados de O3LYP apresentam PDMA's menores que 20% para HuzIII-su3, enquanto que para aug-pcJ-2 são acima de 25%. Além disso, o O3LYP original não apresentou PDMA inferior a 25% para nenhuma das bases.

Tabela 4.2: Valores de PDMA total para os melhores funcionais variando a porcentagem de troca exata.

Funcional	aug-pcJ-2	HuzIII-su3
B1B95 50% E_X^{HF}	11,69%	13,9%
BHandH 50% E_X^{HF}	12,21%	14,7%
B98 50% E_X^{HF}	14,08%	11,1%
BHandH 40% E_X^{HF}	14,17%	15,8%
B1B95 40% E_X^{HF}	14,31%	15,8%
B971 50% E_X^{HF}	16,15%	13,6%
B971 40% E_X^{HF}	17,34%	17,4%
B98 40% E_X^{HF}	18,65%	18,4%
B972 40% E_X^{HF}	18,93%	18,4%
B972 50% E_X^{HF}	19,95%	18,7%
O3LYP 40% E_X^{HF}	26,01%	14,5%
O3LYP 30% E_X^{HF}	26,03%	18,7%
O3LYP 50% E_X^{HF}	30,63%	18,0%

A base aug-pcJ-2 possui qualidade quádruplo- ζ , enquanto a HuzIII-su3 possui triplo- ζ ; desta forma é assumido que a qualidade quádruplo- ζ torna a aug-pcJ-2 uma base de qualidade superior à HuzIII-su3, e portanto não houve continuidade no estudo com o funcional O3LYP. É importante destacar que a base aug-pcJ-2 é contraída, enquanto a HuzIII-su3 é descontraída nas funções gaussianas do tipo “s”, ou seja, mais flexível, o que pode melhorar a descrição dos termos FC e SD dos acoplamentos em alguns casos.

Desta forma, os estudos seguintes com os funcionais sem CLA consideram os fun-

cionais BHandH, B1B95, B971, B972 e B98 e suas versões modificadas. Isso se deve ao fato de apresentarem resultados mais precisos no conjunto de calibração, e portanto são bons candidatos para estimar diferentes tipos de acoplamento. O funcional PBE0 também foi incluído (apesar de ter PDMA superior a 20% até nas versões modificadas) para comparação, e sua escolha se deve à sua boa precisão para sistemas com metais de transição.¹¹³

4.2.2 Geometrias otimizadas

Os valores obtidos para as CAISS, com base aug-pcJ-2, utilizando geometrias experimentais e otimizadas são apresentados nas Tabelas 8.24 a 8.29 para B1B95, B971, B972, B98, BHandH e PBE0. Para cada DFT foi considerado, a princípio, apenas seu ajuste com a porcentagem de E_X^{HF} de menor PDMA com geometrias experimentais e as porcentagens adjacentes ($\pm 10\%$), de modo a verificar o valor mínimo de PDMA.

A Figura 4.5 apresenta a PDMA total, assim como a PDMA dos conjuntos CPI e SPI, para os funcionais B1B95, B971, B972, B98, BHandH e PBE0 originais e modificados. A notação $\text{DFT}_1//\text{DFT}_2$ é adotada, indicando que a otimização de geometrias é feita com o DFT_1 , e o cálculo da propriedade com o DFT_2 ; a ausência da notação indica que não há otimização das geometrias, logo trata-se das geometrias experimentais.

(a) B1B95

4.2. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS

(b) B971

(c) B972

(d) B98

(e) BHandH

(f) PBE0

Figura 4.5: Comparação entre as PDMA obtidas com geometrias teóricas e experimentais para os funcionais selecionados com base aug-pcJ-2. As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

O funcional B1B95 (que originalmente possui 28% de E_X^{HF} e PDMA = 24,17%), mostrado na Figura 4.5a, tem seu melhor resultado com B1B95 40%//B1B95 40% (PDMA = 10,96%). Comparando com B1B95 40% (14,31%) e B1B95//B1B95 40% (12,72%), os valores da PDMA SPI são próximos, logo a melhor precisão para o cálculo B1B95 40%//B1B95 40% é devida aos valores mais precisos obtidos para o conjunto de moléculas CPI. Já o resultado B1B95//B1B95 40% (11,38%) é mais balanceado para moléculas CPI e SPI. O melhor resultado com geometria experimental é obtido com B1B95 50% (11,69%).

O funcional B971 (que originalmente possui 21% de E_X^{HF} e PDMA = 21,89%), mostrado na Figura 4.5b, tem seu melhor resultado com B971//B971 50% (11,38%). Comparando com B971 50% (16,15%) e B971 50%//B971 50% (13,54%), a melhora da precisão se deve principalmente a melhora da CAISS das moléculas CPI, mas também há melhora para as moléculas SPI. Os resultados obtidos para B971//B971 50% indicam uma boa precisão tanto para moléculas CPI quanto SPI. O melhor resultado com geometria experimental é obtido com B971 50% (16,15%).

O funcional B972 (que originalmente possui 21% de E_X^{HF} e PDMA = 23,84%), mostrado na Figura 4.5c, tem seu melhor resultado com B972 50%//B972 50% (14,83%). Comparando com B972 50% (19,95%) e B972//B972 50% (17,38%), a melhora da precisão se deve principalmente a melhora da PDMA CPI, que varia muito mais entre os ajustes do

que a PDMA SPI. Os resultados obtidos para B972 50%/B972 50% tem melhor precisão para moléculas CPI do que SPI (na maioria dos casos foi o contrário). O melhor resultado com geometria experimental é obtido com B972 40% (18,93%).

O funcional B98 (que originalmente possui 21,98% de E_X^{HF} e PDMA = 22,55%), mostrado na Figura 4.5d, tem seu melhor resultado com B98/B98 50% (10,44%). Comparando com B98 50% (14,08%) e B98 50%/B98 50% (15,68%), a melhora da precisão se deve principalmente a melhora da CAISS das moléculas CPI, mas também há melhora para as moléculas SPI. Os resultados obtidos para B98/B98 50% indicam uma boa precisão tanto para moléculas CPI quanto SPI (sendo um pouco mais preciso para CPI do que SPI). O melhor resultado com geometria experimental é obtido com B98 50% (14,08%).

O funcional BHandH (que originalmente possui 50% de E_X^{HF} e PDMA = 12,21%), mostrado na Figura 4.5e, tem seu melhor resultado com BHandH 40%/BHandH 40% (9,04%). Comparando com BHandH 40% (14,17%) e BHandH/BHandH 40% (10,94%), os valores da PDMA SPI são próximos, logo a melhor precisão para o cálculo BHandH 40%/BHandH 40% é devida aos valores mais precisos obtidos para o conjunto de moléculas CPI. A PDMA CPI, além de ter maiores variações, é sempre maior que a PDMA SPI para todos ajustes. O melhor resultado com geometria experimental é obtido com BHandH (12,21%).

O funcional PBE0 (que originalmente possui 25% de E_X^{HF} e PDMA = 23,18%), mostrado na Figura 4.5f, tem seu melhor resultado com PBE 40%/PBE 40% (19,92%). Comparando com PBE 40% (23,41%) e PBE0/PBE 40% (22,50%), os valores da PDMA SPI são próximos, logo a melhor precisão para o cálculo PBE 40%/PBE 40% é devida aos valores mais precisos obtidos para o conjunto de moléculas CPI. Apesar disso, a melhora da precisão CPI conforme o aumento da porcentagem de E_X^{HF} também acarreta na piora da precisão SPI. O melhor resultado com geometria experimental é obtido com PBE 30% (23,07%).

De maneira geral, o ajuste da porcentagem de troca exata melhora a precisão (com exceção do BHandH) relativa ao DFT original para geometrias experimentais, conforme já observado. Já a otimização das geometrias, tanto com o DFT original quanto com

o modificado, melhora a precisão no cálculo das CAISS comparado com a geometria experimental (apenas o B98//B98 50% teve uma ligeira piora).

O resultado mais preciso é obtido com BHandH 40%//BHandH 40%, seguido de B1B95 40%//B1B95 40%. Apesar disso, os resultados para o conjunto de moléculas SPI são mais precisos do que os resultados para o conjunto de moléculas CPI. Já os resultados com B971//B971 50% e B98//B98 50% também apresentaram uma ótima precisão, e as precisões para os conjuntos CPI e SPI estão muito mais próximas, indicando um bom ajuste independente da presença ou não de pares isolados. Essas 4 metodologias, portanto, são recomendadas para otimização seguida do cálculo de CAISS que envolvam acoplamentos similares aos do conjunto de calibração – as 2 primeiras pela excelente precisão geral, e as 2 últimas pela independência da precisão decorrente da presença de pares isolados nas moléculas.

4.3 Correções vibracionais para os funcionais testados

A correção vibracional das CAISS foi calculada no pacote Dalton2016⁹⁶ com BHandH, BHandH 40% e PBE0 40%, utilizando geometrias otimizadas obtidas com o Gaussian 09.³⁹ As coordenadas atômicas de algumas moléculas foram reorientadas para permitir a utilização de elementos de simetria molecular. A comparação com os resultados anteriores está apresentada nas Tabelas 8.30 e 8.31.

(g) BHandH

(h) PBE0

Figura 4.6: Comparação entre as PDMA obtidas pelas correções vibracionais das CAISS e os resultados sem correção, com base aug-pcJ-2, para os funcionais implementados no Dalton. As médias são calculadas para todas as 26 CAISS, assim como a diferença das médias dos conjuntos CPI e SPI.

A Figura 4.6 apresenta os valores de PDMA total e $\Delta(\text{CPI-SPI})$, comparando com os resultados sem correção vibracional. O termo *vibcor* foi adicionado para indicar os resultados das correções vibracionais.

O resultado para *vibcor* BHandH//BHandH (PDMA = 19,07%) tem precisão próxima ao resultado sem correção BHandH//BHandH (19,31%), e o tratamento para moléculas CPI e SPI tem PDMA mais próximas para a correção vibracional ($\Delta(\text{CPI} - \text{SPI}) = 12,45\% \times 16,59\%$). O resultado para *vibcor* BHandH 40%/BHandH 40% (10,04%) também tem precisão próxima ao resultado sem correção BHandH 40%/BHandH 40% (9,04%), e os conjuntos para moléculas CPI e SPI têm precisões um pouco mais distantes para a correção vibracional ($8,62\% \times 5,16\%$, respectivamente). Por sua vez o resultado para *vibcor* PBE 40%/PBE 40% (22,34%) tem precisão razoavelmente próxima ao resultado sem correção PBE 40%/PBE 40% (19,92%), e os conjuntos para moléculas CPI e SPI têm precisões um pouco mais distantes para a correção vibracional ($-8,11\% \times -5,85\%$, respectivamente), desta vez com uma pior precisão para sistemas SPI do que CPI.

A adição de correções vibracionais no cálculo das CAISS não altera significativamente a precisão do conjunto de calibração. A Tabela 4.3 contém as correções vibracionais para cada constante de acoplamento obtidas com BHandH, BHandH 40% e PBE0 40%. As correções obtidas com BHandH, BHandH 40% e PBE0 40% para cada uma das CAISS possuem valores próximos e com magnitudes, em geral, muito menor que a magnitude das CAISS experimentais. Desta forma é assumido que o cálculo das correções vibracionais com outros DFTs deve resultar em valores próximos aos da Tabela 4.3.

Para verificar as diferenças entre os conjuntos de correções vibracionais obtidos e a validade de assumir que as correções independem do funcional, são apresentados CAISS empíricos (subtraindo as correções vibracionais dos valores experimentais) com BHandH, BHandH 40% e PBE0 40% na Tabela 8.32, que também têm valores próximos.

As duas estratégias utilizadas para avaliar se a adição das correções vibracionais influencia significativamente os resultados obtidos é utilizada para corrigir os dados das Tabelas 8.1 a 8.2, 8.5 a 8.22, e 8.24 a 8.29. A adição das correções vibracionais às CAISS obtidas teoricamente (J_{corr_i}) estão apresentadas nas Tabelas 8.33 a 8.110. Já a utilização das CAISS empíricas (J_{emp_i}) como referência estão apresentadas nas Tabelas 8.111 a 8.188.

As correções para as PDMA dos funcionais da literatura estão apresentadas na Figura

4.7 (Tabelas 8.33 a 8.38; e 8.111 a 8.116). De fato, os resultados para J_{corr_i} apresentam resultados similares para os três funcionais (Figuras 4.7a, 4.7c e 4.7e). Da mesma forma, os resultados para J_{emp_i} são também similares (Figuras 4.7b, 4.7d e 4.7f).

Tabela 4.3: Correções vibracionais (em Hz) das CAISS obtidas com BHandH e PBE0.

	Funcional	BHandH	BHandH	PBE0
	E_X^{HF} (%)	50,00	40,00	40,00
HF	$^1J_{\text{HF}}$	-32,8	-33,2	-34,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	0,7	0,8	0,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	1,1	1,2	1,4
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	1,5	1,4	1,5
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	0,8	0,7	0,5
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,9	0,9	0,8
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	-6,8	-7,3	-7,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	0,7	1,8	2,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-4,3	-4,5	-4,4
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-2,1	-2,2	-2,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-14,3	-13,1	-15,3
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	2,5	2,3	2,4
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,3	-0,3	-0,3
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	0,7	0,4	0,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	3,3	3,1	3,2
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	0,4	0,2
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	0,6	0,5	0,7
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	0,7	0,4	1,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	1,9	1,8	2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-0,3	-0,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	0,3	0,2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_{\text{cis}}}$	0,3	0,3	0,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_{\text{trans}}}$	0,6	0,5	0,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	0,9	0,8	0,9
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	1,9	1,8	1,8
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,2	-0,2	-0,2

A PDMA, portanto, independe do funcional utilizado para obter as correções vibracionais. Além disso, as duas estratégias para corrigir as CAISS tem resultados próximos (como nas Figuras 4.7a e 4.7b, por exemplo), que apresentam comportamento parecido

ao obtido inicialmente para os DFTs da literatura (Figura 4.1).

Para melhor verificar as diferenças existentes entre os resultados iniciais para os DFTs da literatura e suas correções, os DFTs com PDMA inferior a 25% (sem correções) são comparados aos valores de PDMA obtidos para cada uma das correções realizadas.

4.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

(d) J_{emp_i} BHandH 40%

(e) J_{corr_i} PBE 40%

(f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.7: PDMA para funcionais da literatura, com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}).

A Tabela 4.4 apresenta os 10 DFTs mais precisos da literatura e seus valores de PDMA. Primeiramente, os valores de PDMA para cada DFT estão próximos (a maior diferença é

de 4% para o B98). Os 5 DFTs com melhor precisão (BHandH, ω B97X, ω B97XD, ω B97 e B971) continuam tendo as melhores precisões, na mesma ordem. Estes são os resultados com melhor precisão em todas correções feitas, ou seja, os demais funcionais da literatura não são mais precisos do que esses 10 DFTs.

Tabela 4.4: Comparação entre as PDMA's dos funcionais da literatura obtidas considerando as correções vibracionais. Estão indicados os funcionais utilizados para obter as correções vibracionais, assim como qual estratégia de correção dos dados foi utilizada.

Correção	—	J_{corr_i}	J_{emp_i}	J_{corr_i}	J_{emp_i}	J_{corr_i}	J_{emp_i}
Funcional	—	BHandH	BHandH	40%	PBE 40%		
BHandH	12,21%	12,91%	13,67%	12,89%	13,44%	13,25%	14,25%
ω B97X	14,49%	16,29%	16,12%	16,65%	16,53%	16,23%	16,09%
ω B97XD	16,48%	18,32%	18,09%	18,68%	18,47%	18,26%	18,08%
ω B97	19,64%	22,08%	21,17%	22,52%	21,19%	22,35%	21,47%
B971	21,89%	24,84%	23,65%	24,78%	23,67%	25,12%	23,94%
B98	22,55%	26,24%	24,94%	26,14%	24,84%	26,55%	25,28%
PBE0	23,18%	26,70%	25,71%	26,66%	25,52%	27,04%	26,15%
B972	23,84%	25,53%	24,07%	25,85%	24,47%	25,76%	24,28%
CAM-B3LYP	23,87%	26,32%	25,63%	26,56%	26,01%	26,28%	25,55%
B1B95	24,17%	26,88%	26,16%	27,16%	26,55%	26,81%	26,10%

Os resultados da variação da porcentagem de E_X^{HF} também foram corrigidos (Tabelas 8.39 a 8.92; e 8.117 a 8.170), e os valores de PDMA total estão apresentados na Figura 4.8. Apenas variações dos funcionais BHandH, B1B95, B971, B972 e B98 apresentam resultados com PDMA inferior a 20%, com valor mínimo utilizando por volta de 40% a 50% E_X^{HF} (de acordo com a Figura 4.4a).

(a) J_{corr_i} BHandH

4.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

62

(b) J_{emi} BHandH

(c) J_{corr_i} BHandH 40%

(d) J_{emi} BHandH 40%

(e) J_{corr_i} PBE 40%

(f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.8: PDMA das CAISS com variação da porcentagem de E_X^{HF} para funcionais da literatura sem CLA, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). Valores de PDMA superiores a 200% estão expressos apenas até 200% na escala.

Os resultados para B1B95, B971, B972, B98, BHandH e PBE0 envolvendo a otimização de geometrias foram corrigidos da mesma maneira (Tabelas 8.93 a 8.110; e 8.171 a 8.188), e os valores de PDMA total estão apresentados na Figuras 4.9, 4.10, 4.11, 4.12, 4.13 e 4.14, respectivamente. Novamente, os resultados com melhores precisões são reproduzidos.

(a) J_{corr_i} BHandH (b) J_{emp_i} BHandH

(c) J_{corr_i} BHAndH 40% (d) J_{emp_i} BHAndH 40% (e) J_{corr_i} PBE 40% (f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.9: Comparação entre as PDMA's obtidas com geometrias teóricas e experimentais para B1B95 com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

(a) J_{corr_i} BHandH (b) J_{emp_i} BHandH (c) J_{corr_i} BHandH 40% (d) J_{emp_i} BHandH 40%

(e) J_{corr_i} PBE 40% (f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.10: Comparação entre as PDMA's obtidas com geometrias teóricas e experimentais para B971 com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

(a) J_{corr_i} BHandH (b) J_{emp_i} BHandH

(c) J_{corr_i} BHandH 40% (d) J_{emp_i} BHandH 40% (e) J_{corr_i} PBE 40% (f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.11: Comparação entre as PDMA's obtidas com geometrias teóricas e experimentais para B972 com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

(a) J_{corr_i} BHandH (b) J_{emp_i} BHandH (c) J_{corr_i} BHandH 40% (d) J_{emp_i} BHandH 40%

(e) J_{corr_i} PBE 40% (f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.12: Comparação entre as PDMA obtidas com geometrias teóricas e experimentais para B98 com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

(a) J_{corr_i} BHandH (b) J_{emp_i} BHandH

4.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

(c) J_{corr_i} BHAndH 40% (d) J_{emp_i} BHAndH 40% (e) J_{corr_i} PBE 40% (f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.13: Comparação entre as PDMA obtidas com geometrias teóricas e experimentais para BHAndH com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

(a) J_{corr_1} BHandH (b) J_{emp_1} BHandH (c) J_{corr_1} BHandH 40% (d) J_{emp_1} BHandH 40%

(e) J_{corr_i} PBE 40%

(f) J_{emp_i} PBE 40%

Figura 4.14: Comparação entre as PDMA obtidas com geometrias teóricas e experimentais para PBE0 com base aug-pcJ-2, utilizando as correções vibracionais para correção das CAISS teóricas (J_{corr_i}) ou experimentais (J_{emp_i}). As médias são calculadas para as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

Retomando, o cálculo das correções vibracionais é importante para descrever os sistemas com maior exatidão. Entretanto, a utilização das correções vibracionais não providenciou PDMA menores, e a ordem de precisão dos funcionais não foi, de maneira geral, alterada. Portanto é considerado que o tratamento das correções vibracionais não melhora a precisão do conjunto das CAISS obtidos. Devido ao grande custo computacional empregado para se calcular as correções vibracionais das CAISS frente aos resultados praticamente inalterados, é decidido utilizar apenas as constantes obtidas sem correções vibracionais.

4.4 Geração de novos funcionais combinando E_X^{HF} , E_X^{DFT} e E_C^{DFT}

4.4.1 Geometrias experimentais

Vários funcionais são gerados através da combinação de diferentes funcionais de troca E_X^{DFT} (B, B971, B972, B98, O, PBE, PW91, S e TPSS) e de correlação E_C^{DFT} (B95, B98, B971, B972, LYP, P86, PBE, PW91 e TPSS), além da variação da porcentagem de E_X^{HF} , possibilitando obter CAISS mais precisas.

Os resultados estão apresentados nas Tabelas 8.189 a 8.197, 8.199 a 8.207, 8.209 a 8.217, 8.219 a 8.227, 8.229 a 8.237, 8.239 a 8.247, 8.249 a 8.257, 8.259 a 8.267 e 8.269 a 8.277, para geometrias experimentais com base aug-pcJ-2.

A Figura 4.15 apresenta os resultados de PDMA total com base aug-pcJ-2. Para melhor visualização, os resultados estão organizados por funcional de troca.

(a) Troca B

(b) Troca B971

(c) Troca B972

(d) Troca B98

(e) Troca O

(f) Troca PBE

(g) Troca PW91

(h) Troca S

(i) Troca TPSS

Figura 4.15: PDMA para CAISS com diferentes funcionais de troca e correlação e variando a porcentagem de E_X^{HF} com a base aug-pcJ-2. Cada um dos gráficos (a) a (i) corresponde a uma das trocas avaliadas, e cada cor de coluna corresponde a uma das correlações.

As precisões já obtidas com B1B95, B971, B972, B98, BHandH (SLYP 50% E_X^{HF}) e PBE0 (ver Figura 4.4a) são reproduzidas. Ótimas precisões também são obtidas com B972LYP 50% E_X^{HF} , SB971 50% E_X^{HF} , B972B95 60% E_X^{HF} , B971TPSS 50% E_X^{HF} e B98TPSS 50% E_X^{HF} , entre vários outros.

Considerando todos os funcionais com troca B (Figura 4.15a), a melhor precisão é obtida com o funcional BB95 50%. Considerando todos os funcionais com troca B971 (Figura 4.15b), a melhor precisão é obtida com o funcional B971TPSS 50%. Para cada

uma das trocas estudadas é possível determinar os resultados com melhores precisões, e tais dados estão resumidos na Tabela 4.5.

Da mesma forma, considerando todos os funcionais com correlação B95 (colunas vermelhas das Figuras 4.15a a 4.15i), a melhor precisão é obtida com o funcional B972B95 60%. Considerando todos os funcionais com correlação B98 (colunas laranjas das Figuras 4.15a a 4.15i), a melhor precisão é obtida com o funcional B972B98 50%. Para cada uma das correlações estudadas também é possível determinar os resultados com melhores precisões, e tais dados estão resumidos na Tabela 4.6.

(a) Troca B

(b) Troca B971

(c) Troca B972

(d) Troca B98

(e) Troca O

(f) Troca PBE

(g) Troca PW91

(h) Troca S

(i) Troca TPSS

Figura 4.16: PDMA para CAISS com diferentes funcionais de troca e correlação e variando a a porcentagem de E_X^{HF} com a base HuzIII-su3. Cada um dos gráficos (a) a (i) corresponde a uma das trocas avaliadas, e cada cor de coluna corresponde a uma das correlações.

A combinação de funcionais de troca e correlação também é calculada para geometrias experimentais com a base HuzIII-su3, e a Figura 4.16 apresenta os resultados para as PDMA. Os valores das PDMA obtidas estão apresentados nas Tabelas 8.198, 8.208, 8.218, 8.228, 8.238, 8.248, 8.258, 8.268 e 8.278.

Em uma análise geral, os valores obtidos com base HuzIII-su3 (Figura 4.16) são bastante similares aos obtidos com a base aug-pcJ-2 (Figura 4.15). Para melhor comparar os funcionais obtidos com cada base, a Tabela 4.5 apresenta os dois melhores funcionais para cada funcional de troca, e a Tabela 4.6 apresenta os dois melhores funcionais para cada funcional de correlação.

Tabela 4.5: Melhores funcionais para cada troca.

Base DFT Troca	aug-pcJ-2		HuzIII-su3	
	Melhor funcional (PDMA)	2º melhor funcional (PDMA)	Melhor funcional (PDMA)	2º melhor funcional (PDMA)
B	BB95 50% E_X^{HF} (11,69%)	BB971 40% E_X^{HF} (14,76%)	BB95 50% E_X^{HF} (13,90%)	BB971 40% E_X^{HF} (16,10%)
B971	B971TPSS 50% E_X^{HF} (10,20%)	B971P86 50% E_X^{HF} (10,70%)	B971TPSS 50% E_X^{HF} (11,40%)	B971P86 50% E_X^{HF} (11,60%)
B972	B972LYP 50% E_X^{HF} (8,31%)	B972B98 50% E_X^{HF} (8,72%)	B972B98 50% E_X^{HF} (8,70%)	B972B971 50% E_X^{HF} (8,90%)
B98	B98TPSS 50% E_X^{HF} (10,89%)	B98LYP 50% E_X^{HF} (12,08%)	B98LYP 50% E_X^{HF} (10,70%)	B98B98 40% E_X^{HF} (11,10%)
O	OB972 40% E_X^{HF} (13,66%)	OB95 50% E_X^{HF} (15,11%)	OB972 40% E_X^{HF} (13,40%)	OLYP 40% E_X^{HF} (14,50%)
PBE	PBEB95 50% E_X^{HF} (11,98%)	PBE971 40% E_X^{HF} (13,41%)	PBEB95 50% E_X^{HF} (12,40%)	PBE971 40% E_X^{HF} (14,60%)
PW91	PW91B95 50% E_X^{HF} (11,71%)	PW91B971 40% E_X^{HF} (14,57%)	PW91B95 50% E_X^{HF} (13,40%)	PW91B971 40% E_X^{HF} (15,80%)
S	SB971 50% E_X^{HF} (9,30%)	SB98 50% E_X^{HF} (10,25 %)	SB971 50% E_X^{HF} (9,50%)	SB98 50% E_X^{HF} (12,00%)
TPSS	TPSSB95 40% E_X^{HF} (16,18%)	TPSSP86 40% E_X^{HF} (19,35%)	TPSSB95 50% E_X^{HF} (16,80%)	TPSSB971 40% E_X^{HF} (19,90%)

Tabela 4.6: Melhores funcionais para cada correlação.

Base DFT de Correlação	aug-pcJ-2		HuzIII-su3	
	Melhor funcional (PDMA)	2º melhor funcional (PDMA)	Melhor funcional (PDMA)	2º melhor funcional (PDMA)
B95	B972B95 60% E_X^{HF} (10,03%)	BB95 50% E_X^{HF} (11,69%)	B972B95 60% E_X^{HF} (10,70%)	SB95 60% E_X^{HF} (12,20%)
B98	B972B98 50% E_X^{HF} (8,72%)	SB98 50% E_X^{HF} (10,25%)	B972B98 50% E_X^{HF} (8,70%)	B98B98 50% E_X^{HF} (11,10%)
B971	SB971 50% E_X^{HF} (9,30%) e B972B971 50% E_X^{HF} (9,34%)	PBE971 40% E_X^{HF} (13,41%)	B972B971 50% E_X^{HF} (8,90%)	SB971 50% E_X^{HF} (9,50%)
B972	OB972 40% E_X^{HF} (13,66%)	SB972 40% E_X^{HF} (15,36%)	OB972 40% E_X^{HF} (13,40%)	SB972 40% E_X^{HF} (15,40%)
LYP	B972LYP 50% E_X^{HF} (8,31%)	B98LYP 50% E_X^{HF} (12,08%)	B972LYP 50% E_X^{HF} (9,60%)	B98LYP 50% E_X^{HF} (10,70%)
P86	B971P86 50% E_X^{HF} (10,70%)	B98P86 50% E_X^{HF} (12,80%)	B971P86 50% E_X^{HF} (11,60%)	B98P86 50% E_X^{HF} (12,80%)
PBE	B971PBE 50% E_X^{HF} (11,84%)	B98PBE 50% E_X^{HF} (13,01%)	B971PBE 50% E_X^{HF} (13,90%)	B98PBE 50% E_X^{HF} (14,50%)
PW91	B971PW91 50% E_X^{HF} (11,48%)	B98PW91 50% E_X^{HF} (12,50%)	B971PW91 50% E_X^{HF} (13,50%)	B98PW91 50% E_X^{HF} (14,00%)
TPSS	B971TPSS 50% E_X^{HF} (10,20%)	B98TPSS 50% E_X^{HF} (10,89%)	B971TPSS 50% E_X^{HF} (11,40%)	B98TPSS 50% E_X^{HF} (11,70%)

Os resultados entre aug-pcJ-2 e HuzIII-su3 são, em geral, similares. Os funcionais de troca B, B971, PBE, PW91, S e TPSS apresentam os mesmos dois melhores funcionais (apenas o funcional TPSSB95 teve melhor precisão com 40% E_X^{HF} para aug-pcJ-2 e 50% E_X^{HF} para HuzIII-su3, e como o intervalo mínimo entre os diferentes funcionais testados é de 10% E_X^{HF} , é possível supor que o mínimo da PDMA está entre 40 e 50% E_X^{HF}). A troca O apresenta o mesmo funcional com melhor resultado, e o 2º melhor funcional aparece como 3º ou 4º melhor utilizando a outra base. As trocas B972 e B98 apresentam o mesmo funcional como melhor para HuzIII-su3 e 2º melhor para aug-pcJ-2, e outro funcional também aparece como 3º ou 4º melhor utilizando a outra base. Como os valores de PDMA são bastante próximos, os resultados são consistentes.

Os funcionais de correlação B972, LYP, P86, PBE, PW91 e TPSS apresentam os mesmos dois melhores funcionais (para a correlação B971, os dois funcionais apresentados na Tabela 4.6 foram considerados o melhor funcional com aug-pcJ-2, pois as PDMA's eram iguais). A correlação B971 apresenta, para os dois melhores resultados para HuzIII-su3, os resultados que são considerados o melhor resultado para aug-pcJ-2. As correlações B95 e B98 apresentam o mesmo melhor funcional, e o 2º melhor aparece como 3º ou 4º melhor utilizando a outra base. Como os valores de PDMA são bastante próximos, os resultados também são consistentes.

As precisões dos funcionais para as bases aug-pcJ-2 e HuzIII-su3, dadas as pequenas mudanças nos valores das PDMA's, são praticamente as mesmas. Em especial, as ordens observadas para os melhores funcionais são muito parecidas. A opção pela utilização da base aug-pcJ-2 se deve, além de seu desenvolvimento para o estudo de propriedades magnéticas, ao fato de ser quádruplo- ζ (frente à HuzIII-su3, que é triplo- ζ).

4.4.2 Geometrias otimizadas

No total, 26 dos funcionais gerados estão elencados nas Tabelas 4.5 e 4.6 com base aug-pcJ-2. Cada um desses funcionais destacados foi utilizado para otimização de geometrias e cálculo das CAISS, e os dados estão apresentados nas Tabelas 8.279 a 8.304.

Tabela 4.7: Comparação da precisão dos melhores funcionais obtida com geometrias teóricas e experimentais combinando troca e correlação. As médias foram calculadas para todas as 26 CAISS e para somente 23 CAISS (excluindo $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 e $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4).

Geometrias	Experimentais	Otimizadas	Experimentais	Otimizadas
CAISS	Total	Total	Sem 3 piores	Sem 3 piores
Funcionais	E_X^{HF} (PDMA)	E_X^{HF} (PDMA)	E_X^{HF} (PDMA)	E_X^{HF} (PDMA)
BB95	50% (11,69%)	40% (10,96%)	40% (8,22%)	40% (7,17%)
BB971	40% (14,76%)	30% (14,46%)	30% (9,55%)	30% (10,50%)
B971P86	50% (10,70%)	60% (12,63%)	50% (10,15%)	60% (8,10%)
B971PBE	50% (11,84%)	60% (16,21%)	50% (9,25%)	50% (8,65%)
B971PW91	50% (11,48%)	60% (15,76%)	50% (9,16%)	50% (8,55%)
B971TPSS	50% (10,20%)	60% (14,96%)	50% (8,05%)	50% (8,23%)
B972B95	60% (10,03%)	60% (8,58%)	60% (9,18%)	60% (7,80%)
B972B971	50% (9,34%)	50% (12,95%)	50% (9,26%)	50% (9,51%)
B972B98	50% (8,72%)	50% (13,81%)	50% (9,13%)	50% (8,90%)
B972LYP	50% (8,31%)	50% (14,60%)	50% (8,63%)	50% (8,25%)
B98LYP	50% (12,08%)	60% (15,82%)	50% (8,82%)	50% (8,50%)
B98P86	50% (12,80%)	60% (12,63%)	60% (10,68%)	60% (8,00%)
B98PBE	50% (13,01%)	60% (15,99%)	50% (9,81%)	60% (9,06%)
B98PW91	50% (12,50%)	60% (15,61%)	50% (9,59%)	60% (8,85%)
B98TPSS	50% (10,89%)	60% (14,29%)	50% (8,39%)	50% (8,65%)
OB95	50% (15,11%)	40% (15,84%)	40% (9,03%)	40% (8,64%)
OB972	40% (13,66%)	30% (14,01%)	30% (8,02%)	30% (9,27%)
PBEB95	50% (11,98%)	40% (9,28%)	40% (7,88%)	40% (7,78%)
PBEB971	40% (13,41%)	30% (13,19%)	30% (9,83%)	30% (11,27%)
PW91B95	50% (11,71%)	40% (10,24%)	40% (8,09%)	40% (7,48%)
PW91B971	40% (14,57%)	30% (13,77%)	30% (9,95%)	30% (11,18%)
SB971	50% (9,30%)	40% (14,89%)	50% (7,41%)	40% (12,47%)
SB972	40% (15,36%)	30% (20,84%)	50% (11,48%)	40% (16,29%)
SB98	50% (10,25%)	40% (12,14%)	50% (8,33%)	40% (11,20%)
TPSSB95	40% (16,18%)	40% (11,44%)	30% (8,85%)	40% (9,64%)
TPSSP86	40% (19,35%)	40% (14,30%)	30% (9,86%)	30% (9,46%)

Para cada funcional, é avaliada a princípio a porcentagem de E_X^{HF} de menor PDMA total para geometrias experimentais e as porcentagens adjacentes ($\pm 10\%$), e a otimização é feita apenas com o funcional construído (visto que majoritariamente não há um funcional original como referência). Os resultados da PDMA considerando a otimização

de geometrias estão apresentados na terceira coluna da Tabela 4.7. A segunda coluna da Tabela 4.7 contém os melhores resultados com geometrias experimentais (Figura 4.15).

Apenas os resultados com troca B972 e TPSS têm mesma porcentagem de E_X^{HF} resultando no menor valor de PDMA tanto para geometrias otimizadas quanto experimentais. Os resultados com troca B971 e B98 têm um aumento de 10% da E_X^{HF} para a otimização de geometrias, e os resultados com troca B, O, PBE, PW91 e S têm diminuição de 10%.

De maneira geral, a precisão melhora para os resultados com troca B, PBE, PW91 e TPSS, e piora para troca B971, B98 e S. De todos, o funcional B972B95 60% E_X^{HF} apresenta a melhor precisão (PDMA = 8,58%) para a otimização e cálculo das CAISS, seguido de PBEB95 40% E_X^{HF} (9,28%), PW91B95 40% E_X^{HF} (10,24%), BB95 40% E_X^{HF} (10,96%) e TPSSB95 40% E_X^{HF} (11,44%), ou seja, os resultados com correlação B95 são os mais precisos com geometrias otimizadas.

Entretanto, a mudança da porcentagem de E_X^{HF} necessária para obter PDMA mínimo encontrada na maioria dos DFTs pode ser um indicativo de que a precisão é dependente das CAISS consideradas. Assim, para melhor investigar a dependência da precisão em relação aos tipos de acoplamento, é observada a porcentagem de desvio absoluto (PDA) de cada uma das CAISS, conforme apresentado na Figura 4.17. Cabe ressaltar que o comportamento da Figura 4.17 não é observado apenas para BB95, B972B95, B98LYP, OB972 e SB971, mas para todos os funcionais construídos avaliados na otimização de geometrias (ver funcionais na Tabela 4.7).

(a) BB95

4.4. GERAÇÃO DE NOVOS FUNCIONAIS COMBINANDO E_X^{HF} , E_X^{DFT} E E_C^{DFT}

(b) B972B95

(c) B98LYP

(d) OB972

(e) SB971

Figura 4.17: PDA das CAISS com otimização de geometrias para algumas combinações de troca e correlação entre 20 e 70% de E_X^{HF} . As geometrias teóricas são obtidas no mesmo nível teórico. Os demais resultados apresentam comportamento similar.

As constantes $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 são as principais contribuições para que a PDMA seja maior, e portanto são feitos todos cálculos de DM, DMA e PDMA com a exclusão dessas 3 constantes (apresentados nas Tabelas 8.189 a 8.304). Os valores das PDMA excluindo essas 3 CAISS estão apresentados nas quarta e quinta colunas da Tabela 4.7 para os melhores funcionais com geometrias experimentais e otimizadas, respectivamente.

Para boa parte dos DFTs houve mudanças significativas nos valores de DM, DMA e PDMA (ver Tabelas 8.189 a 8.304), indicando que a precisão não é independente do tipo de acoplamento. Para o funcional B972B95 60% E_X^{HF} , a exclusão das 3 constantes não altera a porcentagem de E_X^{HF} (60%), e a PDMA total varia de 10,03% para 9,18% considerando as geometrias experimentais, e de 8,58% para 7,80% para as geometrias teóricas. A pequena variação da PDMA (inferior a 1%) para a remoção de $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 e de $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 é um indicativo de que a precisão do funcional é independente dos tipos de acoplamento considerados.

Pequenas variações de PDMA também são observadas para os funcionais B972B971 50% E_X^{HF} (de 9,34% para 9,26% para geometrias experimentais, e de 12,95% para 9,51% para geometrias teóricas), B972B98 50% E_X^{HF} (de 8,72% para 9,13% para geometrias

experimentais, e de 13,81% para 8,90% para geometrias teóricas) e B972LYP 50% E_X^{HF} (de 8,31% para 8,63% para geometrias experimentais, e de 14,60% para 8,25% para geometrias teóricas), e todos têm 50% E_X^{HF} como melhor precisão. Para o funcional B971P86 a PDMA varia de 10,70% para 10,15% para geometrias experimentais (com 50% E_X^{HF}), e de 12,69% para 8,10% para geometrias teóricas (com 60% E_X^{HF}). A maior variação da PDMA para os demais funcionais indica que a precisão é dependente dos tipos de acoplamento considerados.

Assim dos funcionais construídos a partir da troca, correlação e porcentagem de E_X^{HF} , o B972B95 60% E_X^{HF} apresenta ótimos resultados para o cálculo de CAISS, inclusive após a otimização de geometrias. Em geral, utilizar o funcional de correlação B95 é uma boa estratégia para obter CAISS precisas, e está contido em alguns dos DFTs que produzem bons resultados. A utilização do funcional de troca B972 também é uma estratégia razoável para obter CAISS precisas, e também está contido em alguns dos DFTs que produzem bons resultados. O ajuste por volta de 40% a 50% E_X^{HF} resulta nas melhores precisões; desta forma o B972B95 60% E_X^{HF} é destacado pela alta porcentagem de E_X^{HF} presente.

4.5 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais de longo alcance

4.5.1 Geometrias experimentais

A variação da porcentagem de E_X^{HF} para CAM-B3LYP, ω B97, ω B97X e ω B97XD foram feitas através dos IOp(3/107), IOp(3/108), IOp(3/119), IOp(3/120), IOp(3/130) e IOp(3/131). Para tanto, é preciso considerar que α representa a porcentagem de E_X^{HF} a distâncias próximas de zero, e $\alpha + \beta$ representa a porcentagem de E_X^{HF} a distâncias tendendo ao infinito, de acordo com a Figura 3.1. A Tabela 4.8 apresenta os valores originais dos parâmetros α , $\alpha + \beta$ e γ para os DFTs estudados.

Tabela 4.8: Parâmetros originais dos funcionais de longo alcance.

Funcionais	α	$\alpha + \beta$	γ
CAM-B3LYP	19,00%	65,00%	0,33
ω B97	0,00%	100,00%	0,40
ω B97X	15,77%	100,00%	0,30
ω B97XD	22,20%	100,00%	0,20

Para que a variação da porcentagem de E_X^{HF} seja feita de 0 a 100%, O parâmetro $\alpha + \beta$ foi fixado igual a 100%. Desta forma, α foi variado de 0 a 100% em intervalos de 10%, e $\beta = 100\% - \alpha$. Apesar disso, é visto que a correção de longo alcance não implica que α deva ser zero e $\alpha + \beta = 1$, e portanto é possível utilizar valores diferentes, de acordo com a Figura 3.1 (baseada no trabalho de Yanai *et al* sobre o método atenuado por Coulomb – CAM-B3LYP).⁷⁵ Por esse motivo também são adotados valores de $\alpha + \beta$ iguais a 80%, 60%, 40% e 20%. A variação de α , entretanto não pode ser feita até 100%, mas até o valor de $\alpha + \beta$ (pois β deve ser não negativo). O valor de γ não foi alterado.

Os resultados obtidos com base aug-pcJ-2 para as variações desses 4 funcionais estão apresentados nas Tabelas 8.305 a 8.324. Não foi possível obter os resultados desejados nos casos em que α ou β são iguais a zero, visto que quando ajustados para zero, o programa Gaussian 09 retorna o valor original do funcional para tal parâmetro.

Tabela 4.9: Melhores funcionais de longo-alcance, variando α , para diferentes valores do parâmetro $\alpha + \beta$. O valor da PDMA está exposto entre parênteses.

Funcionais	$\alpha + \beta = 100\%$	$\alpha + \beta = 80\%$	$\alpha + \beta = 60\%$	$\alpha + \beta = 40\%$
CAM-B3LYP	$\alpha = 30\%$ (15,51%)	$\alpha = 30\%$ (17,26%)	$\alpha = 40\%$ (18,32%)	$\alpha = 30\%$ (21,20%)
ω B97	$\alpha = 10\%$ (12,34%)	$\alpha = 20\%$ (11,29%)	$\alpha = 20\%$ (12,23%)	$\alpha = 30\%$ (13,31%)
ω B97X	$\alpha = 20\%$ (10,27%)	$\alpha = 20\%$ (10,36%)	$\alpha = 20\%$ (14,01%)	$\alpha = 20\%$ (18,21%)
ω B97XD	$\alpha = 30\%$ (17,55%)	$\alpha = 30\%$ (16,89%)	$\alpha = 30\%$ (16,10%)	$\alpha = 30\%$ (15,47%)

Figura 4.18: PDMA das CAISS com variação da α e $\alpha + \beta$ para os funcionais de longo alcance com base aug-pcJ-2. Valores de PDMA superiores a 200% estão expressos apenas até 200% na escala.

Com base nos resultados para os DFTs sem correção de longo alcance, é esperado que o mínimo do PDMA não seja obtido nos valores extremos. Entretanto, especialmente para as variações de 0 a 40% (em que $\alpha + \beta = 40\%$) e de 0 a 20% (em que $\alpha + \beta = 20\%$), essa consideração pode ser problemática pois há poucos valores investigados na variação. Para a variação de 0 a 20%, temos somente as CAISS para o caso em que $\alpha = 10\%$ e $\beta = 10\%$ (neste caso, as PDMA para os 4 funcionais são superiores a 30%, e portanto não devemos encontrar boas precisões nessa variação).

A Figura 4.18 apresenta os valores de PDMA total para as variações de α e $\alpha + \beta$. O valor de $\alpha + \beta$ está expresso entre colchetes na legenda da Figura 4.18 ao lado do nome do funcional. Para avaliar mais adequadamente os melhores resultados, cada uma das variações (com $\alpha + \beta$ fixado) foi avaliada separadamente, e a porcentagem α de E_X^{HF} que gerou a menor PDMA está destacada na Tabela 4.9 (a variação com $\alpha + \beta = 20\%$ não é incluída pois as PDMA excedem 30%).

A notação “DFT($\alpha|\alpha+\beta|\gamma$)” é adotada para tornar mais breve a descrição dos parâmetros, e “#” indica que o parâmetro não é alterado; assim “DFT(#|#|#)” corresponde ao próprio DFT original. Desta forma, o melhor resultado foi obtido com $\omega\text{B97X}(0,2|1,0|\#)$, seguido de $\omega\text{B97X}(0,2|0,8|\#)$ e $\omega\text{B97}(0,2|0,8|\#)$. Os funcionais ωB97XD e CAM-B3LYP também deram bons resultados, porém não tão precisos pois as PDMA não são inferiores a 15%. O melhor resultado para ωB97XD ainda pode ser superado para casos com $\alpha \geq 40\%$, que não puderam ser investigados. O resultado com $\text{CAM-B3LYP}(0,3|1,0|\#)$, ainda assim, é muito melhor que o CAM-B3LYP original, e isso está principalmente relacionado com o aumento de $\alpha + \beta$.

Para CAM-B3LYP e ωB97X , os melhores resultados assemelham-se à idealização da correção de longo alcance (Figura 3.1b), enquanto que para ωB97XD o método atenuado por Coulomb (Figura 3.1c) é mais similar; ωB97 apresenta características mistas.

Uma outra maneira de ajustar a porcentagem de E_X^{HF} dos funcionais de longo alcance envolve a variação do parâmetro γ . Como não existem grandes restrições como no caso de α e β , foi escolhido variar o γ de 0,25 a 0,65 em intervalos de 0,05 mais o valor de 0,75 (o último intervalo é de 0,10 pois o valor de γ é grande comparativamente aos DFTs da

literatura. Os valores de α e $\alpha + \beta$ não foram variados. Os resultados estão apresentados nas Tabelas 8.325 a 8.328.

Figura 4.19: PDMA das CAISS com variação do parâmetro γ entre 0,25 e 0,75 com base aug-pcJ-2.

A Figura 4.19 apresenta as PDMA's totais obtidas para as modificações dos DFTs de longo alcance. O melhor resultado é do funcional ω B97XD($\#|\#|0,35$) (PDMA = 8,17%), seguido de ω B97X($\#|\#|0,40$) (9,18%), ambos com ótima precisão. Os funcionais ω B97($\#|\#|0,50$) (15,13%) e CAM-B3LYP($\#|\#|0,55$) (18,66%) também são bastante precisos, porém as PDMA's são superiores a 15%. Todos apresentam um incremento do parâmetro γ em relação ao funcional original, cujos parâmetros estão apresentados na Tabela 4.8. O incremento de γ está associado ao incremento da porcentagem E_X^{HF} nos DFTs.

Tabela 4.10: Melhores modificações dos funcionais de longo alcance usando geometrias experimentais.

Funcionais	Original	Modificados
CAM-B3LYP	(0,19 0,65 0,33)	(0,3 1,0 $\#$)
ω B97	(0,0 1,0 0,40)	(0,2 0,8 $\#$)
ω B97X	(0,1577 1,0 0,30)	(0,2 1,0 $\#$) e ($\# \# 0,40$)
ω B97XD	(0,2220 1,0 0,20)	($\# \# 0,35$)

Desta maneira, a utilização dos parâmetros modificados apresentados na Tabela 4.10 para os DFTs de longo alcance permite obter resultados com ótima precisão para geo-

metrias experimentais. É interessante notar que, para CAM-B3LYP, o aumento de α e $\alpha + \beta$ em relação ao original corresponde a um incremento na porcentagem de E_X^{HF} . Para ωB97X e ωB97XD , o aumento de α em relação ao original também corresponde a um incremento na porcentagem de E_X^{HF} , assim como o aumento de γ em relação ao original também corresponde a esse incremento. Já para ωB97 existe um balanço entre a diminuição de $\alpha + \beta$, que corresponde ao decremento da porcentagem de E_X^{HF} , e o aumento de α (e portanto não há uma simples comparação com a porcentagem de E_X^{HF} do funcional original).

4.5.2 Geometrias otimizadas

Os melhores funcionais foram avaliados considerando a otimização das geometrias moleculares. A otimização foi feita tanto com o funcional modificado quanto com o original - para tanto foi utilizada a notação “DFT₁//DFT₂”, indicando que a otimização de geometrias foi feita com o “DFT₁”, e o cálculo da propriedade com o “DFT₂” (a ausência da notação indica que não houve otimização, e portanto as geometrias experimentais foram consideradas no cálculo da propriedade).

Os resultados com otimização de geometrias para os DFTs de longo alcance estão apresentados nas Tabelas 8.329 a 8.337. O CAM-B3LYP apresentou PDMA total de 21,73%, sendo ligeiramente melhor que as geometrias experimentais (23,18%). Nenhuma das modificações a partir do CAM-B3LYP foi investigada para geometrias otimizadas, visto que a família ωB97 apresentou resultados mais precisos.

A Figura 4.20 apresenta os resultados para a variação de α e $\alpha + \beta$ do ωB97X . Em primeiro lugar, a utilização de $\alpha = 20\%$ resulta nas melhores precisões obtidas, sendo ligeiramente mais preciso que o funcional original. O melhor resultado foi obtido com $\omega\text{B97X}(0,2|1,0|\#)/\omega\text{B97X}(0,2|1,0|\#)$ (PDMA = 10,55%); a diferença para o resultado envolvendo as geometrias experimentais consiste na ligeira inversão da precisão dos conjuntos CPI e SPI, que são bastante próximos. O resultado obtido com $\omega\text{B97X}(0,2|0,8|\#)/\omega\text{B97X}(0,2|0,8|\#)$ (12,06%) tem aumento de PDMA inferior a 2% em relação ao com geometrias experimentais, mas seus resultados para CPI e SPI são

muito mais balanceados em relação ao obtido para geometrias experimentais. Os valores de PDMA são menores para $\alpha + \beta = 100\%$, e aumentam conforme $\alpha + \beta$ diminui.

(a) $\alpha + \beta = 100\%$

(b) $\alpha + \beta = 80\%$

(c) $\alpha + \beta = 60\%$

Figura 4.20: Comparação entre as PDMA obtidas com base aug-pcJ-2 para geometrias teóricas e experimentais para o $\omega B97X$ com $\alpha = 10\%$, 20% ou 30% . As médias são calculadas para todas as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

A Figura 4.21 apresenta os resultados para a variação de α e $\alpha + \beta$ do $\omega B97$. Os resultados envolvendo cálculo de otimização não superam os melhores resultados com geometrias experimentais. O melhor resultado foi obtido com $\omega B97//\omega B97(0,2|1,0|1\#)$ (PDMA = 12,81%), porém esse resultado é muito mais preciso para as moléculas CPI

do que as SPI, enquanto os resultados com geometrias experimentais e com otimizadas usando o funcional modificado são ambos muito balanceados. O resultado obtido com $\omega\text{B97}(0,2|0,8|\#)//\omega\text{B97}(0,2|0,8|\#)$ (13,82%) tem um maior aumento de PDMA, comparado às geometrias experimentais, no conjunto CPI. Para $\alpha = 10\%$, os valores de PDMA são menores para $\alpha + \beta = 100\%$, e aumentam conforme $\alpha + \beta$ diminui; para $\alpha = 30\%$, os valores de PDMA são menores para $\alpha + \beta = 60\%$, e aumentam conforme $\alpha + \beta$ aumenta.

Figura 4.21: Comparação entre as PDMA obtidas com base aug-pcJ-2 para geometrias teóricas e experimentais para o ωB97 com $\alpha = 10\%$, 20% ou 30% . As médias são calculadas para todas as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

O ωB97XD , apesar de não ter apresentado funcionais modificados com precisões tão boas quanto as modificações do ωB97X e ωB97 , apresenta uma ótima precisão (ver Figura

4.19) para a variação do parâmetro γ . Desta forma, a Figura 4.22 apresenta os resultados envolvendo otimização de geometrias para a variação de γ do ω B97XD. De modo geral, todos esse resultados apresentam boas precisões (PDMA's totais abaixo de 20%). Os resultados para ω B97XD// ω B97XD($\#\#\mid 0,35$) (PDMA = 9,42%) e ω B97XD($\#\#\mid 0,35$)// ω B97XD($\#\#\mid 0,35$) (10,98%) são bastante precisos, com o segundo mais balanceado (entre CPI e SPI) do que o primeiro. O resultado para ω B97XD// ω B97XD($\#\#\mid 0,40$) (9,37%) empata com o ω B97XD// ω B97XD($\#\#\mid 0,35$) como os melhores dentre os resultados para as geometrias otimizadas, sendo o primeiro ligeiramente mais balanceado.

Figura 4.22: Comparação entre as PDMA's obtidas com geometrias teóricas e experimentais para o ω B97XD variando γ . As médias são calculadas para todas as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

Figura 4.23: Comparação entre as PDMA's obtidas com geometrias teóricas e experimentais para o ω B97X variando γ . As médias são calculadas para todas as 26 CAISS, para as 11 CAISS das moléculas CPI e para as 15 CAISS das moléculas SPI.

A Figura 4.23 apresenta os resultados envolvendo otimização de geometrias para a variação de γ do ω B97X. Esses resultados também apresentam, em geral, boas precisões (PDMA's totais abaixo de 20%). Os resultados para ω B97X// ω B97X($\#\#\mid 0,40$) (PDMA = 10,13%) e ω B97X($\#\#\mid 0,40$)// ω B97X($\#\#\mid 0,40$) (11,09%) são bastante precisos, sendo

ambos um pouco mais precisos para o conjunto CPI do que o SPI (o resultado para geometrias experimentais é um pouco mais preciso para o conjunto SPI). O resultado para $\omega\text{B97XD}/\omega\text{B97XD}(\#|\#|0,45)$ (10,53%) também é bem preciso, porém menos balanceado que o $\omega\text{B97X}/\omega\text{B97X}(\#|\#|0,40)$ e o $\omega\text{B97X}(\#|\#|0,40)/\omega\text{B97X}(\#|\#|0,40)$.

Desta forma, os funcionais de longo alcance da família do ωB97 são ótimos para cálculo das CAISS. A ligeira mudança de parâmetros é capaz de melhorar a precisão geral das CAISS. De modo geral, o aumento de α , $\alpha + \beta$ ou γ , que correspondem ao aumento da porcentagem de E_X^{HF} , melhoram a precisão dos funcionais de longo alcance. Destacam-se os funcionais modificados $\omega\text{B97X}(20\%|100\%|\#)$ e $\omega\text{B97XD}(\#|\#|0,35)$, que apresentam ótimos resultados para geometrias experimentais e após otimização das geometrias (tanto para o conjunto CPI quanto SPI).

4.6 Geração de novos funcionais de longo alcance

4.6.1 Geometrias experimentais

A estratégia de correção de longo alcance é tão interessante quanto a utilização de funcionais híbridos, em especial pois melhora a descrição de fenômenos como excitações envolvendo transferência de carga.⁷⁵ Dessa forma, é interessante tentar construir funcionais de longo alcance a partir dos DFTs já testados. Para tanto, é necessário utilizar o DFT puro para a construção do funcional de longo alcance, nos moldes da Figura 3.1b. Com os IOp(3/107), IOp(3/108), IOp(3/119), IOp(3/120), IOp(3/130) e IOp(3/131), é possível construir variedade de combinações de α , $\alpha + \beta$ e γ para obter novos funcionais.

Os funcionais de longo-alcance, em geral, surgiram de DFTs já conhecidos. É o caso do CAM-B3LYP e da família ω B97 (baseados no B3LYP e B97, respectivamente). Para tentar reproduzir CAM-B3LYP, ω B97, ω B97X e ω B97XD, os funcionais BLYP e B98B98 são utilizados com os valores de γ ajustados aos dos funcionais (no caso do B98B98, três parametrizações distintas são feitas para tentar reproduzir ω B97, ω B97X e ω B97XD).

Os resultados para a variação de α e $\alpha + \beta$ estão apresentados nas Tabelas 8.338 a 8.357. A Figura 4.24 apresenta os valores de PDMA total obtidos com esses funcionais construídos. É notável que, especialmente para a família LC-B98, os resultados não reproduzem o comportamento da Figura 4.18, e portanto não foram reproduzidos exatamente os funcionais de longo alcance. A Tabela 4.11 evidencia que os resultados são bastante diferentes, principalmente para as tentativas de reproduzir o ω B97X e o ω B97XD. Desta forma, contornar esse problema requer um aprofundamento no funcionamento do código do software e nas opções de IOp disponíveis, de modo que se consiga construir um funcional a partir dos funcionais puros. No caso dos funcionais híbridos, a construção pôde ser feita mais facilmente (como o SLYP 50% E_X^{HF} , que é o próprio BHandH).

Os funcionais construídos LC-BLYP e LC-B98, apesar de não remeterem ao CAM-B3LYP e à família ω B97, apresentam alguns bons resultados. O LC-BLYP(30%|100%|0,33) e o LC-B98(50%|60%|0,40) apresentam valores de PDMA inferior a 20%, conforme a Tabela 4.11. As versões LC-B98(X) e LC-B98(XD) tem PDMA superiores a 20%.

Tabela 4.11: Melhores funcionais de longo-alcance construídos, variando α , para diferentes valores do parâmetro $\alpha + \beta$. O valor da PDMA está exposto entre parênteses.

Funcionais	$\alpha + \beta = 100\%$	$\alpha + \beta = 80\%$	$\alpha + \beta = 60\%$	$\alpha + \beta = 40\%$
LC-BLYP	$\alpha = 30\%$ (16,37%)	$\alpha = 40\%$ (17,69%)	$\alpha = 40\%$ (19,52%)	$\alpha = 30\%$ (22,07%)
LC-B98	$\alpha = 40\%$ (16,16%)	$\alpha = 40\%$ (15,55%)	$\alpha = 50\%$ (14,27%)	$\alpha = 30\%$ (26,89%)
LC-B98(X)	$\alpha = 20\%$ (20,70%)	$\alpha = 20\%$ (24,54%)	$\alpha = 30\%$ (24,94%)	$\alpha = 30\%$ (23,28%)
LC-B98(XD)	$\alpha = 20\%$ (26,33%)	$\alpha = 20\%$ (27,79%)	$\alpha = 30\%$ (28,56%)	$\alpha = 30\%$ (27,68%)

Figura 4.24: PDMA das CAISS com variação da E_X^{HF} para os funcionais de longo alcance construídos. Valores de PDMA superiores a 200% estão expressos apenas até 200% na escala.

Mesmo sendo complexa a reprodução dos funcionais já disponíveis, é possível estudar o comportamento de funcionais puros com CLA, conforme visto para o BLYP e o B98. Desta forma, são escolhidos os funcionais puros BB95 e SLYP para obter versões de longo alcance do B1B95 e do BHandH, respectivamente. Os resultados das variações de α , $\alpha + \beta$ e γ para LC-B1B95 (LC-BB95) estão apresentados nas Tabelas 8.358 a 8.381, e para LC-BHandH (LC-SLYP) nas Tabelas 8.382 a 8.405.

Os valores de PDMA total para LC-B1B95 estão apresentados na Figura 4.25. Algumas relações devem ser destacadas: 1) para α pequeno, a PDMA decresce com o aumento de γ ; 2) para α moderado (próximo a 50%), a PDMA cresce com o aumento de γ ; 3) para γ próximo de zero, a diminuição de $\alpha + \beta$ não têm grande impacto na PDMA; 4) para γ muito grandes (0,75 ou maior), a PDMA decresce com a diminuição de $\alpha + \beta$. Assim, para duas variáveis fixas, é possível dizer qual o valor necessário da terceira variável para se obter os resultados mais precisos.

A partir da Figura 4.25 (e das Tabelas 8.358 a 8.381), o mínimo global da PDMA (8,78%) é obtido com LC-B1B95(40%|100%|0,40). Os DFTs LC-B1B95(40%|100%|0,35), LC-B1B95(50%|100%|0,25), LC-B1B95(40%|90%|0,40), LC-B1B95(40%|90%|0,45), LC-B1B95(50%|90%|0,25), LC-B1B95(40%|80%|0,45) e LC-B1B95(50%|80%|0,25) também apresentam resultados bastante precisos (PDMA inferior a 10%).

(a) $\alpha + \beta = 100\%$

(b) $\alpha + \beta = 90\%$ (c) $\alpha + \beta = 80\%$ (d) $\alpha + \beta = 70\%$

Figura 4.25: PDMA's obtidas com LC-B1B95 na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

Destaca-se o fato de que, para um dado $\alpha + \beta$, há uma relação entre o aumento de α e a diminuição de γ . A racionalização dessa relação envolve a porcentagem de E_X^{HF} : o aumento de α incrementa a porcentagem de E_X^{HF} do DFT; já a diminuição de γ decrementa a porcentagem de E_X^{HF} do DFT, de modo a balancear o incremento provocado pelo aumento de α .

A Figuras 4.25a a 4.25d podem ser interpretadas como superfícies 3D, nas quais se nota um vale dos valores mínimos. A visualização, entretanto, não é trivial, e assim é mais adequado apresentar os dados de outra maneira. A Figura 4.26 apresenta as curvas de níveis obtidas para tais superfícies, permitindo melhor visualização da região dos mínimos e da relação entre α e γ (como uma curva parametrizada nessa superfície).

Figura 4.26: Superfícies geradas a partir das PDMA obtidas com LC-B1B95 na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α e γ ($\alpha + \beta$ fixos).

Comparando as Figuras 4.26a a 4.26d, também nota-se que a curva que relaciona α e γ desloca-se com a diminuição de $\alpha + \beta$, que também pode ser racionalizado em termos da porcentagem de E_X^{HF} . A diminuição de $\alpha + \beta$ decrementa a porcentagem de E_X^{HF} , logo um aumento de α ou γ é necessário para balancear.

A Figura 4.27 representa uma projeção da superfície 4D gerada pelos valores de γ , α , $\alpha + \beta$ e PDMA. É possível associar um corte nessa superfície com a região dos mínimos de PDMA, parametrizando α , $\alpha + \beta$ e γ .

Figura 4.27: Distribuição das PDMA obtidas com LC-B1B95 na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

Na Figura 4.27 é possível encontrar a região dos mínimos de PDMA (em azul escuro), assim como os maiores PDMA obtidos (em vermelho escuro); além disso, as tendências apontadas entre α , $\alpha + \beta$ e γ também podem ser verificadas.

Os valores de PDMA total para LC-BHandH estão apresentados na Figura 4.28. Comparando com a Figura 4.25, percebe-se que o comportamento é similar, e portanto valem todas as considerações feitas acerca das tendências de α , $\alpha + \beta$ e γ . A diferença se deve às precisões obtidas, que estão relacionadas ao funcional puro utilizado.

A partir da Figura 4.28 (e das Tabelas 8.382 a 8.405), o mínimo global da PDMA

(10,49%) é obtido com LC-BHandH(40%|100%|0,30) (parâmetros próximos ao do LC-B1B95). Os funcionais LC-BHandH(40%|100%|0,25), LC-BHandH(40%|90%|0,35), LC-BHandH(40%|90%|0,30), LC-BHandH(40%|80%|0,35), LC-BHandH(40%|80%|0,30) e LC-BHandH(40%|70%|0,40) também são bastante precisos (PDMA inferior a 11,5%).

A Figura 4.29 apresenta as curvas de níveis obtidas para as superfícies 3D das Figuras 4.28a a 4.28d, em que também há uma região de mínimos e uma relação entre α e γ . A comparação com a Figura 4.26 mostra que essa relação entre α e γ , entretanto, acontece com valores menores (por exemplo, o γ do PDMA mínimo (para $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$) é menor para LC-BHandH), e portanto a porcentagem de E_X^{HF} que gera melhor precisão difere para LC-BHandH e LC-B1B95.

(a) $\alpha + \beta = 100\%$ (b) $\alpha + \beta = 90\%$

(c) $\alpha + \beta = 80\%$ (d) $\alpha + \beta = 70\%$

Figura 4.28: PDMA's obtidas com LC-BHandH na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

(a) $\alpha + \beta = 100\%$ (b) $\alpha + \beta = 90\%$

Figura 4.29: Superfícies geradas a partir das PDMA obtidas com LC-BHandH na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α e γ ($\alpha + \beta$ fixos).

A Figura 4.30 apresenta a projeção da superfície 4D a partir de γ , α , $\alpha + \beta$ e PDMA.

Figura 4.30: Distribuição das PDMA obtidas com LC-BHandH na base aug-pcJ-2 para geometrias experimentais, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

Desta forma, LC-B1B95(40%|100%|0,40) e LC-BHandH(40%|100%|0,30) são ótimos para cálculo de CAISS com geometrias experimentais, sendo um pouco mais precisos para o conjunto SPI do que o conjunto CPI. Com isso, a estratégia de CLA pode ser

aplicada a outros funcionais puros. A combinação de $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$ é sugerida para o cálculo de CAISS para os funcionais construídos; o valor de γ precisa ser avaliado para cada funcional e corresponde a um ajuste fino da porcentagem de E_X^{HF} .

4.6.2 Geometrias otimizadas

A otimização de geometrias é investigada considerando LC-B1B95(40%|100%|0,40) e LC-BHandH(40%|100%|0,30) como pontos de referência. O ajuste considerou $\alpha \pm 10\%$, $\alpha + \beta \pm 10\%$ e $\gamma \pm 0,05$ a princípio, de modo a verificar o mínimo da PDMA. Os resultados estão apresentados para LC-B1B95 nas Tabelas 8.406 a 8.417, e para LC-BHandH nas Tabelas 8.418 a 8.426.

A Figura 4.31 apresenta os valores de PDMA para a otimização com LC-B1B95. O funcional LC-B1B95(40%|70%|0,35) apresenta a melhor precisão (PDMA = 8,20%). Para $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, o menor valor é obtido com $\gamma = 0,25$ (9,10%). PDMA's inferiores a 10% são obtidas com $\alpha = 40\%$, envolvendo γ entre 0,20 e 0,25 para $\alpha + \beta = 100\%$, e migrando para γ entre 0,25 e 0,40 para $\alpha + \beta = 70\%$, evidenciando um balanço entre o aumento de γ e a diminuição de β .

(a) $\alpha + \beta = 100\%$

(b) $\alpha + \beta = 90\%$ (c) $\alpha + \beta = 80\%$ (d) $\alpha + \beta = 70\%$

Figura 4.31: PDMA's obtidas com LC-B1B95 na base aug-pcJ-2 para geometrias otimizadas, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

A Figura 4.32 apresenta os valores de PDMA para a otimização com LC-BHandH. Os funcionais LC-BHandH(40%|90%|0,05) e LC-BHandH(40%|80%|0,05) apresentam a melhor precisão (PDMA = 8,98%). Para $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, o menor valor é obtido com $\gamma = 0,10$ (9,08%). A utilização de γ próximo a zero torna os funcionais similares, e portanto para $\alpha = 40\%$, valores γ entre 0,05 e 0,10 e $\alpha + \beta$ entre 80% e 100%, as PDMA se beiram 9%, formando um patamar na superfície.

O valor mínimo da PDMA com geometrias otimizadas é obtido, para α e $\alpha + \beta$ fixos, com um valor de γ menor do que o necessário para obter o valor mínimo da PDMA com geometrias experimentais. Isso indica que, para a otimização de geometrias e cálculo da CAISS com um dado DFT, a porcentagem de E_X^{HF} que gera resultados mais precisos é ligeiramente menor do que a necessária para cálculo das CAISS na geometria experimental.

Deste modo, a utilização de $\alpha = 40\%$, associada a valores de $\alpha + \beta$ próximos a 1 e valores pequenos de γ , permite obter ótimos resultados para realizar cálculo de otimização seguido do cálculo das CAISS. Os funcionais LC-B1B95(40%|100%|0,25), LC-B1B95(40%|70%|0,35), LC-BHandH(40%|100%|0,10) e LC-BHandH(40%|80%|0,15) são escolhidos dentre os ótimos resultados para cálculo de CAISS com geometrias otimizadas para comparação com os melhores funcionais obtidos nas seções anteriores.

(a) $\alpha + \beta = 100\%$

(b) $\alpha + \beta = 90\%$ (c) $\alpha + \beta = 80\%$

Figura 4.32: PDMA obtidas com LC-BHandH na base aug-pcJ-2 para geometrias otimizadas, variando α , $\alpha + \beta$ e γ .

O LC-B1B95(40%|100%|0,25) e o LC-BHandH(40%|100%|0,10) associam-se aos resultados mais precisos com geometria experimental por uma diminuição de γ , sendo o último localizado num patamar de 9% de PDMA. O LC-B1B95(40%|70%|0,35) associa-se ao LC-B1B95(40%|100%|0,25) por uma compensação entre a diminuição de $\alpha + \beta$ e o aumento de γ . E o LC-BHandH(40%|80%|0,15) corresponde à uma situação próxima do patamar de 9%.

4.7 Comparação com SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD)

As precisões dos cálculos com SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2) na base aug-cc-pVTZ-J para geometrias experimentais estão apresentadas na Tabela 8.427. Os métodos *ab initio* SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2) devem apresentar saturação de base para o cálculo das CAISS, visto que ambos apresentam o mesmo conjunto de resultados para as geometrias experimentais, e portanto a mesma precisão (PDMA = 12,42%). Além disso, a precisão para as moléculas SPI (9,60%) é melhor que a precisão para as moléculas CPI (16,25%), indicando que os métodos *ab initio* SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2) também apresentam imprecisões para tipos diferentes de acoplamento.

Figura 4.33: PDA das CAISS com SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2). As geometrias são experimentais.

A Figura 4.33 apresenta as PDAs para os métodos SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2). Apenas os valores da PDA para a constante $^1J_{BF}$ da molécula de BF_3 e as constantes $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C_2H_4 são superiores a 30%, indicando a inexatidão no cálculo dessas 3 constantes. De fato, a precisão do conjunto melhora desconsiderando essas constantes (de 12,42% para 7,76%), tanto para o conjunto CPI (de 16,25% para 11,71%) quanto para SPI (de 9,60% para 4,73%).

A Figura 4.34 apresenta a comparação do valores de PDA de SOPPA(CCSD) e dos melhores resultados DFT (e suas versões originais).

(a) Comparação com B1B95

(b) Comparação com B971

(c) Comparação com B972

(d) Comparação com B98

(e) Comparação com BHandH

(f) Comparação com ω B97X

(g) Comparação com ω B97XD

(h) Comparação com B3LYP e PBE0

Figura 4.34: PDA das CAISS com SOPPA(CC2), BHandH 40%, B1B95 40% e B972B95 60%. As geometrias para BHandH 40%, B1B95 40% e B972B95 60% são otimizadas, e para SOPPA(CC2) as geometrias são experimentais.

No geral, as principais diferenças entre SOPPA(CCSD) e os DFTs estão associadas à $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 e às $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 (vamos nos referir ao conjunto destas 3 constantes daqui para a frente como “**3P**”).

O B1B95 (Figura 4.34a) apresenta inexactidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é muito mais inexato para **3P**. O B1B95 40% E_X^{HF} aumenta a exatidão das **3P** e da $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 , superando o SOPPA(CCSD) nas $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 . E o LC-B1B95(40%|100%|0,40) melhora bastante a exatidão,

sendo o mais exato para a $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 ; entretanto a $^1J_{\text{OF}}$ da molécula de F_2O é mais inexata que o SOPPA(CCSD).

O B971 (Figura 4.34b) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é muito mais inexato para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 . Já o B971 50% E_X^{HF} aumenta a exatidão da $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 aproximando-se do SOPPA(CCSD), mas piora significativamente na $^1J_{\text{CO}}$ da molécula de CO .

O B972 (Figura 4.34c) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é muito mais inexato para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 . Já o B972B95 60% E_X^{HF} aumenta a exatidão das **3P** e piora da $^1J_{\text{CO}}$ da molécula de CO , sendo um resultado com exatidão próxima para todas CAISS.

O B98 (Figura 4.34d) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é muito mais inexato para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 . Já o B98 50% E_X^{HF} aumenta a exatidão da $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 e piora da $^1J_{\text{CO}}$ da molécula de CO .

O BHandH (Figura 4.34e) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é mais exato para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 e mais inexato para $^1J_{\text{OF}}$ da molécula de F_2O e $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_4 . O BHandH 40% E_X^{HF} piora a exatidão das $^1J_{\text{BF}}$ das moléculas de BHF_2 e BF_3 . E o LC-BHandH(40%|100%|0,30) repete a tendência do BHandH; entretanto é mais exato que o BHandH em várias CAISS.

O ωB97X (Figura 4.34f) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é mais inexato para $^1J_{\text{CC}}$, $^1J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 . E o $\omega\text{B97X}(20\%|100\%|\#)$ melhora bastante a exatidão da e das $^1J_{\text{CC}}$, $^1J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 , sendo mais balanceado que o SOPPA(CCSD).

O ωB97XD (Figura 4.34g) apresenta inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD) para as CAISS no geral, entretanto é mais inexato para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 , $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_4 e $^1J_{\text{CC}}$, $^1J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 . E o $\omega\text{B97XD}(\#|\#|0,35)$ melhora bastante a exatidão das **3P**, sendo mais balanceado que o SOPPA(CCSD).

O B3LYP e o PBE0 (Figura 4.34h) apresentam inexatidões próximas ao SOPPA(CCSD)

para as CAISS no geral. Ambos são muito mais inexatos para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 . O B3LYP também é mais inexato para $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 que o SOPPA(CCSD), mas o PBE0 é mais exato nessas CAISS.

Assim, funcionais como B972B95 60% E_X^{HF} , $\omega\text{B97X}(20\%|100\%|\#)$, $\omega\text{B97XD}(\#|\#|0,35)$, LC-B1B95(40%|100%|0,40) e LC-BHandH(40%|100%|0,30) se mostram tão bons quanto os métodos *ab initio* SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD) no cálculo de CAISS com geometrias experimentais, indicando que esses métodos DFT permitem obter valores tão precisos quanto os métodos SOPPA por um custo computacional consideravelmente menor.

4.8 Análise dos termos FC, SD, PSO e DSO

O valor total calculado para as constantes spin-spin resulta da soma de 4 componentes: FC, SD, PSO e DSO (ver Equações 1.11 a 1.15). A comparação de cada um desses componentes foi feita em relação SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD) (pois não podem ser medidos experimentalmente); o valor total, entretanto, pode ser comparado com os métodos SOPPA e os valores experimentais. A comparação é feita em termos dos valores dos componentes em hertz, pois não é possível obter uma medida como a PDMA considerando que alguns termos são próximos a zero, gerando imprecisão numérica. Os valores de cada termo para as 26 CAISS do conjunto de calibração estão apresentados nas Tabelas 8.428 a 8.453.

A Figura 4.35 apresenta os componentes da cada uma 26 CAISS obtidas com as geometrias experimentais, comparando os melhores funcionais (e suas versões originais) e o SOPPA(CCSD).

A contribuição FC é a principal componente das CAISS, e o termo PSO pode também ser importante para o valor total. Os termos SD e DSO são muito menores, no geral, quando comparados com FC e PSO. Em alguns poucos casos, entretanto, a contribuição diamagnética não é negligenciável (por exemplo, na $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4).

Os termos FC e SD são mais sensíveis do que as contribuições PSO e DSO às variações na porcentagem de E_X^{HF} e à escolha do método teórico. Isso está associado à descrição dos estados tripletos necessários para calcular esses valores. O aumento da troca exata ajuda (para a maioria dos funcionais originais) a diminuir o erro de auto-interação presente nos DFTs e que afeta principalmente os termos FC, SD e PSO.^{114,115} A magnitude do termo FC em geral é muito maior que a do termo SD, e portanto o último é negligenciável.

(g) $\text{PH}_3 - {}^1J_{\text{PH}}$ (h) $\text{PF}_3 - {}^1J_{\text{PF}}$

Figura 4.35: Valores, em Hz, dos termos FC, SD, PSO e DSO e total obtidos com os melhores funcionais e com SOPPA(CCSD) para as 26 CAISS do conjunto de calibração. Os valores experimentais das CAISS são comparados aos valores totais.

As diferenças observadas entre os resultados obtidos com os DFTs e o SOPPA(CCSD) decorrem dos valores do termo FC predominarem largamente nas diferenças dos valores das CAISS calculadas. Usando como exemplo as constantes $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 (Figura 4.35j) e $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 (Figuras 4.35t e 4.35u, respectivamente), é notável que a tendência observada entre os valores totais das constantes é praticamente reproduzida pela tendência observada entre os valores de FC, e os termos SD, PSO e DSO possuem quase o mesmo valor para os diferentes métodos.

No caso da constante $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 (Figura 4.35j), deve-se notar que os funcionais B1B95, B1B95 40% E_X^{HF} , B971, B98, BHandH 40% E_X^{HF} , B972, ωB97XD , B3LYP e PBE0 resultam em um valor total negativo, e a CAISS experimental é positiva. Isso se deve ao balanço entre os termos FC e PSO, e os termos FC, embora todos positivos, apresentam diferentes magnitudes para os métodos avaliados.

No caso da constante $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_4 (Figura 4.35t), deve-se notar que os funcionais B1B95, ωB97X , ωB97XD e B3LYP apresentam termo FC positivo. Apesar do valor total ser negativo para todos os métodos, eles apresentam diferentes magnitudes. Já a constante $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 (Figura 4.35u) apresenta diferentes magnitudes para o valor total devido às diferentes magnitudes do termo FC.

O termo SD da constante $^1J_{\text{CO}}$ da molécula de CO (Figura 4.35b) apresenta diferentes valores para os DFTs comparados, além de magnitudes comparáveis ao termo FC, eventualmente anulando o valor do FC, e portanto o termo PSO contribui majoritariamente para o valor total. Kupka descreve a dificuldade de obter a constante $^1J_{\text{CO}}$ com desvio relativo inferior a 5%.⁵⁰ Os resultados obtidos B1B95 40% E_X^{HF} (16,1 Hz) e BHandH 40% E_X^{HF} (16,3 Hz) são bem próximos do valor experimental (16,4 Hz), superando resultados no limite de base completa para os funcionais B1B95 e BHandH obtidos por Kupka.

Vale ressaltar que o SOPPA(CCSD) e o SOPPA(CC2), apesar de serem reconhecidos pela boa predição de constantes de acoplamento spin-spin, não apresentam o valor mais próximo do valor experimental em todos os casos, sendo muitas vezes superado pelos DFTs estudados, conforme apontado na seção anterior.

4.9 Teste de precisão e Teorema de Janak

A precisão dos funcionais para cálculo das CAISS através da PDMA define os melhores resultados, mas é preciso verificar se os funcionais são exatos. Os valores de energia utilizados para obter os perfis de energia e as concavidades resultantes dos melhores funcionais estão apresentados nas Tabelas 8.454 a 8.485 para geometrias experimentais, nas Tabelas 8.486 a 8.504 para geometrias otimizadas.

A Figura 4.36 apresenta a variação de energia relativa à espécie neutra de cada uma das 13 moléculas do conjunto de calibração para B1B95, B971, B972, B98, BHandH, ω B97X e ω B97XD. Primeiramente, nenhum desses DFTs, encontrados na literatura, apresentam comportamento linear, e portanto não são funcionais exatos. De fato, muitos funcionais da literatura não satisfazem essa propriedade, assim como diversas outras propriedades de um funcional exato. Apesar disso, ω B97X e ω B97XD apresentam concavidades muito próximas a zero, especialmente para a parte aniônica.

(a) HF

(b) CO

(c) H_2O (d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3

(g) BHF₂ (h) BF₃ (i) F₂O (j) CH₄

(k) C_2H_2 (l) C_2H_4 (m) C_2H_6

Figura 4.36: Avaliação do Teorema de Janak para funcionais da literatura com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

De maneira geral, os valores de concavidade são positivos (exceto a parte aniônica do ω B97X e do ω B97XD), indicando a delocalização eletrônica - característico de um DFT. (Se fosse realizado um cálculo Hartree-Fock, a curvatura seria negativa, indicando a localização eletrônica.)⁶¹ A parte aniônica do ω B97X e do ω B97XD (exceto para a molécula de F_2O) apresenta um comportamento ideal de funcional, em que não há muita

delocalização nem muita localização eletrônica; desta forma a parte catiônica governa a delocalização eletrônica presente nesses funcionais.

A concavidade é maior para a parte catiônica do que para a parte aniônica (ver descrição da Figura 4.36). A concavidade para os hidrocarbonetos é ligeiramente menor que para as demais moléculas. Os valores de concavidade aproximam-se de zero na seguinte ordem de funcionais sem correção de longo alcance: B3LYP, B971, B972, B98, PBE0, B1B95 e BHandH, que corresponde com a ordem crescente de porcentagem de E_X^{HF} presente nesses DFTs. Dessa forma, o aumento da porcentagem de E_X^{HF} está associado com a diminuição da concavidade, indo ao encontro do comportamento exato.

De fato, o comportamento das contribuições E_X^{HF} e E_X^{DFT} em função da distância intereletrônica torna inviável atribuir uma porcentagem independente de geometria ou do campo médio dos elétrons, e portanto não são comparados aos demais. Entretanto, pode-se notar que ωB97X apresenta concavidades menores que o ωB97XD , sendo dentre os DFTs avaliados o mais próximo de um funcional exato.

(a) HF

(b) CO

(c) H_2O (d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3

(g) BHF₂ (h) BF₃ (i) F₂O (j) CH₄

(k) C_2H_2 (l) C_2H_4 (m) C_2H_6

Figura 4.37: Avaliação do Teorema de Janak para BHandH variando a porcentagem de E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A influência da porcentagem de E_X^{HF} do DFT nas curvas de energia está apresentada na Figura 4.37 para o BHandH. É notável que o incremento da E_X^{HF} diminui a concavidade, que passa a ter valores negativos por volta de 80% E_X^{HF} . De fato, a utilização de 80% E_X^{HF} no BHandH apresenta concavidades consideravelmente próximas de 0, e portanto,

segundo o Teorema de Janak, devem corresponder aproximadamente a funcionais exatos. Entretanto, as melhores precisões foram obtidas utilizando 50% E_X^{HF} para o BHandH, que apresentam concavidades um pouco mais distantes de 0. Além disso, o resultado com 80% E_X^{HF} ainda não é tão preciso para o cálculo das CAISS.

A Figura 4.38 apresenta os resultados de concavidade obtidos com B1B95 30%, 40% e 50% E_X^{HF} , e a Figura 4.39 para B972B95 50%, 60% e 70% E_X^{HF} . Ambos apresentam a mesma tendência observada na Figura 4.37: o incremento da E_X^{HF} diminui a concavidade, a parte catiônica apresenta maiores concavidades e portanto determina a delocalização eletrônica nos funcionais.

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O

(d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3 (g) BHF_2

(h) BF_3 (i) F_2O (j) CH_4 (k) C_2H_2

(l) C₂H₄ (m) C₂H₆

Figura 4.38: Avaliação do Teorema de Janak para B1B95 variando a porcentagem de E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

(a) HF

(b) CO

(c) H_2O (d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3

(g) BHF_2 (h) BF_3 (i) F_2O (j) CH_4

(k) C_2H_2 (l) C_2H_4 (m) C_2H_6

Figura 4.39: Avaliação do Teorema de Janak para B972B95 variando a porcentagem de E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

As geometrias otimizadas também foram consideradas para avaliar o efeito da otimização na concavidade. A Figura 4.40 apresenta as curvas de energia nos níveis BHandH 30%, 40%, 50% (original) e 60% E_X^{HF} . Novamente, o aumento da porcentagem de E_X^{HF} no funcional gera a diminuição da concavidade, tornando-a menos positiva (nos valores avaliados não chega a ser negativa).

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O (d) NH₃

(e) PH_3 (f) PF_3 (g) BHF_2 (h) BF_3

(i) F_2O (j) CH_4 (k) C_2H_2 (l) C_2H_4

Figura 4.40: Avaliação do Teorema de Janak para BHandH variando a porcentagem de E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

Contrastando a Figura 4.40 com a Figura 4.37, os valores de concavidade obtidos não são alterados, e portanto a otimização de geometrias não influencia consideravelmente na exatidão dos funcionais. Isso evidencia que as geometrias otimizadas não apresentam grandes mudanças em relação às geometrias experimentais, pois grandes mudanças na geometria (por exemplo, mudanças conformacionais) devem influenciar no perfil observado, uma vez que as energias relativas são dependentes da geometria.⁶¹

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O (d) NH₃ (e) PH₃ (f) PF₃

(g) BHF₂ (h) BF₃ (i) F₂O (j) CH₄

(k) C_2H_2 (l) C_2H_4 (m) C_2H_6

Figura 4.41: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no B1B95 na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.41 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no B1B95. O B1B95 ($PDMA = 24,17\%_{exp.}^{geom.}, 21,61\%_{otm.}^{geom.}$) é o menos exato, e o B1B95 40% E_X^{HF} ($14,31\%_{exp.}^{geom.}, 10,96\%_{otm.}^{geom.}$) tem diminuição das concavidades. O LC-B1B95(40%|100%|0,40) ($8,78\%_{exp.}^{geom.}$) apresenta o comportamento mais próximo do exato. As concavidades não são alteradas para a otimização das geometrias (o funcional de longo alcance tem γ diferente ($9,10\%_{otm.}^{geom.}$) para geometrias experimentais e otimizadas).

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O (d) NH₃

(e) PH_3 (f) PF_3 (g) BHF_2 (h) BF_3

(i) F_2O (j) CH_4 (k) C_2H_2 (l) C_2H_4

Figura 4.42: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no B971 na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.42 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no B971. O B971 (21,89%^{geom.}_{exp.}, 24,16%^{geom.}_{otm.}) é o menos exato, e o B971 50% E_X^{HF} (16,15%^{geom.}_{exp.}) tem diminuição das concavidades. A otimização das geometrias com B971 e cálculo de propriedade com B971 50% E_X^{HF} (11,38%^{geom.}_{otm.}) altera a concavidade aniônica das moléculas, e portanto não é uma estratégia consistente para cálculo das CAISS.

(c) H_2O (d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3

(g) BHF₂ (h) BF₃ (i) F₂O (j) CH₄

(k) C₂H₂ (l) C₂H₄ (m) C₂H₆

Figura 4.43: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no B972 na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.43 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no B972. O B972 ($23,84\%_{exp.}^{geom.}$, $25,54\%_{otm.}^{geom.}$) é o menos exato, e o B972B95 60% E_X^{HF} ($10,03\%_{exp.}^{geom.}$, $8,58\%_{otm.}^{geom.}$) tem diminuição das concavidades. As concavidades não são alteradas para a otimização das geometrias. O B972B95 60% E_X^{HF} é o funcional híbrido mais próximo do comportamento exato.

A Figura 4.44 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no B98. O B98 ($22,55\%_{exp.}^{geom.}$, $25,09\%_{otm.}^{geom.}$) é o menos exato, e o B98 50% E_X^{HF} ($14,08\%_{exp.}^{geom.}$) tem diminuição das concavidades. A otimização das geometrias

com B98 e cálculo de propriedade com B98 50% E_X^{HF} (10,44% $_{\text{otm.}}^{\text{geom.}}$) altera a concavidade aniônica das moléculas.

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O (d) NH₃

(e) PH_3 (f) PF_3 (g) BHF_2 (h) BF_3

(i) F₂O (j) CH₄ (k) C₂H₂ (l) C₂H₄

Figura 4.44: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no B98 na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.45 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no BHandH. O BHandH 40% E_X^{HF} (14,17% $_{\text{exp.}}^{\text{geom.}}$, 9,04% $_{\text{otm.}}^{\text{geom.}}$) é o menos exato, e o BHandH (12,21% $_{\text{exp.}}^{\text{geom.}}$, 19,31% $_{\text{otm.}}^{\text{geom.}}$) tem diminuição das concavidades. O LC-BHandH(40%|100%|0,30) (10,49% $_{\text{exp.}}^{\text{geom.}}$) apresenta o comportamento mais próximo do exato. As concavidades não são alteradas para a otimização das geometrias (o funcional LC tem γ diferente (9,08% $_{\text{otm.}}^{\text{geom.}}$) para geometrias experimentais e otimizadas).

Os funcionais LC-BHandH(40%|100%|0,30) e LC-B1B95(40%|100%|0,40) (Figuras 4.45 e 4.41, respectivamente) são bastante próximos do comportamento exato. Entretanto, enquanto o LC-BHandH(40%|100%|0,30) apresenta concavidades ligeiramente mais próximas de zero, o LC-B1B95(40%|100%|0,40) apresentou PDMA ligeiramente mais preciso para o conjunto de calibração.

(b) CO

(c) H₂O (d) NH₃ (e) PH₃

(f) PF_3 (g) BHF_2 (h) BF_3 (i) F_2O

(j) CH₄ (k) C₂H₂ (l) C₂H₄ (m) C₂H₆

Figura 4.45: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no BHandH na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.46 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no ω B97X. O ω B97X (14,49%^{geom.}_{exp.}, 17,41%^{geom.}_{otm.}) é o mais exato para geometrias experimentais, sendo as concavidades razoavelmente próximas de zero. O ω B97X(20%|100%|#) (10,27%^{geom.}_{exp.}, 10,55%^{geom.}_{otm.}) diminui a concavidade catiônica para a otimização, sendo similar ao ω B97X (a concavidade catiônica é um pouco mais próxima de zero).

(a) HF

(b) CO

(c) H₂O

(d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3 (g) BHF_2

(h) BF_3 (i) F_2O (j) CH_4 (k) C_2H_2

(l) C_2H_4 (m) C_2H_6

Figura 4.46: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no ω B97X na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

(a) HF

(b) CO

(c) H_2O (d) NH_3 (e) PH_3 (f) PF_3

(g) BHF_2 (h) BF_3 (i) F_2O (j) CH_4

(k) C₂H₂ (l) C₂H₄ (m) C₂H₆

Figura 4.47: Avaliação do Teorema de Janak para melhores funcionais baseados no ω B97XD na base aug-pcJ-2. $\Delta N = -1$ corresponde ao cátion e $\Delta N = 1$ ao ânion. A curvatura das curvas catiônica e aniônica estão indicadas, respectivamente, ao lado DFT.

A Figura 4.47 apresenta os resultados de concavidade obtidos com os melhores funcionais baseados no ω B97XD. O ω B97XD(##|0,35) (8,17%^{geom.}_{exp.}, 10,98%^{geom.}_{otm.}) é o mais exato, e não varia com a otimização. O ω B97XD (16,48%^{geom.}_{exp.}, 17,27%^{geom.}_{otm.}) aumenta a concavidade catiônica para a otimização.

De modo geral, os DFTs híbridos originais melhoram as concavidades ao serem ajus-

tados (com exceção do BHandH), devido ao aumento da porcentagem de E_X^{HF} . Para os DFTs com CLA, há uma ligeira melhora nas concavidades pois os originais já têm um comportamento muito próximo a um DFT exato (concavidades próximas de 0).

Assim, os funcionais de longo alcance apresentam um comportamento, de acordo com o Teorema de Janak, mais próximo do funcional ideal. Os funcionais construídos LC-BHandH(40%|100%|0,30) e LC-B1B95(40%|100%|0,40) são os menos inexatos dentre os investigados. O ω B97XD(#|#|0,35) também destaca-se pela melhora da precisão do funcional original envolvendo apenas o incremento de γ . Já o ω B97X é o funcional original com as concavidades mais próximas a zero. Para os funcionais sem CLA, o B972B95 60% E_X^{HF} destaca-se como o menos inexato. O BHandH, dentre os funcionais sem CLA não modificados, é o menos inexato e com resultado mais preciso para as CAISS.

Com base nos funcionais avaliados, o BHandH e o ω B97X são os mais recomendados para cálculo de CAISS sem realizar quaisquer modificações. Os funcionais LC-BHandH(40%|100%|0,30), LC-B1B95(40%|100%|0,40) e ω B97XD(#|#|0,35) são ótimos para obter CAISS precisas, superando o desempenho dos métodos SOPPA.

4.10 Teste com diferentes tipos de acoplamento

Os métodos mais precisos para o cálculo das CAISS no conjunto de calibração são submetidos ao conjunto teste, com mais tipos de acoplamento. As geometrias moleculares são otimizadas para que não seja necessário determinar as geometrias experimentais.

Os DFTs B1B95 40% E_X^{HF} , LC-B1B95(40%|100%|0,25), LC-B1B95(40%|70%|0,35), BHandH 40% E_X^{HF} , LC-BHandH(40%|100%|0,10), LC-BHandH(40%|80%|0,15), B972B95 60% E_X^{HF} , ω B97X(20%|100%|#) e ω B97XD(#|#|0,35) são utilizados. Também são incluídos os métodos B971//B971 50% E_X^{HF} e B98//B98 50% E_X^{HF} . A comparação é feita com os funcionais da literatura PBE0, B1B95, B3LYP, B971, B972, B98, BHandH, ω B97X e ω B97XD. Os resultados com conjunto de base aug-pcJ-2 obtidos estão apresentados nas Tabelas 8.505 e 8.506. Os cálculos também são realizados na base HuzIII-su3, e os resultados estão apresentados nas Tabelas 8.507 a 8.508.

A Figura 4.48 apresenta os valores da PDMA obtidas no conjunto de calibração. A comparação das Figuras 4.48a e 4.48b demonstra que a escolha entre as bases aug-pcJ-2 e HuzIII-su3 não influencia os resultados, pois as PDMA entre as bases diferem menos de 3,5% e, principalmente, a ordem de precisão dos funcionais é mantida. Também destaca-se que todos os valores de PDMA estão entre 30% e 50%, indicando a dificuldade de predição de alguns tipos de acoplamento.

As versões modificadas dos funcionais da literatura B1B95, B971 e B98 não apresentam melhoria de precisão; as versões modificadas do BHandH apresentam uma melhora da precisão relativa ao original; e as versões modificadas dos funcionais da literatura B972, ω B97X e ω B97XD apresentam uma piora da precisão relativa aos originais.

Para facilitar a indicação dos valores da PDMA, a base aug-pcJ-2 é abreviada como “agJ2” e a base HuzIII-su3 como “huz3”.

O BHandH 40% E_X^{HF} (PDMA = 33,12%_{agJ2}, 35,10%_{huz3}) apresenta a melhor precisão entre todos os funcionais avaliados, seguido do LC-BHandH(40%|100%|0,10) (33,54%_{agJ2}, 35,80%_{huz3}) e do LC-BHandH(40%|80%|0,15) (34,20%_{agJ2}, 36,69%_{huz3}) - este último está de acordo com a situação próxima do patamar de LC-BHandH(40%|100%|0,10). Estas

versões modificadas superam o funcional original BHandH (43,60%_{agJ2}, 44,62%_{huz3}).

O funcional original B1B95 (34,47%_{agJ2}, 37,31%_{huz3}) e suas versões B1B95 40% E_X^{HF} (33,87%_{agJ2}, 36,00%_{huz3}), LC-B1B95(40%|100%|0,25) (33,89%_{agJ2}, 35,91%_{huz3}) e LC-B1B95(40%|70%|0,35) (36,11%_{agJ2}, 38,41%_{huz3}) também apresentam boas precisões, seguido de ω B97X (37,41%_{agJ2}, 38,75%_{huz3}) e ω B97XD (37,64%_{agJ2}, 38,71%_{huz3}). Entretanto o LC-B1B95(40%|70%|0,35) é ligeiramente menos preciso que o B1B95, e é superado pelo LC-B1B95(40%|100%|0,25).

(a) aug-pcJ-2

(b) HuzIII-su3

Figura 4.48: PDMA das CAISS do conjunto teste com as bases aug-pcJ-2 e HuzIII-su3 para funcionais selecionados. As geometrias são otimizadas no mesmo nível teórico (exceto para B971//B971 50% e B98//B98 50%).

Os métodos B971//B971 50% E_X^{HF} (39,35%_{agJ2}, 41,56%_{huz3}) e B98//B98 50% E_X^{HF} (40,99%_{agJ2}, 43,31%_{huz3}) apresentam precisões próximas aos funcionais B971 (39,42%_{agJ2}, 41,43%_{huz3}) e B98 (41,47%_{agJ2}, 43,89%_{huz3}), respectivamente.

O funcional B972B95 60% E_X^{HF} (43,07%_{agJ2}, 45,26%_{huz3}) é superado por funcionais da literatura como o B972 (38,53%_{agJ2}, 39,65%_{huz3}). Da mesma maneira, os funcionais de longo alcance ω B97X(20%|100%|#) (41,91%_{agJ2}, 44,23%_{huz3}) e ω B97XD(#|#|0,35) (42,97%_{agJ2}, 45,02%_{huz3}) são superados por suas versões originais. O B3LYP (44,77%_{agJ2}, 47,95%_{huz3}) e o PBE0 (45,91%_{agJ2}, 48,73%_{huz3}) apresentam maior imprecisão dentre os DFTs avaliados no conjunto teste, e portanto são menos indicados para o cálculo de CAISS.

A Figura 4.49 apresenta as PDAs para as CAISS do conjunto teste. A escolha da base também não altera as precisão das constantes individualmente.

No geral, as constantes $^1J_{\text{PC}}$ da molécula de $\text{P}(\text{O})\text{CH}_3\text{Cl}_2$, $^2J_{\text{PH}}$ da molécula de $\text{P}(\text{CH}_3)_3$, $^3J_{\text{HH}}$ da molécula de CH_3NH_2 , $^3J_{\text{FH}_{\text{cis}}}$ da molécula de *gem*- $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$, $^1J_{\text{NC}}$ e $^2J_{\text{NC}}$ da molécula de piridina e $^5J_{\text{FH}}$ da molécula de fluorbenzeno têm resultados muito pouco precisos. Os resultados para algumas outras constantes também são pouco precisos.

Os funcionais híbridos BHandH 40% E_X^{HF} , B1B95 40% E_X^{HF} e B1B95 são sugeridos para investigar CAISS de sistemas similares aos estudados no conjunto teste. Os funcionais de longo-alcance LC-BHandH(40%|100%|0,10), LC-B1B95(40%|100%|0,25), ω B97X e ω B97XD também são sugeridos.

5 Recomendações para uso dos funcionais

A utilização de conjuntos de base como aug-pcJ-2, HuzIII-su3 e aug-cc-pVTZ-J é recomendada para descrever mais adequadamente as propriedades magnéticas. Conjuntos de base que não possuam qualidade mínima triplo- ζ não são adequados, e devem incluir expoentes orbitais extremamente grandes para melhor descrever as regiões próximas aos núcleos atômicos.

Dentre todos os funcionais avaliados, são recomendados os funcionais BHandH, BHandH 40% E_X^{HF} , B1B95, B1B95 40% E_X^{HF} , ω B97X, ω B97XD, LC-BHandH(40%|100%|0,10) e LC-B1B95(40%|100%|0,25). Estes funcionais apresentam ótimas precisões para cálculo das CAISS tanto no conjunto de calibração quanto no conjunto teste, além de apresentarem comportamentos razoavelmente exatos, e seus resultados são tão bons quanto os métodos SOPPA.

Tabela 5.1: Porcentagem de troca exata recomendada nos DFTs híbridos da literatura ajustados para o cálculo de CAISS em geometrias experimentais.

Funcional	E_X^{HF}	Funcional	E_X^{HF}
B1B95	50%	M05	0%
B3LYP	40%	M05-2X	0%
BHandHLYP	40%	M06	0%
B3P86	40%	M06-HF	0%
B971	50%	M06-2X	50%
B972	40%	O3LYP	40%
B98	50%	PBE	30%
BHandH	50%	PBE0	30%
BMK	50%	PW91	30%
BP86	40%	TPSSh	40%
B3PW91	30%	X3LYP	40%

Dentre os funcionais da literatura, recomenda-se utilizar BHandH, ω B97X, ω B97XD, ω B97, B971, B98, PBE0, B972, CAM-B3LYP e B1B95 para cálculo de CAISS. Funcionais M06HF, M05, M06, BP86, PW91 e PBE não são adequados para esse tipo de cálculo.

É recomendado utilizar entre 30% e 50% de troca exata nos funcionais híbridos para obter CAISS mais precisas. A Tabela 5.1 apresenta a porcentagem de E_X^{HF} recomendada para cada um dos DFTs híbridos da literatura utilizados. O ajuste dos funcionais das famílias M05 e M06 não é aconselhado, sendo preferível utilizar as versões originais (evitando M06HF).

É recomendado utilizar 40% de troca exata nos funcionais B1B95, BHandH e PBE0 (PBE) para rotinas de otimização de geometrias e cálculo das CAISS; para o B972 utilizar 50% de troca exata. Para B971 e B98, é recomendado utilizar 50% de troca exata e realizar a otimização com as versões originais destes DFTs.

Para os funcionais híbridos construídos a partir de funcionais de troca e de correlação, é recomendado utilizar entre 30% e 50% de troca exata nos funcionais híbridos para obter CAISS mais precisas. A Tabela 5.2 apresenta a porcentagem de E_X^{HF} recomendada para cada um dos DFTs híbridos construídos. Recomenda-se utilizar troca B971 ou B98 com correlação LYP, P86, PBE, PW91 ou TPSS, ou então utilizar troca B, B972, O, PBE, PW91 ou S com correlação B95, B971, B972 ou B98.

Tabela 5.2: Porcentagem de troca exata recomendada nos DFTs híbridos construídos para o cálculo de CAISS em geometrias experimentais.

$\frac{E_X^{\text{DFT}}}{E_C^{\text{DFT}}}$	B95	B971	B972	B98	LYP	P86	PBE	PW91	TPSS
B	50%	40%	30%	40%	40%	40%	30%	30%	40%
B971	60%	50%	40%	50%	50%	50%	50%	50%	50%
B972	60%	50%	40%	50%	50%	50%	50%	50%	50%
B98	60%	50%	40%	50%	50%	50%	50%	50%	50%
O	50%	40%	40%	40%	40%	50%	40%	40%	40%
PBE	50%	40%	30%	40%	40%	40%	30%	30%	40%
PW91	50%	40%	30%	40%	40%	40%	30%	30%	40%
S	60%	50%	40%	50%	50%	50%	50%	50%	50%
TPSS	40%	40%	30%	40%	40%	40%	40%	40%	40%

Para a otimização de geometria e cálculo das CAISS, recomenda-se troca B972 com correlação B95 e 60% de troca exata. Apesar disso, usar troca B972 ou correlação B95 também pode gerar bons resultados.

Dos funcionais com CLA, é recomendado realizar o ajuste dos parâmetros α , $\alpha + \beta$

e γ de acordo com a Tabela 5.3. Para a otimização de geometrias e cálculo das CAISS, também são sugeridos os ajustes da Tabela 5.3 para a família ω B97.

Tabela 5.3: Melhores modificações dos funcionais de longo alcance usando geometrias experimentais.

Funcionais	α	$\alpha + \beta$	γ
CAM-B3LYP	30%	100%	0,33
ω B97	20%	80%	0,40
ω B97X	20%	100%	0,30
	15,77%	100%	0,40
ω B97XD	22,20%	100%	0,35

É recomendado utilizar os funcionais construídos LC-B1B95 e LC-BHandH, construídos a partir dos funcionais BB95 e SLYP, respectivamente, com os parâmetros α , $\alpha + \beta$ e γ de acordo com a Tabela 5.4. Para a otimização de geometrias e cálculo das CAISS, é sugerido utilizar o parâmetro γ de 0,25 para o LC-B1B95 e 0,10 para o LC-BHandH; os parâmetros α e $\alpha + \beta$ são mantidos de acordo com a Tabela 5.4.

Tabela 5.4: Melhores modificações dos funcionais de longo alcance usando geometrias experimentais.

Funcionais	Corresponde	α	$\alpha + \beta$	γ
LC-B1B95	LC-BB95	40%	100%	0,40
LC-BHandH	LC-SLYP	40%	100%	0,30

6 Conclusões

A utilização dos conjuntos de base aug-pcJ-2 e HuzIII-su3 produz resultados semelhantes, e portanto é mais garantido que os resultados obtidos independem da base utilizada. Entretanto, é importante ressaltar que essas bases foram construídas para cálculo de propriedades magnéticas, e assim é recomendado o uso de um conjunto de base adequado para cálculo de propriedades magnéticas (qualidade mínima triplo- ζ com função de polarização).⁴

Os funcionais BHandH, B1B95, B971, B972, B98, ω B97X e ω B97XD apresentam, portanto resultados bastantes promissores. É interessante notar que todos esses funcionais são funcionais de Becke (ou desenvolvidos a partir dos funcionais de Becke), e são superiores aos demais DFTs. A variação da porcentagem de E_X^{HF} contribui para uma considerável melhora na precisão dos funcionais. A adição de correções vibracionais ou a otimização de geometrias não apresentam melhoras significativas na precisão dos DFTs para as condições estudadas.

Por outro lado, a variação da porcentagem de E_X^{HF} em função da distância intereletrônica permite obter resultados ainda mais precisos, sendo promissor investir em funcionais que apresentem correção de longo alcance. Além disso, também apresentam, pelo Teorema de Janak, um comportamento mais próximo do desejado para um funcional exato. Os funcionais ω B97XD($\#|\#|0,35$) e ω B97X($0,2|1,0|\#$) são ótimos para o conjunto de calibração, porém não são tão precisos para o conjunto teste quanto suas versões originais. Já os funcionais LC-BHandH($40\%|100\%|0,10$) e LC-B1B95($40\%|100\%|0,25$) são precisos para os dois conjuntos, sendo portanto dois DFTs que precisam ser melhor estudados em outros aspectos para avaliar a viabilidade em outros usos.

Os diversos funcionais diferem principalmente no contato de Fermi, indicando a necessidade de melhorar a descrição dos estados tripletos incluídos na expressão de Ramsey para obter as constantes indiretas de acoplamento spin-spin. Os DFTs obtidos também

não são funcionais exatos, assim como os encontrados na literatura, porém estão mais próximos do comportamento ideal (com exceção do BHandH, devido a diminuição da porcentagem de E_X^{HF}); os funcionais que obedecem o Teorema de Janak não apresentam resultados muito precisos para as CAISS. Entretanto os funcionais de longo alcance, além de apresentarem ótimas precisões, tem comportamento mais próximo do desejado para um funcional exato, o que os torna atrativo.

Novamente, foram encontrados resultados muito satisfatórios, mas que necessitam ser submetidos a uma quantidade e variedade muito maior de testes para atestar a eficácia desse funcionais. De qualquer maneira, é possível encontrar DFTs que sejam precisos para diferentes tipos de acoplamento, permitindo avaliar um maior número de sistemas adequadamente.

Dentre os funcionais da literatura, o BHandH, o B1B95, o ω B97X e o ω B97XD são os mais recomendados para cálculo de CAISS envolvendo átomos de H, B, C, N, O, F e P. Os híbridos BHandH 40% E_X^{HF} e B1B95 40% E_X^{HF} são recomendados, bem como o ajuste da porcentagem de E_X^{HF} de um DFT a valores próximos de 40%. Os funcionais com CLA ω B97XD($\#|\#|0,35$) e ω B97X($0,2|1,0|\#$) são bons, mas no conjunto teste é preferível utilizar as versões originais; já os LC-BHandH($40\%|100\%|0,10$) e LC-B1B95($40\%|100\%|0,25$), apesar de pouco avaliados, são bastante promissores para esse tipo de cálculo.

7 Referências Bibliográficas

- [1] Keeler, J. *Understanding NMR Spectroscopy*; Wiley: Chicester, 2010.
- [2] Ramsey, N. F. *Phys. Rev.* **1950**, 78, 699.
- [3] Ramsey, N. F. *Phys. Rev.* **1953**, 91, 303.
- [4] Helgaker, T.; Jaszuński, M.; Ruud, K. *Chem. Rev.* **1999**, 99, 293.
- [5] Autschbach, J.; Ziegler, T. *Coordin. Chem. Rev.* **2003**, 238, 83–126.
- [6] Autschbach, J. Principles and Applications of DFT in Inorg. Chem.. In , Vol. 112 of Structure and Bonding; Kaltsoyannis, N.; MacGrady, J. E., Eds.; Springer: Heidelberg, 2004; Chapter The calculations of nmr parameters in transition metal complexes, pages 1–48.
- [7] Kaupp, M.; Buhl, M.; Malkin, V. G. *Calculation of NMR and EPR Parameters, Theory and Applications*; Wiley-VCH: Darmstadt, 2004.
- [8] Kupka, T. *Magn. Reson. Chem.* **2009**, 47, 959.
- [9] Kupka, T. *Magn. Reson. Chem.* **2009**, 47, 674.
- [10] Autschbach, J.; Guennic, B. L. *J. Chem. Educ.* **2007**, 84, 156.
- [11] Olsen, J.; Jorgensen, P. *J. Chem. Phys.* **1985**, 82, 3235.
- [12] Vahtras, O.; Agren, H.; Jorgensen, P.; Jensen, H. J. A.; Padkjaer, S. B.; Helgaker, T. *J. Chem. Phys.* **1992**, 96, 6120.
- [13] Helgaker, T.; Lutnaes, O. B.; Jaszunski, M. *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, 3, 86.
- [14] Barone, V. in *Recent Advances in Density Functional Methods, Part I* **1996**, Ed. D. P. Chong, (World Scientific Publ. Co., Singapore).

- [15] Sauer, S. P. A.; Provasi, P. F.; Aucar, G. A. *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 1324.
- [16] Helgaker, T.; Jaszunski, M.; Ruud, K.; Gorska, A. *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *99*, 175.
- [17] Benedikt, U.; Auer, A. A.; Jensen, F. *J. Chem. Phys.* **2008**, *129*, 064111.
- [18] Jensen, F. *J. Chem. Theory Comput.* **2006**, *2*, 1360.
- [19] Jensen, F. *J. Chem. Theory Comput.* **2008**, *4*, 719.
- [20] Manninen, P.; Vaara, J. *J. Comput. Chem.* **2006**, *27*, 434.
- [21] Provasi, P. F.; Sauer, S. P. A. *J. Chem. Phys.* **2010**, *133*, 054308.
- [22] Helgaker, T.; Watson, M.; Handy, N. C. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 9402.
- [23] Helgaker, T.; Jaszunski, M.; Pecul, M. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **2008**, *53*, 249.
- [24] Krivdin, L. B.; Contreras, R. H. *Ann. Report. NMR Spectrosc.* **2007**, *61*, 133.
- [25] Malkin, V. G.; Malkina, O. L.; Salahub, D. R. *Chem. Phys. Lett.* **1994**, *221*, 91.
- [26] Dickson, R. M.; Ziegler, T. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 5286-5290.
- [27] Sychrovsky, V.; Grafenstein, J.; Cremer, D. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 3530-3547.
- [28] Autschbach, J.; Ziegler, T. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 936-947.
- [29] Watson, M.; Salek, P.; Macak, P.; Jaszunski, M.; Helgaker, T. *Chem. Eur. J.* **2004**, *10*, 4627.
- [30] Karplus, M. *J. Chem. Phys.* **1958**, *30*, 11.
- [31] Karplus, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1963**, *85*, 2870.
- [32] Peralta, J. E.; Barone, V.; Contreras, R. H. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9162.
- [33] Breitmaier, E.; Voelter, W. *Carbon-13NMR Spectroscopy: High-resolution Methods and Applications in Organic Chemistry and Biochemistry.*; VCH: New York, 1987.

- [34] Kohn, W.; Sham, L. *Phys. Rev. A* **1965**, *140*, 1133.
- [35] Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**, *140*, A1133–A1138.
- [36] Perdew, J. P.; Ruzsinszky, A.; Constantin, L. A.; Sun, J.; Csonka, G. I. *J. Chem. Theory Comput.* **2009**, *5*, 902.
- [37] Jensen, F. *Introduction to Computational Chemistry*; Wiley: Chichester, 2nd ed.; 2007.
- [38] Rode, B. M.; Hofer, T. S.; Kugler, M. D. *The Basics of Theoretical and Computational Chemistry*; Wiley-VCH: Weinheim, 2007.
- [39] Frisch, M. J. *et al.* “Gaussian 09, Revision D.”, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009.
- [40] Marques, M. A. L.; Ullrich, C. A.; Nogueira, F.; Rubio, A.; Burke, K.; Gross, E. K. U. *Time-Dependent Density Functional Theory; Vol. 706 of Lecture Notes in Physics*; Springer: Berlin, 2006.
- [41] Cohen, A. J.; Mori-Sánchez, P.; Yang, W. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 289.
- [42] Neto, A. C.; Ducati, L. C.; Rittner, R.; Tormena, C. F.; Contreras, R. H.; Frenking, G. *J Chem Theory Comput* **2009**, *5*, 2222.
- [43] Ducati, L. C.; Contreras, R. H.; Tormena, C. F. *J. Phys. Chem. A* **2012**, *116*, 4930.
- [44] Dreuw, A.; Weisman, J. L.; Head-Gordon, M. *J. Chem. Phys.* **2003**, *119*, 2943.
- [45] Maximoff, S. N.; Peralta, J. E.; Barone, V.; Scuseria, G. *J. Chem. Theory Comput.* **2005**, *1*, 541.
- [46] Melo, J. I.; de Azua, M. C. R.; Peralta, J. E.; Scuseria, G. E. *J. Chem. Phys.* **2005**, *123*, 204112.
- [47] Keal, T. W.; Helgaker, T.; Sałek, P.; Tozer, D. J. *Chemical Physics Letters* **2006**, *425*, 163 - 166.

- [48] Keal, T.; Helgaker, T.; Salek, P.; Tozer, D. *Chem. Phys. Lett. Phys Lett* **2006**, *425*, 163.
- [49] Kupka, T. *Magn. Reson. Chem.* **2009**, *47*, 210.
- [50] Kupka, T.; Nieradka, M.; Stachów, M.; Pluta, T.; Nowak, P.; Kjaer, H.; Kongsted, J.; Kaminsky, J. *J. Phys. Chem. A* **2012**, *116*, 3728.
- [51] Cohen, A. J.; Mori-Sánchez, P.; Yang, W. *Chemical Reviews* **2012**, *112*, 289-320
PMID: 22191548.
- [52] Iikura, H.; Tsuneda, T.; Yanai, T.; Hirao, K. A. *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 3540.
- [53] Rohrdanz, M. A.; Herbert, J. M. *J. Chem. Phys.* **2008**, *129*, 034107.
- [54] Chai, J.-D.; Head-Gordon, M. *The Journal of Chemical Physics* **2008**, *128*, 084106.
- [55] Chai, J.-D.; Head-Gordon, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 6615-6620.
- [56] Baer, R.; Livshits, E.; Salzner, U. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2010**, *61*, 85.
- [57] Kuritz, N.; Stein, T.; Baer, R.; Kronik, L. *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, *7*, 2408.
- [58] Körzdörfer, T.; Sears, J. S.; Sutton, C.; Brédas, J. L. *J. Chem. Phys.* **2011**, *135*, 204107.
- [59] Kronik, L.; Stein, T.; Refaely-Abramson, S.; Baer, R. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 1515.
- [60] Foster, M. E.; Wong, B. M. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 2682.
- [61] Autschbach, J.; Srebro, M. *Accounts of Chemical Research* **2014**, *47*, 2592-2602.
- [62] Duignan, T. J.; Autschbach, J.; Batista, E.; Yang, P. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2017**, *13*, 3614-3625.
- [63] Huber, K.; Herzberg, G. *Molecular Spectra and Molecular Structure. IV. Constants of Diatomic Molecules*; Van Nostrand Reinhold Co.: New York, 1979.

- [64] Roy, R. J. L. *J. Mol. Spect.* **1999**, 194, 189.
- [65] Hoy, A. R.; Bunker, P. R. *J. Mol. Struct.* **1979**, 74, 1.
- [66] Herzberg, G. *Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules*; Van Nostrand: New York, 1966.
- [67] Kuchitsu, K. *Structure of Free Polyatomic Molecules - Basic Data*; Springer: New York, 1998.
- [68] Hellwege, K. H.; Hellwege, A. *Group II: Atomic and Molecular Physics Volume 7: Structure Data of Free Polyatomic Molecules*; Springer-Verlag: Berlin, 1976.
- [69] Westwood, N. P. C.; Lewis-Bevan, W.; Gerry., M. C. L. *J. Mol. Spect.* **1984**, 106, 227.
- [70] Kirchhoff, W. *J. Mol. Struct.* **1972**, 41, 333.
- [71] Hirota, E. *J Mol Spect.* **1979**, 77, 213.
- [72] Sverdlov, L.; Kovner, M. A.; Krainov, E. P. *Vibrational Spectra of Polyatomic Molecules*; Wiley: New York, 1974.
- [73] Seminario, J. M.; Politzer, P. *Modern Density Functional Theory: A Tool For Chemistry*; Elsevier: Amsterdam, 1995.
- [74] Becke, A. D. *The Journal of Chemical Physics* **1993**, 98, 5648-5652.
- [75] Yanai, T.; Tew, D. P.; Handy, N. C. *Chemical Physics Letters* 393, 51 - 57.
- [76] Schmider, H. L.; Becke, A. D. *The Journal of Chemical Physics* **1998**, 108, 9624-9631.
- [77] Hamprecht, F. A.; Cohen, A. J.; Tozer, D. J.; Handy, N. C. *The Journal of Chemical Physics* **1998**, 109, 6264-6271.
- [78] Wilson, P. J.; Bradley, T. J.; Tozer, D. J. *The Journal of Chemical Physics* **2001**, 115, 9233-9242.

- [79] Perdew, J. P.; Burke, K.; Wang, Y. *Phys. Rev. B* **1996**, *54*, 16533–16539.
- [80] Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*, 3865–3868.
- [81] Adamo, C.; Barone, V. *The Journal of Chemical Physics* **1999**, *110*, 6158–6170.
- [82] Tao, J.; Perdew, J. P.; Staroverov, V. N.; Scuseria, G. E. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 146401.
- [83] Zhao, Y.; Schultz, N. E.; Truhlar, D. G. *The Journal of Chemical Physics* **2005**, *123*, 161103.
- [84] Zhao, Y.; Schultz, N. E.; Truhlar, D. G. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2006**, *2*, 364–382.
- [85] Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Theoretical Chemistry Accounts* **2008**, *120*, 215–241.
- [86] Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Theoretical Chemistry Accounts* **2008**, *120*, 215–241.
- [87] Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *The Journal of Physical Chemistry A* **2006**, *110*, 13126–13130.
- [88] Becke, A. D. *The Journal of Chemical Physics* **1993**, *98*, 1372–1377.
- [89] Perdew, J. P. *Phys. Rev. B* **1986**, *33*, 8822–8824.
- [90] Becke, A. D. *The Journal of Chemical Physics* **1996**, *104*, 1040–1046.
- [91] Boese, A. D.; Martin, J. M. L. *The Journal of Chemical Physics* **2004**, *121*, 3405–3416.
- [92] COHEN, A. J.; HANDY, N. C. *Molecular Physics* **2001**, *99*, 607–615.
- [93] Xu, X.; Goddard, W. A. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2004**, *101*, 2673–2677.
- [94] Huzinaga, S. *The Journal of Chemical Physics* **1965**, *42*, 1293–1302.

- [95] Lutnæs, O. B.; Helgaker, T.; Jaszuński, M. *Molecular Physics* **2010**, *108*, 2579-2590.
- [96] Aidasand, K. *et al.* "Dalton, a molecular electronic structure program, Release Dalton2016.", 2015 "The Dalton quantum chemistry program system", WIREs Comput. Mol. Sci. 2014, 4:269–284 (doi: 10.1002/wcms.1172).
- [97] Becke, A. D. *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098–3100.
- [98] Hoe, W.-M.; Cohen, A. J.; Handy, N. C. *Chemical Physics Letters* **2001**, *341*, 319 - 328.
- [99] Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev.* **1964**, *136*, B864–B871.
- [100] Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B* **1988**, *37*, 785–789.
- [101] Iikura, H.; Tsuneda, T.; Yanai, T.; Hirao, K. *The Journal of Chemical Physics* **2001**, *115*, 3540-3544.
- [102] Kjaer, H.; Sauer, S. P. A.; Kongsted, J. *J. Chem. Phys.* **2010**, *133*, 144106.
- [103] Berger, S.; Braun, S.; Kalinowski, H. O. *NMR Spectroscopy Of The Non-Metallic Elements*; John Wiley & Sons: Bonn, 1997.
- [104] Frankiss, S. G. *The Journal of Physical Chemistry* **1963**, *67*, 752-755.
- [105] Middleton, W. J.; Sharkey, W. H. *Journal of the American Chemical Society* **1959**, *81*, 803-804.
- [106] Wray, V.; Ernst, L.; Lustig, E. *Journal of Magnetic Resonance (1969)* **1977**, *27*, 1 - 21.
- [107] Noggle, J. H.; Baldeschwieler, J. D.; Colburn, C. B. *The Journal of Chemical Physics* **1962**, *37*, 182-189.
- [108] Maier, L.; Schmutzler, R. *J. Chem. Soc. D* **1969**, 961-962.

- [109] Gray, G. A.; Albright, T. A. *Journal of the American Chemical Society* **1977**, *99*, 3243-3250.
- [110] Ducati, L. C. *Adaptação de métodos de estrutura eletrônica em cálculos de propriedades de ressonância magnética nuclear e barreiras de rotação interna*, Thesis, Universidade Estadual de Campinas, 2010.
- [111] Gray, G. A.; Albright, T. A. *Journal of the American Chemical Society* **1976**, *98*, 3857-3861.
- [112] Cowley, A. H.; White, W. D. *Journal of the American Chemical Society* **1969**, *91*, 1917-1921.
- [113] Moncho, S.; Autschbach, J. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2010**, *6*, 223-234 PMID: 26614333.
- [114] Patchkovskii, S.; Ziegler, T. *The Journal of Physical Chemistry A* **2002**, *106*, 1088-1099.
- [115] Gudmundsdóttir, H.; Zhang, Y.; Weber, P. M.; Jónsson, H. *The Journal of Chemical Physics* **2013**, *139*, 194102.

8 Anexos

As seguintes abreviações são utilizadas nas tabelas a seguir:

Funcionais	→	Func.
Experimental	→	Exp.
Empírico	→	Emp.
$\Delta(\text{CPI-SPI})$	→	ΔCS
CAM-B3LYP	→	CAMB3
B3PW91	→	B3W91
ωB97XD	→	ω97XD
BHandH	→	BHH
BHandHLYP	→	BHLYP
LC-BB95	→	LCB95
LC-SLYP	→	LCSLP

8.1 Precisão dos funcionais da literatura

Tabela 8.1: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) com base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	364,2	355,3	455,6	390,6	396,4	497,9	455,6	407,3	445,4	408,9	449,1	442,8	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	24,9	24,9	23,9	20,3	21,9	19,1	18,3	21,6	18,2	21,6	17,4	18,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-66,3	-64,8	-71,8	-72,5	-69,4	-76,5	-77,7	-70,1	-76,8	-70,6	-74,4	-73,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-4,8	-4,6	-6,6	-5,3	-8,0	-6,4	-7,4	-6,3	-7,2	-6,8	-6,5	-7,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	40,8	40,0	39,0	45,8	41,1	41,5	45,2	41,4	45,3	41,7	43,3	41,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,0	-7,8	-8,5	-8,1	-10,1	-8,7	-10,2	-9,3	-9,9	-9,8	-9,1	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	137,6	136,9	159,3	200,5	165,5	165,0	162,3	152,3	171,9	154,6	190,7	184,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1815,2	-1802,5	-1663,0	-1731,7	-1687,8	-1643,0	-1749,1	-1749,4	-1755,9	-1751,4	-1656,7	-1661,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-177,6	-177,9	-111,8	-142,5	-157,4	-97,5	-125,7	-143,2	-134,5	-142,6	-123,8	-129,9	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-80,9	-83,3	-14,8	-47,2	-63,7	3,3	-22,4	-45,2	-33,2	-44,5	-27,9	-36,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-290,5	-290,1	-310,7	-320,1	-297,3	-326,5	-386,6	-360,6	-352,0	-362,9	-318,8	-316,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,1	117,5	109,4	138,8	119,5	112,5	128,9	120,0	131,7	121,0	128,8	118,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,0	-11,8	-11,2	-11,3	-13,2	-11,3	-13,2	-12,9	-13,0	-13,4	-12,0	-11,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	188,8	187,3	194,2	190,8	191,5	193,0	202,0	193,4	203,3	193,8	213,8	197,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,5	247,4	236,3	282,3	254,5	240,2	266,9	251,9	271,8	254,0	261,3	247,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,6	54,6	51,8	57,7	52,6	53,4	57,0	54,0	56,1	54,0	53,2	50,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,5	10,2	10,4	12,6	11,8	10,0	11,1	11,2	11,1	11,7	10,5	10,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	60,6	59,5	65,6	71,5	63,9	64,5	70,6	64,7	71,0	65,3	78,1	68,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,0	149,7	142,7	174,3	154,4	145,4	164,4	153,7	167,1	155,1	162,8	152,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,4	0,0	-2,2	-1,7	-1,9	-1,3	-1,7	-1,6	-1,4	-2,0	-2,1	-2,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	4,5	4,6	2,3	8,2	2,8	2,9	4,0	3,2	4,5	2,8	3,6	3,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	11,9	11,6	11,5	12,5	12,3	11,5	13,3	12,1	12,8	12,4	11,7	11,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	18,5	17,0	22,5	19,3	17,2	20,0	19,0	20,0	19,4	18,4	17,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	25,1	24,2	28,5	34,4	27,5	29,1	32,5	28,0	32,4	28,3	34,9	30,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	120,3	117,6	109,0	138,9	119,9	112,4	129,1	120,6	131,7	121,6	129,1	118,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-2,9	-2,7	-3,2	-3,8	-3,6	-3,2	-3,6	-3,5	-3,4	-3,7	-3,6	-3,2	-4,7
Total	DM	-26,05	-27,51	-28,10	-15,09	-14,90	-19,33	-11,56	-17,75	-22,80	-16,85	-22,56	-10,51	-14,69	—
	DMA	31,85	32,72	33,03	18,42	26,71	23,23	14,27	24,35	26,54	24,62	26,41	17,89	17,63	—
	PDMA	46,79	48,56	50,85	19,64	41,22	33,97	14,49	23,87	30,38	27,96	28,73	21,89	23,84	—
CPI	DM	-61,24	-65,15	-64,98	-31,85	-46,46	-46,34	-24,79	-48,96	-54,76	-48,15	-54,79	-32,51	-35,26	—
	DMA	69,87	71,77	72,02	35,14	51,88	49,86	26,35	50,09	57,85	49,45	57,65	34,51	36,99	—
	PDMA	83,81	87,39	89,78	33,06	56,46	66,48	16,20	36,17	56,19	42,17	54,80	36,11	42,37	—
SPI	DM	-0,25	0,10	-1,06	-2,80	8,24	0,48	-1,85	5,15	0,65	6,11	1,08	5,63	0,40	—
	DMA	3,96	4,07	4,43	6,16	8,25	3,69	5,40	5,47	3,58	6,41	3,51	5,71	3,44	—
	PDMA	19,65	20,09	22,31	9,80	30,05	10,13	13,24	14,85	11,45	17,55	9,60	11,47	10,24	—
Δ CS	DM	-60,98	-65,25	-63,92	-29,05	-54,70	-46,82	-22,94	-54,11	-55,41	-54,25	-55,87	-38,14	-35,66	—
	DMA	65,91	67,70	67,58	28,98	43,63	46,17	20,95	44,62	54,27	43,04	54,14	28,80	33,55	—
	PDMA	64,16	67,30	67,47	23,25	26,41	56,35	2,96	21,32	44,74	24,62	45,20	24,64	32,13	—

Tabela 8.2: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) com base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	453,2	431,2	484,2	430,8	678,3	470,4	828,5	550,8	530,8	526,8	485,6	583,3	177,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,5	19,6	19,9	17,9	18,4	9,1	18,7	13,7	10,9	7,4	3,9	4,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,8	-72,5	-74,7	-73,0	-100,6	-77,3	-108,3	-86,9	-83,7	-86,5	-91,6	-89,3	-54,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-6,9	-6,4	-7,3	-16,8	-7,0	-18,6	-6,7	-9,4	-11,2	-7,1	-4,6	8,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	42,9	41,9	42,5	52,4	44,0	44,3	47,8	45,5	49,0	53,2	43,8	37,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,5	-9,0	-10,1	-18,0	-9,3	-15,8	-10,2	-11,1	-13,5	-11,0	-6,3	-5,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,3	196,4	176,7	154,6	247,5	167,8	171,8	137,9	183,1	201,3	166,9	118,3	159,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1753,0	-1666,4	-1637,8	-1732,1	-1526,9	-1645,5	-1389,0	-1646,1	-1670,4	-1651,5	-1625,7	-1705,4	-1876,6	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,5	-129,1	-103,1	-131,0	-36,1	-127,6	20,8	-104,0	-95,2	-81,9	-116,5	-105,2	-275,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,1	-34,1	-3,0	-30,5	64,9	-27,0	127,1	5,1	15,1	24,3	-20,0	-3,5	-196,7	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-359,4	-336,9	-333,4	-374,9	-308,4	-361,9	-302,9	-377,3	-465,0	-488,0	-429,2	-520,8	-1503,5	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,3	114,7	122,8	139,6	124,4	98,5	159,2	124,9	140,7	143,7	115,3	67,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-12,5	-11,8	-13,8	-25,9	-12,2	-21,2	-14,3	-13,3	-16,0	-12,1	-6,6	-15,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,4	212,9	191,3	196,4	193,6	195,2	209,7	342,7	202,4	220,1	227,8	224,7	251,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	273,8	261,1	245,6	256,2	299,5	256,2	247,8	296,0	259,5	288,5	270,2	208,7	90,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,2	52,8	53,7	53,5	50,3	55,6	36,5	62,0	53,0	54,1	56,9	49,6	45,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	10,7	10,1	12,4	17,1	10,4	20,6	12,0	11,8	14,8	9,3	7,4	5,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,0	77,3	63,7	68,7	64,8	66,0	76,4	127,3	72,3	86,0	91,2	85,1	85,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,6	162,5	148,1	157,3	183,7	158,8	141,6	195,6	160,6	180,1	177,6	141,8	-61,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,4	-1,0	-3,0	-6,4	-1,1	-13,9	-4,7	-3,8	-6,0	-2,5	-1,6	13,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,1	3,0	2,3	-13,4	4,2	-14,6	5,2	2,2	1,6	3,7	6,1	4,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	11,8	11,5	12,7	17,1	12,1	16,2	13,5	13,3	14,9	12,9	9,5	4,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	18,5	17,5	19,8	21,6	19,0	19,2	21,1	19,6	22,7	18,8	14,9	5,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,1	34,4	29,0	30,4	29,4	30,6	24,8	48,7	33,3	40,6	48,9	40,9	46,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,8	115,2	123,5	139,1	125,0	98,2	160,2	125,8	141,3	145,0	117,4	81,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,8	-3,3	-4,1	-5,5	-3,5	-4,6	-5,1	-4,3	-5,1	-3,7	-2,7	-3,3	-4,7
Total	DM	-16,08	-12,61	-11,64	-20,04	12,07	-13,82	17,58	3,98	-12,86	-7,19	-9,43	-20,01	-105,70	—
	DMA	24,40	20,22	14,39	24,04	25,43	17,61	33,00	32,73	19,73	25,55	24,34	33,54	118,91	—
	PDMA	26,59	22,55	16,48	23,18	74,41	24,17	108,73	32,87	12,21	28,90	28,05	35,34	149,27	—
CPI	DM	-47,13	-37,03	-25,99	-50,18	19,39	-35,99	47,83	-28,35	-35,23	-32,84	-38,99	-47,88	-215,00	—
	DMA	48,24	40,46	27,92	52,20	43,43	37,10	60,88	38,84	41,15	43,11	40,74	64,12	223,38	—
	PDMA	39,43	41,68	20,60	43,19	66,99	37,04	113,68	19,29	14,76	27,35	40,86	41,15	230,30	—
SPI	DM	6,69	5,29	-1,12	2,07	6,70	2,44	-4,59	27,69	3,55	11,61	12,24	0,43	-25,54	—
	DMA	6,93	5,37	4,47	3,39	12,23	3,32	12,55	28,25	4,03	12,67	12,32	11,12	42,30	—
	PDMA	17,18	8,52	13,47	8,51	79,85	14,73	105,10	42,84	10,35	30,04	18,67	31,07	89,85	—
Δ CS	DM	-53,81	-42,32	-24,87	-52,25	12,69	-38,43	52,42	-56,03	-38,77	-44,45	-51,23	-48,31	-189,46	—
	DMA	41,31	35,09	23,45	48,81	31,19	33,78	48,33	10,59	37,13	30,44	28,42	53,00	181,08	—
	PDMA	22,25	33,17	7,13	34,68	-12,86	22,31	8,58	-23,55	4,41	-2,69	22,19	10,09	140,46	—

Tabela 8.3: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) com base HuzIII-su3.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	368,9	357,2	350,0	470,6	383,0	394,9	503,1	449,4	396,9	439,8	404,5	452,3	442,3	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,3	26,1	25,9	22,6	21,5	22,6	18,7	19,5	22,8	19,3	22,6	17,7	18,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,5	-65,5	-64,4	-73,8	-72,4	-69,5	-77,2	-77,3	-69,5	-76,4	-70,3	-75,3	-73,8	-80,6
	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,6	-5,4	-7,6	-5,8	-8,8	-7,3	-8,2	-7,4	-8,1	-7,6	-7,6	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	40,6	39,7	39,8	46,1	41,3	41,9	45,1	41,5	45,2	41,7	43,7	42,0	43,8
	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-8,4	-8,2	-8,9	-8,5	-10,5	-9,1	-10,6	-10,1	-10,4	-10,2	-9,5	-9,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	127,5	128,3	130,1	156,5	190,8	157,3	163,5	154,0	141,8	165,6	146,0	182,4	180,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1842,3	-1861,9	-1845,9	-1683,2	-1785,9	-1741,5	-1667,5	-1798,5	-1797,6	-1809,6	-1797,6	-1698,1	-1693,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-175,0	-180,1	-179,8	-107,1	-146,7	-156,8	-95,7	-128,6	-146,7	-137,5	-144,9	-124,9	-128,4	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,9	-84,2	-85,8	-11,0	-52,2	-63,6	3,5	-26,4	-49,4	-37,0	-47,5	-30,6	-35,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-262,3	-272,6	-273,6	-293,6	-300,4	-281,0	-312,7	-372,0	-351,6	-336,8	-348,2	-304,5	-303,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	117,0	111,4	140,0	121,0	114,2	129,4	121,9	132,9	121,8	132,2	120,2	125,3
	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,2	-12,0	-11,2	-11,6	-13,3	-11,3	-13,4	-13,7	-13,3	-13,6	-12,0	-11,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,7	189,8	188,5	198,4	192,5	194,8	196,3	203,0	194,8	204,7	195,2	217,4	201,1	174,8
	$^1J_{\text{CH}}$	251,8	254,2	249,4	239,6	286,7	257,8	243,3	268,9	256,7	274,0	256,5	263,6	251,1	247,6
	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	54,2	54,3	51,5	57,3	52,3	52,9	56,6	53,8	55,7	53,5	52,9	50,4	50,1
	$^3J_{\text{HH}}$	10,3	10,3	10,1	10,2	12,6	11,6	9,8	10,9	11,7	11,0	11,6	10,3	10,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,1	61,4	60,5	68,7	72,9	66,0	67,0	71,3	66,4	71,9	66,2	81,4	70,1	67,6
	$^1J_{\text{CH}}$	152,6	153,6	150,7	145,2	176,0	156,3	147,6	165,2	156,6	168,6	156,7	165,4	154,3	156,3
	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-0,5	-0,1	-2,5	-2,0	-2,2	-1,6	-1,9	-2,2	-1,5	-2,2	-2,4	-2,2	-2,4
	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	4,2	4,3	2,2	7,8	2,6	2,7	3,7	2,6	4,2	2,5	3,4	3,0	2,3
	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,8	11,6	11,4	12,5	12,2	11,4	13,2	12,4	12,8	12,4	11,5	11,1	11,7
	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,6	18,9	18,5	17,0	22,5	19,4	17,2	20,0	19,5	20,0	19,4	18,3	17,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,9	25,3	24,5	30,0	35,2	28,4	30,4	32,7	28,6	32,7	28,7	36,4	31,5	34,5
	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	120,7	118,4	111,0	140,0	121,3	114,1	129,5	122,5	132,8	122,9	131,9	120,3	125,2
	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,0	-2,8	-3,3	-4,0	-3,7	-3,3	-3,7	-3,8	-3,5	-3,9	-3,7	-3,3	-4,7
Total	DM	-27,61	-29,31	-29,60	-13,89	-16,81	-20,62	-11,27	-19,74	-24,87	-18,77	-24,18	-11,26	-14,98	—
	DMA	34,81	36,05	35,95	17,72	28,74	26,24	14,19	26,77	29,12	27,20	28,33	19,73	18,53	—
	PDMA	47,10	48,89	50,85	17,04	41,27	33,95	12,08	25,19	30,01	29,50	28,93	21,98	23,26	—
CPI	DM	-65,22	-69,73	-68,94	-30,60	-51,95	-50,59	-25,43	-54,05	-60,93	-53,35	-59,31	-35,94	-37,24	—
	DMA	76,84	79,75	79,01	34,25	55,73	57,19	27,12	55,45	64,11	54,89	62,31	37,15	38,89	—
	PDMA	86,52	90,49	91,98	28,12	59,09	69,32	13,83	41,36	59,62	47,06	57,93	36,78	42,49	—
SPI	DM	-0,03	0,33	-0,75	-1,63	8,95	1,36	-0,89	5,42	1,58	6,59	1,57	6,83	1,34	—
	DMA	3,99	4,01	4,37	5,59	8,95	3,55	4,71	5,74	3,46	6,90	3,41	6,95	3,59	—
	PDMA	18,18	18,39	20,68	8,93	28,19	8,02	10,80	13,34	8,30	16,62	7,67	11,14	9,15	—
Δ CS	DM	-65,19	-70,06	-68,19	-28,97	-60,90	-51,95	-24,53	-59,47	-62,51	-59,94	-60,88	-42,77	-38,58	—
	DMA	72,85	75,73	74,64	28,66	46,77	53,64	22,41	49,71	60,65	47,99	58,90	30,20	35,30	—
	PDMA	68,34	72,11	71,30	19,19	30,90	61,30	3,02	28,02	51,32	30,44	50,26	25,64	33,35	—

Tabela 8.4: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) com base HuzIII-su3.

	Func. % E_X^{HF}	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	446,6	434,2	487,9	426,5	623,4	465,7	769,8	553,8	525,4	522,7	510,4	559,9	607,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,9	19,0	19,6	21,1	22,9	19,5	16,6	21,4	15,0	12,3	6,9	5,2	-6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,4	-73,4	-75,2	-72,7	-96,1	-77,2	-102,4	-86,2	-83,4	-86,0	-92,4	-86,0	-97,5	-80,6
	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-7,9	-7,3	-8,1	-16,8	-7,9	-17,7	-7,6	-10,2	-12,0	-8,3	-5,4	-22,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,7	43,3	42,3	42,4	52,7	44,0	45,2	46,7	45,5	48,9	52,5	43,0	54,0	43,8
	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-9,9	-9,5	-10,5	-19,5	-9,8	-18,6	-10,5	-11,5	-13,9	-11,4	-5,9	-22,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	166,2	188,9	173,4	143,1	248,3	160,2	199,4	135,8	179,0	184,8	145,3	86,4	293,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1804,3	-1707,8	-1665,6	-1779,6	-1580,6	-1691,9	-1433,9	-1679,5	-1730,4	-1713,3	-1645,0	-1733,1	-1267,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-134,7	-130,9	-102,3	-134,0	-66,1	-129,6	-23,2	-109,0	-98,7	-86,1	-104,2	-102,6	30,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-33,4	-37,1	-3,6	-34,1	31,8	-30,2	78,8	-1,2	10,5	19,2	-10,3	-2,5	127,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-343,8	-321,3	-319,7	-360,4	-304,7	-353,1	-301,6	-374,0	-458,1	-470,2	-437,8	-533,1	-479,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,4	132,4	116,5	124,3	141,4	125,3	104,5	159,4	125,2	141,6	138,2	110,4	154,5	125,3
	$^2J_{\text{HH}}$	-13,4	-12,5	-11,9	-13,9	-21,7	-12,3	-18,4	-14,7	-13,4	-16,2	-12,0	-5,2	-20,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	205,5	216,5	194,2	197,4	201,6	197,2	211,4	335,2	203,6	221,5	223,5	219,9	388,7	174,8
	$^1J_{\text{CH}}$	275,9	263,8	248,3	258,6	306,7	258,9	247,3	298,2	262,3	291,9	267,8	212,2	374,4	247,6
	$^2J_{\text{CH}}$	55,8	52,4	53,2	53,0	50,4	55,0	40,5	61,2	52,5	53,5	56,5	50,7	-21,5	50,1
	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,6	9,9	12,2	14,5	10,3	16,3	11,9	11,7	14,7	9,1	7,7	45,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,8	80,7	66,0	69,5	70,4	67,2	76,8	128,6	72,9	86,9	87,0	78,5	264,5	67,6
	$^1J_{\text{CH}}$	169,4	165,4	150,1	158,4	185,2	160,1	144,6	195,2	161,6	180,2	172,5	137,3	257,7	156,3
	$^2J_{\text{CH}}$	-1,8	-2,7	-1,3	-3,2	-6,5	-1,3	-10,9	-4,8	-4,0	-6,2	-2,2	-0,7	-72,6	-2,4
	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	2,9	2,7	2,1	-8,6	3,9	-9,3	4,8	1,9	1,2	3,8	6,5	-28,2	2,3
	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,9	11,7	11,4	12,6	14,9	12,0	13,8	13,4	13,3	14,9	12,7	9,4	38,5	11,7
	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	18,5	17,6	19,8	19,3	19,0	17,6	21,1	19,7	22,7	18,6	14,7	50,4	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	36,1	30,3	30,7	31,8	31,2	24,8	48,2	33,5	40,9	46,6	37,0	60,6	34,5
	$^1J_{\text{CH}}$	133,4	131,9	116,9	124,2	141,3	125,9	104,9	160,0	125,8	140,7	139,4	111,6	157,3	125,2
	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-3,9	-3,4	-4,2	-5,2	-3,6	-4,2	-5,3	-4,4	-5,2	-3,8	-2,1	-10,1	-4,7
Total	DM	-18,12	-13,23	-11,71	-21,92	7,15	-15,63	12,58	2,20	-15,37	-9,83	-10,83	-24,28	38,96	—
	DMA	26,91	21,77	14,47	26,37	23,02	19,87	23,53	34,33	22,21	26,73	24,18	35,10	72,15	—
	PDMA	28,05	24,09	14,22	25,82	54,40	24,59	75,25	34,81	14,69	28,75	25,46	37,46	290,31	—
CPI	DM	-52,36	-40,35	-27,35	-55,20	4,95	-41,02	33,77	-31,93	-41,62	-39,50	-39,56	-55,91	34,29	—
	DMA	53,75	42,25	28,94	57,49	37,53	42,24	41,55	43,15	46,55	45,32	43,04	67,82	79,11	—
	PDMA	44,81	43,60	18,99	48,29	46,69	40,58	75,12	25,01	18,70	24,09	36,60	40,39	141,60	—
SPI	DM	6,99	6,65	-0,24	2,49	8,76	2,98	-2,96	27,22	3,87	11,93	10,24	-1,08	42,38	—
	DMA	7,23	6,75	3,87	3,55	12,37	3,47	10,31	27,87	4,37	13,11	10,36	11,11	67,05	—
	PDMA	15,77	9,79	10,71	9,34	60,06	12,86	75,35	42,00	11,75	32,17	17,29	35,32	399,37	—
Δ CS	DM	-59,36	-46,99	-27,11	-57,69	-3,81	-44,00	36,73	-59,15	-45,49	-51,43	-49,80	-54,83	-8,09	—
	DMA	46,51	35,50	25,07	53,94	25,15	38,76	31,25	15,27	42,18	32,21	32,68	56,71	12,06	—
	PDMA	29,04	33,81	8,28	38,94	-13,36	27,72	-0,23	-16,99	6,95	-8,08	19,30	5,07	-257,78	—

8.2 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos

8.2.1 Geometrias Experimentais

Tabela 8.5: Constantes de acoplamento B1B95 com base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	403,9	427,5	451,2	475,2	499,3	523,6	548,0	572,6	597,4	622,3	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,4	21,7	19,9	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-72,8	-75,3	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-88,2	-90,8	-93,5	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	42,7	43,4	44,1	44,9	45,6	46,4	47,2	47,9	48,7	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	146,7	154,4	161,8	169,2	176,5	183,6	190,6	197,4	204,1	210,7	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1716,6	-1695,0	-1669,0	-1639,2	-1606,4	-1571,1	-1533,7	-1494,9	-1454,9	-1414,1	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-174,7	-157,8	-141,0	-124,2	-107,5	-91,0	-74,6	-58,3	-42,2	-26,3	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,7	-60,1	-41,7	-23,4	-5,3	12,6	30,3	47,9	65,3	82,6	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,9	-301,3	-334,9	-368,7	-404,3	-443,7	-490,0	-548,8	-631,2	-765,1	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	122,0	123,3	124,7	126,1	127,5	129,0	130,4	131,9	133,4	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,0	-13,7	-14,4	-15,0	-15,7	-16,4	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,2	192,9	195,8	199,3	203,2	207,7	213,0	219,2	226,6	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,5	254,5	256,6	258,8	261,2	263,7	266,5	269,6	273,2	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,7	55,5	55,2	54,6	53,8	52,6	51,1	49,1	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,5	10,0	10,6	11,2	12,0	13,0	14,1	15,4	17,0	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	61,2	63,8	66,5	69,6	73,0	76,8	81,2	86,5	92,8	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,4	155,3	157,2	159,2	161,3	163,5	165,9	168,5	171,4	174,7	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,4	4,7	4,0	3,3	2,5	1,6	0,6	-0,5	-1,9	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,8	13,3	13,9	14,7	15,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,0	19,4	19,9	20,4	21,1	22,0	23,2	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,0	31,0	33,0	35,0	37,1	39,2	41,3	43,5	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	122,2	123,7	125,3	126,9	128,5	130,1	131,8	133,4	135,0	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,7	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,7
Total	DM	-20,82	-18,49	-15,97	-13,28	-10,52	-7,80	-5,23	-3,02	-1,62	-2,08	-8,15	—
	DMA	27,72	22,53	19,82	17,06	14,84	15,13	18,06	22,59	28,10	37,87	54,82	—
	PDMA	53,39	42,20	32,19	22,08	14,31	11,69	21,91	35,98	51,20	68,97	90,89	—
CPI	DM	-49,40	-44,96	-40,13	-34,95	-29,69	-24,62	-20,01	-16,43	-14,94	-18,09	-34,85	—
	DMA	59,60	48,05	42,09	35,84	29,93	29,24	34,14	42,57	53,03	72,98	109,09	—
	PDMA	84,86	66,46	50,03	33,85	21,92	13,99	27,38	45,90	65,14	86,28	112,26	—
SPI	DM	0,13	0,92	1,75	2,60	3,55	4,53	5,61	6,81	8,15	9,66	11,44	—
	DMA	4,35	3,81	3,48	3,29	3,77	4,79	6,27	7,94	9,83	12,13	15,03	—
	PDMA	30,31	24,41	19,10	13,44	8,73	10,00	17,90	28,71	40,98	56,28	75,22	—
ΔCS	DM	-49,53	-45,88	-41,87	-37,55	-33,24	-29,15	-25,62	-23,23	-23,08	-27,75	-46,29	—
	DMA	55,25	44,24	38,61	32,54	26,15	24,45	27,87	34,63	43,20	60,86	94,06	—
	PDMA	54,55	42,05	30,93	20,41	13,20	3,99	9,48	17,19	24,16	30,00	37,04	—

Tabela 8.6: Constantes de acoplamento B3LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	393,4	418,4	443,6	469,1	494,8	520,8	547,0	573,4	600,0	626,9	654,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	19,9	17,9	15,8	13,6	11,4	9,0	6,5	4,0	1,4	-1,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,7	-74,4	-77,1	-79,8	-82,5	-85,3	-88,1	-91,0	-93,8	-96,7	-99,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-15,6	-16,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	49,2	50,0	50,9	51,8	52,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,2	-17,2	-18,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,6	166,1	174,5	182,7	190,9	198,8	206,7	214,3	221,8	229,2	236,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,3	-1784,6	-1754,5	-1720,8	-1684,0	-1644,8	-1603,8	-1561,4	-1518,1	-1474,0	-1429,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-167,7	-150,2	-132,7	-115,4	-98,2	-81,2	-64,4	-47,8	-31,4	-15,2	0,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,2	-51,0	-32,1	-13,3	5,1	23,4	41,5	59,5	77,2	94,8	112,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,0	-316,8	-353,7	-392,3	-434,8	-484,4	-547,0	-634,0	-773,3	-1056,7	-2138,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,0	132,6	134,1	135,7	137,4	139,0	140,7	142,4	144,1	145,9	147,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,9	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,7	-16,4	-17,2	-17,9	-18,6	-19,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,3	202,3	205,8	209,7	214,3	219,6	225,8	233,3	242,3	253,2	266,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	271,1	273,5	276,1	278,9	281,8	285,0	288,6	292,6	297,3	302,7	309,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	56,8	56,5	56,0	55,1	53,9	52,3	50,1	47,2	43,5	38,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,6	19,7	22,2	25,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,6	69,5	72,8	76,4	80,5	85,3	91,1	98,1	107,2	119,6	137,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,4	167,7	170,0	172,5	175,1	178,0	181,2	185,0	189,5	195,2	203,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,5	-1,6	-2,7	-4,1	-5,7	-7,7	-10,1	-13,4	-18,0	-24,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,3	4,5	3,6	2,7	1,6	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,7	13,0	13,4	13,8	14,5	15,3	16,3	17,8	19,9	23,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,0	20,4	20,8	21,4	22,2	23,1	24,4	26,1	28,5	32,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,2	31,3	33,5	35,7	37,9	40,2	42,6	44,9	47,3	49,8	52,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,5	132,3	134,1	135,9	137,7	139,6	141,5	143,3	145,2	147,2	149,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,7	-4,7
Total	DM	-21,44	-18,84	-16,05	-13,16	-10,27	-7,50	-5,08	-3,47	-3,67	-9,15	-44,94	—
	DMA	31,00	27,28	25,15	23,26	22,08	24,21	29,19	35,22	43,70	58,15	104,92	—
	PDMA	47,46	37,15	28,17	21,85	20,00	26,65	42,62	60,21	81,70	109,06	153,61	—
CPI	DM	-57,96	-53,11	-47,91	-42,55	-37,31	-32,54	-28,82	-27,25	-30,38	-46,56	-135,34	—
	DMA	64,84	55,31	49,18	43,21	38,47	41,10	50,09	61,15	76,84	105,56	208,85	—
	PDMA	74,70	56,69	41,66	30,08	21,36	25,16	44,72	64,96	86,59	112,56	162,70	—
SPI	DM	5,35	6,29	7,31	8,40	9,56	10,86	12,32	13,97	15,92	18,29	21,35	—
	DMA	6,19	6,72	7,53	8,63	10,07	11,82	13,87	16,20	19,40	23,39	28,70	—
	PDMA	27,48	22,82	18,27	15,81	19,00	27,74	41,08	56,72	78,12	106,49	146,95	—
ΔCS	DM	-63,31	-59,40	-55,22	-50,95	-46,87	-43,40	-41,14	-41,23	-46,30	-64,86	-156,69	—
	DMA	58,65	48,59	41,66	34,58	28,41	29,28	36,22	44,95	57,44	82,18	180,15	—
	PDMA	47,22	33,87	23,39	14,26	2,36	-2,58	3,64	8,24	8,47	6,07	15,74	—

8.2. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS

Tabela 8.7: Constantes de acoplamento B3P86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	357,7	381,4	405,4	429,5	454,0	478,6	503,5	528,5	553,8	579,3	605,0	500
CO	$^1J_{CO}$	24,7	23,1	21,3	19,5	17,5	15,5	13,4	11,3	9,1	6,8	4,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-65,2	-67,8	-70,3	-72,9	-75,5	-78,1	-80,8	-83,4	-86,1	-88,9	-91,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,6	-5,6	-6,5	-7,6	-8,6	-9,6	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,3	41,1	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,0	-15,9	-16,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	138,4	146,6	154,6	162,6	170,5	178,2	185,8	193,3	200,6	207,8	214,8	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1804,0	-1778,3	-1748,1	-1714,4	-1677,8	-1638,8	-1598,0	-1555,9	-1512,8	-1469,1	-1425,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-175,5	-158,4	-141,4	-124,6	-107,9	-91,3	-74,9	-58,7	-42,7	-26,9	-11,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-81,4	-62,6	-44,1	-25,8	-7,7	10,1	27,8	45,3	62,7	79,9	96,9	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-287,8	-324,9	-362,3	-401,4	-444,6	-495,1	-558,7	-646,9	-786,4	-1061,9	-1993,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	119,3	120,8	122,3	123,8	125,4	127,0	128,6	130,2	131,8	133,5	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,4	-16,1	-16,8	-17,5	-18,2	-18,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	189,8	192,5	195,7	199,3	203,5	208,5	214,4	221,5	230,2	241,0	254,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	251,0	253,4	255,8	258,5	261,4	264,5	268,1	272,2	276,9	282,7	289,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,7	54,6	54,4	53,9	53,0	51,8	50,2	47,9	44,9	40,9	35,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,6	14,9	16,4	18,3	20,6	23,5	27,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,6	63,4	66,4	69,9	73,8	78,5	84,2	91,5	101,2	115,3	138,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	152,0	154,1	156,4	158,8	161,3	164,2	167,5	171,3	176,2	182,8	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,2	-5,9	-7,9	-10,6	-14,3	-19,7	-28,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,7	4,0	3,2	2,3	1,3	0,1	-1,2	-2,9	-5,2	-8,5	-13,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,2	21,1	26,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,6	18,9	19,3	19,9	20,5	21,4	22,5	24,1	26,3	29,6	35,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,0	27,0	29,0	31,1	33,2	35,3	37,5	39,7	41,9	44,2	46,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	119,4	121,1	122,8	124,5	126,2	128,0	129,8	131,6	133,4	135,3	137,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,6	-4,7
Total	DM	-27,22	-24,73	-22,06	-19,30	-16,53	-13,91	-11,62	-10,13	-10,39	-15,54	-45,36	—
	DMA	32,75	29,10	26,30	23,93	22,01	20,78	22,32	28,30	36,78	51,08	92,90	—
	PDMA	50,09	39,59	29,44	22,06	21,47	23,46	35,35	54,05	76,90	107,03	157,02	—
CPI	DM	-64,19	-59,55	-54,55	-49,44	-44,45	-39,95	-36,51	-35,23	-38,55	-54,21	-129,51	—
	DMA	71,54	63,56	57,47	51,40	45,57	40,47	41,35	51,81	67,27	95,05	185,27	—
	PDMA	88,11	70,82	54,58	40,40	28,41	17,98	27,23	46,53	67,48	92,50	137,68	—
SPI	DM	-0,11	0,81	1,76	2,81	3,93	5,19	6,63	8,28	10,26	12,82	16,35	—
	DMA	4,30	3,82	3,44	3,78	4,73	6,33	8,37	11,07	14,42	18,83	25,17	—
	PDMA	22,21	16,69	10,99	8,61	16,37	27,48	41,30	59,57	83,81	117,68	171,21	—
ΔCS	DM	-64,08	-60,35	-56,31	-52,24	-48,38	-45,13	-43,14	-43,51	-48,81	-67,03	-145,86	—
	DMA	67,24	59,74	54,03	47,62	40,84	34,14	32,97	40,74	52,85	76,21	160,11	—
	PDMA	65,90	54,12	43,59	31,80	12,03	-9,50	-14,06	-13,04	-16,33	-25,18	-33,52	—

Tabela 8.8: Constantes de acoplamento B971 com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	427,3	443,9	461,4	480,0	499,7	520,6	542,8	566,1	590,8	616,7	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	14,7	13,5	12,2	10,7	9,0	7,3	5,3	3,2	1,0	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,7	-69,8	-72,1	-74,5	-77,0	-79,7	-82,5	-85,5	-88,8	-92,2	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,6	38,6	39,6	40,7	41,9	43,1	44,4	45,9	47,3	48,9	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,9	168,1	174,7	181,6	188,9	196,6	204,6	213,1	221,9	231,1	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1613,6	-1608,3	-1597,4	-1581,8	-1562,1	-1539,1	-1513,4	-1485,6	-1456,2	-1425,8	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-145,0	-130,5	-115,6	-100,5	-85,1	-69,6	-54,0	-38,4	-22,8	-7,2	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-55,7	-38,9	-21,9	-4,7	12,4	29,7	47,1	64,5	81,9	99,3	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-189,8	-221,6	-254,8	-289,8	-327,7	-370,4	-421,2	-486,9	-582,5	-752,8	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	102,5	105,7	109,1	112,7	116,5	120,6	125,0	129,6	134,4	139,6	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-13,1	-14,4	-15,8	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,1	190,1	194,4	199,4	205,0	211,6	219,4	228,8	240,5	255,4	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	200,6	207,3	214,3	221,7	229,5	237,9	247,0	256,9	268,0	280,6	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,5	53,0	53,2	53,0	52,5	51,2	49,1	45,6	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,2	6,6	7,1	7,6	8,4	9,3	10,5	12,0	14,0	16,7	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,4	66,1	69,1	72,5	76,4	80,8	86,2	92,8	101,2	112,9	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	130,5	135,2	140,1	145,4	151,2	157,4	164,3	172,1	181,3	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,9	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,8	-8,5	-12,5	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,6	9,8	10,2	10,5	11,0	11,6	12,4	13,6	15,3	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,4	18,6	20,2	22,5	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,6	30,0	32,4	35,1	37,8	40,8	43,9	47,2	50,7	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	104,7	108,4	112,3	116,5	120,9	125,5	130,4	135,6	141,2	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,2	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,7
Total	DM	-15,04	-13,12	-10,93	-8,50	-5,88	-3,16	-0,44	1,98	3,60	2,77	-8,92	—
	DMA	27,95	23,47	18,69	13,67	10,48	12,53	15,65	21,69	29,58	42,27	68,67	—
	PDMA	58,49	48,70	38,43	27,82	17,34	16,15	21,45	35,84	55,59	81,12	118,03	—
CPI	DM	-24,92	-22,78	-20,13	-17,07	-13,79	-10,52	-7,58	-5,71	-6,33	-13,52	-47,66	—
	DMA	49,65	41,00	31,53	21,27	15,37	21,59	29,75	39,93	52,89	75,52	128,26	—
	PDMA	73,76	58,48	42,83	26,75	12,12	20,42	34,57	54,31	75,37	99,24	132,83	—
SPI	DM	-7,79	-6,03	-4,19	-2,21	-0,07	2,23	4,80	7,63	10,88	14,72	19,49	—
	DMA	12,05	10,62	9,27	8,10	6,90	5,89	5,32	8,32	12,48	17,89	24,97	—
	PDMA	47,29	41,52	35,20	28,61	21,17	13,02	11,83	22,30	41,09	67,83	107,17	—
ΔCS	DM	-17,12	-16,75	-15,93	-14,87	-13,72	-12,75	-12,38	-13,34	-17,21	-28,24	-67,15	—
	DMA	37,60	30,38	22,25	13,17	8,47	15,70	24,43	31,61	40,41	57,62	103,30	—
	PDMA	26,47	16,96	7,63	-1,86	-9,04	7,39	22,74	32,00	34,28	31,42	25,65	—

8.2. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS

202

Tabela 8.9: Constantes de acoplamento B972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	420,6	441,5	463,7	487,2	512,0	538,2	565,8	595,0	625,6	657,8	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	16,9	15,3	13,5	11,5	9,2	6,8	4,2	1,4	-1,6	-4,8	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-66,8	-69,6	-72,5	-75,6	-78,9	-82,3	-86,0	-90,0	-94,1	-98,5	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,2	-2,2	-3,2	-4,3	-5,5	-6,7	-8,0	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	36,3	37,5	38,9	40,3	41,8	43,4	45,1	47,0	48,9	50,9	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,7	-12,1	-13,6	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	152,4	159,5	167,0	175,0	183,4	192,2	201,4	211,1	221,2	231,6	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1626,4	-1621,0	-1610,4	-1595,3	-1576,6	-1555,0	-1531,2	-1505,7	-1479,1	-1452,1	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-151,4	-134,7	-117,6	-100,3	-82,9	-65,4	-48,0	-30,7	-13,4	3,5	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-64,0	-44,6	-25,1	-5,4	14,1	33,8	53,5	73,1	92,7	112,2	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-187,3	-217,9	-249,8	-283,7	-320,6	-362,5	-412,9	-478,9	-577,4	-761,7	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	94,6	98,6	102,8	107,2	111,9	116,9	122,2	127,8	133,7	139,9	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-5,4	-6,1	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,7	-11,9	-13,0	-14,3	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	172,7	177,5	182,8	188,8	195,6	203,4	212,5	223,4	236,6	253,1	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	189,9	197,4	205,4	213,7	222,6	232,0	242,2	253,1	265,2	278,6	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,1	50,0	50,8	51,4	51,8	51,9	51,5	50,6	48,9	46,1	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,1	6,5	6,9	7,4	8,1	8,9	9,9	11,2	12,9	15,1	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	54,6	58,0	61,7	66,0	70,8	76,3	82,9	91,0	101,4	115,7	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	117,8	122,9	128,4	134,1	140,3	146,9	154,1	161,9	170,8	181,1	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-8,0	-11,9	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,6	5,4	5,1	4,7	4,2	3,7	3,0	2,2	1,1	-0,5	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,8	12,8	14,3	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	12,8	13,3	13,8	14,4	15,1	15,9	16,8	17,9	19,4	21,4	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	21,9	24,5	27,3	30,2	33,3	36,6	40,1	43,8	47,8	52,0	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	93,2	97,4	101,8	106,4	111,4	116,6	122,1	127,9	134,1	140,6	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,5	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,7	-6,5	-4,7
Total	DM	-19,05	-16,53	-13,71	-10,65	-7,40	-4,05	-0,75	2,25	4,37	3,58	-12,05	—
	DMA	31,30	26,09	20,73	14,98	11,64	14,03	17,62	23,42	32,18	45,12	75,85	—
	PDMA	62,60	51,97	41,18	29,79	18,93	19,95	25,17	36,94	55,71	81,27	118,82	—
CPI	DM	-28,65	-25,57	-21,95	-17,95	-13,82	-9,69	-6,04	-3,53	-3,75	-11,65	-56,05	—
	DMA	53,99	44,41	34,12	23,03	17,29	24,53	34,22	45,80	60,47	83,11	145,55	—
	PDMA	79,88	62,30	45,12	27,62	11,80	24,58	41,76	63,46	86,79	113,04	152,13	—
SPI	DM	-12,01	-9,90	-7,66	-5,29	-2,69	0,08	3,12	6,48	10,31	14,76	20,21	—
	DMA	14,67	12,66	10,91	9,07	7,49	6,33	5,44	7,01	11,43	17,27	24,75	—
	PDMA	49,93	44,39	38,30	31,39	24,15	16,55	13,01	17,49	32,91	57,98	94,39	—
Δ CS	DM	-16,63	-15,67	-14,29	-12,67	-11,12	-9,77	-9,16	-10,01	-14,06	-26,41	-76,27	—
	DMA	39,32	31,75	23,20	13,95	9,80	18,19	28,78	38,79	49,04	65,84	120,80	—
	PDMA	29,95	17,91	6,82	-3,77	-12,35	8,03	28,74	45,98	53,88	55,06	57,74	—

Tabela 8.10: Constantes de acoplamento B98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,6	428,1	445,8	464,6	484,6	505,9	528,5	552,5	577,9	604,8	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	15,5	14,2	12,8	11,2	9,5	7,7	5,6	3,4	1,0	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-68,2	-70,5	-73,0	-75,6	-78,4	-81,4	-84,6	-88,1	-91,7	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,7	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	49,6	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,9	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	172,2	179,0	186,1	193,7	201,7	210,1	218,9	228,1	237,8	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1622,6	-1617,6	-1607,1	-1591,6	-1572,1	-1549,1	-1523,4	-1495,6	-1466,2	-1435,7	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,1	-135,5	-120,6	-105,2	-89,6	-73,8	-57,8	-41,8	-25,7	-9,6	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,5	-44,7	-27,7	-10,4	7,0	24,5	42,2	60,0	77,9	95,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-196,5	-228,9	-262,8	-298,9	-338,2	-383,0	-437,3	-509,0	-617,4	-823,5	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	104,7	108,5	112,6	116,9	121,5	126,5	131,7	137,3	143,2	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-15,0	-16,5	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,5	188,8	193,5	198,9	205,0	212,2	220,6	230,9	243,6	260,0	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	198,0	205,3	212,9	221,1	229,7	239,0	249,0	260,0	272,3	286,5	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	51,5	52,3	52,9	53,2	53,2	52,6	51,4	49,2	45,4	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,6	12,3	14,5	17,5	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,2	65,2	68,5	72,2	76,4	81,3	87,2	94,5	104,0	117,4	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	129,2	134,3	139,8	145,7	152,0	158,9	166,6	175,4	185,9	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,8	-2,1	-3,8	-6,0	-9,0	-13,5	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,4	5,0	4,5	3,9	3,2	2,3	1,2	-0,3	-2,5	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	13,9	15,9	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,1	13,6	14,2	14,9	15,6	16,5	17,6	18,9	20,8	23,3	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,9	29,5	32,2	35,1	38,2	41,5	45,0	48,8	52,8	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,8	103,7	107,8	112,1	116,8	121,7	127,0	132,5	138,4	144,7	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,9	-7,9	-4,7
Total	DM	-16,91	-14,92	-12,64	-10,09	-7,35	-4,51	-1,72	0,74	2,17	0,35	-19,10	—
	DMA	29,25	24,65	19,73	14,55	12,38	12,58	16,22	22,92	31,70	45,52	80,95	—
	PDMA	59,87	49,92	39,57	28,67	18,65	14,08	20,27	36,64	57,99	86,02	129,89	—
CPI	DM	-28,25	-26,18	-23,59	-20,58	-17,35	-14,15	-11,44	-9,98	-11,58	-21,82	-75,31	—
	DMA	52,06	43,33	33,79	23,36	20,03	21,97	30,45	41,38	55,76	80,13	152,76	—
	PDMA	77,65	62,08	46,46	30,24	16,50	16,91	31,97	52,38	74,45	99,96	140,82	—
SPI	DM	-8,59	-6,67	-4,61	-2,40	-0,02	2,57	5,41	8,60	12,26	16,61	22,12	—
	DMA	12,51	10,96	9,41	8,09	6,78	5,79	5,79	9,39	14,06	20,14	28,29	—
	PDMA	46,84	41,00	34,51	27,52	20,23	12,01	11,68	25,10	45,92	75,81	121,88	—
ΔCS	DM	-19,65	-19,52	-18,98	-18,18	-17,33	-16,72	-16,85	-18,58	-23,84	-38,42	-97,43	—
	DMA	39,55	32,37	24,38	15,27	13,25	16,27	24,67	32,00	41,70	59,99	124,47	—
	PDMA	30,81	21,08	11,96	2,72	-3,73	4,91	20,29	27,28	28,53	24,15	18,94	—

8.2. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS

204

Tabela 8.11: Constantes de acoplamento BHandH com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	420,6	441,1	462,4	484,4	507,2	530,8	555,3	580,6	606,9	634,2	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	24,8	22,9	20,9	18,7	16,3	13,7	11,0	8,0	4,9	1,6	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-69,9	-72,4	-75,1	-77,8	-80,7	-83,7	-86,9	-90,2	-93,7	-97,3	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,3	-4,4	-5,5	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,3	-13,9	-15,6	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,4	40,5	41,7	42,9	44,2	45,5	47,0	48,5	50,0	51,7	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,4	-6,5	-7,5	-8,7	-9,9	-11,1	-12,5	-13,9	-15,4	-17,0	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	135,5	144,3	153,5	163,0	172,9	183,1	193,7	204,6	215,9	227,4	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1814,4	-1797,1	-1773,1	-1743,5	-1709,0	-1670,4	-1628,3	-1583,4	-1536,2	-1487,3	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-187,4	-169,5	-151,2	-132,8	-114,0	-95,2	-76,1	-57,0	-37,8	-18,6	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-79,8	-61,1	-42,3	-23,3	-4,1	15,1	34,6	54,2	73,9	93,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-272,1	-308,2	-344,0	-380,5	-419,8	-465,0	-521,4	-600,0	-727,9	-1000,8	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	106,0	109,4	113,0	116,8	120,7	124,9	129,4	134,0	138,9	144,0	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-18,4	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	175,5	179,6	184,2	189,4	195,4	202,4	210,6	220,6	232,8	248,3	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	226,4	232,3	238,4	245,0	252,0	259,5	267,8	276,9	287,3	299,2	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,3	53,0	52,2	50,7	48,2	44,2	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,4	15,5	18,1	21,5	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	50,4	53,8	57,6	61,8	66,7	72,3	78,9	87,3	98,2	113,8	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	136,2	140,5	145,0	149,9	155,0	160,6	166,8	173,7	181,8	191,8	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,9	0,2	-0,4	-1,3	-2,4	-3,8	-5,6	-8,0	-11,4	-16,5	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,5	5,0	4,4	3,8	3,1	2,2	1,1	-0,1	-2,0	-4,7	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	14,1	15,2	16,8	19,3	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	16,3	16,7	17,3	17,9	18,7	19,6	20,8	22,4	24,5	27,6	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	18,7	21,3	24,0	26,9	30,0	33,3	36,7	40,4	44,3	48,4	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	106,1	109,7	113,4	117,3	121,5	125,8	130,4	135,2	140,2	145,4	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-4,7
Total	DM	-29,04	-26,40	-23,38	-20,05	-16,48	-12,86	-9,32	-6,28	-4,77	-8,31	-48,74	—
	DMA	34,53	29,43	26,08	22,41	19,57	19,73	24,00	30,75	39,93	55,48	110,36	—
	PDMA	59,82	48,15	36,94	24,93	14,17	12,21	27,30	46,76	70,77	102,43	158,62	—
CPI	DM	-59,35	-55,57	-51,01	-45,94	-40,53	-35,23	-30,48	-27,44	-28,56	-42,62	-145,56	—
	DMA	69,39	59,34	53,54	47,12	41,91	41,15	47,12	57,96	73,27	101,80	220,20	—
	PDMA	91,57	72,82	55,57	37,59	22,32	14,76	33,37	55,94	80,40	109,77	169,20	—
SPI	DM	-6,81	-5,01	-3,11	-1,06	1,15	3,55	6,21	9,23	12,69	16,85	22,27	—
	DMA	8,97	7,49	5,94	4,29	3,19	4,03	7,05	10,80	15,49	21,51	29,81	—
	PDMA	36,54	30,06	23,28	15,65	8,19	10,35	22,85	40,02	63,71	97,05	150,86	—
Δ CS	DM	-52,55	-50,56	-47,90	-44,88	-41,68	-38,77	-36,69	-36,66	-41,25	-59,47	-167,83	—
	DMA	60,42	51,84	47,60	42,83	38,72	37,13	40,07	47,16	57,79	80,29	190,39	—
	PDMA	55,03	42,76	32,29	21,95	14,13	4,41	10,52	15,92	16,68	12,72	18,34	—

Tabela 8.12: Constantes de acoplamento BMK com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,4	502,8	515,2	528,7	543,5	559,7	577,4	597,0	618,7	642,5	669,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,8	14,3	14,6	14,8	14,8	14,6	14,1	13,3	12,0	10,2	7,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-72,8	-73,4	-74,1	-74,9	-75,9	-77,0	-78,3	-79,8	-81,4	-83,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,8	0,6	-0,5	-1,8	-3,2	-4,7	-6,4	-8,1	-10,0	-12,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,5	36,6	36,7	36,8	37,1	37,4	37,7	38,2	38,7	39,3	40,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,6	-2,5	-3,5	-4,7	-5,9	-7,2	-8,7	-10,3	-12,0	-13,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,8	125,4	125,4	126,0	127,0	128,5	130,5	133,0	136,1	139,7	144,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1529,4	-1527,6	-1517,9	-1500,7	-1476,3	-1445,2	-1408,2	-1365,9	-1319,0	-1268,4	-1214,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-143,1	-131,7	-118,2	-102,8	-85,4	-66,1	-44,9	-21,9	2,7	29,1	56,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,1	-37,2	-21,4	-3,8	15,4	36,6	59,4	84,1	110,4	138,4	167,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-147,5	-173,9	-201,0	-228,4	-256,0	-284,4	-314,8	-349,2	-392,3	-454,2	-567,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	104,7	106,5	108,7	111,2	114,2	117,5	121,3	125,7	130,7	136,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,0	-4,0	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,9	-12,8	-14,9	-17,3	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	244,5	249,2	254,4	260,5	267,6	276,3	287,2	301,5	321,1	349,5	394,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	177,9	184,0	190,5	197,6	205,4	214,0	223,8	235,3	249,0	266,5	290,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	55,3	56,0	56,5	56,6	56,3	55,2	53,0	49,0	41,7	28,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,3	5,6	6,0	6,5	7,2	8,2	9,5	11,3	13,9	17,8	24,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	89,5	91,0	92,9	95,3	98,2	101,8	106,6	112,8	121,5	134,4	155,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	123,6	127,2	131,1	135,5	140,5	146,3	153,0	161,2	171,5	185,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,5	3,6	2,6	1,5	0,1	-1,4	-3,4	-6,0	-9,7	-15,1	-24,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,7	7,2	6,6	5,8	4,9	3,8	2,5	0,7	-1,4	-4,6	-9,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,3	9,4	9,6	9,8	10,2	10,7	11,5	12,8	14,9	18,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,3	11,8	12,3	12,9	13,5	14,3	15,3	16,6	18,4	21,1	25,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	31,0	32,1	33,3	34,8	36,5	38,5	40,7	43,3	46,4	49,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,4	103,3	105,6	108,2	111,1	114,4	118,2	122,5	127,3	132,8	139,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	0,0	-0,8	-1,5	-2,4	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,1	-9,7	-4,7
Total	DM	-6,22	-5,13	-3,49	-1,27	1,52	4,91	8,85	13,32	18,25	23,48	28,26	—
	DMA	29,54	26,76	24,11	21,00	17,46	16,53	19,25	24,38	31,50	43,11	59,29	—
	PDMA	72,17	63,22	53,13	41,90	29,32	27,90	29,36	42,43	64,07	97,09	144,20	—
CPI	DM	-10,43	-9,53	-7,53	-4,40	-0,20	5,02	11,04	17,66	24,38	30,21	32,14	—
	DMA	43,12	37,49	32,33	26,16	19,11	18,13	25,75	38,23	52,64	70,08	93,21	—
	PDMA	79,70	66,70	52,40	36,82	20,11	30,96	44,45	60,11	80,69	107,82	138,50	—
SPI	DM	-3,14	-1,90	-0,53	1,03	2,78	4,83	7,24	10,13	13,76	18,54	25,42	—
	DMA	19,58	18,89	18,09	17,21	16,25	15,35	14,49	14,23	16,00	23,33	34,42	—
	PDMA	66,65	60,67	53,66	45,63	36,08	25,66	18,29	29,47	51,88	89,22	148,39	—
ΔCS	DM	-7,29	-7,63	-7,00	-5,43	-2,98	0,18	3,80	7,54	10,62	11,67	6,72	—
	DMA	23,54	18,60	14,24	8,96	2,86	2,77	11,25	23,99	36,64	46,76	58,79	—
	PDMA	13,06	6,02	-1,26	-8,81	-15,98	5,30	26,16	30,64	28,81	18,60	-9,89	—

8.2. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS

Tabela 8.13: Constantes de acoplamento BP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	355,3	378,9	402,8	426,9	451,3	475,8	500,7	525,7	551,0	576,5	602,2	500
CO	$^1J_{CO}$	24,9	23,2	21,5	19,7	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-64,8	-67,3	-69,8	-72,4	-75,0	-77,6	-80,2	-82,9	-85,5	-88,3	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,5	-8,5	-9,6	-10,6	-11,7	-12,8	-13,9	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,0	40,7	41,5	42,2	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,9	144,9	152,8	160,7	168,4	176,0	183,5	190,8	198,1	205,1	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1802,5	-1777,4	-1747,9	-1714,7	-1678,5	-1639,9	-1599,5	-1557,7	-1514,9	-1471,4	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-177,9	-160,9	-144,0	-127,2	-110,6	-94,0	-77,7	-61,5	-45,5	-29,7	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-83,3	-64,6	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,3	60,6	77,8	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-290,1	-327,4	-365,0	-404,4	-447,8	-498,7	-562,6	-651,0	-790,4	-1064,3	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	117,5	118,9	120,4	121,9	123,4	124,9	126,5	128,1	129,7	131,4	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,5	-13,2	-13,9	-14,6	-15,3	-16,1	-16,8	-17,5	-18,1	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,3	189,9	193,0	196,5	200,6	205,4	211,1	218,0	226,4	236,9	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	247,4	249,7	252,1	254,7	257,5	260,6	264,1	268,1	272,8	278,4	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,1	51,9	50,3	48,1	45,2	41,3	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,4	18,2	20,5	23,3	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	59,5	62,2	65,2	68,5	72,4	76,9	82,4	89,4	98,7	112,2	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	149,7	151,8	154,0	156,3	158,8	161,6	164,7	168,5	173,2	179,6	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,3	-13,9	-19,1	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,6	3,9	3,1	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,2	-8,4	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,1	21,0	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,5	18,9	19,3	19,8	20,4	21,3	22,4	23,9	26,1	29,3	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,2	26,2	28,2	30,2	32,3	34,4	36,5	38,7	40,9	43,2	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	117,6	119,2	120,9	122,6	124,3	126,0	127,8	129,6	131,3	133,2	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,7
Total	DM	-28,10	-25,67	-23,05	-20,35	-17,63	-15,07	-12,83	-11,38	-11,69	-16,84	-45,89	—
	DMA	33,03	29,60	26,84	24,22	22,25	20,73	21,63	27,38	35,80	49,96	90,58	—
	PDMA	50,85	40,53	30,46	22,94	22,22	23,42	33,70	51,99	74,53	104,07	152,34	—
CPI	DM	-64,98	-60,45	-55,56	-50,54	-45,63	-41,22	-37,85	-36,62	-39,96	-55,53	-128,80	—
	DMA	72,02	64,61	58,62	52,63	46,88	41,76	41,28	51,29	66,76	94,38	182,13	—
	PDMA	89,78	72,91	56,58	42,32	30,26	19,53	25,40	44,36	65,33	90,28	134,69	—
SPI	DM	-1,06	-0,16	0,79	1,79	2,89	4,11	5,51	7,12	9,05	11,53	14,91	—
	DMA	4,43	3,93	3,54	3,39	4,19	5,30	7,23	9,84	13,10	17,39	23,45	—
	PDMA	22,31	16,78	11,30	8,73	16,32	26,27	39,78	57,59	81,27	114,19	165,29	—
Δ CS	DM	-63,92	-60,29	-56,36	-52,32	-48,52	-45,33	-43,35	-43,74	-49,01	-67,06	-143,71	—
	DMA	67,58	60,68	55,08	49,24	42,70	36,46	34,06	41,45	53,66	77,00	158,67	—
	PDMA	67,47	56,13	45,28	33,59	13,93	-6,74	-14,38	-13,23	-15,94	-23,91	-30,60	—

Tabela 8.14: Constantes de acoplamento BPW91 com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	353,3	377,4	401,9	426,6	451,5	476,7	502,2	527,9	553,8	579,9	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,2	23,6	21,8	20,0	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,5	-70,1	-72,7	-75,4	-78,1	-80,8	-83,5	-86,3	-89,1	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,2	-11,3	-12,5	-13,6	-14,8	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,7	47,5	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,7	-15,7	-16,7	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,6	153,9	162,0	170,1	178,0	185,8	193,4	200,9	208,3	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,6	-1784,5	-1754,1	-1720,0	-1683,1	-1643,8	-1602,7	-1560,3	-1516,9	-1472,9	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,0	-160,8	-143,8	-126,8	-110,0	-93,3	-76,8	-60,4	-44,3	-28,3	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,5	-45,8	-27,4	-9,1	8,9	26,7	44,5	62,0	79,4	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,7	-329,9	-368,6	-409,2	-454,4	-507,7	-575,7	-671,4	-827,4	-1153,6	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	121,9	123,5	125,1	126,7	128,4	130,0	131,7	133,4	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,7	193,9	197,7	202,2	207,5	213,8	221,6	231,2	243,3	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	253,6	256,2	259,1	262,1	265,6	269,5	274,1	279,5	286,1	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,1	46,5	42,8	37,9	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	22,8	26,3	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,7	65,9	69,5	73,7	78,7	84,9	93,0	104,3	121,5	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	154,1	156,4	158,9	161,6	164,7	168,3	172,6	178,2	186,4	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,4	-16,8	-23,7	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,3	2,5	1,5	0,4	-0,8	-2,4	-4,5	-7,4	-11,7	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,3	14,0	14,8	16,0	17,7	20,1	24,0	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,7	25,6	28,4	32,8	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,5	28,5	30,6	32,7	34,8	37,0	39,2	41,5	43,8	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	120,9	122,6	124,4	126,2	128,0	129,8	131,7	133,5	135,4	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-28,18	-25,69	-23,01	-20,22	-17,46	-14,85	-12,64	-11,28	-11,99	-18,81	-65,03	—
	DMA	33,18	29,88	27,15	24,92	23,10	21,89	23,41	29,92	39,35	56,13	115,74	—
	PDMA	48,78	38,13	28,57	26,47	26,80	29,03	41,67	62,51	88,36	124,48	191,82	—
CPI	DM	-66,07	-61,44	-56,46	-51,35	-46,45	-42,09	-38,94	-38,21	-42,92	-63,08	-178,33	—
	DMA	72,67	65,42	59,39	53,45	47,70	42,62	42,99	54,25	71,30	103,77	233,56	—
	PDMA	88,82	71,78	56,13	43,46	31,54	20,46	27,96	47,80	69,47	96,38	155,08	—
SPI	DM	-0,39	0,52	1,52	2,62	3,80	5,13	6,65	8,46	10,69	13,65	18,05	—
	DMA	4,21	3,83	3,51	4,01	5,07	6,69	9,05	12,07	15,93	21,20	29,34	—
	PDMA	19,42	13,46	8,36	14,02	23,33	35,32	51,73	73,30	102,22	145,09	218,77	—
ΔCS	DM	-65,69	-61,96	-57,98	-53,97	-50,25	-47,22	-45,58	-46,67	-53,60	-76,74	-196,37	—
	DMA	68,46	61,59	55,88	49,44	42,63	35,92	33,94	42,17	55,37	82,57	204,22	—
	PDMA	69,41	58,32	47,77	29,44	8,21	-14,86	-23,77	-25,51	-32,75	-48,71	-63,69	—

Tabela 8.15: Constantes de acoplamento M05 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	847,0	840,1	833,5	827,3	821,4	815,9	810,8	805,8	801,1	796,4	791,7	500
CO	$^1J_{CO}$	15,8	13,7	11,3	8,5	5,3	1,7	-2,1	-6,2	-10,7	-15,5	-20,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-108,9	-108,7	-108,5	-108,3	-108,2	-108,0	-108,0	-108,0	-108,0	-108,1	-108,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-18,6	-18,7	-18,7	-18,6	-18,3	-17,9	-17,4	-16,7	-15,9	-15,0	-13,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,1	42,3	43,4	44,5	45,6	46,7	47,8	48,8	49,8	50,8	51,7	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-13,5	-14,4	-15,2	-15,9	-16,4	-16,7	-16,9	-16,8	-16,5	-15,9	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	168,5	166,8	168,2	173,0	180,3	188,9	198,1	207,2	215,9	224,1	231,8	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1357,6	-1376,0	-1386,5	-1388,9	-1383,6	-1372,0	-1355,3	-1334,8	-1311,8	-1287,0	-1261,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	2,2	8,2	14,9	22,3	30,5	39,5	49,5	60,5	72,8	86,3	101,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	102,9	111,1	119,8	129,1	139,0	149,8	161,4	174,1	187,8	202,7	218,9	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-218,9	-253,7	-282,8	-307,6	-330,0	-351,6	-374,7	-402,2	-439,1	-494,9	-592,4	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	80,9	87,2	93,5	99,8	106,1	112,4	118,7	125,0	131,1	137,1	142,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-20,8	-21,1	-21,2	-21,2	-21,0	-20,8	-20,4	-19,8	-19,2	-18,5	-17,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	182,9	192,0	201,6	211,8	222,6	234,0	246,1	258,8	272,4	286,7	302,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	223,0	232,1	240,9	249,5	257,6	265,4	272,7	279,3	285,2	290,2	294,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	35,8	36,1	36,4	36,6	36,7	36,7	36,8	36,7	36,4	35,9	34,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	19,6	20,1	20,4	20,6	20,7	20,7	20,6	20,4	20,2	20,1	20,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	57,9	64,1	70,7	77,9	85,7	94,1	103,3	113,2	123,9	135,6	148,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	119,8	127,7	135,5	143,2	150,8	158,4	165,8	173,1	180,1	187,0	193,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-11,4	-12,2	-13,1	-14,1	-15,1	-16,2	-17,3	-18,4	-19,6	-20,9	-22,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	-16,0	-15,7	-15,1	-14,4	-13,6	-12,6	-11,4	-10,1	-8,8	-7,5	-6,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	14,5	15,2	15,8	16,3	16,7	17,0	17,2	17,3	17,3	17,3	17,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	15,6	17,0	18,2	19,4	20,5	21,4	22,2	22,9	23,4	23,9	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	15,2	18,5	21,9	25,6	29,4	33,3	37,5	41,9	46,4	51,2	56,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	80,1	86,6	93,0	99,5	106,0	112,6	119,1	125,6	132,0	138,4	144,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,7
Total	DM	15,73	15,75	16,49	17,93	19,94	22,38	25,12	27,92	30,55	32,61	33,20	—
	DMA	38,73	35,93	33,83	33,28	34,87	36,94	40,62	44,83	50,53	57,17	65,62	—
	PDMA	102,34	104,33	106,37	109,46	114,16	118,96	124,72	130,85	138,18	146,39	156,29	—
CPI	DM	56,28	51,80	48,95	47,68	47,70	48,67	50,21	51,89	53,14	53,00	49,37	—
	DMA	68,37	64,51	61,75	61,50	64,86	68,93	75,30	82,58	91,15	101,78	116,48	—
	PDMA	94,70	100,97	107,67	115,59	124,82	134,60	145,78	157,49	170,14	183,98	199,76	—
SPI	DM	-14,01	-10,68	-7,32	-3,89	-0,41	3,11	6,71	10,35	13,98	17,66	21,34	—
	DMA	17,00	14,97	13,36	12,58	12,88	13,48	15,19	17,15	20,74	24,46	28,31	—
	PDMA	107,95	106,80	105,42	104,96	106,35	107,49	109,29	111,31	114,74	118,81	124,41	—
Δ CS	DM	70,30	62,48	56,27	51,57	48,11	45,57	43,50	41,54	39,16	35,34	28,03	—
	DMA	51,37	49,54	48,39	48,92	51,98	55,45	60,11	65,44	70,41	77,32	88,17	—
	PDMA	-13,26	-5,83	2,25	10,63	18,46	27,11	36,49	46,18	55,40	65,17	75,35	—

Tabela 8.16: Constantes de acoplamento M06 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	591,8	620,1	652,6	690,1	733,4	782,9	838,6	900,5	967,8	1039,5	1113,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	17,6	17,9	17,8	17,0	15,4	13,0	9,5	5,0	-0,8	-7,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-86,0	-90,6	-96,1	-102,7	-110,6	-120,0	-131,2	-144,5	-160,2	-178,9	-201,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-9,1	-13,3	-18,4	-24,8	-32,8	-42,7	-54,9	-70,2	-89,3	-113,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,2	46,1	49,6	53,7	58,6	64,4	71,6	80,3	91,1	104,7	122,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-10,7	-14,6	-19,7	-26,3	-35,0	-46,5	-62,0	-83,1	-112,3	-153,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	199,3	214,4	232,5	254,5	281,6	315,1	357,5	411,8	483,2	577,7	701,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1437,2	-1476,6	-1508,9	-1533,6	-1552,2	-1567,1	-1579,5	-1588,2	-1591,0	-1586,1	-1573,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-67,3	-57,9	-46,0	-31,5	-14,7	3,7	22,9	41,7	58,7	71,6	75,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	27,0	39,1	53,4	70,2	89,7	111,5	135,2	160,1	185,6	211,4	237,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-161,1	-211,1	-265,9	-328,2	-406,1	-530,0	-975,7	4267,8	-15,5	-222,3	-320,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,3	114,7	128,4	144,8	164,8	189,3	219,9	258,9	309,9	379,0	477,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-16,6	-21,5	-27,9	-36,3	-47,3	-62,2	-82,8	-112,3	-156,2	-225,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	161,7	170,7	182,5	199,5	227,4	285,4	502,3	-632,7	-14,0	128,2	5815,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,8	237,3	271,3	313,1	367,7	450,4	661,2	-166,8	360,7	495,3	-161,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,7	51,3	51,6	49,0	39,6	9,0	-141,1	758,3	315,4	282,8	1065,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,6	9,7	13,2	19,3	31,2	60,3	184,0	-514,8	-158,3	-117,3	-2,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,1	54,6	59,6	67,7	83,1	126,0	1247,1	-64,0	-10,1	6,5	13,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,3	146,9	166,9	191,8	225,2	282,2	1104,7	218,8	304,5	376,2	458,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,7	-0,9	-3,5	-8,1	-17,7	-46,3	-834,9	91,9	56,9	48,8	48,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-5,9	-9,6	-15,6	-26,7	-56,4	-792,0	61,8	21,0	1,6	-16,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,0	12,5	14,7	18,6	26,8	52,5	782,6	-78,9	-49,1	-45,4	-50,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,1	14,6	18,1	23,5	33,7	62,4	821,1	-67,9	-32,7	-23,3	-21,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,1	22,9	26,4	30,8	36,4	43,5	52,9	65,7	83,6	110,1	152,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	113,2	127,4	144,5	165,3	190,7	222,4	262,9	316,0	388,7	493,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,6	-4,2	-6,2	-8,8	-12,3	-17,2	-24,3	-34,8	-51,6	-80,4	-4,7
Total	DM	4,17	6,10	9,13	13,54	19,70	28,94	106,50	163,97	53,20	68,98	307,77	—
	DMA	17,75	16,56	19,37	29,62	47,70	77,65	323,45	353,43	134,27	143,62	417,97	—
	PDMA	33,84	35,89	50,78	88,16	155,56	312,10	3389,72	808,08	467,07	468,20	738,57	—
CPI	DM	24,76	21,85	20,03	19,21	18,61	15,20	-16,15	471,02	93,68	88,57	94,52	—
	DMA	25,85	30,67	37,19	49,05	69,79	96,55	154,85	528,84	162,30	169,54	194,15	—
	PDMA	20,42	29,35	49,75	75,95	109,84	152,10	212,49	386,48	324,21	400,40	501,27	—
SPI	DM	-10,93	-5,45	1,15	9,38	20,51	39,02	196,45	-61,20	23,51	54,62	464,15	—
	DMA	11,81	6,21	6,31	15,38	31,49	63,79	447,10	224,80	113,71	124,62	582,11	—
	PDMA	43,69	40,68	51,53	97,11	189,08	429,43	5719,69	1117,26	571,83	517,92	912,58	—
ΔCS	DM	35,69	27,30	18,88	9,83	-1,90	-23,82	-212,60	532,22	70,18	33,95	-369,63	—
	DMA	14,05	24,47	30,88	33,67	38,30	32,75	-292,25	304,04	48,59	44,92	-387,95	—
	PDMA	-23,28	-11,33	-1,78	-21,17	-79,24	-277,33	-5507,20	-730,78	-247,62	-117,52	-411,32	—

Tabela 8.17: Constantes de acoplamento M062X com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	445,9	449,4	453,4	459,1	467,4	479,5	496,4	519,2	548,9	586,4	632,6	500
CO	$^1J_{CO}$	3,7	4,7	5,7	6,6	7,2	7,4	7,1	6,0	3,7	-0,2	-6,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-73,4	-75,6	-78,2	-81,3	-85,0	-89,5	-95,0	-101,7	-109,8	-119,5	-131,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	4,2	3,0	1,5	-0,3	-2,7	-5,7	-9,5	-14,4	-20,5	-28,2	-38,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,2	40,2	42,4	45,0	48,0	51,6	55,9	60,9	66,9	74,2	83,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	0,2	-0,7	-2,1	-4,0	-6,4	-9,5	-13,6	-18,9	-25,9	-35,2	-47,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	133,0	134,2	137,3	142,7	150,6	161,6	176,1	195,1	219,2	250,0	289,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1442,3	-1488,8	-1533,3	-1573,0	-1603,7	-1622,0	-1627,6	-1623,0	-1612,8	-1602,7	-1596,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-166,8	-163,3	-156,4	-146,7	-135,1	-122,1	-107,7	-92,3	-75,9	-58,8	-41,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-89,3	-80,2	-68,9	-56,0	-41,7	-26,4	-10,0	7,5	26,7	47,8	70,9	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-156,6	-199,7	-246,2	-295,8	-348,4	-404,9	-468,8	-550,1	-685,1	-1305,2	-2162,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	86,4	93,7	102,1	112,1	123,7	137,5	153,9	173,6	197,4	226,6	262,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-0,2	-1,3	-2,8	-4,8	-7,3	-10,5	-14,7	-20,1	-27,3	-36,8	-49,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	167,7	174,7	182,9	192,6	204,6	220,1	241,5	273,9	331,7	472,8	1542,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	142,4	159,4	178,9	201,1	226,7	256,7	292,4	336,8	397,0	500,5	1037,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	46,7	49,1	51,6	53,9	55,8	56,9	56,2	51,7	36,8	-14,6	-491,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	4,3	4,8	5,3	6,0	7,0	8,5	10,9	15,4	24,8	51,4	274,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,5	63,3	67,0	71,7	78,0	86,7	99,5	120,7	162,3	284,8	14163,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	99,2	109,3	120,9	134,4	150,2	169,0	192,0	221,3	263,2	345,6	6656,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	6,3	5,6	4,7	3,5	1,7	-1,0	-5,4	-13,2	-30,1	-83,1	-6358,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	7,0	7,0	6,8	6,4	5,7	4,4	2,2	-1,8	-10,4	-37,0	-3080,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,1	9,5	9,9	10,5	11,2	12,3	14,1	17,4	24,8	49,5	3090,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	9,4	10,7	12,0	13,6	15,4	17,7	20,8	25,9	35,5	63,8	3278,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	27,4	29,9	33,0	36,6	41,1	46,4	53,0	61,2	71,5	84,8	102,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	84,0	91,7	100,8	111,4	123,8	138,4	155,8	176,6	201,7	232,6	271,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	2,2	1,5	0,7	-0,2	-1,5	-3,0	-5,0	-7,5	-10,8	-15,3	-21,7	-4,7
Total	DM	-15,22	-15,88	-16,00	-15,38	-13,80	-10,96	-6,71	-0,95	6,10	3,43	687,78	—
	DMA	30,98	27,80	24,39	20,63	20,00	22,33	28,29	39,11	60,14	117,91	1625,87	—
	PDMA	90,99	82,14	71,50	59,66	46,84	32,90	33,80	67,29	141,88	348,16	18293,03	—
CPI	DM	-13,10	-19,79	-25,97	-31,33	-35,52	-38,26	-39,78	-41,15	-45,95	-93,85	-162,64	—
	DMA	44,35	42,43	39,15	34,60	37,70	39,99	41,98	49,00	68,28	136,86	230,22	—
	PDMA	112,79	102,20	88,76	73,50	60,02	44,89	40,48	44,20	70,11	128,81	204,29	—
SPI	DM	-16,78	-13,01	-8,69	-3,69	2,13	9,07	17,54	28,52	44,27	74,77	1311,41	—
	DMA	21,17	17,07	13,57	10,39	7,03	9,39	18,25	31,85	54,17	104,01	2649,35	—
	PDMA	75,00	67,42	58,85	49,52	37,18	24,10	28,90	84,22	194,50	509,01	31558,11	—
Δ CS	DM	3,68	-6,78	-17,29	-27,64	-37,65	-47,33	-57,32	-69,67	-90,22	-168,61	-1474,05	—
	DMA	23,19	25,36	25,59	24,21	30,67	30,60	23,74	17,15	14,11	32,86	-2419,13	—
	PDMA	37,80	34,78	29,90	23,98	22,84	20,79	11,58	-40,03	-124,40	-380,20	-31353,82	—

Tabela 8.18: Constantes de acoplamento OLYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	363,4	391,6	420,1	449,1	478,5	508,2	538,4	568,9	599,7	630,9	662,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,0	21,8	19,5	17,1	14,6	12,0	9,4	6,6	3,8	0,9	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-69,4	-72,7	-76,1	-79,5	-83,0	-86,5	-90,1	-93,7	-97,3	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,5	42,7	44,0	45,3	46,6	47,9	49,3	50,6	52,0	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,7	-16,7	-17,7	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,8	167,5	176,1	184,5	192,8	201,0	209,0	216,8	224,5	231,9	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1702,2	-1685,7	-1665,4	-1642,0	-1616,2	-1588,5	-1559,4	-1529,4	-1498,8	-1467,9	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-181,4	-160,8	-140,7	-121,1	-102,0	-83,5	-65,6	-48,2	-31,4	-15,1	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-90,5	-67,4	-45,0	-23,1	-1,8	18,8	38,9	58,4	77,4	95,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-254,6	-290,9	-327,9	-367,1	-410,6	-461,8	-526,5	-616,5	-760,6	-1056,6	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,2	121,1	124,1	127,1	130,2	133,3	136,4	139,6	142,9	146,1	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,4	192,0	197,1	202,6	208,8	215,7	223,5	232,3	242,5	254,4	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,4	258,1	263,0	268,0	273,2	278,7	284,6	290,9	297,7	305,1	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,0	52,8	52,4	51,7	50,7	49,3	47,6	45,2	42,1	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,2	12,9	13,7	14,7	15,9	17,3	18,9	20,9	23,2	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,8	64,6	68,7	73,2	78,2	83,9	90,5	98,4	108,1	120,9	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,7	156,5	160,4	164,4	168,6	173,1	177,9	183,2	189,3	196,5	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-3,1	-4,3	-5,6	-7,2	-9,2	-11,6	-14,8	-19,1	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,8	2,2	1,5	0,8	0,0	-1,1	-2,3	-3,9	-6,1	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,6	13,1	13,6	14,2	14,9	15,8	17,0	18,5	20,6	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,8	20,3	21,0	21,7	22,6	23,6	25,0	26,8	29,3	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,9	30,4	33,0	35,6	38,4	41,1	43,9	46,8	49,7	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,4	121,5	124,6	127,8	131,0	134,2	137,5	140,8	144,1	147,5	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-21,99	-18,95	-15,80	-12,59	-9,44	-6,49	-3,96	-2,28	-2,56	-8,48	-48,74	—
	DMA	29,34	23,77	20,66	18,92	18,17	19,40	25,67	33,10	42,85	58,80	110,36	—
	PDMA	45,94	35,45	28,59	26,03	26,01	30,63	47,52	65,93	87,40	114,22	158,62	—
CPI	DM	-51,48	-46,49	-41,35	-36,17	-31,26	-27,01	-23,93	-23,17	-27,39	-45,47	-145,56	—
	DMA	63,75	51,16	43,35	37,15	32,57	32,12	43,13	56,30	74,26	105,93	220,20	—
	PDMA	88,13	69,78	53,74	38,43	26,58	22,30	43,33	64,85	87,83	114,95	169,20	—
SPI	DM	-0,37	1,25	2,94	4,70	6,56	8,56	10,68	13,03	15,65	18,65	22,27	—
	DMA	4,10	3,68	4,02	5,54	7,60	10,07	12,87	16,09	19,81	24,25	29,81	—
	PDMA	15,00	10,27	10,16	16,94	25,59	36,74	50,59	66,72	87,07	113,69	150,86	—
ΔCS	DM	-51,12	-47,74	-44,29	-40,87	-37,82	-35,57	-34,61	-36,21	-43,04	-64,12	-167,83	—
	DMA	59,65	47,48	39,33	31,61	24,97	22,05	30,26	40,21	54,45	81,68	190,39	—
	PDMA	73,13	59,51	43,58	21,48	1,00	-14,44	-7,26	-1,87	0,76	1,26	18,34	—

Tabela 8.19: Constantes de acoplamento PBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	376	397,8	419,7	441,9	464,3	486,9	509,8	532,8	556,1	579,6	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	24,1	22,5	20,8	19,1	17,3	15,4	13,5	11,5	9,5	7,4	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,2	-69,5	-71,8	-74,2	-76,6	-79	-81,4	-83,9	-86,4	-88,9	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-10	-11,1	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,1	45,8	46,6	47,4	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	133,7	142,1	150,4	158,7	166,9	175,1	183,1	191,1	198,9	206,7	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1801	-1776,9	-1748,1	-1715,3	-1679,4	-1640,8	-1600,3	-1558,1	-1514,9	-1470,9	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-172,8	-155,9	-139,2	-122,7	-106,5	-90,4	-74,6	-59	-43,7	-28,6	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-75,8	-57,5	-39,4	-21,7	-4,2	12,9	29,9	46,6	63	79,2	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-278	-316,3	-354,9	-395,6	-440,5	-493,5	-560,8	-655,5	-809,2	-1129,5	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	119,3	120,7	122,1	123,5	125	126,5	128	129,6	131,2	132,8	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	188,7	191,5	194,6	198,3	202,6	207,6	213,7	221	230,2	241,9	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	249,8	252,2	254,8	257,6	260,7	264,1	268	272,5	277,9	284,6	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,1	54,1	53,7	53,2	52,2	50,9	49	46,5	42,9	38,1	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,4	11,1	11,9	12,9	14,1	15,6	17,4	19,6	22,5	26,1	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	61,3	64	67	70,4	74,4	79,1	85	92,8	103,6	120,3	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	151,8	153,9	156,1	158,5	161,1	164	167,5	171,6	177,1	185,2	199	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,1	-12,2	-16,5	-23,4	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,5	3,7	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,1	-7	-11,4	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,7	12,1	12,5	13	13,6	14,5	15,7	17,3	19,7	23,7	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,7	19	19,5	20,1	20,9	21,9	23,3	25,2	28	32,5	41	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,7	27,6	29,4	31,3	33,3	35,2	37,2	39,3	41,3	43,4	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	119,5	121,1	122,7	124,3	126	127,7	129,4	131,2	133	134,8	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-26,05	-23,77	-21,32	-18,75	-16,19	-13,77	-11,72	-10,54	-11,36	-18,15	-62,67	—
	DMA	31,85	27,68	25,11	23,12	21,47	20,50	23,18	29,22	38,35	54,68	112,44	—
	PDMA	46,79	35,93	26,02	23,07	23,41	26,51	41,16	61,13	86,55	122,43	190,22	—
CPI	DM	-61,24	-57,05	-52,50	-47,84	-43,31	-39,32	-36,47	-36,04	-40,91	-60,89	-172,10	—
	DMA	69,87	60,63	55,01	49,49	44,20	39,70	42,91	53,18	69,62	101,13	226,41	—
	PDMA	83,81	66,37	50,34	37,51	26,29	16,91	29,77	48,48	69,25	95,09	151,26	—
SPI	DM	-0,25	0,63	1,55	2,57	3,70	4,96	6,43	8,16	10,31	13,20	17,57	—
	DMA	3,96	3,51	3,19	3,79	4,79	6,43	8,72	11,64	15,41	20,63	28,87	—
	PDMA	19,65	13,60	8,19	12,49	21,30	33,55	49,51	70,42	99,24	142,49	218,79	—
ΔCS	DM	-60,98	-57,68	-54,05	-50,41	-47,01	-44,28	-42,90	-44,20	-51,22	-74,09	-189,67	—
	DMA	65,91	57,11	51,82	45,70	39,41	33,27	34,19	41,54	54,20	80,50	197,54	—
	PDMA	64,16	52,77	42,15	25,03	4,99	-16,64	-19,74	-21,94	-29,99	-47,40	-67,53	—

Tabela 8.20: Constantes de acoplamento PW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,2	387,4	410,8	434,5	458,3	482,4	506,7	531,2	556,0	581,0	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,6	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,2	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,7	-71,2	-73,7	-76,2	-78,7	-81,3	-83,9	-86,5	-89,2	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,4	-13,5	-14,7	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,7	44,5	45,2	46,0	46,8	47,6	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,7	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,6	145,9	154,0	162,1	170,0	177,9	185,7	193,3	200,8	208,2	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1815,2	-1790,1	-1760,3	-1726,4	-1689,3	-1649,5	-1607,6	-1564,2	-1519,7	-1474,3	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,6	-160,4	-143,4	-126,4	-109,6	-93,0	-76,5	-60,2	-44,1	-28,2	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,8	-25,6	-7,6	10,2	27,8	45,3	62,5	79,6	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,5	-328,8	-367,5	-408,1	-453,0	-506,0	-573,5	-668,7	-823,8	-1148,9	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	121,5	122,9	124,3	125,8	127,3	128,8	130,4	131,9	133,5	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,2	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,7	198,5	202,8	208,0	214,2	221,8	231,3	243,3	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,5	254,8	257,3	259,9	262,8	266,1	269,8	274,3	279,6	286,1	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,2	46,6	43,0	38,0	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,0	13,0	14,2	15,7	17,5	19,7	22,5	26,1	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,3	66,4	69,9	74,0	78,9	85,0	92,9	104,1	121,2	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,0	155,1	157,3	159,6	162,2	165,1	168,5	172,7	178,2	186,2	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,1	-12,1	-16,5	-23,5	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,1	13,8	14,7	15,8	17,4	19,8	23,8	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,5	25,4	28,1	32,6	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,0	29,0	31,0	33,1	35,1	37,3	39,4	41,6	43,8	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	121,9	123,5	125,1	126,8	128,5	130,2	132,0	133,7	135,5	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-27,51	-25,13	-22,57	-19,88	-17,19	-14,62	-12,45	-11,12	-11,84	-18,64	-65,03	—
	DMA	32,72	29,40	26,80	24,62	22,93	21,82	23,78	30,12	39,39	56,00	115,74	—
	PDMA	48,56	37,80	28,07	24,53	25,00	27,68	40,94	61,33	87,16	123,40	191,82	—
CPI	DM	-65,15	-60,72	-55,93	-50,97	-46,15	-41,83	-38,68	-37,95	-42,60	-62,65	-178,33	—
	DMA	71,77	64,52	58,65	52,81	47,18	42,30	43,85	54,79	71,51	103,60	233,56	—
	PDMA	87,39	70,40	54,43	41,35	29,65	19,37	28,66	48,28	69,67	96,27	155,08	—
SPI	DM	0,10	0,96	1,90	2,91	4,05	5,33	6,79	8,55	10,72	13,63	18,05	—
	DMA	4,07	3,64	3,45	3,95	5,14	6,80	9,07	12,03	15,84	21,10	29,34	—
	PDMA	20,09	13,89	8,73	12,20	21,60	33,78	49,95	70,90	99,98	143,30	218,77	—
ΔCS	DM	-65,25	-61,68	-57,83	-53,89	-50,19	-47,16	-45,48	-46,51	-53,32	-76,29	-196,37	—
	DMA	67,70	60,88	55,21	48,86	42,04	35,50	34,77	42,76	55,67	82,50	204,22	—
	PDMA	67,30	56,51	45,70	29,14	8,05	-14,40	-21,29	-22,63	-30,30	-47,04	-63,69	—

Tabela 8.21: Constantes de acoplamento TPSSh com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	366,0	390,6	415,1	439,7	464,2	488,7	513,1	537,4	561,6	585,8	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	21,7	20,3	18,8	17,3	15,7	14,0	12,3	10,5	8,7	6,8	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,2	-72,5	-74,9	-77,3	-79,6	-82,0	-84,3	-86,6	-88,9	-91,1	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,0	-5,3	-6,6	-7,8	-9,1	-10,3	-11,5	-12,7	-13,9	-15,1	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,3	45,8	46,4	46,9	47,3	47,8	48,3	48,8	49,2	49,7	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,9	-8,1	-9,3	-10,4	-11,6	-12,7	-13,8	-14,9	-15,9	-17,0	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	195,7	200,5	205,0	209,3	213,4	217,2	220,8	224,1	227,2	230,0	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1757,5	-1731,7	-1703,3	-1673,0	-1641,1	-1608,0	-1574,1	-1539,7	-1504,9	-1470,0	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-156,7	-142,5	-128,4	-114,3	-100,2	-86,1	-72,1	-58,1	-44,2	-30,3	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-63,8	-47,2	-30,7	-14,3	1,8	17,8	33,8	49,6	65,2	80,8	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-282,7	-320,1	-359,5	-402,5	-451,3	-510,0	-585,2	-690,4	-857,9	-1192,7	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	138,0	138,8	139,6	140,4	141,1	141,9	142,6	143,2	143,8	144,4	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,2	-11,3	-12,4	-13,4	-14,5	-15,5	-16,5	-17,4	-18,4	-19,3	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,5	190,8	194,6	198,9	203,9	209,8	216,7	225,0	234,9	247,0	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	280,6	282,3	284,1	286,1	288,3	290,8	293,7	297,1	301,3	306,4	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	58,3	57,7	56,9	55,8	54,3	52,4	50,0	46,9	43,0	38,0	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	12,0	12,6	13,5	14,5	15,7	17,3	19,1	21,4	24,1	27,5	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	68,8	71,5	74,5	78,0	82,1	87,0	93,1	100,9	111,6	127,4	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	172,7	174,3	176,1	178,0	180,1	182,5	185,3	188,9	193,6	200,5	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,6	-1,7	-3,0	-4,5	-6,2	-8,3	-10,9	-14,3	-18,9	-25,6	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	9,4	8,2	6,8	5,4	3,8	2,0	0,0	-2,5	-5,8	-10,3	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,0	12,5	13,0	13,7	14,5	15,5	16,9	18,6	21,1	24,9	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	22,1	22,5	22,9	23,5	24,2	25,2	26,6	28,4	31,1	35,2	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,9	34,4	35,8	37,2	38,7	40,1	41,5	42,9	44,2	45,6	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	137,9	138,9	140,0	141,0	141,9	142,9	143,8	144,7	145,5	146,3	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-4,7
Total	DM	-16,92	-14,90	-12,86	-10,83	-8,96	-7,34	-6,24	-6,16	-8,28	-16,47	-57,72	—
	DMA	29,51	26,71	25,40	24,44	23,91	24,23	28,44	35,26	44,86	61,59	113,73	—
	PDMA	51,70	41,22	32,92	29,32	28,23	30,82	48,29	69,59	95,67	130,80	191,26	—
CPI	DM	-50,36	-46,46	-42,57	-38,85	-35,58	-33,14	-32,15	-33,90	-41,34	-64,00	-166,33	—
	DMA	59,09	51,88	47,75	44,01	40,98	39,65	46,85	59,14	76,97	110,00	223,67	—
	PDMA	72,03	56,46	41,98	30,62	22,83	19,94	36,81	55,37	75,56	100,96	152,58	—
SPI	DM	7,60	8,24	8,93	9,71	10,56	11,57	12,76	14,18	15,97	18,39	21,93	—
	DMA	7,81	8,25	9,01	10,09	11,39	12,92	14,93	17,75	21,31	26,09	33,11	—
	PDMA	36,79	30,05	26,27	28,37	32,19	38,80	56,71	80,01	110,42	152,68	219,63	—
Δ CS	DM	-57,96	-54,70	-51,51	-48,55	-46,14	-44,71	-44,91	-48,08	-57,30	-82,39	-188,25	—
	DMA	51,28	43,63	38,74	33,92	29,60	26,73	31,92	41,38	55,66	83,91	190,56	—
	PDMA	35,25	26,41	15,71	2,25	-9,36	-18,86	-19,90	-24,64	-34,87	-51,73	-67,05	—

Tabela 8.22: Constantes de acoplamento X3LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	397,3	422,2	447,3	472,6	498,2	524,1	550,1	576,4	602,9	629,7	656,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,5	19,7	17,7	15,6	13,4	11,1	8,8	6,3	3,8	1,2	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-75,0	-77,6	-80,4	-83,1	-85,8	-88,6	-91,5	-94,3	-97,2	-100,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	45,3	46,1	46,9	47,8	48,6	49,4	50,3	51,2	52,0	52,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,3	-17,3	-18,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,3	166,8	175,2	183,5	191,6	199,6	207,5	215,2	222,7	230,0	237,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,7	-1787,4	-1757,6	-1724,0	-1687,4	-1648,2	-1607,1	-1564,6	-1521,0	-1476,7	-1432,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-168,0	-150,4	-132,9	-115,6	-98,4	-81,4	-64,6	-47,9	-31,5	-15,3	0,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-69,5	-50,4	-31,4	-12,7	5,7	24,0	42,1	60,0	77,8	95,3	112,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,3	-317,2	-354,2	-392,9	-435,5	-485,2	-547,9	-635,3	-775,4	-1061,6	-2173,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,8	133,3	134,9	136,5	138,1	139,7	141,4	143,0	144,7	146,4	148,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,7	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,6	202,6	206,0	210,0	214,5	219,9	226,1	233,6	242,6	253,6	267,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	272,4	274,9	277,4	280,1	283,0	286,2	289,8	293,8	298,5	304,0	310,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,0	56,9	56,6	56,1	55,2	54,0	52,3	50,1	47,2	43,4	38,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,7	19,8	22,4	25,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,9	69,8	73,1	76,7	80,8	85,6	91,3	98,4	107,5	119,9	138,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,3	168,5	170,8	173,3	175,9	178,8	182,0	185,7	190,2	196,0	204,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,6	-1,6	-2,8	-4,1	-5,7	-7,7	-10,2	-13,5	-18,1	-25,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,4	4,6	3,7	2,7	1,7	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,1	13,5	13,9	14,6	15,4	16,4	17,9	20,0	23,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,2	20,5	21,0	21,5	22,3	23,2	24,5	26,2	28,7	32,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,4	31,5	33,7	35,9	38,1	40,4	42,7	45,1	47,5	49,9	52,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	133,1	134,8	136,6	138,4	140,3	142,1	144,0	145,9	147,8	149,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-4,7
Total	DM	-21,18	-18,60	-15,84	-12,97	-10,11	-7,33	-4,95	-3,34	-3,56	-9,15	-46,10	—
	DMA	31,02	27,37	25,25	23,40	22,34	24,76	29,72	35,77	44,28	58,83	106,59	—
	PDMA	47,32	37,13	28,16	22,18	20,18	27,05	43,16	61,03	82,52	110,01	155,13	—
CPI	DM	-57,80	-53,00	-47,83	-42,52	-37,32	-32,56	-28,86	-27,32	-30,50	-46,95	-138,48	—
	DMA	64,53	55,11	49,03	43,12	38,66	42,00	50,95	62,05	77,79	106,72	212,34	—
	PDMA	74,09	56,15	41,09	29,78	21,28	26,06	45,54	65,77	87,57	113,54	164,80	—
SPI	DM	5,67	6,63	7,62	8,71	9,85	11,17	12,59	14,24	16,19	18,57	21,64	—
	DMA	6,45	7,03	7,81	8,95	10,37	12,11	14,15	16,51	19,70	23,71	29,04	—
	PDMA	27,68	23,18	18,67	16,61	19,37	27,78	41,41	57,56	78,82	107,43	148,03	—
ΔCS	DM	-63,47	-59,63	-55,45	-51,22	-47,16	-43,73	-41,45	-41,56	-46,69	-65,52	-160,12	—
	DMA	58,08	48,08	41,22	34,17	28,30	29,89	36,81	45,54	58,09	83,00	183,30	—
	PDMA	46,41	32,98	22,42	13,17	1,90	-1,72	4,13	8,20	8,75	6,11	16,77	—

Tabela 8.23: Valores de PDMA total obtidos para a variação da porcentagem de E_X^{HF} nos funcionais com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
B1B95	53,5	42,0	31,9	23,0	15,8	13,9	22,7	36,8	52,2	70,3	92,6
B3LYP , BHandHLYP	47,7	37,6	29,9	24,6	22,9	28,7	44,7	62,9	84,9	114,2	161,5
B3P86	50,3	39,5	30,0	26,8	26,6	28,6	37,1	57,1	80,2	112,9	169,3
B971	57,6	47,9	38,1	27,3	17,4	13,6	20,8	36,1	55,9	81,9	119,3
B972	61,5	50,9	40,1	28,9	18,4	18,7	24,6	37,0	55,8	81,6	120,0
B98	59,6	49,2	39,2	28,4	18,4	11,1	20,2	37,0	58,4	87,2	131,6
BHandH	60,2	48,3	37,0	25,3	15,8	14,7	27,2	46,8	70,9	104,0	161,5
BMK	71,3	62,5	52,5	41,2	28,8	25,4	27,1	41,8	66,1	100,8	150,6
BP86	50,8	40,1	30,3	25,6	24,9	26,3	34,8	53,8	75,6	106,2	156,7
B3PW91	48,4	37,9	30,1	29,2	30,0	32,3	42,7	63,6	89,7	127,3	197,9
M05 , M05-2X	63,4	67,1	71,3	76,6	84,9	94,2	104,9	116,1	128,2	141,3	155,4
M06 , M06-HF	33,0	26,0	21,2	21,4	26,2	37,3	54,8	78,2	112,5	180,4	290,3
M06-2X	33,0	26,0	21,2	21,4	26,2	37,3	54,8	78,2	112,5	180,4	290,3
O3LYP	53,3	41,1	28,6	18,7	14,5	18,0	34,4	53,4	76,9	107,9	161,5
PBE , PBE0	47,1	35,5	27,0	25,6	26,5	29,3	41,7	62,4	87,7	125,0	196,2
PW91	48,9	37,8	28,9	27,4	28,1	30,8	41,6	63,0	88,4	126,1	197,9
TPSSH	52,5	41,3	34,2	31,7	30,4	33,0	49,1	70,7	97,5	133,9	197,2
X3LYP	47,8	37,5	29,9	24,6	22,9	28,6	44,6	62,9	84,8	114,0	161,5

8.2.2 Geometrias Otimizadas

Tabela 8.24: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00/ 40,00	50,00	50,00	21,00/ 50,00	60,00	60,00	21,00/ 60,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	449,1	441,3	499,7	438,6	492,5	520,6	485,9	513,5	542,8	533,4	535,7	500,0
CO	$^1J_{CO}$	17,4	16,9	10,7	14,6	10,2	9,0	10,4	8,6	7,3	6,2	6,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,4	-74,2	-77,0	-70,0	-76,8	-79,7	-76,0	-79,5	-82,5	-81,9	-82,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,5	-6,2	-5,1	-5,1	-4,8	-6,4	-6,1	-6,1	-7,7	-7,1	-7,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,3	43,4	41,9	40,0	42,0	43,1	42,4	43,2	44,4	44,8	44,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,1	-9,0	-7,4	-7,4	-7,2	-8,6	-8,3	-8,4	-9,9	-9,3	-9,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	190,7	196,4	188,9	182,7	194,0	196,6	195,7	201,5	204,6	208,5	209,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1656,7	-1547,7	-1562,1	-1459,7	-1478,1	-1539,1	-1449,7	-1459,4	-1513,4	-1429,0	-1438,0	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-123,8	-129,8	-85,1	-118,1	-91,1	-69,6	-88,3	-75,5	-54,0	-59,4	-59,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-27,9	-39,4	12,4	-28,7	1,5	29,7	5,7	19,0	47,1	39,2	36,7	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-318,8	-257,2	-327,7	-318,6	-262,4	-370,4	-281,7	-298,6	-421,2	-245,8	-340,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	128,8	129,3	116,5	121,4	116,9	120,6	124,4	121,1	125,0	127,5	125,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,0	-12,0	-9,6	-9,3	-9,5	-10,7	-10,5	-10,6	-11,8	-11,7	-11,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	213,8	213,8	205,0	207,4	205,1	211,6	213,6	211,5	219,4	220,2	219,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	261,3	260,2	229,5	239,0	228,6	237,9	243,9	236,9	247,0	249,0	245,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,2	53,3	53,2	53,3	53,2	53,0	53,1	53,1	52,5	52,6	52,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,5	10,3	8,4	9,1	8,2	9,3	9,7	9,1	10,5	10,5	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	78,1	80,5	76,4	78,7	78,8	80,8	83,5	83,1	86,2	88,6	88,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	162,8	160,7	145,4	149,6	143,6	151,2	153,5	149,2	157,4	157,6	155,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-2,1	-1,8	-0,8	-0,4	-0,6	-2,1	-1,9	-1,8	-3,7	-3,5	-3,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,6	2,4	4,1	4,3	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,7	12,2	10,5	10,3	11,0	11,0	11,1	11,5	11,6	12,0	12,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,4	19,0	15,6	16,6	16,1	16,4	17,3	16,9	17,4	18,2	17,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	34,9	36,5	35,1	36,3	36,7	37,8	39,4	39,5	40,8	42,5	42,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	129,1	128,5	116,5	120,7	115,9	120,9	123,9	120,3	125,5	127,0	125,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,6	-3,5	-2,8	-2,6	-2,8	-3,5	-3,4	-3,4	-4,2	-4,1	-4,1	-4,7
Total	DM	-10,51	-4,66	-5,88	-5,47	-0,81	-3,16	1,77	2,00	-0,44	9,35	4,88	—
	DMA	17,89	15,80	10,48	11,11	9,01	12,53	5,98	6,35	15,65	10,40	9,31	—
	PDMA	21,89	24,16	17,34	29,76	19,53	16,15	13,54	11,38	21,45	18,49	18,05	—
CPI	DM	-32,51	-18,76	-13,79	-15,69	-1,92	-10,52	-0,99	1,58	-7,58	14,43	4,99	—
	DMA	34,51	29,60	15,37	18,42	11,39	21,59	6,97	6,45	29,75	16,52	14,37	—
	PDMA	36,11	44,38	12,12	40,04	20,37	20,42	14,19	11,59	34,57	27,18	24,58	—
SPI	DM	5,63	5,69	-0,07	2,02	0,01	2,23	3,79	2,31	4,80	5,63	4,81	—
	DMA	5,71	5,69	6,90	5,75	7,26	5,89	5,25	6,27	5,32	5,91	5,59	—
	PDMA	11,47	9,33	21,17	22,22	18,92	13,02	13,07	11,22	11,83	12,12	13,26	—
ACS	DM	-38,14	-24,45	-13,72	-17,71	-1,92	-12,75	-4,78	-0,72	-12,38	8,80	0,18	—
	DMA	28,80	23,91	8,47	12,66	4,13	15,70	1,72	0,19	24,43	10,61	8,78	—
	PDMA	24,64	35,05	-9,04	17,83	1,44	7,39	1,12	0,37	22,74	15,05	11,32	—

Tabela 8.25: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	442,8	447,0	487,2	401,9	491,1	512,0	452,6	515,9	538,2	503,7	542,0	565,8	555,5	569,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	17,1	11,5	17,6	10,2	9,2	12,9	8,0	6,8	8,0	5,6	4,2	3,0	3,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,5	-74,4	-75,6	-65,7	-76,4	-78,9	-72,4	-79,7	-82,3	-79,0	-83,2	-86,0	-85,6	-86,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,2	-4,3	-4,7	-4,1	-5,5	-5,5	-5,3	-6,7	-6,4	-6,5	-8,0	-7,4	-7,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	42,0	40,3	37,6	40,6	41,8	40,3	42,1	43,4	43,0	43,7	45,1	45,7	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-6,0	-6,3	-6,0	-7,1	-7,1	-7,0	-8,2	-7,9	-8,1	-9,4	-8,9	-9,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	184,0	191,6	175,0	158,0	182,2	183,4	173,7	190,5	192,2	189,1	199,2	201,4	204,8	208,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1661,2	-1562,9	-1595,3	-1477,0	-1516,3	-1576,6	-1482,9	-1501,6	-1555,0	-1472,3	-1484,0	-1531,2	-1451,5	-1464,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,9	-132,8	-100,3	-146,5	-103,3	-82,9	-115,3	-85,8	-65,4	-84,7	-68,3	-48,0	-55,3	-50,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,6	-43,3	-5,4	-63,3	-12,0	14,1	-26,3	7,7	33,8	9,3	27,6	53,5	43,6	47,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-316,0	-219,7	-283,7	-341,6	-189,4	-320,6	-310,4	-218,4	-362,5	-278,7	-250,3	-412,9	-247,5	-286,6	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	118,8	107,2	112,8	107,2	111,9	116,6	111,9	116,9	120,6	116,9	122,2	124,6	122,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-7,8	-7,4	-7,8	-8,7	-8,4	-8,7	-9,7	-9,5	-9,7	-10,7	-10,6	-10,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,5	197,6	188,8	189,7	189,1	195,6	197,1	195,7	203,4	204,9	203,2	212,5	213,3	212,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,3	245,2	213,7	226,1	211,9	222,6	231,8	220,7	232,0	237,7	230,0	242,2	243,9	240,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	50,8	51,4	51,7	51,5	51,8	51,9	51,9	51,9	51,9	52,0	51,5	51,7	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,1	7,4	8,4	7,2	8,1	8,7	7,8	8,9	9,2	8,6	9,9	9,8	9,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,1	70,6	66,0	67,6	68,7	70,8	73,1	73,3	76,3	78,9	78,5	82,9	85,2	84,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,3	149,4	134,1	139,5	131,7	140,3	144,2	137,7	146,9	149,1	144,1	154,1	154,1	151,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-1,6	0,5	1,0	0,7	-0,4	-0,1	-0,2	-1,7	-1,4	-1,4	-3,2	-3,0	-2,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	4,7	5,2	3,6	4,2	4,4	3,1	3,7	3,5	2,5	3,0	2,5	1,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,8	9,7	9,2	10,3	10,1	9,9	10,7	10,6	10,6	11,1	11,1	11,5	11,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,7	18,3	14,4	15,5	14,9	15,1	16,1	15,6	15,9	16,8	16,4	16,8	17,5	17,3	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,4	30,2	31,6	32,1	33,3	35,0	35,2	36,6	38,4	38,5	40,1	41,9	42,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	117,3	106,4	111,4	105,1	111,4	115,3	110,0	116,6	119,3	115,2	122,1	123,4	120,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-1,9	-1,6	-1,8	-2,4	-2,2	-2,4	-3,0	-2,8	-2,9	-3,6	-3,5	-3,6	-4,7
Total	DM	-14,69	-7,25	-10,65	-14,40	-4,00	-7,40	-7,38	-0,63	-4,05	0,24	2,91	-0,75	8,22	6,58	—
	DMA	17,63	16,65	14,98	18,50	15,59	11,64	11,53	11,69	14,03	6,27	11,29	17,62	11,27	11,68	—
	PDMA	23,84	25,54	29,79	47,97	31,03	18,93	30,62	20,06	19,95	14,83	17,38	25,17	20,37	21,40	—
CPI	DM	-35,26	-17,50	-17,95	-30,08	-2,21	-13,82	-16,48	2,32	-9,69	-1,53	6,98	-6,04	14,14	11,59	—
	DMA	36,99	34,10	23,03	34,08	24,32	17,29	18,75	16,83	24,53	7,00	17,25	34,22	19,41	19,46	—
	PDMA	42,37	47,10	27,62	68,94	34,70	11,80	38,76	17,94	24,58	12,22	21,13	41,76	33,08	35,40	—
SPI	DM	0,40	0,27	-5,29	-2,89	-5,31	-2,69	-0,71	-2,79	0,08	1,54	-0,07	3,12	3,88	2,91	—
	DMA	3,44	3,85	9,07	7,07	9,19	7,49	6,23	7,92	6,33	5,73	6,91	5,44	5,31	5,97	—
	PDMA	10,24	9,73	31,39	32,58	28,35	24,15	24,64	21,61	16,55	16,74	14,63	13,01	11,05	11,12	—
ΔCS	DM	-35,66	-17,77	-12,67	-27,19	3,10	-11,12	-15,77	5,10	-9,77	-3,07	7,06	-9,16	10,26	8,68	—
	DMA	33,55	30,25	13,95	27,02	15,12	9,80	12,52	8,91	18,19	1,27	10,34	28,78	14,10	13,49	—
	PDMA	32,13	37,37	-3,77	36,36	6,35	-12,35	14,12	-3,68	8,03	-4,52	6,49	28,74	22,03	24,28	—

Tabela 8.26: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	¹ J _{HF}	431,2	425,7	484,6	417,7	479,5	505,9	465,8	500,8	528,5	514,5	523,5	500,0
CO	¹ J _{CO}	18,5	17,6	11,2	15,5	10,4	9,5	11,2	8,7	7,7	6,9	6,8	16,4
H ₂ O	¹ J _{OH}	-72,5	-72,6	-75,6	-67,9	-75,7	-78,4	-74,2	-78,5	-81,4	-80,4	-81,5	-80,6
H ₂ O	² J _{HH}	-6,9	-6,5	-5,1	-5,1	-4,7	-6,4	-6,1	-6,1	-7,9	-7,2	-7,5	-7,3
NH ₃	¹ J _{NH}	42,9	43,1	41,7	39,6	41,9	43,1	42,3	43,3	44,6	44,8	44,8	43,8
NH ₃	² J _{HH}	-9,5	-9,3	-7,6	-7,5	-7,4	-8,8	-8,5	-8,6	-10,2	-9,6	-10,0	-9,6
PH ₃	¹ J _{PH}	196,4	202,7	193,7	187,2	199,5	201,7	200,7	207,3	210,1	213,9	215,4	188,2
PF ₃	¹ J _{PF}	-1666,4	-1560,1	-1572,1	-1468,9	-1489,9	-1549,1	-1459,9	-1470,8	-1523,4	-1439,8	-1449,0	-1441,0
BHF ₂	¹ J _{BF}	-129,1	-133,2	-89,6	-125,3	-93,7	-73,8	-95,5	-77,8	-57,8	-66,4	-61,8	-84,0
BF ₃	¹ J _{BF}	-34,1	-43,2	7,0	-37,6	-1,5	24,5	-3,0	16,1	42,2	30,6	34,0	15,0
F ₂ O	¹ J _{OF}	-336,9	-264,6	-338,2	-347,7	-262,5	-383,0	-312,7	-299,3	-437,3	-278,5	-341,9	-300,0
CH ₄	¹ J _{CH}	128,3	128,7	116,9	122,0	117,2	121,5	125,6	121,9	126,5	129,3	126,9	125,3
CH ₄	² J _{HH}	-12,5	-12,5	-9,8	-9,5	-9,8	-11,0	-10,8	-11,0	-12,2	-12,1	-12,2	-12,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CC}	212,9	212,7	205,0	207,5	205,0	212,2	214,3	211,9	220,6	221,6	220,0	174,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CH}	261,1	259,6	229,7	239,7	228,3	239,0	245,4	237,5	249,0	251,5	247,4	247,6
C ₂ H ₂	² J _{CH}	52,8	52,9	53,2	53,4	53,3	53,2	53,3	53,3	52,6	52,7	52,8	50,1
C ₂ H ₂	³ J _{HH}	10,7	10,4	8,4	9,2	8,2	9,4	9,8	9,1	10,6	10,7	10,4	9,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CC}	77,3	79,7	76,4	78,8	78,9	81,3	84,1	83,6	87,2	89,7	89,1	67,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CH}	162,5	160,1	145,7	150,2	143,6	152,0	154,8	149,8	158,9	159,5	156,5	156,3
C ₂ H ₄	² J _{CH}	-2,4	-2,1	-0,8	-0,5	-0,6	-2,1	-1,9	-1,9	-3,8	-3,6	-3,4	-2,4
C ₂ H ₄	² J _{HH}	3,1	1,9	3,9	4,2	2,8	3,2	3,1	2,1	2,3	1,9	1,2	2,3
C ₂ H ₄	³ J _{HH_c}	11,8	12,4	10,6	10,2	11,1	11,1	11,1	11,6	11,8	12,0	12,2	11,7
C ₂ H ₄	³ J _{HH_t}	18,5	19,1	15,6	16,7	16,2	16,5	17,5	17,0	17,6	18,4	18,1	19,0
C ₂ H ₆	¹ J _{CC}	34,4	36,0	35,1	36,2	36,7	38,2	39,6	39,8	41,5	43,1	43,1	34,5
C ₂ H ₆	¹ J _{CH}	128,8	128,1	116,8	121,4	116,1	121,7	125,2	121,1	127,0	129,0	126,3	125,2
C ₂ H ₆	² J _{CH}	-3,8	-3,7	-2,9	-2,6	-2,9	-3,6	-3,4	-3,5	-4,3	-4,2	-4,3	-4,7
Total	DM	-12,61	-6,23	-7,35	-8,00	-1,73	-4,51	-0,67	1,25	-1,72	7,05	4,30	—
	DMA	20,22	16,99	12,38	13,78	10,38	12,58	7,63	6,24	16,22	7,95	9,24	—
	PDMA	22,55	25,09	18,65	32,25	20,09	14,08	15,68	10,44	20,27	15,80	17,92	—
CPI	DM	-37,03	-21,94	-17,35	-21,90	-4,09	-14,15	-7,35	-0,53	-11,44	7,99	2,90	—
	DMA	40,46	32,88	20,03	24,99	14,73	21,97	11,20	6,38	30,45	9,72	13,99	—
	PDMA	41,68	47,47	16,50	47,05	23,01	16,91	20,34	9,53	31,97	19,14	23,24	—
SPI	DM	5,29	5,28	-0,02	2,19	0,00	2,57	4,23	2,55	5,41	6,36	5,33	—
	DMA	5,37	5,33	6,78	5,56	7,20	5,70	5,01	6,13	5,79	6,65	5,76	—
	PDMA	8,52	8,68	20,23	21,39	17,96	12,01	12,27	11,11	11,68	13,34	14,03	—
ΔCS	DM	-42,32	-27,22	-17,33	-24,09	-4,09	-16,72	-11,58	-3,07	-16,85	1,63	-2,43	—
	DMA	35,09	27,55	13,25	19,43	7,53	16,27	6,19	0,25	24,67	3,06	8,23	—
	PDMA	33,17	38,79	-3,73	25,65	5,05	4,91	8,06	-1,57	20,29	5,80	9,21	—

Tabela 8.27: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

$\%E_X^{\text{HF}}$		28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
Geom.		Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	470,4	470,4	499,3	515,6	499,3	523,6	552,4	523,6	548,0	588,5	548,0	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	16,5	16,1	12,6	14,1	14,0	9,4	12,1	11,8	6,2	9,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,3	-78,4	-80,4	-83,5	-81,4	-83,0	-87,4	-83,9	-85,6	-91,2	-86,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,6	-8,2	-7,3	-7,8	-9,2	-8,1	-8,8	-10,3	-8,9	-9,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,6	44,9	46,1	45,5	45,6	47,2	46,2	46,4	48,2	46,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,1	-10,4	-9,8	-10,1	-11,3	-10,5	-11,0	-12,1	-11,2	-11,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,8	175,8	176,5	187,5	184,0	183,6	196,8	190,8	190,6	205,6	197,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1645,5	-1532,2	-1606,4	-1500,6	-1500,0	-1571,1	-1466,8	-1470,3	-1533,7	-1427,8	-1438,6	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-127,6	-125,7	-107,5	-98,9	-105,8	-91,0	-77,2	-89,3	-74,6	-56,0	-72,9	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,0	-28,2	-5,3	2,1	-6,4	12,6	26,6	11,4	30,3	50,2	29,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-361,9	-249,0	-404,3	-221,1	-280,1	-443,7	-199,3	-307,4	-490,0	-179,2	-337,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,1	126,1	125,2	125,8	127,5	126,0	127,2	129,0	126,9	128,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-12,2	-13,0	-13,1	-13,0	-13,7	-13,7	-13,7	-14,4	-14,4	-14,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,2	195,5	199,3	199,1	199,2	203,2	202,4	202,8	207,7	205,9	207,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	253,2	258,8	253,7	255,8	261,2	254,3	258,0	263,7	254,9	260,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,7	55,2	55,5	55,4	54,6	55,1	54,9	53,8	54,6	54,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,0	11,2	10,5	10,8	12,0	11,1	11,5	13,0	11,7	12,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,0	68,9	69,6	72,1	72,1	73,0	74,9	75,1	76,8	77,9	78,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,8	155,4	161,3	156,8	157,7	163,5	158,0	159,7	165,9	159,3	161,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-0,9	-2,3	-2,0	-2,0	-3,4	-3,0	-3,0	-4,7	-4,0	-4,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	2,8	3,3	1,9	1,9	2,5	1,1	1,1	1,6	0,3	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,9	12,5	13,4	13,2	12,8	13,8	13,6	13,3	14,2	14,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	19,4	19,9	20,0	19,9	20,2	20,4	20,4	20,6	20,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,5	33,0	34,7	34,8	35,0	36,6	36,8	37,1	38,7	38,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,0	123,0	126,9	124,3	124,9	128,5	125,2	126,4	130,1	126,2	128,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-4,0	-4,1	-4,0	-4,5	-4,5	-4,5	-5,0	-5,0	-5,0	-4,7
Total	DM	-13,82	-5,00	-10,52	1,75	-1,58	-7,80	7,52	1,33	-5,23	13,35	4,27	—
	DMA	17,61	12,27	14,84	9,19	7,04	15,13	10,91	5,86	18,06	15,62	8,88	—
	PDMA	24,17	21,61	14,31	10,96	12,72	11,69	15,02	11,38	21,91	28,67	21,33	—
CPI	DM	-35,99	-14,80	-29,69	0,16	-8,15	-24,62	12,93	-2,50	-20,01	25,77	3,07	—
	DMA	37,10	24,85	29,93	17,44	12,07	29,24	20,44	7,70	34,14	30,14	12,93	—
	PDMA	37,04	35,77	21,92	15,62	19,33	13,99	19,55	10,17	27,38	41,83	22,37	—
SPI	DM	2,44	2,19	3,55	2,92	3,23	4,53	3,56	4,15	5,61	4,25	5,15	—
	DMA	3,32	3,03	3,77	3,15	3,35	4,79	3,92	4,51	6,27	4,98	5,91	—
	PDMA	14,73	11,22	8,73	7,55	7,87	10,00	11,69	12,27	17,90	19,02	20,57	—
ΔCS	DM	-38,43	-16,99	-33,24	-2,76	-11,38	-29,15	9,37	-6,65	-25,62	21,53	-2,08	—
	DMA	33,78	21,82	26,15	14,29	8,72	24,45	16,52	3,19	27,87	25,16	7,01	—
	PDMA	22,31	24,55	13,20	8,06	11,47	3,99	7,86	-2,10	9,48	22,81	1,81	—

Tabela 8.28: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	530,8	546,7	484,4	472,9	500,8	507,2	509,6	523,4	555,3	584,3	570,9	500,0
CO	$^1J_{CO}$	13,7	8,0	18,7	14,9	12,8	16,3	11,5	10,4	11,0	4,4	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-83,7	-87,5	-77,8	-78,5	-81,7	-80,7	-83,1	-84,6	-86,9	-92,0	-90,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-9,4	-7,9	-6,8	-5,8	-5,3	-8,0	-6,8	-6,6	-10,8	-9,0	-9,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,5	47,7	42,9	44,5	45,1	44,2	46,2	46,4	47,0	49,5	49,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-11,1	-9,9	-8,7	-7,6	-7,5	-9,9	-8,7	-8,7	-12,5	-11,0	-11,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	183,1	195,1	163,0	167,4	175,8	172,9	181,3	185,3	193,7	208,9	205,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1670,4	-1554,5	-1743,5	-1622,0	-1624,2	-1709,0	-1591,4	-1591,2	-1628,3	-1512,0	-1514,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-95,2	-72,8	-132,8	-116,4	-109,5	-114,0	-94,5	-91,2	-76,1	-51,3	-54,3	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	15,1	38,8	-23,3	-7,3	1,5	-4,1	15,8	20,0	34,6	61,4	57,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-465,0	-165,5	-380,5	-173,9	-123,8	-419,8	-169,2	-144,3	-521,4	-163,3	-188,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	124,9	124,4	116,8	117,4	116,3	120,7	120,7	120,3	129,4	128,1	128,8	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-13,3	-13,3	-11,0	-11,0	-11,0	-12,1	-12,1	-12,1	-14,5	-14,5	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	202,4	201,9	189,4	190,4	190,4	195,4	195,9	195,8	210,6	208,6	209,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	259,5	253,3	245,0	243,0	239,4	252,0	248,0	246,1	267,8	259,1	261,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,0	53,8	53,2	53,5	53,5	53,3	53,8	53,8	52,2	53,4	53,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,8	10,7	9,4	8,9	8,6	10,5	9,8	9,6	13,4	11,9	12,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	72,3	74,8	61,8	65,7	65,6	66,7	70,0	69,9	78,9	80,2	80,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	160,6	155,7	149,9	147,1	145,6	155,0	151,3	150,5	166,8	160,4	161,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-3,8	-3,4	-1,3	-1,2	-1,2	-2,4	-2,2	-2,2	-5,6	-4,8	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,2	1,2	3,8	3,0	2,8	3,1	2,1	2,0	1,1	0,2	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	13,3	14,4	12,2	13,3	13,4	12,7	13,8	13,9	14,1	15,1	15,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	19,6	20,2	17,9	18,9	18,6	18,7	19,5	19,4	20,8	21,1	21,2	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	33,3	36,2	26,9	30,6	30,0	30,0	33,3	33,0	36,7	38,9	39,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	125,8	122,8	117,3	115,3	114,6	121,5	119,0	118,6	130,4	126,8	127,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-4,3	-4,4	-3,1	-3,3	-3,2	-3,7	-3,8	-3,8	-4,9	-5,0	-5,0	-4,7
Total	DM	-12,86	5,44	-20,05	-6,35	-2,98	-16,48	-0,58	1,10	-9,32	11,71	10,02	—
	DMA	19,73	15,92	22,41	18,52	18,99	19,57	14,22	15,80	24,00	19,71	18,08	—
	PDMA	12,21	19,31	24,93	19,64	18,32	14,17	9,04	10,94	27,30	34,92	33,31	—
CPI	DM	-35,23	8,85	-45,94	-13,88	-5,17	-40,53	-2,75	1,64	-30,48	20,82	16,30	—
	DMA	41,15	32,43	47,12	37,95	38,34	41,91	29,11	32,60	47,12	38,55	34,17	—
	PDMA	14,76	28,89	37,59	28,46	24,92	22,32	12,01	16,08	33,37	51,35	47,19	—
SPI	DM	3,55	2,95	-1,06	-0,83	-1,38	1,15	1,00	0,71	6,21	5,03	5,42	—
	DMA	4,03	3,81	4,29	4,26	4,81	3,19	3,29	3,47	7,05	5,89	6,27	—
	PDMA	10,35	12,29	15,65	13,17	13,49	8,19	6,85	7,18	22,85	22,88	23,14	—
ΔCS	DM	-38,77	5,90	-44,88	-13,05	-3,79	-41,68	-3,75	0,92	-36,69	15,79	10,88	—
	DMA	37,13	28,61	42,83	33,69	33,53	38,72	25,82	29,13	40,07	32,65	27,90	—
	PDMA	4,41	16,59	21,95	15,29	11,43	14,13	5,16	8,91	10,52	28,47	24,05	—

Tabela 8.29: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,8	427,7	419,7	409,3	416,6	441,9	445,9	438,8	464,3	482,0	461,3	486,9	517,7	484	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,4	20,8	19,9	19,2	19,1	16,9	17,5	17,3	13,8	15,7	15,4	10,9	13,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-73,5	-71,8	-71,5	-72,3	-74,2	-75,4	-74,7	-76,6	-79,6	-77	-79,0	-83,4	-79,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-6,9	-6,7	-6,4	-6,4	-7,8	-7,4	-7,4	-8,9	-8,1	-8,5	-10,0	-9,0	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	43,0	42,2	42,3	42,6	42,9	43,6	43,4	43,6	44,8	44,1	44,3	45,9	44,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,8	-9,6	-9,5	-9,4	-10,6	-10,3	-10,3	-11,5	-11,0	-11,3	-12,5	-11,8	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	161,3	150,4	155,5	157,2	158,7	166,9	165,3	166,9	178,0	173,2	175,1	188,6	181,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1732,1	-1627,0	-1748,1	-1634,2	-1639,7	-1715,3	-1612,1	-1613,5	-1679,4	-1581,4	-1583,9	-1640,8	-1543,9	-1551,5	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,0	-130,8	-139,2	-142,2	-139	-122,7	-119,9	-122,5	-106,5	-97,7	-106,3	-90,4	-76,6	-90,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,5	-33,5	-39,4	-46,9	-42,4	-21,7	-21,1	-24,6	-4,2	3,6	-7	12,9	27,3	10,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,9	-251,0	-354,9	-261,4	-236,3	-395,6	-241,6	-266	-440,5	-222,0	-297,4	-493,5	-202,0	-331,8	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	123,0	122,1	122,5	122,3	123,5	123,5	123,8	125,0	124,5	125,2	126,5	125,5	126,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,8	-13,7	-13,4	-13,3	-13,3	-14,2	-14,2	-14,1	-15,0	-15,0	-15	-15,8	-15,8	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	196,6	194,6	195,0	195	198,3	198,3	198,4	202,6	202,0	202,4	207,6	206,0	207,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	254,5	254,8	254,0	253,1	257,6	255,0	255,9	260,7	256,1	258,8	264,1	257,5	262,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,7	53,7	53,9	53,9	53,2	53,5	53,4	52,2	52,8	52,6	50,9	52,0	51,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	12,0	11,9	11,7	11,6	12,9	12,4	12,5	14,1	13,3	13,7	15,6	14,3	15,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	71,3	67,0	69,8	69,8	70,4	72,9	72,9	74,4	76,2	76,5	79,1	79,9	80,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,3	154,6	156,1	153,8	153,5	158,5	155,3	155,7	161,1	156,9	158,1	164,0	158,7	160,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-2,7	-2,5	-2,2	-2,2	-3,7	-3,3	-3,3	-5,1	-4,5	-4,6	-6,9	-5,9	-6,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,2	2,8	1,7	1,6	1,8	0,7	0,7	0,7	-0,3	-0,2	-0,5	-1,4	-1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,4	12,5	13,1	13,2	13,0	13,7	13,6	13,6	14,3	14,2	14,5	15,0	14,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,4	19,5	20,2	20,2	20,1	20,7	20,7	20,9	21,2	21,4	21,9	21,9	22,3	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	29,4	31,7	31,7	31,3	33,5	33,6	33,3	35,3	35,5	35,2	37,1	37,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,0	122,7	121,5	121,2	124,3	122,6	122,9	126,0	123,8	124,5	127,7	124,9	126,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-4,1	-3,9	-3,9	-3,9	-4,3	-4,4	-4,4	-4,9	-4,9	-4,9	-5,4	-5,4	-5,4	-4,7
Total	DM	-20,04	-11,24	-21,32	-13,87	-12,58	-18,75	-8,43	-9,87	-16,19	-2,73	-7,07	-13,77	3,19	-4,22	—
	DMA	24,04	18,98	25,11	20,83	21,30	23,12	16,93	16,67	21,47	13,26	12,34	20,50	12,91	10,78	—
	PDMA	23,18	24,36	26,02	28,02	26,95	23,07	22,05	22,98	23,41	19,92	22,50	26,51	27,43	25,43	—
CPI	DM	-50,18	-29,36	-52,50	-35,09	-31,89	-47,84	-23,22	-26,81	-43,31	-10,77	-21,64	-39,32	2,07	-16,51	—
	DMA	52,20	40,00	55,01	44,58	45,69	49,49	34,87	34,26	44,20	25,32	22,82	39,70	23,00	16,91	—
	PDMA	43,19	42,49	50,34	53,92	50,99	37,51	32,32	34,65	26,29	16,54	22,12	16,91	20,22	12,93	—
SPI	DM	2,07	2,05	1,55	1,69	1,57	2,57	2,41	2,55	3,70	3,17	3,61	4,96	4,01	4,79	—
	DMA	3,39	3,57	3,19	3,41	3,41	3,79	3,78	3,76	4,79	4,41	4,66	6,43	5,51	6,28	—
	PDMA	8,51	11,06	8,19	9,03	9,32	12,49	14,51	14,42	21,30	22,39	22,78	33,55	32,72	34,60	—
ΔCS	DM	-52,25	-31,41	-54,05	-36,78	-33,46	-50,41	-25,62	-29,36	-47,01	-13,95	-25,24	-44,28	-1,94	-21,30	—
	DMA	48,81	36,43	51,82	41,17	42,28	45,70	31,09	30,50	39,41	20,90	18,16	33,27	17,49	10,63	—
	PDMA	34,68	31,43	42,15	44,90	41,67	25,03	17,80	20,23	4,99	-5,85	-0,66	-16,64	-12,50	-21,67	—

8.3 Correções vibracionais para os funcionais testados

Tabela 8.30: Constantes de acoplamento BHandH com correção vibracional na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	40,00	40,00	50,00 / 40,00	50,00	40,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Correção	Correção	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	530,8	546,7	507,2	509,6	523,4	514,8	477,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	8,0	16,3	11,5	10,4	8,7	12,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,7	-87,5	-80,7	-83,1	-84,6	-86,7	-82,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-7,9	-8,0	-6,8	-6,6	-6,5	-5,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	47,7	44,2	46,2	46,4	48,7	47,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-9,9	-9,9	-8,7	-8,7	-9,1	-7,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,1	195,1	172,9	181,3	185,3	188,8	174,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1670,4	-1554,5	-1709,0	-1591,4	-1591,2	-1556,8	-1592,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,2	-72,8	-114,0	-94,5	-91,2	-76,5	-99,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,1	38,8	-4,1	15,8	20,0	36,9	13,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,0	-165,5	-419,8	-169,2	-144,3	-179,7	-182,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,4	120,7	120,7	120,3	127,3	123,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,3	-13,3	-12,1	-12,1	-12,1	-13,6	-12,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	201,9	195,4	195,9	195,8	203,1	196,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	253,3	252,0	248,0	246,1	257,3	251,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,8	53,3	53,8	53,8	54,2	54,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	10,7	10,5	9,8	9,6	11,4	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	74,8	66,7	70,0	69,9	75,7	70,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	155,7	155,0	151,3	150,5	158,1	153,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,4	-2,4	-2,2	-2,2	-3,8	-2,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	1,2	3,1	2,1	2,0	1,5	2,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	14,4	12,7	13,8	13,9	14,8	14,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,2	18,7	19,5	19,4	20,9	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	36,2	30,0	33,3	33,0	37,2	34,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	122,8	121,5	119,0	118,6	125,1	121,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,4	-3,7	-3,8	-3,8	-4,7	-4,1	-4,7
Total	DM	-12,86	5,44	-16,48	-0,58	1,10	3,93	-2,15	—
	DMA	19,73	15,92	19,57	14,22	15,80	14,14	14,72	—
	PDMA	12,21	19,31	14,17	9,04	10,94	19,07	10,04	—
CPI	DM	-35,23	8,85	-40,53	-2,75	1,64	3,82	-7,76	—
	DMA	41,15	32,43	41,91	29,11	32,60	27,36	30,44	—
	PDMA	14,76	28,89	22,32	12,01	16,08	26,25	15,01	—
SPI	DM	3,55	2,95	1,15	1,00	0,71	4,02	1,97	—
	DMA	4,03	3,81	3,19	3,29	3,47	4,45	3,20	—
	PDMA	10,35	12,29	8,19	6,85	7,18	13,80	6,39	—
ΔCS	DM	-38,77	5,90	-41,68	-3,75	0,92	-0,20	-9,73	—
	DMA	37,13	28,61	38,72	25,82	29,13	22,91	27,24	—
	PDMA	4,41	16,59	14,13	5,16	8,91	12,45	8,62	—

Tabela 8.31: Constantes de acoplamento PBE0 com correção vibracional na base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	25,00	25,00	40,00	40,00	25,00 / 40,00	40,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Correção	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,8	427,7	464,3	482,0	461,3	447,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,4	17,3	13,8	15,7	14,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-73,5	-76,6	-79,6	-77,0	-78,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-6,9	-8,9	-8,1	-8,5	-6,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	43,0	43,6	44,8	44,1	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,8	-11,5	-11,0	-11,3	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	161,3	166,9	178,0	173,2	170,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1732,1	-1627,0	-1679,4	-1581,4	-1583,9	-1582,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,0	-130,8	-106,5	-97,7	-106,3	-102,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,5	-33,5	-4,2	3,6	-7,0	1,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,9	-251,0	-440,5	-222,0	-297,4	-237,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	123,0	125,0	124,5	125,2	127,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,8	-13,7	-15,0	-15,0	-15,0	-15,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	196,6	202,6	202,0	202,4	203,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	254,5	260,7	256,1	258,8	260,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,7	52,2	52,8	52,6	53,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	12,0	14,1	13,3	13,7	14,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	71,3	74,4	76,2	76,5	77,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,3	154,6	161,1	156,9	158,1	159,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-2,7	-5,1	-4,5	-4,6	-5,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,2	0,7	-0,3	-0,2	-0,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,4	13,6	14,3	14,2	14,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,4	20,9	21,2	21,4	22,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	33,3	35,3	35,5	36,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,0	126,0	123,8	124,5	125,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-4,1	-4,9	-4,9	-4,9	-5,2	-4,7
Total	DM	-20,04	-11,24	-16,19	-2,73	-7,07	-4,38	—
	DMA	24,04	18,98	21,47	13,26	12,34	15,08	—
	PDMA	23,18	24,36	23,41	19,92	22,50	22,34	—
CPI	DM	-50,18	-29,36	-43,31	-10,77	-21,64	-16,15	—
	DMA	52,20	40,00	44,20	25,32	22,82	28,37	—
	PDMA	43,19	42,49	26,29	16,54	22,12	17,66	—
SPI	DM	2,07	2,05	3,70	3,17	3,61	4,26	—
	DMA	3,39	3,57	4,79	4,41	4,66	5,34	—
	PDMA	8,51	11,06	21,30	22,39	22,78	25,78	—
ΔCS	DM	-52,25	-31,41	-47,01	-13,95	-25,24	-20,41	—
	DMA	48,81	36,43	39,41	20,90	18,16	23,02	—
	PDMA	34,68	31,43	4,99	-5,85	-0,66	-8,11	—

Tabela 8.32: Constantes de acoplamento empíricas obtidas com as correções vibracionais de BHandH e PBE0 na base aug-pcJ-2.

		Exp.	Emp. BHH	Emp. BHH	Emp. PBE0
	% E_X^{HF}	—	50,00%	40,00%	40,00%
HF	$^1J_{\text{HF}}$	500	532,8	533,2	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,4	15,7	15,6	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,6	-81,7	-81,8	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-8,8	-8,7	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,8	43,0	43,1	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,5	-10,5	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,2	195,0	195,5	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1441	-1.441,7	-1.442,8	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-84	-79,7	-79,5	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15	17,1	17,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-300	-285,7	-286,9	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,3	122,8	123,0	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,5	-12,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	174,8	174,1	174,4	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,6	244,3	244,5	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,1	49,8	49,7	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,6	9,0	9,1	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,6	66,9	67,2	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	156,3	154,4	154,5	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,0	-2,1	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	2,1	2,0	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	11,4	11,4	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19	18,4	18,5	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,5	33,6	33,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,2	123,3	123,4	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,7	-4,5	-4,5	-4,5

8.3.1 Correções vibracionais das CAISS calculadas

8.3.1.1 Precisão dos funcionais da literatura

Tabela 8.33: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE 0,00	PW91 0,00	BP86 0,00	ω B97 0,00	TPSSH 10,00	O3LYP 11,61	ω B97X 15,77	CAMB3 19,00	B3P86 20,00	B3LYP 20,00	B3W91 20,00	B971 21,00	B972 21,00	Exp. —
HF	$^1J_{\text{HF}}$	343,2	331,4	322,5	422,8	357,8	363,6	465,1	422,8	374,5	412,6	376,1	416,3	410,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	25,6	25,6	24,6	21,0	22,6	19,8	19,0	22,3	18,9	22,3	18,1	19,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-65,2	-63,7	-70,7	-71,4	-68,3	-75,4	-76,6	-69,0	-75,7	-69,5	-73,3	-72,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-3,3	-3,1	-5,1	-3,8	-6,5	-4,9	-5,9	-4,8	-5,7	-5,3	-5,0	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,6	41,6	40,8	39,8	46,6	41,9	42,3	46,0	42,2	46,1	42,5	44,1	42,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,1	-6,9	-7,6	-7,2	-9,2	-7,8	-9,3	-8,4	-9,0	-8,9	-8,2	-8,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,9	130,8	130,1	152,5	193,7	158,7	158,2	155,5	145,5	165,1	147,8	183,9	177,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1800,3	-1814,5	-1801,8	-1662,3	-1731,0	-1687,1	-1642,3	-1748,4	-1748,7	-1755,2	-1750,7	-1656,0	-1660,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,1	-181,9	-182,2	-116,1	-146,8	-161,7	-101,8	-130,0	-147,5	-138,8	-146,9	-128,1	-134,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-77,9	-83,0	-85,4	-16,9	-49,3	-65,8	1,2	-24,5	-47,3	-35,3	-46,6	-30,0	-38,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-292,3	-304,8	-304,4	-325,0	-334,4	-311,6	-340,8	-400,9	-374,9	-366,3	-377,2	-333,1	-330,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	122,6	120,0	111,9	141,3	122,0	115,0	131,4	122,5	134,2	123,5	131,3	121,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,3	-12,1	-11,5	-11,6	-13,5	-11,6	-13,5	-13,2	-13,3	-13,7	-12,3	-11,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	189,5	188,0	194,9	191,5	192,2	193,7	202,7	194,1	204,0	194,5	214,5	198,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,1	255,8	250,7	239,6	285,6	257,8	243,5	270,2	255,2	275,1	257,3	264,6	250,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	54,9	54,9	52,1	58,0	52,9	53,7	57,3	54,3	56,4	54,3	53,5	51,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	11,1	10,8	11,0	13,2	12,4	10,6	11,7	11,8	11,7	12,3	11,1	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,0	61,3	60,2	66,3	72,2	64,6	65,2	71,3	65,4	71,7	66,0	78,8	68,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,7	154,9	151,6	144,6	176,2	156,3	147,3	166,3	155,6	169,0	157,0	164,7	154,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-0,8	-0,4	-2,6	-2,1	-2,3	-1,7	-2,1	-2,0	-1,8	-2,4	-2,5	-2,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,7	4,8	2,5	8,4	3,0	3,1	4,2	3,4	4,7	3,0	3,8	3,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,2	11,9	11,8	12,8	12,6	11,8	13,6	12,4	13,1	12,7	12,0	11,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,3	19,6	19,1	17,6	23,1	19,9	17,8	20,6	19,6	20,6	20,0	19,0	18,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,6	26,0	25,1	29,4	35,3	28,4	30,0	33,4	28,9	33,3	29,2	35,8	31,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	122,2	119,5	110,9	140,8	121,8	114,3	131,0	122,5	133,6	123,5	131,0	120,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-2,9	-3,4	-4,0	-3,8	-3,4	-3,8	-3,7	-3,6	-3,9	-3,8	-3,4	-4,7
Total	DM	-27,65	-29,11	-29,70	-16,69	-16,50	-20,93	-13,16	-19,35	-24,40	-18,45	-24,16	-12,11	-16,29	—
	DMA	33,04	34,30	34,52	20,43	29,17	25,27	16,27	27,23	28,88	27,54	28,79	20,61	19,90	—
	PDMA	48,58	50,59	52,60	22,08	43,98	35,21	16,29	26,32	32,83	30,76	31,05	24,84	25,53	—
CPI	DM	-66,20	-70,12	-69,95	-36,81	-51,43	-51,30	-29,75	-53,93	-59,73	-53,11	-59,75	-37,47	-40,23	—
	DMA	73,00	75,77	75,95	40,86	56,52	54,88	32,08	55,84	63,58	55,27	63,34	39,84	42,68	—
	PDMA	89,10	92,97	95,34	39,22	62,29	69,78	22,36	41,27	62,35	48,09	60,58	42,15	48,03	—
SPI	DM	0,61	0,97	-0,19	-1,93	9,11	1,35	-0,99	6,01	1,51	6,97	1,95	6,49	1,27	—
	DMA	3,73	3,89	4,14	5,45	9,11	3,55	4,67	6,25	3,43	7,20	3,45	6,51	3,19	—
	PDMA	18,86	19,52	21,26	9,51	30,55	9,86	11,83	15,35	11,18	18,05	9,40	12,14	9,03	—
Δ CS	DM	-66,81	-71,08	-69,75	-34,88	-60,53	-52,65	-28,77	-59,94	-61,24	-60,08	-61,70	-43,97	-41,49	—
	DMA	69,27	71,89	71,81	35,41	47,41	51,34	27,42	49,58	60,15	48,07	59,88	33,33	39,50	—
	PDMA	70,24	73,46	74,08	29,70	31,74	59,92	10,52	25,92	51,16	30,04	51,19	30,01	39,00	—

Tabela 8.34: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,4	398,4	451,4	398,0	645,5	437,6	795,7	518,0	498,0	494,0	452,8	550,5	144,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	19,2	20,3	20,6	18,6	19,1	9,8	19,4	14,4	11,6	8,1	4,6	5,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,7	-71,4	-73,6	-71,9	-99,5	-76,2	-107,2	-85,8	-82,6	-85,4	-90,5	-88,2	-53,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,4	-4,9	-5,8	-15,3	-5,5	-17,1	-5,2	-7,9	-9,7	-5,6	-3,1	10,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,6	43,7	42,7	43,3	53,2	44,8	45,1	48,6	46,3	49,8	54,0	44,6	38,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-8,6	-8,1	-9,2	-17,1	-8,4	-14,9	-9,3	-10,2	-12,6	-10,1	-5,4	-4,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,5	189,6	169,9	147,8	240,7	161,0	165,0	131,1	176,3	194,5	160,1	111,5	152,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1752,3	-1665,7	-1637,1	-1731,4	-1526,2	-1644,8	-1388,3	-1645,4	-1669,7	-1650,8	-1625,0	-1704,7	-1875,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,8	-133,4	-107,4	-135,3	-40,4	-131,9	16,5	-108,3	-99,5	-86,2	-120,8	-109,5	-279,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-31,2	-36,2	-5,1	-32,6	62,8	-29,1	125,0	3,0	13,0	22,2	-22,1	-5,6	-198,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-373,7	-351,2	-347,7	-389,2	-322,7	-376,2	-317,2	-391,6	-479,3	-502,3	-443,5	-535,1	-1517,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,4	130,8	117,2	125,3	142,1	126,9	101,0	161,7	127,4	143,2	146,2	117,8	70,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-12,8	-12,1	-14,1	-26,2	-12,5	-21,5	-14,6	-13,6	-16,3	-12,4	-6,9	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	205,1	213,6	192,0	197,1	194,3	195,9	210,4	343,4	203,1	220,8	228,5	225,4	252,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	277,1	264,4	248,9	259,5	302,8	259,5	251,1	299,3	262,8	291,8	273,5	212,0	93,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,5	53,1	54,0	53,8	50,6	55,9	36,8	62,3	53,3	54,4	57,2	49,9	45,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,3	10,7	13,0	17,7	11,0	21,2	12,6	12,4	15,4	9,9	8,0	5,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,7	78,0	64,4	69,4	65,5	66,7	77,1	128,0	73,0	86,7	91,9	85,8	86,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	170,5	164,4	150,0	159,2	185,6	160,7	143,5	197,5	162,5	182,0	179,5	143,7	-59,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-2,8	-1,4	-3,4	-6,8	-1,5	-14,3	-5,1	-4,2	-6,4	-2,9	-2,0	12,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,3	3,2	2,5	-13,2	4,4	-14,4	5,4	2,4	1,8	3,9	6,3	4,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	12,1	11,8	13,0	17,4	12,4	16,5	13,8	13,6	15,2	13,2	9,8	4,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,8	19,1	18,1	20,4	22,2	19,6	19,8	21,7	20,2	23,3	19,4	15,5	6,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,0	35,3	29,9	31,3	30,3	31,5	25,7	49,6	34,2	41,5	49,8	41,8	47,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	134,8	130,7	117,1	125,4	141,0	126,9	100,1	162,1	127,7	143,2	146,9	119,3	83,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-4,0	-3,5	-4,3	-5,7	-3,7	-4,8	-5,3	-4,5	-5,3	-3,9	-2,9	-3,5	-4,7
Total	DM	-17,68	-14,21	-13,24	-21,64	10,47	-15,42	15,98	2,38	-14,46	-8,79	-11,03	-21,61	-107,30	—
	DMA	27,28	22,60	16,49	26,58	24,54	20,39	32,17	33,13	19,97	25,35	27,11	32,99	120,93	—
	PDMA	28,94	26,24	18,32	26,70	73,64	26,88	107,43	36,63	12,91	28,39	30,92	36,02	150,61	—
CPI	DM	-52,09	-41,99	-30,95	-55,15	14,43	-40,95	42,86	-33,31	-40,19	-37,80	-43,95	-52,85	-219,96	—
	DMA	53,96	44,95	33,65	57,84	40,30	42,97	58,99	38,44	40,65	41,35	46,12	63,70	228,98	—
	PDMA	44,28	47,18	26,75	48,40	62,46	43,53	109,05	23,20	13,55	22,75	44,62	45,43	235,68	—
SPI	DM	7,55	6,16	-0,25	2,93	7,57	3,31	-3,73	28,55	4,41	12,48	13,11	1,29	-24,67	—
	DMA	7,71	6,21	3,91	3,67	12,98	3,83	12,50	29,23	4,80	13,63	13,17	10,47	41,69	—
	PDMA	17,69	10,89	12,14	10,79	81,84	14,67	106,24	46,48	12,45	32,53	20,87	29,12	88,22	—
Δ CS	DM	-59,64	-48,15	-30,70	-58,08	6,86	-44,26	46,59	-61,86	-44,60	-50,28	-57,06	-54,14	-195,29	—
	DMA	46,25	38,74	29,74	54,17	27,32	39,15	46,49	9,20	35,85	27,72	32,94	53,23	187,30	—
	PDMA	26,60	36,30	14,62	37,61	-19,38	28,86	2,81	-23,28	1,09	-9,78	23,74	16,30	147,47	—

Tabela 8.35: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	342,8	331,0	322,1	422,4	357,4	363,2	464,7	422,4	374,1	412,2	375,7	415,9	409,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	25,7	25,7	24,7	21,1	22,7	19,9	19,1	22,4	19,0	22,4	18,2	19,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-65,1	-63,6	-70,6	-71,3	-68,2	-75,3	-76,5	-68,9	-75,6	-69,4	-73,2	-72,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-3,4	-3,2	-5,2	-3,9	-6,6	-5,0	-6,0	-4,9	-5,8	-5,4	-5,1	-6,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,5	41,5	40,7	39,7	46,5	41,8	42,2	45,9	42,1	46,0	42,4	44,0	42,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,1	-6,9	-7,6	-7,2	-9,2	-7,8	-9,3	-8,4	-9,0	-8,9	-8,2	-8,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,4	130,3	129,6	152,0	193,2	158,2	157,7	155,0	145,0	164,6	147,3	183,4	176,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1799,2	-1813,4	-1800,7	-1661,2	-1729,9	-1686,0	-1641,2	-1747,3	-1747,6	-1754,1	-1749,6	-1654,9	-1659,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,3	-182,1	-182,4	-116,3	-147,0	-161,9	-102,0	-130,2	-147,7	-139,0	-147,1	-128,3	-134,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,0	-83,1	-85,5	-17,0	-49,4	-65,9	1,1	-24,6	-47,4	-35,4	-46,7	-30,1	-38,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,1	-303,6	-303,2	-323,8	-333,2	-310,4	-339,6	-399,7	-373,7	-365,1	-376,0	-331,9	-329,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	122,4	119,8	111,7	141,1	121,8	114,8	131,2	122,3	134,0	123,3	131,1	121,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,3	-12,1	-11,5	-11,6	-13,5	-11,6	-13,5	-13,2	-13,3	-13,7	-12,3	-11,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,1	189,2	187,7	194,6	191,2	191,9	193,4	202,4	193,8	203,7	194,2	214,2	197,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,9	255,6	250,5	239,4	285,4	257,6	243,3	270,0	255,0	274,9	257,1	264,4	250,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,5	55,0	55,0	52,2	58,1	53,0	53,8	57,4	54,4	56,5	54,4	53,6	51,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	11,0	10,7	10,9	13,1	12,3	10,5	11,6	11,7	11,6	12,2	11,0	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,7	61,0	59,9	66,0	71,9	64,3	64,9	71,0	65,1	71,4	65,7	78,5	68,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,6	154,8	151,5	144,5	176,1	156,2	147,2	166,2	155,5	168,9	156,9	164,6	154,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-0,7	-0,3	-2,5	-2,0	-2,2	-1,6	-2,0	-1,9	-1,7	-2,3	-2,4	-2,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,8	4,9	2,6	8,5	3,1	3,2	4,3	3,5	4,8	3,1	3,9	3,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,2	11,9	11,8	12,8	12,6	11,8	13,6	12,4	13,1	12,7	12,0	11,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,5	19,0	17,5	23,0	19,8	17,7	20,5	19,5	20,5	19,9	18,9	18,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,5	25,9	25,0	29,3	35,2	28,3	29,9	33,3	28,8	33,2	29,1	35,7	31,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	122,1	119,4	110,8	140,7	121,7	114,2	130,9	122,4	133,5	123,4	130,9	120,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-2,9	-3,4	-4,0	-3,8	-3,4	-3,8	-3,7	-3,6	-3,9	-3,8	-3,4	-4,7
Total	DM	-27,66	-29,11	-29,71	-16,69	-16,51	-20,93	-13,16	-19,35	-24,40	-18,45	-24,16	-12,11	-16,29	—
	DMA	33,11	34,28	34,50	20,43	29,04	25,25	16,27	27,15	28,86	27,46	28,76	20,52	19,86	—
	PDMA	48,93	50,91	52,92	22,12	44,18	35,53	16,65	26,56	33,15	31,00	31,37	24,78	25,85	—
CPI	DM	-66,10	-70,02	-69,85	-36,71	-51,33	-51,20	-29,65	-53,83	-59,63	-53,01	-59,65	-37,37	-40,13	—
	DMA	73,14	75,69	75,86	40,78	56,33	54,80	32,00	55,74	63,50	55,17	63,25	39,74	42,60	—
	PDMA	89,21	93,00	95,37	39,25	62,23	69,81	22,39	41,27	62,38	48,08	60,62	42,14	48,06	—
SPI	DM	0,53	0,89	-0,27	-2,01	9,03	1,27	-1,07	5,93	1,43	6,89	1,87	6,41	1,19	—
	DMA	3,76	3,91	4,17	5,51	9,03	3,57	4,73	6,19	3,46	7,13	3,47	6,43	3,19	—
	PDMA	19,39	20,04	21,79	9,57	30,94	10,39	12,44	15,78	11,71	18,48	9,92	12,05	9,57	—
Δ CS	DM	-66,63	-70,90	-69,57	-34,70	-60,35	-52,47	-28,59	-59,76	-61,06	-59,90	-61,52	-43,79	-41,31	—
	DMA	69,38	71,78	71,70	35,28	47,30	51,23	27,27	49,55	60,04	48,04	59,79	33,31	39,41	—
	PDMA	69,82	72,96	73,58	29,68	31,29	59,42	9,95	25,48	50,67	29,60	50,70	30,10	38,50	—

Tabela 8.36: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,0	398,0	451,0	397,6	645,1	437,2	795,3	517,6	497,6	493,6	452,4	550,1	144,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	19,3	20,4	20,7	18,7	19,2	9,9	19,5	14,5	11,7	8,2	4,7	5,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,6	-71,3	-73,5	-71,8	-99,4	-76,1	-107,1	-85,7	-82,5	-85,3	-90,4	-88,1	-53,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-5,5	-5,0	-5,9	-15,4	-5,6	-17,2	-5,3	-8,0	-9,8	-5,7	-3,2	10,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,5	43,6	42,6	43,2	53,1	44,7	45,0	48,5	46,2	49,7	53,9	44,5	38,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-8,6	-8,1	-9,2	-17,1	-8,4	-14,9	-9,3	-10,2	-12,6	-10,1	-5,4	-4,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,0	189,1	169,4	147,3	240,2	160,5	164,5	130,6	175,8	194,0	159,6	111,0	152,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1751,2	-1664,6	-1636,0	-1730,3	-1525,1	-1643,7	-1387,2	-1644,3	-1668,6	-1649,7	-1623,9	-1703,6	-1874,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-136,0	-133,6	-107,6	-135,5	-40,6	-132,1	16,3	-108,5	-99,7	-86,4	-121,0	-109,7	-279,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-31,3	-36,3	-5,2	-32,7	62,7	-29,2	124,9	2,9	12,9	22,1	-22,2	-5,7	-198,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-372,5	-350,0	-346,5	-388,0	-321,5	-375,0	-316,0	-390,4	-478,1	-501,1	-442,3	-533,9	-1516,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,2	130,6	117,0	125,1	141,9	126,7	100,8	161,5	127,2	143,0	146,0	117,6	69,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-12,8	-12,1	-14,1	-26,2	-12,5	-21,5	-14,6	-13,6	-16,3	-12,4	-6,9	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,8	213,3	191,7	196,8	194,0	195,6	210,1	343,1	202,8	220,5	228,2	225,1	251,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	276,9	264,2	248,7	259,3	302,6	259,3	250,9	299,1	262,6	291,6	273,3	211,8	93,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,6	53,2	54,1	53,9	50,7	56,0	36,9	62,4	53,4	54,5	57,3	50,0	45,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,7	11,2	10,6	12,9	17,6	10,9	21,1	12,5	12,3	15,3	9,8	7,9	5,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,4	77,7	64,1	69,1	65,2	66,4	76,8	127,7	72,7	86,4	91,6	85,5	86,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	170,4	164,3	149,9	159,1	185,5	160,6	143,4	197,4	162,4	181,9	179,4	143,6	-59,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-2,7	-1,3	-3,3	-6,7	-1,4	-14,2	-5,0	-4,1	-6,3	-2,8	-1,9	12,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,4	3,3	2,6	-13,1	4,5	-14,3	5,5	2,5	1,9	4,0	6,4	4,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	12,1	11,8	13,0	17,4	12,4	16,5	13,8	13,6	15,2	13,2	9,8	4,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,7	19,0	18,0	20,3	22,1	19,5	19,7	21,6	20,1	23,2	19,3	15,4	6,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,9	35,2	29,8	31,2	30,2	31,4	25,6	49,5	34,1	41,4	49,7	41,7	47,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	134,7	130,6	117,0	125,3	140,9	126,8	100,0	162,0	127,6	143,1	146,8	119,2	82,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-4,0	-3,5	-4,3	-5,7	-3,7	-4,8	-5,3	-4,5	-5,3	-3,9	-2,9	-3,5	-4,7
Total	DM	-17,68	-14,22	-13,25	-21,64	10,47	-15,42	15,98	2,38	-14,46	-8,80	-11,04	-21,62	-107,30	—
	DMA	27,20	22,48	16,48	26,52	24,37	20,33	32,12	32,99	19,87	25,20	27,00	32,91	120,89	—
	PDMA	29,18	26,14	18,68	26,66	73,27	27,16	107,00	36,52	12,89	27,93	30,76	36,32	150,93	—
CPI	DM	-51,99	-41,89	-30,85	-55,05	14,53	-40,85	42,96	-33,21	-40,09	-37,70	-43,85	-52,75	-219,86	—
	DMA	53,86	44,78	33,56	57,75	39,98	42,87	58,95	38,25	40,53	41,12	45,98	63,49	228,88	—
	PDMA	44,27	47,17	26,79	48,43	62,45	43,52	108,99	23,15	13,65	22,68	44,48	45,27	235,61	—
SPI	DM	7,47	6,08	-0,33	2,85	7,49	3,23	-3,81	28,47	4,33	12,40	13,03	1,21	-24,75	—
	DMA	7,65	6,12	3,95	3,61	12,93	3,80	12,45	29,14	4,72	13,52	13,08	10,48	41,70	—
	PDMA	18,12	10,72	12,73	10,68	81,20	15,16	105,55	46,32	12,33	31,78	20,71	29,75	88,84	—
Δ CS	DM	-59,46	-47,97	-30,52	-57,90	7,04	-44,08	46,77	-61,68	-44,42	-50,10	-56,88	-53,96	-195,11	—
	DMA	46,22	38,66	29,62	54,14	27,06	39,07	46,50	9,11	35,81	27,60	32,90	53,01	187,18	—
	PDMA	26,16	36,45	14,05	37,75	-18,74	28,36	3,44	-23,16	1,33	-9,10	23,77	15,52	146,77	—

Tabela 8.37: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	341,2	329,4	320,5	420,8	355,8	361,6	463,1	420,8	372,5	410,6	374,1	414,3	408,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	25,6	25,6	24,6	21,0	22,6	19,8	19,0	22,3	18,9	22,3	18,1	19,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,8	-64,9	-63,4	-70,4	-71,1	-68,0	-75,1	-76,3	-68,7	-75,4	-69,2	-73,0	-72,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-3,3	-3,1	-5,1	-3,8	-6,5	-4,9	-5,9	-4,8	-5,7	-5,3	-5,0	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,3	41,3	40,5	39,5	46,3	41,6	42,0	45,7	41,9	45,8	42,2	43,8	42,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,2	-7,0	-7,7	-7,3	-9,3	-7,9	-9,4	-8,5	-9,1	-9,0	-8,3	-8,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,2	130,1	129,4	151,8	193,0	158,0	157,5	154,8	144,8	164,4	147,1	183,2	176,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1798,8	-1813,0	-1800,3	-1660,8	-1729,5	-1685,6	-1640,8	-1746,9	-1747,2	-1753,7	-1749,2	-1654,5	-1659,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,2	-182,0	-182,3	-116,2	-146,9	-161,8	-101,9	-130,1	-147,6	-138,9	-147,0	-128,2	-134,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,0	-83,1	-85,5	-17,0	-49,4	-65,9	1,1	-24,6	-47,4	-35,4	-46,7	-30,1	-38,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-293,3	-305,8	-305,4	-326,0	-335,4	-312,6	-341,8	-401,9	-375,9	-367,3	-378,2	-334,1	-331,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	122,5	119,9	111,8	141,2	121,9	114,9	131,3	122,4	134,1	123,4	131,2	121,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,3	-12,1	-11,5	-11,6	-13,5	-11,6	-13,5	-13,2	-13,3	-13,7	-12,3	-11,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,6	189,7	188,2	195,1	191,7	192,4	193,9	202,9	194,3	204,2	194,7	214,7	198,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,0	255,7	250,6	239,5	285,5	257,7	243,4	270,1	255,1	275,0	257,2	264,5	250,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,3	54,8	54,8	52,0	57,9	52,8	53,6	57,2	54,2	56,3	54,2	53,4	50,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	11,2	10,9	11,1	13,3	12,5	10,7	11,8	11,9	11,8	12,4	11,2	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,3	61,6	60,5	66,6	72,5	64,9	65,5	71,6	65,7	72,0	66,3	79,1	69,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,8	155,0	151,7	144,7	176,3	156,4	147,4	166,4	155,7	169,1	157,1	164,8	154,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-0,9	-0,5	-2,7	-2,2	-2,4	-1,8	-2,2	-2,1	-1,9	-2,5	-2,6	-2,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,7	4,8	2,5	8,4	3,0	3,1	4,2	3,4	4,7	3,0	3,8	3,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,3	12,0	11,9	12,9	12,7	11,9	13,7	12,5	13,2	12,8	12,1	11,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,7	19,2	17,7	23,2	20,0	17,9	20,7	19,7	20,7	20,1	19,1	18,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,6	26,0	25,1	29,4	35,3	28,4	30,0	33,4	28,9	33,3	29,2	35,8	31,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	122,1	119,4	110,8	140,7	121,7	114,2	130,9	122,4	133,5	123,4	130,9	120,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-2,9	-3,4	-4,0	-3,8	-3,4	-3,8	-3,7	-3,6	-3,9	-3,8	-3,4	-4,7
Total	DM	-27,73	-29,19	-29,78	-16,77	-16,58	-21,01	-13,24	-19,43	-24,48	-18,53	-24,24	-12,19	-16,37	—
	DMA	33,07	34,41	34,63	20,55	29,22	25,38	16,38	27,33	28,99	27,64	28,92	20,72	20,02	—
	PDMA	48,54	50,58	52,58	22,35	43,91	35,20	16,23	26,28	32,81	30,72	31,36	25,12	25,76	—
CPI	DM	-66,43	-70,35	-70,17	-37,04	-51,65	-51,53	-29,98	-54,15	-59,95	-53,34	-59,98	-37,70	-40,45	—
	DMA	73,08	76,04	76,21	41,13	56,60	55,15	32,35	56,05	63,85	55,48	63,60	40,05	42,95	—
	PDMA	89,21	93,14	95,50	39,38	62,26	69,95	22,52	41,31	62,51	48,13	60,75	42,19	48,19	—
SPI	DM	0,64	0,99	-0,17	-1,91	9,13	1,37	-0,96	6,04	1,54	7,00	1,97	6,52	1,29	—
	DMA	3,73	3,89	4,14	5,47	9,13	3,56	4,67	6,28	3,43	7,23	3,48	6,55	3,21	—
	PDMA	18,71	19,37	21,11	9,85	30,45	9,72	11,62	15,25	11,04	17,95	9,81	12,60	9,31	—
Δ CS	DM	-67,07	-71,34	-70,01	-35,13	-60,79	-52,90	-29,02	-60,19	-61,49	-60,34	-61,96	-44,22	-41,75	—
	DMA	69,35	72,15	72,07	35,66	47,47	51,59	27,68	49,77	60,41	48,26	60,12	33,50	39,73	—
	PDMA	70,49	73,77	74,39	29,52	31,81	60,22	10,90	26,06	51,47	30,18	50,93	29,60	38,88	—

Tabela 8.38: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func.	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Exp.
	% E_X^{HF}	21,80	21,98	22,20	25,00	27,00	28,00	28,00	42,00	50,00	50,00	54,00	56,00	100,00	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	418,4	396,4	449,4	396,0	643,5	435,6	793,7	516,0	496,0	492,0	450,8	548,5	142,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	19,2	20,3	20,6	18,6	19,1	9,8	19,4	14,4	11,6	8,1	4,6	5,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,4	-71,1	-73,3	-71,6	-99,2	-75,9	-106,9	-85,5	-82,3	-85,1	-90,2	-87,9	-53,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,4	-4,9	-5,8	-15,3	-5,5	-17,1	-5,2	-7,9	-9,7	-5,6	-3,1	10,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,3	43,4	42,4	43,0	52,9	44,5	44,8	48,3	46,0	49,5	53,7	44,3	38,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-8,7	-8,2	-9,3	-17,2	-8,5	-15,0	-9,4	-10,3	-12,7	-10,2	-5,5	-4,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	166,8	188,9	169,2	147,1	240,0	160,3	164,3	130,4	175,6	193,8	159,4	110,8	151,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1750,8	-1664,2	-1635,6	-1729,9	-1524,7	-1643,3	-1386,8	-1643,9	-1668,2	-1649,3	-1623,5	-1703,2	-1874,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,9	-133,5	-107,5	-135,4	-40,5	-132,0	16,4	-108,4	-99,6	-86,3	-120,9	-109,6	-279,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-31,3	-36,3	-5,2	-32,7	62,7	-29,2	124,9	2,9	12,9	22,1	-22,2	-5,7	-198,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,7	-352,2	-348,7	-390,2	-323,7	-377,2	-318,2	-392,6	-480,3	-503,3	-444,5	-536,1	-1518,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,3	130,7	117,1	125,2	142,0	126,8	100,9	161,6	127,3	143,1	146,1	117,7	69,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-12,8	-12,1	-14,1	-26,2	-12,5	-21,5	-14,6	-13,6	-16,3	-12,4	-6,9	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	205,3	213,8	192,2	197,3	194,5	196,1	210,6	343,6	203,3	221,0	228,7	225,6	252,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	277,0	264,3	248,8	259,4	302,7	259,4	251,0	299,2	262,7	291,7	273,4	211,9	93,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,4	53,0	53,9	53,7	50,5	55,8	36,7	62,2	53,2	54,3	57,1	49,8	45,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,9	11,4	10,8	13,1	17,8	11,1	21,3	12,7	12,5	15,5	10,0	8,1	5,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	73,0	78,3	64,7	69,7	65,8	67,0	77,4	128,3	73,3	87,0	92,2	86,1	86,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	170,6	164,5	150,1	159,3	185,7	160,8	143,6	197,6	162,6	182,1	179,6	143,8	-59,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,9	-1,5	-3,5	-6,9	-1,6	-14,4	-5,2	-4,3	-6,5	-3,0	-2,1	12,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,3	3,2	2,5	-13,2	4,4	-14,4	5,4	2,4	1,8	3,9	6,3	4,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,4	12,2	11,9	13,1	17,5	12,5	16,6	13,9	13,7	15,3	13,3	9,9	4,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,9	19,2	18,2	20,5	22,3	19,7	19,9	21,8	20,3	23,4	19,5	15,6	6,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,0	35,3	29,9	31,3	30,3	31,5	25,7	49,6	34,2	41,5	49,8	41,8	47,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	134,7	130,6	117,0	125,3	140,9	126,8	100,0	162,0	127,6	143,1	146,8	119,2	82,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-4,0	-3,5	-4,3	-5,7	-3,7	-4,8	-5,3	-4,5	-5,3	-3,9	-2,9	-3,5	-4,7
Total	DM	-17,76	-14,29	-13,32	-21,72	10,39	-15,50	15,90	2,30	-14,54	-8,87	-11,12	-21,69	-107,38	—
	DMA	27,38	22,68	16,59	26,73	24,39	20,47	32,23	33,06	20,06	25,39	27,21	32,92	121,05	—
	PDMA	28,90	26,55	18,26	27,04	73,82	26,81	107,70	36,85	13,25	28,64	31,25	35,76	150,46	—
CPI	DM	-52,32	-42,22	-31,18	-55,37	14,20	-41,18	42,64	-33,54	-40,42	-38,03	-44,18	-53,07	-220,19	—
	DMA	54,17	45,09	33,91	58,10	39,95	43,18	59,04	38,23	40,82	41,37	46,29	63,49	229,25	—
	PDMA	44,32	47,28	26,92	48,57	62,34	43,57	109,01	23,10	13,71	22,72	44,78	45,33	235,85	—
SPI	DM	7,58	6,19	-0,23	2,96	7,59	3,33	-3,70	28,58	4,44	12,51	13,13	1,32	-24,65	—
	DMA	7,74	6,25	3,89	3,72	12,98	3,81	12,57	29,27	4,84	13,67	13,21	10,49	41,71	—
	PDMA	17,59	11,34	11,92	11,25	82,24	14,51	106,73	46,93	12,91	32,98	21,33	28,74	87,84	—
Δ CS	DM	-59,90	-48,40	-30,96	-58,33	6,61	-44,52	46,34	-62,12	-44,86	-50,53	-57,32	-54,39	-195,54	—
	DMA	46,43	38,84	30,02	54,38	26,97	39,37	46,47	8,95	35,98	27,71	33,08	53,00	187,53	—
	PDMA	26,74	35,94	15,00	37,31	-19,90	29,06	2,28	-23,84	0,80	-10,26	23,45	16,58	148,01	—

8.3.1.2 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos - Geometrias Experimentais

Tabela 8.39: Constantes de acoplamento B1B95 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	371,1	394,7	418,4	442,4	466,5	490,8	515,2	539,8	564,6	589,5	614,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,4	20,6	18,8	16,8	14,7	12,5	10,3	8,0	5,6	3,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,2	-71,7	-74,2	-76,8	-79,3	-81,9	-84,5	-87,1	-89,7	-92,4	-95,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-3,7	-4,7	-5,7	-6,7	-7,7	-8,8	-9,8	-10,9	-12,0	-13,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,7	43,5	44,2	44,9	45,7	46,4	47,2	48,0	48,7	49,5	50,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-6,9	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	139,9	147,6	155,0	162,4	169,7	176,8	183,8	190,6	197,3	203,9	210,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1715,9	-1694,3	-1668,3	-1638,5	-1605,7	-1570,4	-1533,0	-1494,2	-1454,2	-1413,4	-1372,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-179,0	-162,1	-145,3	-128,5	-111,8	-95,3	-78,9	-62,6	-46,5	-30,6	-14,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,8	-62,2	-43,8	-25,5	-7,4	10,5	28,2	45,8	63,2	80,5	97,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-281,2	-315,6	-349,2	-383,0	-418,6	-458,0	-504,3	-563,1	-645,5	-779,4	-1062,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,2	124,5	125,8	127,2	128,6	130,0	131,5	132,9	134,4	135,9	137,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-11,3	-12,0	-12,7	-13,3	-14,0	-14,7	-15,3	-16,0	-16,7	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,6	190,9	193,6	196,5	200,0	203,9	208,4	213,7	219,9	227,3	236,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,9	255,8	257,8	259,9	262,1	264,5	267,0	269,8	272,9	276,5	280,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,8	56,0	56,0	55,8	55,5	54,9	54,1	52,9	51,4	49,4	46,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,7	10,1	10,6	11,2	11,8	12,6	13,6	14,7	16,0	17,6	19,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,6	61,9	64,5	67,2	70,3	73,7	77,5	81,9	87,2	93,5	101,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,3	157,2	159,1	161,1	163,2	165,4	167,8	170,4	173,3	176,6	180,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	-0,1	-0,8	-1,7	-2,7	-3,8	-5,1	-6,7	-8,5	-10,8	-13,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,6	4,9	4,2	3,5	2,7	1,8	0,8	-0,3	-1,7	-3,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	12,0	12,2	12,5	12,8	13,1	13,6	14,2	15,0	15,9	17,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	19,1	19,4	19,6	20,0	20,5	21,0	21,7	22,6	23,8	25,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,0	28,0	29,9	31,9	33,9	35,9	38,0	40,1	42,2	44,4	46,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,5	124,1	125,6	127,2	128,8	130,4	132,0	133,7	135,3	136,9	138,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,3	-3,8	-4,2	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,1	-4,7
Total	DM	-22,42	-20,09	-17,57	-14,88	-12,12	-9,40	-6,83	-4,62	-3,22	-3,68	-9,75	—
	DMA	28,84	24,87	22,36	19,88	17,65	16,03	17,57	21,77	27,28	37,08	54,03	—
	PDMA	54,52	44,23	34,60	24,82	16,58	13,11	21,28	35,17	50,39	68,12	90,04	—
CPI	DM	-54,36	-49,93	-45,09	-39,91	-34,65	-29,58	-24,97	-21,39	-19,90	-23,05	-39,82	—
	DMA	62,73	53,78	47,89	41,71	35,44	30,05	31,68	39,32	49,77	69,85	105,96	—
	PDMA	90,15	72,62	56,36	40,34	24,32	13,16	22,50	40,60	59,84	80,99	106,97	—
SPI	DM	1,00	1,79	2,61	3,47	4,41	5,40	6,48	7,67	9,01	10,53	12,31	—
	DMA	3,99	3,67	3,64	3,87	4,60	5,75	7,23	8,90	10,79	13,05	15,95	—
	PDMA	28,39	23,42	18,64	13,43	10,90	13,07	20,38	31,19	43,46	58,68	77,62	—
ΔCS	DM	-55,36	-51,71	-47,70	-43,38	-39,07	-34,98	-31,45	-29,06	-28,91	-33,58	-52,12	—
	DMA	58,74	50,12	44,25	37,84	30,84	24,31	24,46	30,42	38,99	56,81	90,02	—
	PDMA	61,76	49,20	37,72	26,91	13,42	0,09	2,12	9,41	16,38	22,31	29,35	—

Tabela 8.40: Constantes de acoplamento B3LYP com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	360,6	385,6	410,8	436,3	462,0	488,0	514,2	540,6	567,2	594,1	621,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,4	20,6	18,6	16,5	14,3	12,1	9,7	7,2	4,7	2,1	-0,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,6	-73,3	-76,0	-78,7	-81,4	-84,2	-87,0	-89,9	-92,7	-95,6	-98,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-4,9	-6,0	-7,1	-8,2	-9,3	-10,5	-11,7	-12,9	-14,1	-15,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,0	45,8	46,6	47,4	48,3	49,1	50,0	50,8	51,7	52,6	53,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,4	-9,4	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-14,3	-15,3	-16,3	-17,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,8	159,3	167,7	175,9	184,1	192,0	199,9	207,5	215,0	222,4	229,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1809,6	-1783,9	-1753,8	-1720,1	-1683,3	-1644,1	-1603,1	-1560,7	-1517,4	-1473,3	-1428,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,0	-154,5	-137,0	-119,7	-102,5	-85,5	-68,7	-52,1	-35,7	-19,5	-3,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-72,3	-53,1	-34,2	-15,4	3,0	21,3	39,4	57,4	75,1	92,7	110,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-294,3	-331,1	-368,0	-406,6	-449,1	-498,7	-561,3	-648,3	-787,6	-1071,0	-2152,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,5	135,1	136,6	138,2	139,9	141,5	143,2	144,9	146,6	148,4	150,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-13,0	-13,7	-14,5	-15,2	-16,0	-16,7	-17,5	-18,2	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,0	203,0	206,5	210,4	215,0	220,3	226,5	234,0	243,0	253,9	267,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	274,4	276,8	279,4	282,2	285,1	288,3	291,9	295,9	300,6	306,0	312,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,2	57,1	56,8	56,3	55,4	54,2	52,6	50,4	47,5	43,8	38,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,3	12,0	12,9	13,9	15,1	16,5	18,2	20,3	22,8	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,3	70,2	73,5	77,1	81,2	86,0	91,8	98,8	107,9	120,3	138,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	167,3	169,6	171,9	174,4	177,0	179,9	183,1	186,9	191,4	197,1	205,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,1	-0,9	-2,0	-3,1	-4,5	-6,1	-8,1	-10,5	-13,8	-18,4	-25,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,5	4,7	3,8	2,9	1,8	0,6	-0,8	-2,7	-5,3	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,0	13,3	13,7	14,1	14,8	15,6	16,6	18,1	20,2	23,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,4	20,6	21,0	21,4	22,0	22,8	23,7	25,0	26,7	29,1	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	32,2	34,4	36,6	38,8	41,1	43,5	45,8	48,2	50,7	53,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,4	134,2	136,0	137,8	139,6	141,5	143,4	145,2	147,1	149,1	151,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,6	-4,1	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-23,04	-20,44	-17,65	-14,76	-11,87	-9,10	-6,68	-5,07	-5,27	-10,75	-46,54	—
	DMA	32,76	30,21	28,02	26,08	24,59	24,42	28,37	34,39	42,85	57,31	104,12	—
	PDMA	49,87	40,12	30,43	24,00	21,68	26,16	41,81	59,40	80,85	108,20	152,76	—
CPI	DM	-62,93	-58,07	-52,87	-47,52	-42,27	-37,50	-33,78	-32,22	-35,35	-51,53	-140,30	—
	DMA	68,11	61,18	54,89	48,57	43,09	40,30	46,84	57,89	73,58	102,31	205,72	—
	PDMA	80,32	63,18	46,33	30,96	21,13	20,62	39,42	59,66	81,29	107,26	157,41	—
SPI	DM	6,21	7,16	8,18	9,27	10,43	11,73	13,19	14,84	16,79	19,16	22,22	—
	DMA	6,84	7,49	8,31	9,59	11,03	12,78	14,83	17,16	20,32	24,31	29,62	—
	PDMA	27,53	23,22	18,78	18,89	22,08	30,23	43,56	59,20	80,52	108,89	149,36	—
ΔCS	DM	-69,14	-65,23	-61,05	-56,78	-52,70	-49,23	-46,97	-47,06	-52,13	-70,69	-162,52	—
	DMA	61,27	53,69	46,58	38,99	32,06	27,52	32,01	40,73	53,26	78,00	176,10	—
	PDMA	52,79	39,96	27,55	12,07	-0,95	-9,60	-4,14	0,46	0,77	-1,63	8,05	—

Tabela 8.41: Constantes de acoplamento B3P86 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	324,9	348,6	372,6	396,7	421,2	445,8	470,7	495,7	521,0	546,5	572,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,4	23,8	22,0	20,2	18,2	16,2	14,1	12,0	9,8	7,5	5,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,1	-66,7	-69,2	-71,8	-74,4	-77,0	-79,7	-82,3	-85,0	-87,8	-90,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-4,1	-5,0	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,3	-11,4	-12,5	-13,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,1	41,9	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,4	48,3	49,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,2	-14,1	-15,0	-16,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	131,6	139,8	147,8	155,8	163,7	171,4	179,0	186,5	193,8	201,0	208,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1803,3	-1777,6	-1747,4	-1713,7	-1677,1	-1638,1	-1597,3	-1555,2	-1512,1	-1468,4	-1424,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-179,8	-162,7	-145,7	-128,9	-112,2	-95,6	-79,2	-63,0	-47,0	-31,2	-15,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,5	-64,7	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,2	60,6	77,8	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-302,1	-339,2	-376,6	-415,7	-458,9	-509,4	-573,0	-661,2	-800,7	-1076,2	-2007,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	123,3	124,8	126,3	127,9	129,5	131,1	132,7	134,3	136,0	137,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,7	-16,4	-17,1	-17,8	-18,5	-19,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,5	193,2	196,4	200,0	204,2	209,2	215,1	222,2	230,9	241,7	255,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,3	256,7	259,1	261,8	264,7	267,8	271,4	275,5	280,2	286,0	293,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,0	54,9	54,7	54,2	53,3	52,1	50,5	48,2	45,2	41,2	35,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,2	13,1	14,2	15,5	17,0	18,9	21,2	24,1	27,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,1	67,1	70,6	74,5	79,2	84,9	92,2	101,9	116,0	138,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,9	156,0	158,3	160,7	163,2	166,1	169,4	173,2	178,1	184,7	194,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,2	-2,2	-3,3	-4,6	-6,3	-8,3	-11,0	-14,7	-20,1	-29,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	4,2	3,4	2,5	1,5	0,3	-1,0	-2,7	-5,0	-8,3	-13,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,0	13,6	14,3	15,3	16,6	18,5	21,4	26,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,5	19,9	20,5	21,1	22,0	23,1	24,7	26,9	30,2	35,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,9	27,9	29,9	32,0	34,1	36,2	38,4	40,6	42,8	45,1	47,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	123,0	124,7	126,4	128,1	129,9	131,7	133,5	135,3	137,2	139,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-28,82	-26,33	-23,66	-20,90	-18,13	-15,51	-13,22	-11,73	-11,99	-17,14	-46,96	—
	DMA	34,08	31,40	28,78	26,58	24,77	23,58	24,35	27,92	35,93	50,23	92,11	—
	PDMA	51,82	41,83	31,98	25,15	22,95	25,01	35,35	53,33	76,05	106,17	156,17	—
CPI	DM	-69,15	-64,51	-59,51	-54,40	-49,41	-44,91	-41,47	-40,19	-43,51	-59,17	-134,47	—
	DMA	75,05	69,29	63,20	56,93	50,97	45,78	44,82	49,65	64,02	91,79	182,15	—
	PDMA	93,53	76,98	60,74	44,30	29,79	18,26	23,86	41,55	62,18	87,20	132,39	—
SPI	DM	0,75	1,67	2,63	3,67	4,80	6,05	7,49	9,15	11,13	13,69	17,22	—
	DMA	4,05	3,62	3,55	4,33	5,55	7,29	9,33	11,99	15,34	19,75	26,09	—
	PDMA	21,24	16,05	10,89	11,10	17,94	29,97	43,78	61,97	86,21	120,09	173,61	—
ΔCS	DM	-69,91	-66,18	-62,14	-58,07	-54,21	-50,96	-48,97	-49,34	-54,64	-72,86	-151,69	—
	DMA	71,00	65,67	59,65	52,60	45,43	38,49	35,48	37,66	48,68	72,04	156,06	—
	PDMA	72,29	60,93	49,85	33,20	11,85	-11,71	-19,92	-20,43	-24,03	-32,88	-41,22	—

Tabela 8.42: Constantes de acoplamento B971 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	394,5	411,1	428,6	447,2	466,9	487,8	510,0	533,3	558,0	583,9	611,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,5	15,4	14,2	12,9	11,4	9,7	8,0	6,0	3,9	1,7	-0,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,6	-68,7	-71,0	-73,4	-75,9	-78,6	-81,4	-84,4	-87,7	-91,1	-94,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,9	-0,1	-1,2	-2,3	-3,6	-4,9	-6,2	-7,7	-9,3	-11,0	-12,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,4	39,4	40,4	41,5	42,7	43,9	45,2	46,7	48,1	49,7	51,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,4	-4,3	-5,4	-6,5	-7,7	-9,0	-10,3	-11,8	-13,4	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	155,1	161,3	167,9	174,8	182,1	189,8	197,8	206,3	215,1	224,3	233,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1612,9	-1607,6	-1596,7	-1581,1	-1561,4	-1538,4	-1512,7	-1484,9	-1455,5	-1425,1	-1394,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-149,3	-134,8	-119,9	-104,8	-89,4	-73,9	-58,3	-42,7	-27,1	-11,5	3,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-57,8	-41,0	-24,0	-6,8	10,3	27,6	45,0	62,4	79,8	97,2	114,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-204,1	-235,9	-269,1	-304,1	-342,0	-384,7	-435,5	-501,2	-596,8	-767,1	-1235,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,0	108,2	111,6	115,2	119,0	123,1	127,5	132,1	136,9	142,1	147,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-7,0	-7,9	-8,8	-9,9	-11,0	-12,1	-13,4	-14,7	-16,1	-17,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,8	190,8	195,1	200,1	205,7	212,3	220,1	229,5	241,2	256,1	275,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	203,9	210,6	217,6	225,0	232,8	241,2	250,3	260,2	271,3	283,9	298,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,3	52,2	52,8	53,3	53,5	53,3	52,8	51,5	49,4	45,9	40,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	7,2	7,7	8,2	9,0	9,9	11,1	12,6	14,6	17,3	21,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,1	66,8	69,8	73,2	77,1	81,5	86,9	93,5	101,9	113,6	131,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,0	132,4	137,1	142,0	147,3	153,1	159,3	166,2	174,0	183,2	194,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,1	1,5	0,7	-0,2	-1,2	-2,5	-4,1	-6,2	-8,9	-12,9	-19,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,8	5,4	4,9	4,3	3,6	2,7	1,6	0,2	-1,8	-4,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	9,9	10,1	10,5	10,8	11,3	11,9	12,7	13,9	15,6	18,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,9	14,4	14,9	15,5	16,2	17,0	18,0	19,2	20,8	23,1	26,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,3	28,5	30,9	33,3	36,0	38,7	41,7	44,8	48,1	51,6	55,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	106,6	110,3	114,2	118,4	122,8	127,4	132,3	137,5	143,1	148,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,3	-1,9	-2,4	-3,0	-3,7	-4,4	-5,1	-5,9	-6,8	-7,7	-4,7
Total	DM	-16,64	-14,72	-12,53	-10,10	-7,48	-4,76	-2,04	0,38	2,00	1,17	-10,52	—
	DMA	28,75	24,27	19,53	14,83	12,45	11,98	14,82	20,84	28,73	41,48	67,88	—
	PDMA	59,09	49,25	39,06	28,56	18,51	15,87	22,10	34,87	54,74	80,27	117,17	—
CPI	DM	-29,88	-27,75	-25,09	-22,04	-18,75	-15,48	-12,55	-10,67	-11,29	-18,48	-52,63	—
	DMA	52,66	44,00	34,53	25,02	20,85	21,06	26,80	36,67	49,64	72,39	125,14	—
	PDMA	78,39	62,99	47,34	31,51	17,44	20,96	33,14	49,01	70,07	93,95	127,53	—
SPI	DM	-6,93	-5,17	-3,33	-1,34	0,79	3,10	5,67	8,49	11,75	15,59	20,35	—
	DMA	11,22	9,79	8,54	7,37	6,29	5,33	6,03	9,23	13,40	18,81	25,89	—
	PDMA	44,94	39,17	32,99	26,39	19,30	12,13	13,99	24,51	43,49	70,23	109,58	—
ΔCS	DM	-22,96	-22,58	-21,76	-20,70	-19,55	-18,58	-18,21	-19,17	-23,04	-34,07	-72,98	—
	DMA	41,44	34,21	25,99	17,65	14,56	15,74	20,77	27,45	36,24	53,58	99,25	—
	PDMA	33,44	23,82	14,36	5,12	-1,87	8,83	19,15	24,50	26,57	23,72	17,96	—

Tabela 8.43: Constantes de acoplamento B972 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	387,8	408,7	430,9	454,4	479,2	505,4	533,0	562,2	592,8	625,0	658,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	16,0	14,2	12,2	9,9	7,5	4,9	2,1	-0,9	-4,1	-7,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,7	-68,5	-71,4	-74,5	-77,8	-81,2	-84,9	-88,9	-93,0	-97,4	-102,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,3	-0,7	-1,7	-2,8	-4,0	-5,2	-6,5	-8,0	-9,5	-11,1	-12,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,1	38,3	39,7	41,1	42,6	44,2	45,9	47,8	49,7	51,7	53,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,4	-3,3	-4,2	-5,1	-6,2	-7,3	-8,5	-9,8	-11,2	-12,7	-14,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,6	152,7	160,2	168,2	176,6	185,4	194,6	204,3	214,4	224,8	235,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1625,7	-1620,3	-1609,7	-1594,6	-1575,9	-1554,3	-1530,5	-1505,0	-1478,4	-1451,4	-1424,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-155,7	-139,0	-121,9	-104,6	-87,2	-69,7	-52,3	-35,0	-17,7	-0,8	16,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,1	-46,7	-27,2	-7,5	12,0	31,7	51,4	71,0	90,6	110,1	129,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-201,6	-232,2	-264,1	-298,0	-334,9	-376,8	-427,2	-493,2	-591,7	-776,0	-1363,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	97,1	101,1	105,3	109,7	114,4	119,4	124,7	130,3	136,2	142,4	149,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-6,4	-7,2	-8,1	-9,0	-10,0	-11,0	-12,2	-13,3	-14,6	-15,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	173,4	178,2	183,5	189,5	196,3	204,1	213,2	224,1	237,3	253,8	275,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	193,2	200,7	208,7	217,0	225,9	235,3	245,5	256,4	268,5	281,9	297,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,4	50,3	51,1	51,7	52,1	52,2	51,8	50,9	49,2	46,4	41,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,7	7,1	7,5	8,0	8,7	9,5	10,5	11,8	13,5	15,7	18,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	55,3	58,7	62,4	66,7	71,5	77,0	83,6	91,7	102,1	116,4	137,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,7	124,8	130,3	136,0	142,2	148,8	156,0	163,8	172,7	183,0	195,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,6	0,9	0,1	-0,8	-2,1	-3,6	-5,6	-8,4	-12,3	-18,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,8	5,6	5,3	4,9	4,4	3,9	3,2	2,4	1,3	-0,3	-2,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,4	9,7	10,0	10,4	10,9	11,4	12,1	13,1	14,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,4	13,9	14,4	15,0	15,7	16,5	17,4	18,5	20,0	22,0	25,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	22,8	25,4	28,2	31,1	34,2	37,5	41,0	44,7	48,7	52,9	57,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	95,1	99,3	103,7	108,3	113,3	118,5	124,0	129,8	136,0	142,5	149,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,1	-1,6	-2,1	-2,6	-3,2	-3,8	-4,4	-5,1	-5,9	-6,7	-4,7
Total	DM	-20,65	-18,13	-15,31	-12,25	-9,00	-5,65	-2,35	0,65	2,77	1,98	-13,65	—
	DMA	32,07	26,88	21,52	15,77	12,58	12,67	16,09	22,52	31,33	44,28	75,06	—
	PDMA	63,41	52,51	41,74	30,35	19,64	18,97	25,18	35,71	54,85	80,42	117,97	—
CPI	DM	-33,61	-30,54	-26,92	-22,92	-18,78	-14,65	-11,00	-8,49	-8,71	-16,62	-61,02	—
	DMA	57,12	47,41	37,12	26,03	20,51	22,15	31,27	42,55	57,22	79,85	142,42	—
	PDMA	85,18	66,82	49,63	32,13	16,51	24,82	40,15	58,16	81,49	107,74	146,84	—
SPI	DM	-11,15	-9,03	-6,79	-4,42	-1,83	0,95	3,99	7,35	11,18	15,63	21,08	—
	DMA	13,71	11,82	10,09	8,25	6,76	5,72	4,96	7,84	12,35	18,19	25,67	—
	PDMA	47,45	42,02	35,95	29,04	21,94	14,68	14,20	19,25	35,32	60,38	96,80	—
ΔCS	DM	-22,46	-21,50	-20,12	-18,50	-16,96	-15,60	-14,99	-15,84	-19,89	-32,24	-82,10	—
	DMA	43,41	35,59	27,03	17,78	13,75	16,43	26,31	34,71	44,86	61,67	116,75	—
	PDMA	37,73	24,80	13,69	3,09	-5,43	10,14	25,95	38,91	46,17	47,35	50,04	—

Tabela 8.44: Constantes de acoplamento B98 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	378,8	395,3	413,0	431,8	451,8	473,1	495,7	519,7	545,1	572,0	600,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,3	16,2	14,9	13,5	11,9	10,2	8,4	6,3	4,1	1,7	-0,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,1	-69,4	-71,9	-74,5	-77,3	-80,3	-83,5	-87,0	-90,6	-94,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,8	-0,2	-1,2	-2,4	-3,6	-4,9	-6,4	-7,9	-9,5	-11,2	-13,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,8	38,9	40,0	41,2	42,5	43,9	45,4	46,9	48,6	50,4	52,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-3,5	-4,5	-5,5	-6,7	-7,9	-9,3	-10,7	-12,3	-14,0	-15,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	159,1	165,4	172,2	179,3	186,9	194,9	203,3	212,1	221,3	231,0	241,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1621,9	-1616,9	-1606,4	-1590,9	-1571,4	-1548,4	-1522,7	-1494,9	-1465,5	-1435,0	-1403,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,4	-139,8	-124,9	-109,5	-93,9	-78,1	-62,1	-46,1	-30,0	-13,9	1,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,6	-46,8	-29,8	-12,5	4,9	22,4	40,1	57,9	75,8	93,7	111,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-210,8	-243,2	-277,1	-313,2	-352,5	-397,3	-451,6	-523,3	-631,7	-837,8	-1521,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,6	107,2	111,0	115,1	119,4	124,0	129,0	134,2	139,8	145,7	152,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,1	-8,0	-9,0	-10,1	-11,3	-12,5	-13,8	-15,3	-16,8	-18,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,2	189,5	194,2	199,6	205,7	212,9	221,3	231,6	244,3	260,7	282,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	201,3	208,6	216,2	224,4	233,0	242,3	252,3	263,3	275,6	289,8	306,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,9	51,8	52,6	53,2	53,5	52,9	51,7	49,5	45,7	39,6	50,1	
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,7	7,1	7,6	8,2	9,0	10,0	11,2	12,9	15,1	18,1	22,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,9	65,9	69,2	72,9	77,1	82,0	87,9	95,2	104,7	118,1	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,3	131,1	136,2	141,7	147,6	153,9	160,8	168,5	177,3	187,8	201,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,1	1,4	0,6	-0,3	-1,2	-2,5	-4,2	-6,4	-9,4	-13,9	-21,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	-0,1	-2,3	-6,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	9,8	10,1	10,5	10,9	11,4	12,1	13,0	14,2	16,2	19,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,7	14,2	14,8	15,5	16,2	17,1	18,2	19,5	21,4	23,9	28,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,8	30,4	33,1	36,0	39,1	42,4	45,9	49,7	53,7	58,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,7	105,6	109,7	114,0	118,7	123,6	128,9	134,4	140,3	146,6	153,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,4	-1,9	-2,5	-3,1	-3,8	-4,5	-5,3	-6,1	-7,1	-8,1	-4,7
Total	DM	-18,51	-16,52	-14,24	-11,69	-8,95	-6,11	-3,32	-0,86	0,57	-1,25	-20,70	—
	DMA	30,09	25,45	20,57	16,42	13,98	13,18	15,78	22,09	30,86	44,73	80,16	—
	PDMA	60,76	50,48	40,20	29,65	19,63	14,10	20,66	35,79	57,14	85,17	129,04	—
CPI	DM	-33,21	-31,15	-28,55	-25,55	-22,32	-19,12	-16,40	-14,95	-16,55	-26,78	-80,27	—
	DMA	55,19	46,33	36,79	28,76	24,63	24,12	28,25	38,13	52,51	77,00	149,64	—
	PDMA	82,94	66,60	50,98	35,56	21,35	17,99	29,70	47,08	69,15	94,66	135,53	—
SPI	DM	-7,73	-5,80	-3,75	-1,53	0,85	3,43	6,28	9,47	13,13	17,47	22,99	—
	DMA	11,69	10,13	8,68	7,36	6,17	5,15	6,63	10,33	14,98	21,06	29,21	—
	PDMA	44,49	38,65	32,30	25,31	18,36	11,25	14,03	27,51	48,33	78,21	124,29	—
ΔCS	DM	-25,48	-25,35	-24,81	-24,01	-23,16	-22,55	-22,68	-24,41	-29,67	-44,26	-103,26	—
	DMA	43,50	36,19	28,11	21,40	18,46	18,96	21,63	27,79	37,53	55,94	120,42	—
	PDMA	38,45	27,94	18,68	10,24	2,99	6,74	15,68	19,57	20,82	16,46	11,24	—

Tabela 8.45: Constantes de acoplamento BHandH com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	387,8	408,3	429,6	451,6	474,4	498,0	522,5	547,8	574,1	601,4	629,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,5	23,6	21,6	19,4	17,0	14,4	11,7	8,7	5,6	2,3	-1,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,8	-71,3	-74,0	-76,7	-79,6	-82,6	-85,8	-89,1	-92,6	-96,2	-100,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,8	-2,9	-4,0	-5,3	-6,5	-7,9	-9,3	-10,8	-12,4	-14,1	-15,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,3	42,5	43,7	45,0	46,3	47,8	49,3	50,8	52,5	54,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,5	-5,6	-6,6	-7,8	-9,0	-10,2	-11,6	-13,0	-14,5	-16,1	-17,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	128,7	137,5	146,7	156,2	166,1	176,3	186,9	197,8	209,1	220,6	232,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,7	-1796,4	-1772,4	-1742,8	-1708,3	-1669,7	-1627,6	-1582,7	-1535,5	-1486,6	-1436,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-191,7	-173,8	-155,5	-137,1	-118,3	-99,5	-80,4	-61,3	-42,1	-22,9	-3,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-81,9	-63,2	-44,4	-25,4	-6,2	13,0	32,5	52,1	71,8	91,7	111,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-286,4	-322,5	-358,3	-394,8	-434,1	-479,3	-535,7	-614,3	-742,2	-1015,1	-2268,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,5	111,9	115,5	119,3	123,2	127,4	131,9	136,5	141,4	146,5	151,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-9,2	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-14,8	-16,0	-17,3	-18,7	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	176,2	180,3	184,9	190,1	196,1	203,1	211,3	221,3	233,5	249,0	269,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	229,7	235,6	241,7	248,3	255,3	262,8	271,1	280,2	290,6	302,5	316,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,5	52,4	53,0	53,5	53,6	53,3	52,5	51,0	48,5	44,5	38,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,8	8,4	9,1	10,0	11,1	12,4	14,0	16,1	18,7	22,1	26,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,1	54,5	58,3	62,5	67,4	73,0	79,6	88,0	98,9	114,5	139,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,1	142,4	146,9	151,8	156,9	162,5	168,7	175,6	183,7	193,7	207,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,5	-0,2	-0,8	-1,7	-2,8	-4,2	-6,0	-8,4	-11,8	-16,9	-25,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,2	4,6	4,0	3,3	2,4	1,3	0,1	-1,8	-4,5	-9,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,8	12,1	12,5	13,0	13,6	14,4	15,5	17,1	19,6	24,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,9	17,3	17,9	18,5	19,3	20,2	21,4	23,0	25,1	28,2	33,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	19,6	22,2	24,9	27,8	30,9	34,2	37,6	41,3	45,2	49,3	53,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,0	111,6	115,3	119,2	123,4	127,7	132,3	137,1	142,1	147,3	152,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-2,3	-2,8	-3,3	-3,9	-4,5	-5,1	-5,8	-6,5	-7,2	-8,0	-4,7
Total	DM	-30,64	-28,00	-24,98	-21,65	-18,08	-14,46	-10,92	-7,88	-6,37	-9,91	-50,34	—
	DMA	35,38	31,38	28,05	24,46	21,36	19,97	23,28	29,93	39,09	54,63	109,57	—
	PDMA	60,71	49,46	38,39	26,72	16,62	12,91	26,54	45,95	69,92	101,58	157,77	—
CPI	DM	-64,32	-60,54	-55,97	-50,90	-45,49	-40,19	-35,45	-32,40	-33,53	-47,58	-150,53	—
	DMA	72,52	65,06	59,26	52,85	46,25	40,65	44,10	54,71	70,02	98,55	217,07	—
	PDMA	96,86	78,98	61,73	43,75	26,10	13,55	28,19	50,64	75,10	104,47	163,91	—
SPI	DM	-5,94	-4,15	-2,25	-0,19	2,02	4,41	7,07	10,09	13,55	17,72	23,13	—
	DMA	8,14	6,68	5,15	3,65	3,10	4,80	8,01	11,76	16,41	22,43	30,73	—
	PDMA	34,19	27,82	21,27	14,23	9,67	12,45	25,33	42,50	66,12	99,46	153,27	—
ΔCS	DM	-58,38	-56,39	-53,73	-50,71	-47,51	-44,60	-42,52	-42,49	-47,08	-65,30	-173,66	—
	DMA	64,38	58,38	54,11	49,20	43,15	35,85	36,09	42,95	53,61	76,12	186,34	—
	PDMA	62,67	51,16	40,45	29,52	16,43	1,09	2,87	8,14	8,98	5,01	10,65	—

Tabela 8.46: Constantes de acoplamento BMK com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	458,6	470,0	482,4	495,9	510,7	526,9	544,6	564,2	585,9	609,7	636,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,5	15,0	15,3	15,5	15,5	15,3	14,8	14,0	12,7	10,9	8,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,2	-71,7	-72,3	-73,0	-73,8	-74,8	-75,9	-77,2	-78,7	-80,3	-82,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,3	3,3	2,1	1,0	-0,3	-1,7	-3,2	-4,9	-6,6	-8,5	-10,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,3	37,4	37,5	37,6	37,9	38,2	38,5	39,0	39,5	40,1	40,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,7	-1,6	-2,6	-3,8	-5,0	-6,3	-7,8	-9,4	-11,1	-13,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	119,0	118,6	118,6	119,2	120,2	121,7	123,7	126,2	129,3	132,9	137,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1528,7	-1526,9	-1517,2	-1500,0	-1475,6	-1444,5	-1407,5	-1365,2	-1318,3	-1267,7	-1213,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-147,4	-136,0	-122,5	-107,1	-89,7	-70,4	-49,2	-26,2	-1,6	24,8	52,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-53,2	-39,3	-23,5	-5,9	13,3	34,5	57,3	82,0	108,3	136,3	165,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-161,8	-188,2	-215,3	-242,7	-270,3	-298,7	-329,1	-363,5	-406,6	-468,5	-581,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,6	107,2	109,0	111,2	113,7	116,7	120,0	123,8	128,2	133,2	138,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,0	-9,5	-11,2	-13,1	-15,2	-17,6	-20,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	245,2	249,9	255,1	261,2	268,3	277,0	287,9	302,2	321,8	350,2	395,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	181,2	187,3	193,8	200,9	208,7	217,3	227,1	238,6	252,3	269,8	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	55,6	56,3	56,8	56,9	56,6	55,5	53,3	49,3	42,0	28,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,9	6,2	6,6	7,1	7,8	8,8	10,1	11,9	14,5	18,4	24,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	90,2	91,7	93,6	96,0	98,9	102,5	107,3	113,5	122,2	135,1	156,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,4	125,5	129,1	133,0	137,4	142,4	148,2	154,9	163,1	173,4	187,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,1	3,2	2,2	1,1	-0,3	-1,8	-3,8	-6,4	-10,1	-15,5	-24,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,9	7,4	6,8	6,0	5,1	4,0	2,7	0,9	-1,2	-4,4	-9,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,5	9,6	9,7	9,9	10,1	10,5	11,0	11,8	13,1	15,2	18,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,9	12,4	12,9	13,5	14,1	14,9	15,9	17,2	19,0	21,7	26,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,0	31,9	33,0	34,2	35,7	37,4	39,4	41,6	44,2	47,3	50,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,3	105,2	107,5	110,1	113,0	116,3	120,1	124,4	129,2	134,7	141,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-0,2	-1,0	-1,7	-2,6	-3,5	-4,5	-5,6	-6,9	-8,3	-9,9	-4,7
Total	DM	-7,82	-6,73	-5,09	-2,87	-0,08	3,31	7,25	11,72	16,65	21,88	26,66	—
	DMA	30,38	27,39	23,79	19,63	15,82	14,43	18,38	23,55	31,28	42,80	58,96	—
	PDMA	72,80	63,81	53,53	42,10	29,45	26,76	30,27	43,33	64,11	96,40	143,49	—
CPI	DM	-15,39	-14,49	-12,49	-9,36	-5,16	0,05	6,07	12,70	19,42	25,25	27,17	—
	DMA	46,12	39,98	32,56	23,95	16,07	14,00	24,35	36,83	50,96	68,10	91,17	—
	PDMA	84,22	71,11	56,36	40,29	22,94	30,81	45,17	60,83	78,09	102,92	133,53	—
SPI	DM	-2,27	-1,03	0,34	1,90	3,65	5,70	8,11	10,99	14,63	19,41	26,29	—
	DMA	18,85	18,15	17,35	16,47	15,63	14,74	14,00	13,81	16,84	24,25	35,34	—
	PDMA	64,43	58,46	51,45	43,42	34,22	23,80	19,34	30,50	53,86	91,62	150,79	—
ΔCS	DM	-13,12	-13,46	-12,83	-11,26	-8,81	-5,65	-2,03	1,71	4,79	5,84	0,89	—
	DMA	27,27	21,83	15,21	7,47	0,44	-0,74	10,35	23,02	34,12	43,85	55,83	—
	PDMA	19,79	12,65	4,92	-3,13	-11,27	7,01	25,83	30,33	24,23	11,30	-17,26	—

Tabela 8.47: Constantes de acoplamento BP86 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	322,5	346,1	370,0	394,1	418,5	443,0	467,9	492,9	518,2	543,7	569,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,6	23,9	22,2	20,4	18,4	16,5	14,4	12,3	10,1	7,8	5,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,7	-66,2	-68,7	-71,3	-73,9	-76,5	-79,1	-81,8	-84,4	-87,2	-89,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-4,0	-5,0	-6,0	-7,0	-8,1	-9,1	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,3	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	48,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,7	-8,6	-9,5	-10,3	-11,2	-12,1	-13,0	-14,0	-14,9	-15,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,1	138,1	146,0	153,9	161,6	169,2	176,7	184,0	191,3	198,3	205,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,8	-1776,7	-1747,2	-1714,0	-1677,8	-1639,2	-1598,8	-1557,0	-1514,2	-1470,7	-1426,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,2	-165,2	-148,3	-131,5	-114,9	-98,3	-82,0	-65,8	-49,8	-34,0	-18,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,4	-66,7	-48,3	-30,0	-11,9	5,9	23,6	41,2	58,5	75,7	92,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-304,4	-341,7	-379,3	-418,7	-462,1	-513,0	-576,9	-665,3	-804,7	-1078,6	-1987,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,0	121,4	122,9	124,4	125,9	127,4	129,0	130,6	132,2	133,9	135,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,4	-17,1	-17,8	-18,4	-19,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,0	190,6	193,7	197,2	201,3	206,1	211,8	218,7	227,1	237,6	250,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,7	253,0	255,4	258,0	260,8	263,9	267,4	271,4	276,1	281,7	288,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,9	54,9	54,7	54,2	53,4	52,2	50,6	48,4	45,5	41,6	36,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,2	13,1	14,1	15,4	17,0	18,8	21,1	23,9	27,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,2	62,9	65,9	69,2	73,1	77,6	83,1	90,1	99,4	112,9	134,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,6	153,7	155,9	158,2	160,7	163,5	166,6	170,4	175,1	181,5	191,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,2	-2,1	-3,3	-4,6	-6,1	-8,1	-10,7	-14,3	-19,5	-28,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,1	3,3	2,4	1,4	0,2	-1,0	-2,7	-5,0	-8,2	-13,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,0	13,6	14,3	15,3	16,6	18,4	21,3	26,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	19,9	20,4	21,0	21,9	23,0	24,5	26,7	29,9	35,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,1	31,1	33,2	35,3	37,4	39,6	41,8	44,1	46,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	121,1	122,8	124,5	126,2	127,9	129,7	131,5	133,2	135,1	136,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,7	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-29,70	-27,27	-24,65	-21,95	-19,23	-16,67	-14,43	-12,98	-13,29	-18,44	-47,49	—
	DMA	34,52	31,91	29,18	26,70	24,77	23,50	23,89	27,40	34,96	49,12	89,79	—
	PDMA	52,60	42,76	32,91	25,66	23,57	24,97	33,76	51,41	73,67	103,21	151,49	—
CPI	DM	-69,95	-65,41	-60,53	-55,50	-50,59	-46,18	-42,81	-41,58	-44,93	-60,49	-133,76	—
	DMA	75,95	70,34	64,35	58,17	52,23	47,09	45,30	50,09	63,51	91,13	179,00	—
	PDMA	95,34	79,07	62,74	46,46	31,72	19,92	22,17	39,72	60,03	84,97	129,40	—
SPI	DM	-0,19	0,71	1,66	2,65	3,76	4,98	6,37	7,99	9,91	12,40	15,77	—
	DMA	4,14	3,73	3,39	3,63	4,63	6,19	8,19	10,76	14,02	18,31	24,37	—
	PDMA	21,26	16,13	11,03	10,41	17,59	28,67	42,26	59,99	83,68	116,59	167,69	—
ΔCS	DM	-69,75	-66,12	-62,19	-58,15	-54,35	-51,16	-49,18	-49,57	-54,84	-72,89	-149,54	—
	DMA	71,81	66,60	60,95	54,55	47,60	40,90	37,11	39,33	49,49	72,82	154,63	—
	PDMA	74,08	62,94	51,71	36,05	14,13	-8,76	-20,09	-20,27	-23,64	-31,62	-38,29	—

Tabela 8.48: Constantes de acoplamento BPW91 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	320,5	344,6	369,1	393,8	418,7	443,9	469,4	495,1	521,0	547,1	573,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,9	24,3	22,5	20,7	18,8	16,8	14,7	12,5	10,3	8,0	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,8	-66,4	-69,0	-71,6	-74,3	-77,0	-79,7	-82,4	-85,2	-88,0	-90,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,6	-4,6	-5,6	-6,6	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	49,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-12,0	-12,9	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,5	138,8	147,1	155,2	163,3	171,2	179,0	186,6	194,1	201,5	208,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1809,9	-1783,8	-1753,4	-1719,3	-1682,4	-1643,1	-1602,0	-1559,6	-1516,2	-1472,2	-1427,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,3	-165,1	-148,1	-131,1	-114,3	-97,6	-81,1	-64,7	-48,6	-32,6	-16,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,4	-66,6	-47,9	-29,5	-11,2	6,8	24,6	42,4	59,9	77,3	94,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-306,0	-344,2	-382,9	-423,5	-468,7	-522,0	-590,0	-685,7	-841,7	-1167,9	-2540,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	122,9	124,4	126,0	127,6	129,2	130,9	132,5	134,2	135,9	137,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,8	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,6	191,4	194,6	198,4	202,9	208,2	214,5	222,3	231,9	244,0	259,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,4	256,9	259,5	262,4	265,4	268,9	272,8	277,4	282,8	289,4	297,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,0	54,9	54,5	53,9	52,9	51,4	49,4	46,8	43,1	38,2	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,4	12,1	13,0	14,0	15,2	16,7	18,5	20,7	23,4	26,9	31,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,4	66,6	70,2	74,4	79,4	85,6	93,7	105,0	122,2	152,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,8	156,0	158,3	160,8	163,5	166,6	170,2	174,5	180,1	188,3	201,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,8	-2,8	-4,0	-5,5	-7,3	-9,6	-12,8	-17,2	-24,1	-36,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,5	2,7	1,7	0,6	-0,6	-2,2	-4,3	-7,2	-11,5	-19,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,3	12,6	13,0	13,6	14,3	15,1	16,3	18,0	20,4	24,3	31,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,7	20,1	20,6	21,2	22,0	23,0	24,3	26,2	29,0	33,4	41,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,4	29,4	31,5	33,6	35,7	37,9	40,1	42,4	44,7	47,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,1	122,8	124,5	126,3	128,1	129,9	131,7	133,6	135,4	137,3	139,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,78	-27,29	-24,61	-21,82	-19,06	-16,45	-14,24	-12,88	-13,59	-20,41	-66,63	—
	DMA	34,85	32,22	29,63	27,48	25,84	24,72	25,51	29,57	38,51	55,29	114,95	—
	PDMA	50,84	40,58	32,00	28,26	28,40	30,77	41,65	61,80	87,51	123,63	190,97	—
CPI	DM	-71,04	-66,40	-61,43	-56,32	-51,41	-47,05	-43,90	-43,17	-47,88	-68,05	-183,29	—
	DMA	76,89	71,15	65,03	58,86	53,06	48,00	46,70	52,17	68,05	100,52	230,44	—
	PDMA	94,48	77,93	61,34	45,92	32,42	21,18	24,63	42,83	64,17	91,08	149,79	—
SPI	DM	0,48	1,39	2,39	3,49	4,67	6,00	7,51	9,33	11,55	14,52	18,91	—
	DMA	4,03	3,68	3,67	4,47	5,88	7,65	9,97	12,99	16,85	22,12	30,26	—
	PDMA	18,84	13,19	10,48	15,31	25,44	37,80	54,13	75,70	104,62	147,49	221,17	—
ΔCS	DM	-71,52	-67,79	-63,81	-59,80	-56,08	-53,05	-51,41	-52,50	-59,44	-82,57	-202,20	—
	DMA	72,86	67,47	61,36	54,39	47,18	40,35	36,73	39,18	51,20	78,40	200,18	—
	PDMA	75,64	64,74	50,86	30,61	6,98	-16,63	-29,50	-32,88	-40,45	-56,41	-71,38	—

Tabela 8.49: Constantes de acoplamento M05 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	814,2	807,3	800,7	794,5	788,6	783,1	778,0	773,0	768,3	763,6	758,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,5	14,4	12,0	9,2	6,0	2,4	-1,4	-5,5	-10,0	-14,8	-19,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-107,8	-107,6	-107,4	-107,2	-107,1	-106,9	-106,9	-106,9	-106,9	-107,0	-107,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-17,1	-17,2	-17,2	-17,1	-16,8	-16,4	-15,9	-15,2	-14,4	-13,5	-12,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	43,1	44,2	45,3	46,4	47,5	48,6	49,6	50,6	51,6	52,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-13,5	-14,3	-15,0	-15,5	-15,8	-16,0	-15,9	-15,6	-15,0	-14,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,7	160,0	161,4	166,2	173,5	182,1	191,3	200,4	209,1	217,3	225,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1356,9	-1375,3	-1385,8	-1388,2	-1382,9	-1371,3	-1354,6	-1334,1	-1311,1	-1286,3	-1260,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-2,1	3,9	10,6	18,0	26,2	35,2	45,2	56,2	68,5	82,0	97,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	100,8	109,0	117,7	127,0	136,9	147,7	159,3	172,0	185,7	200,6	216,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-233,2	-268,0	-297,1	-321,9	-344,3	-365,9	-389,0	-416,5	-453,4	-509,2	-606,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	83,4	89,7	96,0	102,3	108,6	114,9	121,2	127,5	133,6	139,6	145,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-21,1	-21,4	-21,5	-21,5	-21,3	-21,1	-20,7	-20,1	-19,5	-18,8	-18,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	183,6	192,7	202,3	212,5	223,3	234,7	246,8	259,5	273,1	287,4	302,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,3	235,4	244,2	252,8	260,9	268,7	276,0	282,6	288,5	293,5	297,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	36,1	36,4	36,7	36,9	37,0	37,0	37,1	37,0	36,7	36,2	35,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	20,2	20,7	21,0	21,2	21,3	21,3	21,2	21,0	20,8	20,7	20,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,6	64,8	71,4	78,6	86,4	94,8	104,0	113,9	124,6	136,3	149,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	129,6	137,4	145,1	152,7	160,3	167,7	175,0	182,0	188,9	195,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,8	-12,6	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,7	-18,8	-20,0	-21,3	-22,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-15,8	-15,5	-14,9	-14,2	-13,4	-12,4	-11,2	-9,9	-8,6	-7,3	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,8	15,5	16,1	16,6	17,0	17,3	17,5	17,6	17,6	17,6	17,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,2	17,6	18,8	20,0	21,1	22,0	22,8	23,5	24,0	24,5	25,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	16,1	19,4	22,8	26,5	30,3	34,2	38,4	42,8	47,3	52,1	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	82,0	88,5	94,9	101,4	107,9	114,5	121,0	127,5	133,9	140,3	146,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,3	-6,8	-7,2	-7,7	-8,2	-4,7
Total	DM	14,13	14,15	14,89	16,33	18,34	20,78	23,52	26,32	28,95	31,01	31,60	—
	DMA	36,39	33,58	31,57	32,45	34,05	36,21	39,49	44,02	49,74	56,38	64,82	—
	PDMA	99,99	101,94	104,12	108,32	113,03	117,89	123,60	129,97	137,33	145,53	155,44	—
CPI	DM	51,32	46,84	43,99	42,72	42,74	43,71	45,25	46,93	48,17	48,04	44,41	—
	DMA	63,75	59,87	57,19	59,61	62,97	66,91	72,17	79,45	88,03	98,65	113,35	—
	PDMA	88,97	95,14	102,00	110,95	120,18	129,90	140,48	152,20	164,85	178,69	194,47	—
SPI	DM	-13,15	-9,81	-6,45	-3,02	0,45	3,97	7,58	11,21	14,85	18,53	22,21	—
	DMA	16,32	14,29	12,77	12,54	12,84	13,69	15,53	18,03	21,66	25,38	29,23	—
	PDMA	108,07	106,92	105,68	106,38	107,78	109,08	111,22	113,68	117,14	121,22	126,82	—
ΔCS	DM	64,46	56,65	50,44	45,74	42,28	39,74	37,67	35,71	33,33	29,51	22,20	—
	DMA	47,43	45,58	44,42	47,07	50,13	53,22	56,65	61,43	66,37	73,27	84,12	—
	PDMA	-19,10	-11,78	-3,67	4,57	12,40	20,83	29,26	38,52	47,71	57,47	67,66	—

Tabela 8.50: Constantes de acoplamento M06 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	559,0	587,3	619,8	657,3	700,6	750,1	805,8	867,7	935,0	1006,7	1081,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	18,3	18,6	18,5	17,7	16,1	13,7	10,2	5,7	-0,1	-7,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-84,9	-89,5	-95,0	-101,6	-109,5	-118,9	-130,1	-143,4	-159,1	-177,8	-200,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-7,6	-11,8	-16,9	-23,3	-31,3	-41,2	-53,4	-68,7	-87,8	-111,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	46,9	50,4	54,5	59,4	65,2	72,4	81,1	91,9	105,5	123,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-9,8	-13,7	-18,8	-25,4	-34,1	-45,6	-61,1	-82,2	-111,4	-153,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	192,5	207,6	225,7	247,7	274,8	308,3	350,7	405,0	476,4	570,9	694,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1436,5	-1475,9	-1508,2	-1532,9	-1551,5	-1566,4	-1578,8	-1587,5	-1590,3	-1585,4	-1572,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-71,6	-62,2	-50,3	-35,8	-19,0	-0,6	18,6	37,4	54,4	67,3	71,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	24,9	37,0	51,3	68,1	87,6	109,4	133,1	158,0	183,5	209,3	235,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-175,4	-225,4	-280,2	-342,5	-420,4	-544,3	-990,0	4253,5	-29,8	-236,6	-335,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,8	117,2	130,9	147,3	167,3	191,8	222,4	261,4	312,4	381,5	479,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-16,9	-21,8	-28,2	-36,6	-47,6	-62,5	-83,1	-112,6	-156,5	-225,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	162,4	171,4	183,2	200,2	228,1	286,1	503,0	-632,0	-13,3	128,9	5816,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	212,1	240,6	274,6	316,4	371,0	453,7	664,5	-163,5	364,0	498,6	-158,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,0	51,6	51,9	49,3	39,9	9,3	-140,8	758,6	315,7	283,1	1065,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,2	10,3	13,8	19,9	31,8	60,9	184,6	-514,2	-157,7	-116,7	-1,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,8	55,3	60,3	68,4	83,8	126,7	1247,8	-63,3	-9,4	7,2	14,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,2	148,8	168,8	193,7	227,1	284,1	1106,6	220,7	306,4	378,1	460,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-1,3	-3,9	-8,5	-18,1	-46,7	-835,3	91,5	56,5	48,4	48,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-5,7	-9,4	-15,4	-26,5	-56,2	-791,8	62,0	21,2	1,8	-16,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,3	12,8	15,0	18,9	27,1	52,8	782,9	-78,6	-48,8	-45,1	-50,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,7	15,2	18,7	24,1	34,3	63,0	821,7	-67,3	-32,1	-22,7	-20,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,0	23,8	27,3	31,7	37,3	44,4	53,8	66,6	84,5	111,0	153,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	115,1	129,3	146,4	167,2	192,6	224,3	264,8	317,9	390,6	495,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,8	-4,4	-6,4	-9,0	-12,5	-17,4	-24,5	-35,0	-51,8	-80,6	-4,7
Total	DM	2,57	4,50	7,53	11,94	18,10	27,34	104,90	162,37	51,60	67,38	306,17	—
	DMA	14,96	13,68	17,32	28,76	46,90	76,80	322,61	351,02	132,10	141,45	416,70	—
	PDMA	31,72	32,41	49,08	87,43	155,03	311,24	3388,87	805,16	464,24	464,71	735,37	—
CPI	DM	19,80	16,89	15,06	14,25	13,65	10,24	-21,12	466,05	88,72	83,61	89,55	—
	DMA	20,58	24,95	31,46	45,92	66,66	93,29	151,59	522,98	156,45	163,68	190,90	—
	PDMA	20,23	23,96	44,36	71,42	105,32	146,80	207,19	380,31	318,04	394,23	495,97	—
SPI	DM	-10,06	-4,58	2,01	10,25	21,37	39,89	197,31	-60,33	24,37	55,49	465,01	—
	DMA	10,83	5,42	6,95	16,18	32,41	64,71	448,02	224,91	114,25	125,14	582,28	—
	PDMA	40,15	38,61	52,54	99,17	191,49	431,83	5722,10	1116,71	571,46	516,39	910,93	—
ΔCS	DM	29,86	21,47	13,05	4,00	-7,73	-29,65	-218,43	526,39	64,34	28,12	-375,46	—
	DMA	9,75	19,53	24,52	29,74	34,25	28,58	-296,43	298,08	42,19	38,54	-391,38	—
	PDMA	-19,93	-14,65	-8,18	-27,75	-86,17	-285,04	-5514,91	-736,40	-253,42	-122,16	-414,97	—

Tabela 8.51: Constantes de acoplamento M062X com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	413,1	416,6	420,6	426,3	434,6	446,7	463,6	486,4	516,1	553,6	599,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	4,4	5,4	6,4	7,3	7,9	8,1	7,8	6,7	4,4	0,5	-6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-74,5	-77,1	-80,2	-83,9	-88,4	-93,9	-100,6	-108,7	-118,4	-130,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	4,5	3,0	1,2	-1,2	-4,2	-8,0	-12,9	-19,0	-26,7	-36,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,0	41,0	43,2	45,8	48,8	52,4	56,7	61,7	67,7	75,0	83,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	1,1	0,2	-1,2	-3,1	-5,5	-8,6	-12,7	-18,0	-25,0	-34,3	-46,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,2	127,4	130,5	135,9	143,8	154,8	169,3	188,3	212,4	243,2	282,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1441,6	-1488,1	-1532,6	-1572,3	-1603,0	-1621,3	-1626,9	-1622,3	-1612,1	-1602,0	-1596,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-171,1	-167,6	-160,7	-151,0	-139,4	-126,4	-112,0	-96,6	-80,2	-63,1	-45,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-91,4	-82,3	-71,0	-58,1	-43,8	-28,5	-12,1	5,4	24,6	45,7	68,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-170,9	-214,0	-260,5	-310,1	-362,7	-419,2	-483,1	-564,4	-699,4	-1319,5	-2176,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	88,9	96,2	104,6	114,6	126,2	140,0	156,4	176,1	199,9	229,1	265,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,5	-1,6	-3,1	-5,1	-7,6	-10,8	-15,0	-20,4	-27,6	-37,1	-49,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	168,4	175,4	183,6	193,3	205,3	220,8	242,2	274,6	332,4	473,5	1542,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	145,7	162,7	182,2	204,4	230,0	260,0	295,7	340,1	400,3	503,8	1040,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	47,0	49,4	51,9	54,2	56,1	57,2	56,5	52,0	37,1	-14,3	-491,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	4,9	5,4	5,9	6,6	7,6	9,1	11,5	16,0	25,4	52,0	275,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,2	64,0	67,7	72,4	78,7	87,4	100,2	121,4	163,0	285,5	14163,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	111,2	122,8	136,3	152,1	170,9	193,9	223,2	265,1	347,5	6658,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	5,9	5,2	4,3	3,1	1,3	-1,4	-5,8	-13,6	-30,5	-83,5	-6359,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,2	7,2	7,0	6,6	5,9	4,6	2,4	-1,6	-10,2	-36,8	-3080,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,4	9,8	10,2	10,8	11,5	12,6	14,4	17,7	25,1	49,8	3090,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	10,0	11,3	12,6	14,2	16,0	18,3	21,4	26,5	36,1	64,4	3278,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,3	30,8	33,9	37,5	42,0	47,3	53,9	62,1	72,4	85,7	103,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	85,9	93,6	102,7	113,3	125,7	140,3	157,7	178,5	203,6	234,5	272,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-7,7	-11,0	-15,5	-21,9	-4,7
Total	DM	-16,82	-17,48	-17,60	-16,98	-15,40	-12,56	-8,31	-2,55	4,50	1,83	686,18	—
	DMA	31,69	28,56	25,19	22,33	22,10	25,09	31,01	39,82	59,30	117,06	1625,02	—
	PDMA	91,47	82,64	72,07	60,83	48,17	34,80	35,57	68,16	141,02	347,30	18292,17	—
CPI	DM	-18,06	-24,75	-30,94	-36,29	-40,48	-43,23	-44,75	-46,11	-50,92	-98,81	-167,60	—
	DMA	47,35	45,43	42,15	39,45	43,25	45,54	47,09	49,38	65,03	133,61	226,96	—
	PDMA	117,31	106,72	93,27	78,80	65,49	50,36	40,50	42,87	64,81	123,51	198,99	—
SPI	DM	-15,91	-12,15	-7,82	-2,82	3,00	9,93	18,41	29,39	45,13	75,63	1312,28	—
	DMA	20,21	16,19	12,75	9,78	6,60	10,09	19,22	32,81	55,09	104,93	2650,27	—
	PDMA	72,51	64,99	56,52	47,66	35,46	23,39	31,96	86,71	196,91	511,41	31560,51	—
ΔCS	DM	-2,15	-12,61	-23,12	-33,47	-43,48	-53,16	-63,15	-75,50	-96,05	-174,44	-1479,88	—
	DMA	27,15	29,24	29,40	29,67	36,65	35,44	27,87	16,57	9,93	28,68	-2423,30	—
	PDMA	44,79	41,73	36,75	31,14	30,02	26,97	8,54	-43,84	-132,10	-387,90	-31361,52	—

Tabela 8.52: Constantes de acoplamento OLYP com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	330,6	358,8	387,3	416,3	445,7	475,4	505,6	536,1	566,9	598,1	629,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	22,5	20,2	17,8	15,3	12,7	10,1	7,3	4,5	1,6	-1,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,0	-68,3	-71,6	-75,0	-78,4	-81,9	-85,4	-89,0	-92,6	-96,2	-100,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,6	-12,6	-13,7	-14,7	-15,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,0	42,3	43,5	44,8	46,1	47,4	48,7	50,1	51,4	52,8	54,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-16,8	-17,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	152,0	160,7	169,3	177,7	186,0	194,2	202,2	210,0	217,7	225,1	232,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1701,5	-1685,0	-1664,7	-1641,3	-1615,5	-1587,8	-1558,7	-1528,7	-1498,1	-1467,2	-1436,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-185,7	-165,1	-145,0	-125,4	-106,3	-87,8	-69,9	-52,5	-35,7	-19,4	-3,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-92,6	-69,5	-47,1	-25,2	-3,9	16,7	36,8	56,3	75,3	93,7	111,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-268,9	-305,2	-342,2	-381,4	-424,9	-476,1	-540,8	-630,8	-774,9	-1070,9	-2268,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	123,6	126,6	129,6	132,7	135,8	138,9	142,1	145,4	148,6	151,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,8	-14,5	-15,2	-15,9	-16,6	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,1	192,7	197,8	203,3	209,5	216,4	224,2	233,0	243,2	255,1	269,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,7	261,4	266,3	271,3	276,5	282,0	287,9	294,2	301,0	308,4	316,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	53,3	53,1	52,7	52,0	51,0	49,6	47,9	45,5	42,4	38,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,2	12,8	13,5	14,3	15,3	16,5	17,9	19,5	21,5	23,8	26,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,5	65,3	69,4	73,9	78,9	84,6	91,2	99,1	108,8	121,6	139,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,6	158,4	162,3	166,3	170,5	175,0	179,8	185,1	191,2	198,4	207,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-2,4	-3,5	-4,7	-6,0	-7,6	-9,6	-12,0	-15,2	-19,5	-25,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,6	3,0	2,4	1,7	1,0	0,2	-0,9	-2,1	-3,7	-5,9	-9,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,9	13,4	13,9	14,5	15,2	16,1	17,3	18,8	20,9	24,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,0	20,4	20,9	21,6	22,3	23,2	24,2	25,6	27,4	29,9	33,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,3	28,8	31,3	33,9	36,5	39,3	42,0	44,8	47,7	50,6	53,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	123,4	126,5	129,7	132,9	136,1	139,4	142,7	146,0	149,4	152,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,7
Total	DM	-23,59	-20,55	-17,40	-14,19	-11,04	-8,09	-5,56	-3,88	-4,16	-10,08	-50,34	—
	DMA	30,57	25,42	23,23	21,68	20,61	20,76	24,82	32,25	42,00	57,96	109,57	—
	PDMA	47,92	36,06	30,03	27,38	27,37	30,54	46,66	65,07	86,54	113,36	157,77	—
CPI	DM	-56,45	-51,45	-46,31	-41,14	-36,23	-31,97	-28,89	-28,14	-32,35	-50,44	-150,53	—
	DMA	66,86	54,91	48,64	42,59	37,05	34,03	39,87	53,05	71,01	102,67	217,07	—
	PDMA	93,17	71,38	54,45	39,48	26,41	18,72	38,03	59,55	82,53	109,65	163,91	—
SPI	DM	0,50	2,12	3,81	5,57	7,43	9,43	11,55	13,90	16,52	19,51	23,13	—
	DMA	3,95	3,79	4,61	6,35	8,56	11,03	13,79	17,01	20,73	25,17	30,73	—
	PDMA	14,73	10,17	12,11	18,51	28,07	39,22	52,99	69,12	89,48	116,09	153,27	—
ΔCS	DM	-56,95	-53,57	-50,12	-46,70	-43,65	-41,40	-40,44	-42,04	-48,87	-69,95	-173,66	—
	DMA	62,91	51,12	44,03	36,24	28,49	23,00	26,09	36,04	50,28	77,51	186,34	—
	PDMA	78,44	61,21	42,34	20,97	-1,65	-20,50	-14,96	-9,57	-6,94	-6,44	10,65	—

Tabela 8.53: Constantes de acoplamento PBE com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	343,2	365,0	386,9	409,1	431,5	454,1	477,0	500,0	523,3	546,8	570,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	23,2	21,5	19,8	18,0	16,1	14,2	12,2	10,2	8,1	6,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-68,4	-70,7	-73,1	-75,5	-77,9	-80,3	-82,8	-85,3	-87,8	-90,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-4,2	-5,2	-6,3	-7,4	-8,5	-9,6	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,6	42,3	43,0	43,7	44,4	45,1	45,9	46,6	47,4	48,2	49,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,6	-11,6	-12,6	-13,6	-14,6	-15,7	-16,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,9	135,3	143,6	151,9	160,1	168,3	176,3	184,3	192,1	199,9	207,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1800,3	-1776,2	-1747,4	-1714,6	-1678,7	-1640,1	-1599,6	-1557,4	-1514,2	-1470,2	-1425,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,1	-160,2	-143,5	-127,0	-110,8	-94,7	-78,9	-63,3	-48,0	-32,9	-18,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-77,9	-59,6	-41,5	-23,8	-6,3	10,8	27,8	44,5	60,9	77,1	93,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-292,3	-330,6	-369,2	-409,9	-454,8	-507,8	-575,1	-669,8	-823,5	-1143,8	-2467,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	123,2	124,6	126,0	127,5	129,0	130,5	132,1	133,7	135,3	136,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,1	-16,9	-17,7	-18,5	-19,3	-20,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	192,2	195,3	199,0	203,3	208,3	214,4	221,7	230,9	242,6	257,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,1	255,5	258,1	260,9	264,0	267,4	271,3	275,8	281,2	287,9	296,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	54,4	54,0	53,5	52,5	51,2	49,3	46,8	43,2	38,4	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	11,7	12,5	13,5	14,7	16,2	18,0	20,2	23,1	26,7	31,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,0	64,7	67,7	71,1	75,1	79,8	85,7	93,5	104,3	121,0	151,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,7	155,8	158,0	160,4	163,0	165,9	169,4	173,5	179,0	187,1	200,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,8	-2,9	-4,1	-5,5	-7,3	-9,5	-12,6	-16,9	-23,8	-36,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,9	3,0	2,0	0,9	-0,3	-1,9	-3,9	-6,8	-11,2	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,4	12,8	13,3	13,9	14,8	16,0	17,6	20,0	24,0	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,3	19,6	20,1	20,7	21,5	22,5	23,9	25,8	28,6	33,1	41,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,6	28,5	30,3	32,2	34,2	36,1	38,1	40,2	42,2	44,3	46,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	123,0	124,6	126,2	127,9	129,6	131,3	133,1	134,9	136,7	138,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-27,65	-25,37	-22,92	-20,35	-17,79	-15,37	-13,32	-12,14	-12,96	-19,75	-64,27	—
	DMA	33,04	30,00	27,62	25,70	24,21	23,30	24,65	28,67	37,50	53,84	111,65	—
	PDMA	48,58	38,26	29,85	25,17	25,04	28,06	40,97	60,44	85,70	121,58	189,37	—
CPI	DM	-66,20	-62,01	-57,46	-52,80	-48,27	-44,28	-41,44	-41,00	-45,87	-65,85	-177,06	—
	DMA	73,00	66,35	60,74	54,96	49,60	45,01	45,13	50,64	66,36	97,87	223,28	—
	PDMA	89,10	72,53	56,50	40,72	27,26	17,18	26,03	43,55	63,95	89,79	145,97	—
SPI	DM	0,61	1,50	2,41	3,44	4,57	5,83	7,29	9,03	11,17	14,07	18,44	—
	DMA	3,73	3,34	3,33	4,24	5,59	7,39	9,64	12,56	16,33	21,55	29,79	—
	PDMA	18,86	13,13	10,31	13,77	23,40	36,03	51,92	72,82	101,64	144,89	221,20	—
ΔCS	DM	-66,81	-63,51	-59,88	-56,24	-52,84	-50,11	-48,73	-50,03	-57,05	-79,92	-195,50	—
	DMA	69,27	63,01	57,40	50,72	44,01	37,62	35,49	38,08	50,03	76,33	193,50	—
	PDMA	70,24	59,40	46,19	26,96	3,86	-18,85	-25,88	-29,27	-37,69	-55,11	-75,23	—

Tabela 8.54: Constantes de acoplamento PW91 com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	331,4	354,6	378,0	401,7	425,5	449,6	473,9	498,4	523,2	548,2	573,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,6	23,9	22,2	20,3	18,4	16,5	14,4	12,3	10,1	7,9	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,2	-67,6	-70,1	-72,6	-75,1	-77,6	-80,2	-82,8	-85,4	-88,1	-90,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,0	-13,2	-14,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,6	42,3	43,0	43,7	44,5	45,3	46,0	46,8	47,6	48,4	49,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,1	-8,0	-8,9	-9,9	-10,8	-11,8	-12,7	-13,7	-14,7	-15,7	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,8	139,1	147,2	155,3	163,2	171,1	178,9	186,5	194,0	201,4	208,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1814,5	-1789,4	-1759,6	-1725,7	-1688,6	-1648,8	-1606,9	-1563,5	-1519,0	-1473,6	-1427,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-181,9	-164,7	-147,7	-130,7	-113,9	-97,3	-80,8	-64,5	-48,4	-32,5	-16,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,0	-64,4	-45,9	-27,7	-9,7	8,1	25,7	43,2	60,4	77,5	94,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-304,8	-343,1	-381,8	-422,4	-467,3	-520,3	-587,8	-683,0	-838,1	-1163,2	-2540,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,6	124,0	125,4	126,8	128,3	129,8	131,3	132,9	134,4	136,0	137,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-13,1	-13,9	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,8	-18,6	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,5	192,3	195,4	199,2	203,5	208,7	214,9	222,5	232,0	244,0	259,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,8	258,1	260,6	263,2	266,1	269,4	273,1	277,6	282,9	289,4	297,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,9	54,8	54,4	53,8	52,9	51,5	49,5	46,9	43,3	38,3	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	11,8	12,6	13,6	14,8	16,3	18,1	20,3	23,1	26,7	31,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,0	67,1	70,6	74,7	79,6	85,7	93,6	104,8	121,9	152,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,9	157,0	159,2	161,5	164,1	167,0	170,4	174,6	180,1	188,1	201,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,7	-2,7	-3,9	-5,4	-7,2	-9,5	-12,5	-16,9	-23,9	-36,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,8	3,0	2,0	0,9	-0,3	-1,9	-4,0	-6,9	-11,2	-19,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,5	12,9	13,4	14,1	15,0	16,1	17,7	20,1	24,1	31,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	19,9	20,4	21,0	21,7	22,7	24,1	26,0	28,7	33,2	41,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,0	27,9	29,9	31,9	34,0	36,0	38,2	40,3	42,5	44,7	47,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,2	123,8	125,4	127,0	128,7	130,4	132,1	133,9	135,6	137,4	139,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,11	-26,73	-24,17	-21,48	-18,79	-16,22	-14,05	-12,72	-13,44	-20,24	-66,63	—
	DMA	34,30	31,79	29,32	27,32	25,70	24,63	25,50	29,53	38,55	55,16	114,95	—
	PDMA	50,59	40,29	31,43	26,62	26,66	29,28	40,80	60,57	86,30	122,55	190,97	—
CPI	DM	-70,12	-65,68	-60,89	-55,94	-51,11	-46,79	-43,65	-42,92	-47,56	-67,62	-183,29	—
	DMA	75,77	70,25	64,35	58,26	52,60	47,63	46,65	52,14	68,25	100,35	230,44	—
	PDMA	92,97	76,56	60,21	44,30	30,66	19,76	25,06	43,20	64,37	90,97	149,79	—
SPI	DM	0,97	1,83	2,77	3,78	4,91	6,20	7,66	9,42	11,59	14,50	18,91	—
	DMA	3,89	3,59	3,63	4,62	5,98	7,76	9,99	12,95	16,76	22,02	30,26	—
	PDMA	19,52	13,69	10,33	13,65	23,73	36,26	52,35	73,31	102,38	145,70	221,17	—
ΔCS	DM	-71,08	-67,51	-63,66	-59,72	-56,02	-52,99	-51,31	-52,34	-59,15	-82,12	-202,20	—
	DMA	71,89	66,66	60,71	53,64	46,62	39,87	36,65	39,18	51,49	78,33	200,18	—
	PDMA	73,46	62,87	49,88	30,65	6,93	-16,50	-27,30	-30,11	-38,01	-54,74	-71,38	—

Tabela 8.55: Constantes de acoplamento TPSSh com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	333,2	357,8	382,3	406,9	431,4	455,9	480,3	504,6	528,8	553,0	577,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,4	21,0	19,5	18,0	16,4	14,7	13,0	11,2	9,4	7,5	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,1	-71,4	-73,8	-76,2	-78,5	-80,9	-83,2	-85,5	-87,8	-90,0	-92,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,8	-5,1	-6,3	-7,6	-8,8	-10,0	-11,2	-12,4	-13,6	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,1	46,6	47,2	47,7	48,1	48,6	49,1	49,6	50,0	50,5	50,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-7,2	-8,4	-9,5	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,0	-16,1	-17,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,9	193,7	198,2	202,5	206,6	210,4	214,0	217,3	220,4	223,2	225,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1756,8	-1731,0	-1702,6	-1672,3	-1640,4	-1607,3	-1573,4	-1539,0	-1504,2	-1469,3	-1434,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-161,0	-146,8	-132,7	-118,6	-104,5	-90,4	-76,4	-62,4	-48,5	-34,6	-20,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-65,9	-49,3	-32,8	-16,4	-0,3	15,7	31,7	47,5	63,1	78,7	94,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-297,0	-334,4	-373,8	-416,8	-465,6	-524,3	-599,5	-704,7	-872,2	-1207,0	-2417,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,5	141,3	142,1	142,9	143,6	144,4	145,1	145,7	146,3	146,9	147,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,5	-11,6	-12,7	-13,7	-14,8	-15,8	-16,8	-17,7	-18,7	-19,6	-20,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,2	191,5	195,3	199,6	204,6	210,5	217,4	225,7	235,6	247,7	262,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	283,9	285,6	287,4	289,4	291,6	294,1	297,0	300,4	304,6	309,7	316,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,6	58,0	57,2	56,1	54,6	52,7	50,3	47,2	43,3	38,3	31,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,6	13,2	14,1	15,1	16,3	17,9	19,7	22,0	24,7	28,1	32,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,5	72,2	75,2	78,7	82,8	87,7	93,8	101,6	112,3	128,1	154,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	174,6	176,2	178,0	179,9	182,0	184,4	187,2	190,8	195,5	202,4	213,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-2,1	-3,4	-4,9	-6,6	-8,7	-11,3	-14,7	-19,3	-26,0	-37,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,6	8,4	7,0	5,6	4,0	2,2	0,2	-2,3	-5,6	-10,1	-17,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,3	12,8	13,3	14,0	14,8	15,8	17,2	18,9	21,4	25,2	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,7	23,1	23,5	24,1	24,8	25,8	27,2	29,0	31,7	35,8	42,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,8	35,3	36,7	38,1	39,6	41,0	42,4	43,8	45,1	46,5	47,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	139,8	140,8	141,9	142,9	143,8	144,8	145,7	146,6	147,4	148,2	149,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-4,0	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,2	-8,7	-4,7
Total	DM	-18,52	-16,50	-14,46	-12,43	-10,56	-8,94	-7,84	-7,76	-9,88	-18,07	-59,32	—
	DMA	30,80	29,17	27,90	26,87	26,20	26,26	29,12	34,42	44,02	60,74	112,94	—
	PDMA	53,91	43,98	36,98	32,72	30,17	30,91	47,77	68,73	94,82	129,94	190,41	—
CPI	DM	-55,33	-51,43	-47,54	-43,81	-40,55	-38,10	-37,11	-38,86	-46,30	-68,96	-171,29	—
	DMA	61,13	56,52	52,39	48,41	45,05	43,14	47,18	55,88	73,72	106,75	220,55	—
	PDMA	77,00	62,29	47,82	33,69	22,45	16,76	32,22	50,07	70,25	95,66	147,29	—
SPI	DM	8,47	9,11	9,80	10,57	11,43	12,44	13,63	15,05	16,83	19,26	22,79	—
	DMA	8,56	9,11	9,93	11,08	12,37	13,88	15,88	18,67	22,23	27,01	34,03	—
	PDMA	36,98	30,55	29,03	32,01	35,83	41,28	59,17	82,42	112,83	155,09	222,03	—
ΔCS	DM	-63,79	-60,53	-57,34	-54,38	-51,97	-50,54	-50,74	-53,91	-63,13	-88,22	-194,08	—
	DMA	52,57	47,41	42,46	37,33	32,68	29,26	31,30	37,21	51,48	79,74	186,51	—
	PDMA	40,02	31,74	18,78	1,68	-13,38	-24,52	-26,94	-32,35	-42,57	-59,43	-74,74	—

Tabela 8.56: Constantes de acoplamento X3LYP com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,5	389,4	414,5	439,8	465,4	491,3	517,3	543,6	570,1	596,9	623,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,2	20,4	18,4	16,3	14,1	11,8	9,5	7,0	4,5	1,9	-0,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,2	-73,9	-76,5	-79,3	-82,0	-84,7	-87,5	-90,4	-93,2	-96,1	-99,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-4,9	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,6	-11,8	-13,0	-14,2	-15,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,3	46,1	46,9	47,7	48,6	49,4	50,2	51,1	52,0	52,8	53,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,4	-9,4	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-14,3	-15,4	-16,4	-17,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,5	160,0	168,4	176,7	184,8	192,8	200,7	208,4	215,9	223,2	230,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,0	-1786,7	-1756,9	-1723,3	-1686,7	-1647,5	-1606,4	-1563,9	-1520,3	-1476,0	-1431,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,3	-154,7	-137,2	-119,9	-102,7	-85,7	-68,9	-52,2	-35,8	-19,6	-3,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-71,6	-52,5	-33,5	-14,8	3,6	21,9	40,0	57,9	75,7	93,2	110,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-294,6	-331,5	-368,5	-407,2	-449,8	-499,5	-562,2	-649,6	-789,7	-1075,9	-2188,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	134,3	135,8	137,4	139,0	140,6	142,2	143,9	145,5	147,2	148,9	150,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,0	-16,8	-17,6	-18,3	-19,0	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,3	203,3	206,7	210,7	215,2	220,6	226,8	234,3	243,3	254,3	268,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	275,7	278,2	280,7	283,4	286,3	289,5	293,1	297,1	301,8	307,3	314,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,3	57,2	56,9	56,4	55,5	54,3	52,6	50,4	47,5	43,7	38,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,3	12,0	12,9	13,9	15,1	16,5	18,3	20,4	23,0	26,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,6	70,5	73,8	77,4	81,5	86,3	92,0	99,1	108,2	120,6	138,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,2	170,4	172,7	175,2	177,8	180,7	183,9	187,6	192,1	197,9	205,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,2	-1,0	-2,0	-3,2	-4,5	-6,1	-8,1	-10,6	-13,9	-18,5	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,6	4,8	3,9	2,9	1,9	0,6	-0,8	-2,7	-5,3	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,8	13,1	13,4	13,8	14,2	14,9	15,7	16,7	18,2	20,3	23,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,5	20,8	21,1	21,6	22,1	22,9	23,8	25,1	26,8	29,3	33,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,3	32,4	34,6	36,8	39,0	41,3	43,6	46,0	48,4	50,8	53,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	133,2	135,0	136,7	138,5	140,3	142,2	144,0	145,9	147,8	149,7	151,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,3	-6,8	-7,4	-7,9	-4,7
Total	DM	-22,78	-20,20	-17,44	-14,57	-11,71	-8,93	-6,55	-4,94	-5,16	-10,75	-47,70	—
	DMA	32,78	30,29	28,12	26,22	24,79	24,73	28,90	34,95	43,43	57,98	105,80	—
	PDMA	49,73	40,05	30,44	24,28	21,83	26,53	42,35	60,22	81,67	109,16	154,27	—
CPI	DM	-62,76	-57,96	-52,79	-47,48	-42,28	-37,53	-33,83	-32,28	-35,46	-51,92	-143,45	—
	DMA	67,80	60,98	54,74	48,46	43,15	40,64	47,70	58,79	74,54	103,46	209,21	—
	PDMA	79,72	62,64	45,75	30,55	20,98	21,44	40,24	60,47	82,27	108,24	159,51	—
SPI	DM	6,54	7,49	8,49	9,57	10,71	12,03	13,45	15,11	17,06	19,43	22,51	—
	DMA	7,10	7,79	8,61	9,91	11,33	13,07	15,11	17,47	20,62	24,63	29,96	—
	PDMA	27,73	23,47	19,22	19,68	22,45	30,26	43,89	60,05	81,22	109,83	150,43	—
ΔCS	DM	-69,30	-65,46	-61,28	-57,06	-53,00	-49,56	-47,28	-47,39	-52,52	-71,35	-165,95	—
	DMA	60,70	53,20	46,13	38,56	31,83	27,56	32,59	41,32	53,92	78,83	179,25	—
	PDMA	51,98	39,17	26,54	10,87	-1,47	-8,82	-3,65	0,42	1,04	-1,60	9,07	—

Tabela 8.57: Constantes de acoplamento B1B95 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	370,7	394,3	418,0	442,0	466,1	490,4	514,8	539,4	564,2	589,1	614,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,2	22,5	20,7	18,9	16,9	14,8	12,6	10,4	8,1	5,7	3,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,1	-71,6	-74,1	-76,7	-79,2	-81,8	-84,4	-87,0	-89,6	-92,3	-95,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,8	-3,8	-4,8	-5,8	-6,8	-7,8	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,6	43,4	44,1	44,8	45,6	46,3	47,1	47,9	48,6	49,4	50,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-6,9	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	139,4	147,1	154,5	161,9	169,2	176,3	183,3	190,1	196,8	203,4	209,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1714,8	-1693,2	-1667,2	-1637,4	-1604,6	-1569,3	-1531,9	-1493,1	-1453,1	-1412,3	-1371,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-179,2	-162,3	-145,5	-128,7	-112,0	-95,5	-79,1	-62,8	-46,7	-30,8	-15,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,9	-25,6	-7,5	10,4	28,1	45,7	63,1	80,4	97,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,0	-314,4	-348,0	-381,8	-417,4	-456,8	-503,1	-561,9	-644,3	-778,2	-1061,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,0	124,3	125,6	127,0	128,4	129,8	131,3	132,7	134,2	135,7	137,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-11,3	-12,0	-12,7	-13,3	-14,0	-14,7	-15,3	-16,0	-16,7	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,3	190,6	193,3	196,2	199,7	203,6	208,1	213,4	219,6	227,0	235,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,7	255,6	257,6	259,7	261,9	264,3	266,8	269,6	272,7	276,3	280,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,9	56,1	56,1	55,9	55,6	55,0	54,2	53,0	51,5	49,5	46,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,6	10,0	10,5	11,1	11,7	12,5	13,5	14,6	15,9	17,5	19,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,3	61,6	64,2	66,9	70,0	73,4	77,2	81,6	86,9	93,2	101,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,2	157,1	159,0	161,0	163,1	165,3	167,7	170,3	173,2	176,5	180,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,7	0,0	-0,7	-1,6	-2,6	-3,7	-5,0	-6,6	-8,4	-10,7	-13,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,7	5,0	4,3	3,6	2,8	1,9	0,9	-0,2	-1,6	-3,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	12,0	12,2	12,5	12,8	13,1	13,6	14,2	15,0	15,9	17,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,8	19,0	19,3	19,5	19,9	20,4	20,9	21,6	22,5	23,7	25,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,9	27,9	29,8	31,8	33,8	35,8	37,9	40,0	42,1	44,3	46,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,4	124,0	125,5	127,1	128,7	130,3	131,9	133,6	135,2	136,8	138,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,3	-3,8	-4,2	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,1	-4,7
Total	DM	-22,43	-20,10	-17,57	-14,89	-12,12	-9,40	-6,83	-4,63	-3,22	-3,68	-9,75	—
	DMA	28,92	24,84	22,30	19,82	17,56	15,93	17,41	21,57	27,08	36,95	53,90	—
	PDMA	54,91	44,55	34,88	25,09	16,50	13,06	20,82	34,69	49,91	67,63	89,55	—
CPI	DM	-54,26	-49,83	-44,99	-39,81	-34,55	-29,48	-24,87	-21,29	-19,80	-22,95	-39,72	—
	DMA	62,86	53,70	47,79	41,61	35,34	29,94	31,44	38,98	49,44	69,72	105,83	—
	PDMA	90,25	72,65	56,35	40,33	24,32	13,26	22,43	40,48	59,72	80,88	106,86	—
SPI	DM	0,92	1,71	2,53	3,39	4,33	5,32	6,40	7,59	8,93	10,45	12,23	—
	DMA	4,03	3,68	3,61	3,84	4,52	5,65	7,12	8,79	10,68	12,93	15,83	—
	PDMA	28,99	23,94	19,13	13,92	10,77	12,91	19,64	30,44	42,72	57,91	76,85	—
ΔCS	DM	-55,18	-51,53	-47,52	-43,20	-38,89	-34,80	-31,27	-28,88	-28,73	-33,40	-51,94	—
	DMA	58,84	50,02	44,18	37,77	30,82	24,28	24,32	30,19	38,76	56,79	90,00	—
	PDMA	61,26	48,71	37,22	26,42	13,54	0,36	2,79	10,03	17,00	22,97	30,01	—

Tabela 8.58: Constantes de acoplamento B3LYP com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	360,2	385,2	410,4	435,9	461,6	487,6	513,8	540,2	566,8	593,7	620,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,5	20,7	18,7	16,6	14,4	12,2	9,8	7,3	4,8	2,2	-0,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,5	-73,2	-75,9	-78,6	-81,3	-84,1	-86,9	-89,8	-92,6	-95,5	-98,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-5,0	-6,1	-7,2	-8,3	-9,4	-10,6	-11,8	-13,0	-14,2	-15,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,9	45,7	46,5	47,3	48,2	49,0	49,9	50,7	51,6	52,5	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,4	-9,4	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-14,3	-15,3	-16,3	-17,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,3	158,8	167,2	175,4	183,6	191,5	199,4	207,0	214,5	221,9	229,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1808,5	-1782,8	-1752,7	-1719,0	-1682,2	-1643,0	-1602,0	-1559,6	-1516,3	-1472,2	-1427,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,2	-154,7	-137,2	-119,9	-102,7	-85,7	-68,9	-52,3	-35,9	-19,7	-3,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-72,4	-53,2	-34,3	-15,5	2,9	21,2	39,3	57,3	75,0	92,6	110,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-293,1	-329,9	-366,8	-405,4	-447,9	-497,5	-560,1	-647,1	-786,4	-1069,8	-2151,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,3	134,9	136,4	138,0	139,7	141,3	143,0	144,7	146,4	148,2	149,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-13,0	-13,7	-14,5	-15,2	-16,0	-16,7	-17,5	-18,2	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,7	202,7	206,2	210,1	214,7	220,0	226,2	233,7	242,7	253,6	267,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	274,2	276,6	279,2	282,0	284,9	288,1	291,7	295,7	300,4	305,8	312,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,3	57,2	56,9	56,4	55,5	54,3	52,7	50,5	47,6	43,9	38,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,2	11,9	12,8	13,8	15,0	16,4	18,1	20,2	22,7	25,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,0	69,9	73,2	76,8	80,9	85,7	91,5	98,5	107,6	120,0	138,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	167,2	169,5	171,8	174,3	176,9	179,8	183,0	186,8	191,3	197,0	205,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,9	-3,0	-4,4	-6,0	-8,0	-10,4	-13,7	-18,3	-25,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,6	4,8	3,9	3,0	1,9	0,7	-0,7	-2,6	-5,2	-8,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,0	13,3	13,7	14,1	14,8	15,6	16,6	18,1	20,2	23,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,3	20,5	20,9	21,3	21,9	22,7	23,6	24,9	26,6	29,0	32,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,0	32,1	34,3	36,5	38,7	41,0	43,4	45,7	48,1	50,6	53,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,3	134,1	135,9	137,7	139,5	141,4	143,3	145,1	147,0	149,0	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,6	-4,1	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-23,04	-20,44	-17,65	-14,76	-11,87	-9,10	-6,69	-5,07	-5,27	-10,75	-46,54	—
	DMA	32,80	30,13	27,94	25,98	24,49	24,27	28,17	34,19	42,64	57,10	104,00	—
	PDMA	50,18	40,37	30,68	23,90	21,63	25,71	41,33	58,92	80,35	107,70	152,27	—
CPI	DM	-62,83	-57,97	-52,77	-47,42	-42,17	-37,40	-33,68	-32,12	-35,25	-51,43	-140,20	—
	DMA	68,23	61,08	54,79	48,47	42,97	40,07	46,50	57,55	73,25	101,97	205,58	—
	PDMA	80,39	63,17	46,32	30,95	21,24	20,56	39,30	59,54	81,17	107,14	157,30	—
SPI	DM	6,13	7,08	8,10	9,19	10,35	11,65	13,11	14,76	16,71	19,08	22,14	—
	DMA	6,81	7,43	8,25	9,49	10,93	12,67	14,72	17,05	20,20	24,19	29,50	—
	PDMA	28,02	23,65	19,21	18,72	21,91	29,48	42,82	58,46	79,75	108,12	148,59	—
ΔCS	DM	-68,96	-65,05	-60,87	-56,60	-52,52	-49,05	-46,79	-46,88	-51,95	-70,51	-162,34	—
	DMA	61,41	53,66	46,54	38,98	32,04	27,40	31,78	40,50	53,05	77,79	176,08	—
	PDMA	52,37	39,52	27,11	12,23	-0,67	-8,92	-3,52	1,08	1,42	-0,98	8,72	—

Tabela 8.59: Constantes de acoplamento B3P86 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	324,5	348,2	372,2	396,3	420,8	445,4	470,3	495,3	520,6	546,1	571,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,5	23,9	22,1	20,3	18,3	16,3	14,2	12,1	9,9	7,6	5,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,0	-66,6	-69,1	-71,7	-74,3	-76,9	-79,6	-82,2	-84,9	-87,7	-90,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-4,2	-5,1	-6,2	-7,2	-8,2	-9,3	-10,4	-11,5	-12,6	-13,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,0	41,8	42,5	43,3	44,1	44,9	45,7	46,5	47,3	48,2	49,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,2	-14,1	-15,0	-16,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	131,1	139,3	147,3	155,3	163,2	170,9	178,5	186,0	193,3	200,5	207,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1802,2	-1776,5	-1746,3	-1712,6	-1676,0	-1637,0	-1596,2	-1554,1	-1511,0	-1467,3	-1423,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-180,0	-162,9	-145,9	-129,1	-112,4	-95,8	-79,4	-63,2	-47,2	-31,4	-15,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,6	-64,8	-46,3	-28,0	-9,9	7,9	25,6	43,1	60,5	77,7	94,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-300,9	-338,0	-375,4	-414,5	-457,7	-508,2	-571,8	-660,0	-799,5	-1075,0	-2006,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	123,1	124,6	126,1	127,7	129,3	130,9	132,5	134,1	135,8	137,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,7	-16,4	-17,1	-17,8	-18,5	-19,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,2	192,9	196,1	199,7	203,9	208,9	214,8	221,9	230,6	241,4	255,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,1	256,5	258,9	261,6	264,5	267,6	271,2	275,3	280,0	285,8	292,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,1	55,0	54,8	54,3	53,4	52,2	50,6	48,3	45,3	41,3	35,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,4	12,1	13,0	14,1	15,4	16,9	18,8	21,1	24,0	27,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,0	63,8	66,8	70,3	74,2	78,9	84,6	91,9	101,6	115,7	138,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,8	155,9	158,2	160,6	163,1	166,0	169,3	173,1	178,0	184,6	194,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-1,1	-2,1	-3,2	-4,5	-6,2	-8,2	-10,9	-14,6	-20,0	-29,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	4,3	3,5	2,6	1,6	0,4	-0,9	-2,6	-4,9	-8,2	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,0	13,6	14,3	15,3	16,6	18,5	21,4	26,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,4	19,8	20,4	21,0	21,9	23,0	24,6	26,8	30,1	35,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,8	27,8	29,8	31,9	34,0	36,1	38,3	40,5	42,7	45,0	47,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,2	122,9	124,6	126,3	128,0	129,8	131,6	133,4	135,2	137,1	138,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-28,83	-26,33	-23,67	-20,90	-18,14	-15,51	-13,23	-11,73	-11,99	-17,14	-46,96	—
	DMA	34,07	31,38	28,76	26,50	24,67	23,47	24,22	27,78	35,72	50,02	91,98	—
	PDMA	52,14	42,14	32,30	25,09	22,54	24,64	34,91	52,86	75,55	105,68	155,68	—
CPI	DM	-69,05	-64,41	-59,41	-54,30	-49,31	-44,81	-41,37	-40,09	-43,41	-59,07	-134,37	—
	DMA	74,96	69,21	63,12	56,85	50,87	45,68	44,66	49,47	63,68	91,45	182,01	—
	PDMA	93,56	77,01	60,77	44,33	29,78	18,39	23,83	41,49	62,06	87,08	132,29	—
SPI	DM	0,67	1,59	2,55	3,59	4,72	5,97	7,41	9,07	11,05	13,61	17,14	—
	DMA	4,07	3,65	3,56	4,25	5,45	7,19	9,23	11,87	15,22	19,63	25,97	—
	PDMA	21,77	16,58	11,41	10,97	17,24	29,22	43,04	61,20	85,44	119,31	172,84	—
ΔCS	DM	-69,73	-66,00	-61,96	-57,89	-54,03	-50,78	-48,79	-49,16	-54,46	-72,68	-151,51	—
	DMA	70,89	65,56	59,56	52,60	45,42	38,50	35,44	37,61	48,46	71,82	156,04	—
	PDMA	71,80	60,43	49,36	33,36	12,55	-10,84	-19,21	-19,71	-23,38	-32,23	-40,55	—

Tabela 8.60: Constantes de acoplamento B971 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	394,1	410,7	428,2	446,8	466,5	487,4	509,6	532,9	557,6	583,5	610,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	15,5	14,3	13,0	11,5	9,8	8,1	6,1	4,0	1,8	-0,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,5	-68,6	-70,9	-73,3	-75,8	-78,5	-81,3	-84,3	-87,6	-91,0	-94,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,8	-0,2	-1,3	-2,4	-3,7	-5,0	-6,3	-7,8	-9,4	-11,1	-12,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,3	39,3	40,3	41,4	42,6	43,8	45,1	46,6	48,0	49,6	51,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,4	-4,3	-5,4	-6,5	-7,7	-9,0	-10,3	-11,8	-13,4	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	160,8	167,4	174,3	181,6	189,3	197,3	205,8	214,6	223,8	233,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1611,8	-1606,5	-1595,6	-1580,0	-1560,3	-1537,3	-1511,6	-1483,8	-1454,4	-1424,0	-1393,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-149,5	-135,0	-120,1	-105,0	-89,6	-74,1	-58,5	-42,9	-27,3	-11,7	3,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-57,9	-41,1	-24,1	-6,9	10,2	27,5	44,9	62,3	79,7	97,1	114,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-202,9	-234,7	-267,9	-302,9	-340,8	-383,5	-434,3	-500,0	-595,6	-765,9	-1234,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,8	108,0	111,4	115,0	118,8	122,9	127,3	131,9	136,7	141,9	147,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-7,0	-7,9	-8,8	-9,9	-11,0	-12,1	-13,4	-14,7	-16,1	-17,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,5	190,5	194,8	199,8	205,4	212,0	219,8	229,2	240,9	255,8	275,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	203,7	210,4	217,4	224,8	232,6	241,0	250,1	260,0	271,1	283,7	298,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,4	52,3	52,9	53,4	53,6	53,4	52,9	51,6	49,5	46,0	40,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,7	7,1	7,6	8,1	8,9	9,8	11,0	12,5	14,5	17,2	21,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,8	66,5	69,5	72,9	76,8	81,2	86,6	93,2	101,6	113,3	130,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,9	132,3	137,0	141,9	147,2	153,0	159,2	166,1	173,9	183,1	194,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,6	0,8	-0,1	-1,1	-2,4	-4,0	-6,1	-8,8	-12,8	-19,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,9	5,5	5,0	4,4	3,7	2,8	1,7	0,3	-1,7	-4,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	9,9	10,1	10,5	10,8	11,3	11,9	12,7	13,9	15,6	18,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,8	14,3	14,8	15,4	16,1	16,9	17,9	19,1	20,7	23,0	26,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,2	28,4	30,8	33,2	35,9	38,6	41,6	44,7	48,0	51,5	55,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,0	106,5	110,2	114,1	118,3	122,7	127,3	132,2	137,4	143,0	148,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,3	-1,9	-2,4	-3,0	-3,7	-4,4	-5,1	-5,9	-6,8	-7,7	-4,7
Total	DM	-16,64	-14,72	-12,54	-10,10	-7,48	-4,77	-2,04	0,38	2,00	1,17	-10,53	—
	DMA	28,86	24,36	19,61	14,82	12,42	11,87	14,62	20,63	28,52	41,35	67,75	—
	PDMA	59,57	49,68	39,46	28,92	18,85	15,70	21,88	34,39	54,24	79,78	116,68	—
CPI	DM	-29,78	-27,65	-24,99	-21,94	-18,65	-15,38	-12,45	-10,57	-11,19	-18,38	-52,53	—
	DMA	52,80	44,12	34,65	24,92	20,75	20,80	26,45	36,34	49,30	72,25	125,00	—
	PDMA	78,49	62,99	47,34	31,43	17,36	20,63	32,77	48,89	69,95	93,85	127,43	—
SPI	DM	-7,01	-5,25	-3,41	-1,42	0,71	3,02	5,59	8,41	11,67	15,51	20,27	—
	DMA	11,30	9,87	8,58	7,41	6,31	5,33	5,95	9,12	13,28	18,69	25,77	—
	PDMA	45,69	39,92	33,67	27,08	19,95	12,09	13,90	23,76	42,72	69,46	108,81	—
ΔCS	DM	-22,78	-22,40	-21,58	-20,52	-19,37	-18,40	-18,03	-18,99	-22,86	-33,89	-72,80	—
	DMA	41,50	34,24	26,07	17,51	14,43	15,47	20,50	27,22	36,02	53,56	99,23	—
	PDMA	32,80	23,07	13,66	4,35	-2,59	8,54	18,87	25,13	27,22	24,39	18,62	—

Tabela 8.61: Constantes de acoplamento B972 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	387,4	408,3	430,5	454,0	478,8	505,0	532,6	561,8	592,4	624,6	658,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	16,1	14,3	12,3	10,0	7,6	5,0	2,2	-0,8	-4,0	-7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,6	-68,4	-71,3	-74,4	-77,7	-81,1	-84,8	-88,8	-92,9	-97,3	-101,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,8	-1,8	-2,9	-4,1	-5,3	-6,6	-8,1	-9,6	-11,2	-12,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	38,2	39,6	41,0	42,5	44,1	45,8	47,7	49,6	51,6	53,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,4	-3,3	-4,2	-5,1	-6,2	-7,3	-8,5	-9,8	-11,2	-12,7	-14,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,1	152,2	159,7	167,7	176,1	184,9	194,1	203,8	213,9	224,3	235,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1624,6	-1619,2	-1608,6	-1593,5	-1574,8	-1553,2	-1529,4	-1503,9	-1477,3	-1450,3	-1423,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-155,9	-139,2	-122,1	-104,8	-87,4	-69,9	-52,5	-35,2	-17,9	-1,0	15,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,2	-46,8	-27,3	-7,6	11,9	31,6	51,3	70,9	90,5	110,0	129,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-200,4	-231,0	-262,9	-296,8	-333,7	-375,6	-426,0	-492,0	-590,5	-774,8	-1362,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	96,9	100,9	105,1	109,5	114,2	119,2	124,5	130,1	136,0	142,2	148,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-6,4	-7,2	-8,1	-9,0	-10,0	-11,0	-12,2	-13,3	-14,6	-15,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	173,1	177,9	183,2	189,2	196,0	203,8	212,9	223,8	237,0	253,5	274,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	193,0	200,5	208,5	216,8	225,7	235,1	245,3	256,2	268,3	281,7	297,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,5	50,4	51,2	51,8	52,2	52,3	51,9	51,0	49,3	46,5	42,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	7,0	7,4	7,9	8,6	9,4	10,4	11,7	13,4	15,6	18,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	55,0	58,4	62,1	66,4	71,2	76,7	83,3	91,4	101,8	116,1	137,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,6	124,7	130,2	135,9	142,1	148,7	155,9	163,7	172,6	182,9	195,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,3	1,7	1,0	0,2	-0,7	-2,0	-3,5	-5,5	-8,3	-12,2	-18,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,7	5,4	5,0	4,5	4,0	3,3	2,5	1,4	-0,2	-2,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,4	9,7	10,0	10,4	10,9	11,4	12,1	13,1	14,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,3	18,4	19,9	21,9	24,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	22,7	25,3	28,1	31,0	34,1	37,4	40,9	44,6	48,6	52,8	57,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	95,0	99,2	103,6	108,2	113,2	118,4	123,9	129,7	135,9	142,4	149,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,1	-1,6	-2,1	-2,6	-3,2	-3,8	-4,4	-5,1	-5,9	-6,7	-4,7
Total	DM	-20,65	-18,13	-15,31	-12,25	-9,00	-5,66	-2,36	0,64	2,76	1,98	-13,66	—
	DMA	32,19	26,97	21,62	15,87	12,56	12,57	15,94	22,33	31,12	44,07	74,93	—
	PDMA	63,88	52,94	42,17	30,78	20,01	19,21	25,00	35,61	54,36	79,92	117,48	—
CPI	DM	-33,51	-30,44	-26,82	-22,82	-18,68	-14,55	-10,90	-8,39	-8,61	-16,52	-60,92	—
	DMA	57,25	47,53	37,24	26,15	20,41	21,88	30,92	42,21	56,88	79,52	142,28	—
	PDMA	85,28	66,82	49,63	32,13	16,43	24,50	39,78	58,04	81,37	107,62	146,73	—
SPI	DM	-11,23	-9,11	-6,87	-4,50	-1,91	0,87	3,91	7,27	11,10	15,55	21,00	—
	DMA	13,81	11,90	10,17	8,33	6,80	5,75	4,96	7,76	12,23	18,07	25,55	—
	PDMA	48,19	42,77	36,70	29,79	22,63	15,34	14,16	19,16	34,55	59,61	96,02	—
ΔCS	DM	-22,28	-21,32	-19,94	-18,32	-16,78	-15,42	-14,81	-15,66	-19,71	-32,06	-81,92	—
	DMA	43,44	35,63	27,07	17,82	13,61	16,14	25,96	34,45	44,65	61,45	116,74	—
	PDMA	37,09	24,05	12,93	2,34	-6,20	9,17	25,62	38,89	46,82	48,00	50,71	—

Tabela 8.62: Constantes de acoplamento B98 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	378,4	394,9	412,6	431,4	451,4	472,7	495,3	519,3	544,7	571,6	599,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,4	16,3	15,0	13,6	12,0	10,3	8,5	6,4	4,2	1,8	-0,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,8	-67,0	-69,3	-71,8	-74,4	-77,2	-80,2	-83,4	-86,9	-90,5	-94,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,7	-0,3	-1,3	-2,5	-3,7	-5,0	-6,5	-8,0	-9,6	-11,3	-13,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,7	38,8	39,9	41,1	42,4	43,8	45,3	46,8	48,5	50,3	52,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-3,5	-4,5	-5,5	-6,7	-7,9	-9,3	-10,7	-12,3	-14,0	-15,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,6	164,9	171,7	178,8	186,4	194,4	202,8	211,6	220,8	230,5	240,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1620,8	-1615,8	-1605,3	-1589,8	-1570,3	-1547,3	-1521,6	-1493,8	-1464,4	-1433,9	-1402,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,6	-140,0	-125,1	-109,7	-94,1	-78,3	-62,3	-46,3	-30,2	-14,1	1,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,7	-46,9	-29,9	-12,6	4,8	22,3	40,0	57,8	75,7	93,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-209,6	-242,0	-275,9	-312,0	-351,3	-396,1	-450,4	-522,1	-630,5	-836,6	-1520,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,4	107,0	110,8	114,9	119,2	123,8	128,8	134,0	139,6	145,5	151,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,1	-8,0	-9,0	-10,1	-11,3	-12,5	-13,8	-15,3	-16,8	-18,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,9	189,2	193,9	199,3	205,4	212,6	221,0	231,3	244,0	260,4	282,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	201,1	208,4	216,0	224,2	232,8	242,1	252,1	263,1	275,4	289,6	306,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,7	53,3	53,6	53,6	53,0	51,8	49,6	45,8	39,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	7,0	7,5	8,1	8,9	9,9	11,1	12,8	15,0	18,0	22,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,6	65,6	68,9	72,6	76,8	81,7	87,6	94,9	104,4	117,8	138,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,2	131,0	136,1	141,6	147,5	153,8	160,7	168,4	177,2	187,7	201,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,5	0,7	-0,2	-1,1	-2,4	-4,1	-6,3	-9,3	-13,8	-21,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,7	5,3	4,8	4,2	3,5	2,6	1,5	0,0	-2,2	-5,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	9,8	10,1	10,5	10,9	11,4	12,1	13,0	14,2	16,2	19,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,6	14,1	14,7	15,4	16,1	17,0	18,1	19,4	21,3	23,8	28,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,3	27,7	30,3	33,0	35,9	39,0	42,3	45,8	49,6	53,6	57,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,6	105,5	109,6	113,9	118,6	123,5	128,8	134,3	140,2	146,5	153,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,4	-1,9	-2,5	-3,1	-3,8	-4,5	-5,3	-6,1	-7,1	-8,1	-4,7
Total	DM	-18,51	-16,53	-14,25	-11,70	-8,96	-6,11	-3,32	-0,87	0,57	-1,25	-20,70	—
	DMA	30,20	25,54	20,65	16,40	13,95	13,07	15,62	21,89	30,65	44,60	80,03	—
	PDMA	61,23	50,91	40,60	30,01	19,97	13,94	20,46	35,31	56,64	84,68	128,55	—
CPI	DM	-33,11	-31,05	-28,45	-25,45	-22,22	-19,02	-16,30	-14,85	-16,45	-26,68	-80,17	—
	DMA	55,33	46,45	36,91	28,66	24,53	23,85	27,99	37,79	52,17	76,86	149,50	—
	PDMA	83,05	66,59	50,97	35,48	21,27	17,66	29,37	46,96	69,03	94,56	135,42	—
SPI	DM	-7,81	-5,88	-3,83	-1,61	0,77	3,35	6,20	9,39	13,05	17,39	22,91	—
	DMA	11,77	10,21	8,72	7,40	6,19	5,15	6,55	10,23	14,86	20,94	29,09	—
	PDMA	45,24	39,40	32,99	26,00	19,01	11,21	13,93	26,77	47,56	77,44	123,51	—
ΔCS	DM	-25,30	-25,17	-24,63	-23,83	-22,98	-22,37	-22,50	-24,23	-29,49	-44,08	-103,08	—
	DMA	43,56	36,23	28,19	21,26	18,33	18,70	21,44	27,56	37,31	55,92	120,41	—
	PDMA	37,81	27,19	17,99	9,48	2,26	6,45	15,44	20,19	21,48	17,12	11,91	—

Tabela 8.63: Constantes de acoplamento BHandH com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	387,4	407,9	429,2	451,2	474,0	497,6	522,1	547,4	573,7	601,0	629,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,6	23,7	21,7	19,5	17,1	14,5	11,8	8,8	5,7	2,4	-1,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,7	-71,2	-73,9	-76,6	-79,5	-82,5	-85,7	-89,0	-92,5	-96,1	-99,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,9	-3,0	-4,1	-5,4	-6,6	-8,0	-9,4	-10,9	-12,5	-14,2	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,1	41,2	42,4	43,6	44,9	46,2	47,7	49,2	50,7	52,4	54,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,5	-5,6	-6,6	-7,8	-9,0	-10,2	-11,6	-13,0	-14,5	-16,1	-17,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	128,2	137,0	146,2	155,7	165,6	175,8	186,4	197,3	208,6	220,1	231,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,6	-1795,3	-1771,3	-1741,7	-1707,2	-1668,6	-1626,5	-1581,6	-1534,4	-1485,5	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-191,9	-174,0	-155,7	-137,3	-118,5	-99,7	-80,6	-61,5	-42,3	-23,1	-3,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-82,0	-63,3	-44,5	-25,5	-6,3	12,9	32,4	52,0	71,7	91,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-285,2	-321,3	-357,1	-393,6	-432,9	-478,1	-534,5	-613,1	-741,0	-1013,9	-2266,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,3	111,7	115,3	119,1	123,0	127,2	131,7	136,3	141,2	146,3	151,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-9,2	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-14,8	-16,0	-17,3	-18,7	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,9	180,0	184,6	189,8	195,8	202,8	211,0	221,0	233,2	248,7	268,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	229,5	235,4	241,5	248,1	255,1	262,6	270,9	280,0	290,4	302,3	316,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,6	52,5	53,1	53,6	53,7	53,4	52,6	51,1	48,6	44,6	38,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	8,3	9,0	9,9	11,0	12,3	13,9	16,0	18,6	22,0	26,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,8	54,2	58,0	62,2	67,1	72,7	79,3	87,7	98,6	114,2	139,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,0	142,3	146,8	151,7	156,8	162,4	168,6	175,5	183,6	193,6	207,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	-0,1	-0,7	-1,6	-2,7	-4,1	-5,9	-8,3	-11,7	-16,8	-25,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,8	5,3	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,2	-1,7	-4,4	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,8	12,1	12,5	13,0	13,6	14,4	15,5	17,1	19,6	24,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,8	17,2	17,8	18,4	19,2	20,1	21,3	22,9	25,0	28,1	33,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	19,5	22,1	24,8	27,7	30,8	34,1	37,5	41,2	45,1	49,2	53,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	107,9	111,5	115,2	119,1	123,3	127,6	132,2	137,0	142,0	147,2	152,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-2,3	-2,8	-3,3	-3,9	-4,5	-5,1	-5,8	-6,5	-7,2	-8,0	-4,7
Total	DM	-30,64	-28,01	-24,98	-21,65	-18,08	-14,46	-10,92	-7,89	-6,37	-9,91	-50,34	—
	DMA	35,48	31,39	28,06	24,45	21,32	19,87	23,11	29,73	38,88	54,42	109,44	—
	PDMA	61,18	49,91	38,83	27,08	16,60	12,89	26,08	45,46	69,42	101,08	157,28	—
CPI	DM	-64,22	-60,44	-55,87	-50,80	-45,39	-40,09	-35,35	-32,30	-33,43	-47,48	-150,43	—
	DMA	72,65	64,98	59,18	52,76	46,15	40,53	43,85	54,37	69,68	98,21	216,94	—
	PDMA	96,97	79,01	61,76	43,79	26,09	13,65	28,12	50,52	74,98	104,35	163,81	—
SPI	DM	-6,02	-4,23	-2,33	-0,27	1,94	4,33	6,99	10,01	13,47	17,64	23,05	—
	DMA	8,22	6,76	5,23	3,69	3,10	4,72	7,90	11,65	16,29	22,31	30,61	—
	PDMA	34,94	28,57	22,02	14,83	9,64	12,33	24,58	41,76	65,35	98,68	152,50	—
ΔCS	DM	-58,20	-56,21	-53,55	-50,53	-47,33	-44,42	-42,34	-42,31	-46,90	-65,12	-173,48	—
	DMA	64,43	58,22	53,95	49,08	43,05	35,81	35,95	42,72	53,40	75,90	186,32	—
	PDMA	62,03	50,44	39,74	28,96	16,46	1,33	3,54	8,76	9,63	5,66	11,31	—

Tabela 8.64: Constantes de acoplamento BMK com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	458,2	469,6	482,0	495,5	510,3	526,5	544,2	563,8	585,5	609,3	635,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,6	15,1	15,4	15,6	15,6	15,4	14,9	14,1	12,8	11,0	8,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,1	-71,6	-72,2	-72,9	-73,7	-74,7	-75,8	-77,1	-78,6	-80,2	-82,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,2	2,0	0,9	-0,4	-1,8	-3,3	-5,0	-6,7	-8,6	-10,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,2	37,3	37,4	37,5	37,8	38,1	38,4	38,9	39,4	40,0	40,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,7	-1,6	-2,6	-3,8	-5,0	-6,3	-7,8	-9,4	-11,1	-13,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	118,5	118,1	118,1	118,7	119,7	121,2	123,2	125,7	128,8	132,4	136,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1527,6	-1525,8	-1516,1	-1498,9	-1474,5	-1443,4	-1406,4	-1364,1	-1317,2	-1266,6	-1212,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-147,6	-136,2	-122,7	-107,3	-89,9	-70,6	-49,4	-26,4	-1,8	24,6	52,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-53,3	-39,4	-23,6	-6,0	13,2	34,4	57,2	81,9	108,2	136,2	165,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-160,6	-187,0	-214,1	-241,5	-269,1	-297,5	-327,9	-362,3	-405,4	-467,3	-580,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,4	107,0	108,8	111,0	113,5	116,5	119,8	123,6	128,0	133,0	138,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,0	-9,5	-11,2	-13,1	-15,2	-17,6	-20,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	244,9	249,6	254,8	260,9	268,0	276,7	287,6	301,9	321,5	349,9	395,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	181,0	187,1	193,6	200,7	208,5	217,1	226,9	238,4	252,1	269,6	293,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,8	55,7	56,4	56,9	57,0	56,7	55,6	53,4	49,4	42,1	28,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,8	6,1	6,5	7,0	7,7	8,7	10,0	11,8	14,4	18,3	24,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	89,9	91,4	93,3	95,7	98,6	102,2	107,0	113,2	121,9	134,8	155,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,3	125,4	129,0	132,9	137,3	142,3	148,1	154,8	163,0	173,3	187,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,2	3,3	2,3	1,2	-0,2	-1,7	-3,7	-6,3	-10,0	-15,4	-24,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	8,0	7,5	6,9	6,1	5,2	4,1	2,8	1,0	-1,1	-4,3	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,5	9,6	9,7	9,9	10,1	10,5	11,0	11,8	13,1	15,2	18,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,8	12,3	12,8	13,4	14,0	14,8	15,8	17,1	18,9	21,6	26,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,9	31,8	32,9	34,1	35,6	37,3	39,3	41,5	44,1	47,2	50,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,2	105,1	107,4	110,0	112,9	116,2	120,0	124,3	129,1	134,6	140,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-0,2	-1,0	-1,7	-2,6	-3,5	-4,5	-5,6	-6,9	-8,3	-9,9	-4,7
Total	DM	-7,83	-6,73	-5,09	-2,87	-0,08	3,31	7,24	11,71	16,65	21,87	26,66	—
	DMA	30,46	27,46	23,86	19,71	15,85	14,44	18,37	23,53	31,20	42,73	58,88	—
	PDMA	73,20	64,21	53,92	42,49	29,82	27,06	30,14	42,87	63,61	95,96	143,04	—
CPI	DM	-15,29	-14,39	-12,39	-9,26	-5,06	0,15	6,17	12,80	19,52	25,35	27,27	—
	DMA	46,24	40,10	32,68	24,06	16,12	13,99	24,32	36,80	50,94	68,09	91,15	—
	PDMA	84,22	71,11	56,36	40,29	22,93	30,63	44,93	60,59	77,85	102,93	133,52	—
SPI	DM	-2,35	-1,11	0,26	1,82	3,57	5,62	8,03	10,91	14,55	19,33	26,21	—
	DMA	18,89	18,19	17,39	16,51	15,66	14,77	14,00	13,79	16,73	24,13	35,22	—
	PDMA	65,12	59,15	52,14	44,11	34,87	24,45	19,30	29,87	53,16	90,85	150,02	—
ΔCS	DM	-12,94	-13,28	-12,65	-11,08	-8,63	-5,47	-1,85	1,89	4,97	6,02	1,07	—
	DMA	27,35	21,91	15,29	7,55	0,46	-0,78	10,32	23,01	34,20	43,96	55,93	—
	PDMA	19,09	11,95	4,22	-3,83	-11,94	6,18	25,63	30,71	24,69	12,08	-16,50	—

Tabela 8.65: Constantes de acoplamento BP86 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	322,1	345,7	369,6	393,7	418,1	442,6	467,5	492,5	517,8	543,3	569,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,7	24,0	22,3	20,5	18,5	16,6	14,5	12,4	10,2	7,9	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,6	-66,1	-68,6	-71,2	-73,8	-76,4	-79,0	-81,7	-84,3	-87,1	-89,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-4,1	-5,1	-6,1	-7,1	-8,2	-9,2	-10,3	-11,4	-12,5	-13,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,7	41,4	42,2	42,9	43,7	44,5	45,3	46,1	46,9	47,7	48,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,7	-8,6	-9,5	-10,3	-11,2	-12,1	-13,0	-14,0	-14,9	-15,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	129,6	137,6	145,5	153,4	161,1	168,7	176,2	183,5	190,8	197,8	204,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1800,7	-1775,6	-1746,1	-1712,9	-1676,7	-1638,1	-1597,7	-1555,9	-1513,1	-1469,6	-1425,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,4	-165,4	-148,5	-131,7	-115,1	-98,5	-82,2	-66,0	-50,0	-34,2	-18,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,5	-66,8	-48,4	-30,1	-12,0	5,8	23,5	41,1	58,4	75,6	92,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-303,2	-340,5	-378,1	-417,5	-460,9	-511,8	-575,7	-644,1	-803,5	-1077,4	-1986,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	121,2	122,7	124,2	125,7	127,2	128,8	130,4	132,0	133,7	135,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,4	-17,1	-17,8	-18,4	-19,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,7	190,3	193,4	196,9	201,0	205,8	211,5	218,4	226,8	237,3	250,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,5	252,8	255,2	257,8	260,6	263,7	267,2	271,2	275,9	281,5	288,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,0	55,0	54,8	54,3	53,5	52,3	50,7	48,5	45,6	41,7	36,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,4	12,1	13,0	14,0	15,3	16,9	18,7	21,0	23,8	27,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,6	65,6	68,9	72,8	77,3	82,8	89,8	99,1	112,6	134,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,5	153,6	155,8	158,1	160,6	163,4	166,5	170,3	175,0	181,4	191,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-1,1	-2,0	-3,2	-4,5	-6,0	-8,0	-10,6	-14,2	-19,4	-27,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	4,2	3,4	2,5	1,5	0,3	-0,9	-2,6	-4,9	-8,1	-13,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,0	13,6	14,3	15,3	16,6	18,4	21,3	26,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,4	19,8	20,3	20,9	21,8	22,9	24,4	26,6	29,8	35,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,0	27,0	29,0	31,0	33,1	35,2	37,3	39,5	41,7	44,0	46,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	121,0	122,7	124,4	126,1	127,8	129,6	131,4	133,1	135,0	136,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,7	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-29,71	-27,27	-24,65	-21,95	-19,24	-16,67	-14,44	-12,99	-13,29	-18,44	-47,50	—
	DMA	34,50	31,89	29,16	26,65	24,68	23,40	23,76	27,26	34,75	48,90	89,67	—
	PDMA	52,92	43,08	33,23	25,62	23,18	24,64	33,32	50,95	73,18	102,72	151,00	—
CPI	DM	-69,85	-65,31	-60,43	-55,40	-50,49	-46,08	-42,71	-41,48	-44,83	-60,39	-133,66	—
	DMA	75,86	70,25	64,26	58,09	52,15	47,01	45,15	49,92	63,17	90,79	178,86	—
	PDMA	95,37	79,10	62,77	46,49	31,75	20,16	22,14	39,66	59,91	84,85	129,29	—
SPI	DM	-0,27	0,63	1,58	2,57	3,68	4,90	6,29	7,91	9,83	12,32	15,69	—
	DMA	4,17	3,76	3,42	3,59	4,53	6,09	8,08	10,64	13,90	18,19	24,25	—
	PDMA	21,79	16,66	11,56	10,32	16,89	27,93	41,52	59,22	82,91	115,82	166,92	—
ΔCS	DM	-69,57	-65,94	-62,01	-57,97	-54,17	-50,98	-49,00	-49,39	-54,66	-72,71	-149,36	—
	DMA	71,70	66,49	60,84	54,50	47,61	40,92	37,07	39,28	49,27	72,60	154,61	—
	PDMA	73,58	62,44	51,21	36,18	14,87	-7,77	-19,38	-19,56	-22,99	-30,96	-37,63	—

Tabela 8.66: Constantes de acoplamento BPW91 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	320,1	344,2	368,7	393,4	418,3	443,5	469,0	494,7	520,6	546,7	573,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	26,0	24,4	22,6	20,8	18,9	16,9	14,8	12,6	10,4	8,1	5,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,7	-66,3	-68,9	-71,5	-74,2	-76,9	-79,6	-82,3	-85,1	-87,9	-90,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,7	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,8	-9,9	-11,1	-12,2	-13,4	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,9	41,7	42,5	43,3	44,1	44,9	45,7	46,5	47,4	48,2	49,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-12,0	-12,9	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,0	138,3	146,6	154,7	162,8	170,7	178,5	186,1	193,6	201,0	208,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1808,8	-1782,7	-1752,3	-1718,2	-1681,3	-1642,0	-1600,9	-1558,5	-1515,1	-1471,1	-1426,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,5	-165,3	-148,3	-131,3	-114,5	-97,8	-81,3	-64,9	-48,8	-32,8	-17,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,5	-66,7	-48,0	-29,6	-11,3	6,7	24,5	42,3	59,8	77,2	94,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-304,8	-343,0	-381,7	-422,3	-467,5	-520,8	-588,8	-684,5	-840,5	-1166,7	-2538,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,2	122,7	124,2	125,8	127,4	129,0	130,7	132,3	134,0	135,7	137,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,8	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,3	191,1	194,3	198,1	202,6	207,9	214,2	222,0	231,6	243,7	259,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,2	256,7	259,3	262,2	265,2	268,7	272,6	277,2	282,6	289,2	297,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,1	55,0	54,6	54,0	53,0	51,5	49,5	46,9	43,2	38,3	31,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,3	12,0	12,9	13,9	15,1	16,6	18,4	20,6	23,3	26,8	31,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,3	63,1	66,3	69,9	74,1	79,1	85,3	93,4	104,7	121,9	152,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,7	155,9	158,2	160,7	163,4	166,5	170,1	174,4	180,0	188,2	201,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,4	-7,2	-9,5	-12,7	-17,1	-24,0	-36,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-18,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,3	12,6	13,0	13,6	14,3	15,1	16,3	18,0	20,4	24,3	31,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,0	20,5	21,1	21,9	22,9	24,2	26,1	28,9	33,3	41,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,3	27,3	29,3	31,4	33,5	35,6	37,8	40,0	42,3	44,6	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,0	122,7	124,4	126,2	128,0	129,8	131,6	133,5	135,3	137,2	139,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,78	-27,30	-24,62	-21,82	-19,06	-16,45	-14,24	-12,89	-13,60	-20,42	-66,64	—
	DMA	34,83	32,20	29,59	27,40	25,75	24,63	25,37	29,43	38,30	55,08	114,82	—
	PDMA	51,16	40,90	31,99	27,87	28,09	30,44	41,19	61,33	87,01	123,13	190,48	—
CPI	DM	-70,94	-66,30	-61,33	-56,22	-51,31	-46,95	-43,80	-43,07	-47,78	-67,95	-183,19	—
	DMA	76,81	71,06	64,95	58,78	52,98	47,92	46,55	52,00	67,71	100,18	230,30	—
	PDMA	94,51	77,97	61,37	45,95	32,66	21,42	24,60	42,77	64,05	90,96	149,68	—
SPI	DM	0,40	1,31	2,31	3,41	4,59	5,92	7,43	9,25	11,47	14,44	18,83	—
	DMA	4,05	3,71	3,67	4,38	5,79	7,55	9,85	12,87	16,73	22,00	30,14	—
	PDMA	19,37	13,72	10,45	14,60	24,74	37,06	53,36	74,93	103,85	146,72	220,40	—
ΔCS	DM	-71,34	-67,61	-63,63	-59,62	-55,90	-52,87	-51,23	-52,32	-59,26	-82,39	-202,02	—
	DMA	72,76	67,36	61,28	54,40	47,20	40,37	36,70	39,13	50,98	78,18	200,16	—
	PDMA	75,15	64,25	50,93	31,35	7,93	-15,64	-28,76	-32,16	-39,80	-55,76	-70,72	—

Tabela 8.67: Constantes de acoplamento M05 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	813,8	806,9	800,3	794,1	788,2	782,7	777,6	772,6	767,9	763,2	758,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	14,5	12,1	9,3	6,1	2,5	-1,3	-5,4	-9,9	-14,7	-19,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-107,7	-107,5	-107,3	-107,1	-107,0	-106,8	-106,8	-106,8	-106,8	-106,9	-107,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-17,2	-17,3	-17,3	-17,2	-16,9	-16,5	-16,0	-15,3	-14,5	-13,6	-12,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,8	43,0	44,1	45,2	46,3	47,4	48,5	49,5	50,5	51,5	52,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-13,5	-14,3	-15,0	-15,5	-15,8	-16,0	-15,9	-15,6	-15,0	-14,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,2	159,5	160,9	165,7	173,0	181,6	190,8	199,9	208,6	216,8	224,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1355,8	-1374,2	-1384,7	-1387,1	-1381,8	-1370,2	-1353,5	-1333,0	-1310,0	-1285,2	-1259,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-2,3	3,7	10,4	17,8	26,0	35,0	45,0	56,0	68,3	81,8	96,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	100,7	108,9	117,6	126,9	136,8	147,6	159,2	171,9	185,6	200,5	216,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-232,0	-266,8	-295,9	-320,7	-343,1	-364,7	-387,8	-415,3	-452,2	-508,0	-605,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	83,2	89,5	95,8	102,1	108,4	114,7	121,0	127,3	133,4	139,4	145,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-21,1	-21,4	-21,5	-21,5	-21,3	-21,1	-20,7	-20,1	-19,5	-18,8	-18,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	183,3	192,4	202,0	212,2	223,0	234,4	246,5	259,2	272,8	287,1	302,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,1	235,2	244,0	252,6	260,7	268,5	275,8	282,4	288,3	293,3	297,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	36,2	36,5	36,8	37,0	37,1	37,1	37,2	37,1	36,8	36,3	35,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	20,1	20,6	20,9	21,1	21,2	21,2	21,1	20,9	20,7	20,6	20,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,3	64,5	71,1	78,3	86,1	94,5	103,7	113,6	124,3	136,0	148,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	129,5	137,3	145,0	152,6	160,2	167,6	174,9	181,9	188,8	195,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,7	-12,5	-13,4	-14,4	-15,4	-16,5	-17,6	-18,7	-19,9	-21,2	-22,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-15,7	-15,4	-14,8	-14,1	-13,3	-12,3	-11,1	-9,8	-8,5	-7,2	-6,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,8	15,5	16,1	16,6	17,0	17,3	17,5	17,6	17,6	17,6	17,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,1	17,5	18,7	19,9	21,0	21,9	22,7	23,4	23,9	24,4	24,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	16,0	19,3	22,7	26,4	30,2	34,1	38,3	42,7	47,2	52,0	57,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	81,9	88,4	94,8	101,3	107,8	114,4	120,9	127,4	133,8	140,2	146,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,3	-6,8	-7,2	-7,7	-8,2	-4,7
Total	DM	14,12	14,15	14,88	16,33	18,34	20,78	23,51	26,32	28,94	31,01	31,60	—
	DMA	36,49	33,67	31,63	32,40	34,00	36,15	39,39	43,89	49,61	56,25	64,70	—
	PDMA	99,74	101,64	103,78	107,89	112,60	117,46	123,13	129,48	136,84	145,04	154,95	—
CPI	DM	51,42	46,94	44,09	42,82	42,84	43,81	45,35	47,03	48,27	48,14	44,51	—
	DMA	63,96	60,06	57,36	59,56	62,93	66,86	72,04	79,32	87,89	98,52	113,22	—
	PDMA	89,14	95,19	102,02	110,89	120,13	129,84	140,38	152,09	164,74	178,58	194,37	—
SPI	DM	-13,23	-9,89	-6,53	-3,10	0,37	3,89	7,50	11,13	14,77	18,45	22,13	—
	DMA	16,35	14,32	12,76	12,49	12,79	13,63	15,45	17,91	21,54	25,26	29,11	—
	PDMA	107,52	106,37	105,07	105,69	107,09	108,38	110,48	112,91	116,37	120,45	126,04	—
ΔCS	DM	64,64	56,83	50,62	45,92	42,46	39,92	37,85	35,89	33,51	29,69	22,38	—
	DMA	47,62	45,74	44,60	47,08	50,14	53,24	56,59	61,41	66,35	73,26	84,10	—
	PDMA	-18,38	-11,18	-3,05	5,20	13,04	21,47	29,90	39,18	48,37	58,14	68,32	—

Tabela 8.68: Constantes de acoplamento M06 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	558,6	586,9	619,4	656,9	700,2	749,7	805,4	867,3	934,6	1006,3	1080,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,4	18,7	18,6	17,8	16,2	13,8	10,3	5,8	0,0	-7,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-84,8	-89,4	-94,9	-101,5	-109,4	-118,8	-130,0	-143,3	-159,0	-177,7	-199,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,3	-7,7	-11,9	-17,0	-23,4	-31,4	-41,3	-53,5	-68,8	-87,9	-111,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,9	46,8	50,3	54,4	59,3	65,1	72,3	81,0	91,8	105,4	122,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-9,8	-13,7	-18,8	-25,4	-34,1	-45,6	-61,1	-82,2	-111,4	-153,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	192,0	207,1	225,2	247,2	274,3	307,8	350,2	404,5	475,9	570,4	694,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1435,4	-1474,8	-1507,1	-1531,8	-1550,4	-1565,3	-1577,7	-1586,4	-1589,2	-1584,3	-1571,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-71,8	-62,4	-50,5	-36,0	-19,2	-0,8	18,4	37,2	54,2	67,1	71,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	24,8	36,9	51,2	68,0	87,5	109,3	133,0	157,9	183,4	209,2	235,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-174,2	-224,2	-279,0	-341,3	-419,2	-543,1	-988,8	4254,7	-28,6	-235,4	-333,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,6	117,0	130,7	147,1	167,1	191,6	222,2	261,2	312,2	381,3	479,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-16,9	-21,8	-28,2	-36,6	-47,6	-62,5	-83,1	-112,6	-156,5	-225,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	162,1	171,1	182,9	199,9	227,8	285,8	502,7	-632,3	-13,6	128,6	5815,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	211,9	240,4	274,4	316,2	370,8	453,5	664,3	-163,7	363,8	498,4	-158,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,1	51,7	52,0	49,4	40,0	9,4	-140,7	758,7	315,8	283,2	1065,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,1	10,2	13,7	19,8	31,7	60,8	184,5	-514,3	-157,8	-116,8	-1,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,5	55,0	60,0	68,1	83,5	126,4	1247,5	-63,6	-9,7	6,9	14,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,1	148,7	168,7	193,6	227,0	284,0	1106,5	220,6	306,3	378,0	460,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-1,2	-3,8	-8,4	-18,0	-46,6	-835,2	91,6	56,6	48,5	48,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-5,6	-9,3	-15,3	-26,4	-56,1	-791,7	62,1	21,3	1,9	-16,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,3	12,8	15,0	18,9	27,1	52,8	782,9	-78,6	-48,8	-45,1	-50,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,6	15,1	18,6	24,0	34,2	62,9	821,6	-67,4	-32,2	-22,8	-20,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,9	23,7	27,2	31,6	37,2	44,3	53,7	66,5	84,4	110,9	153,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,0	115,0	129,2	146,3	167,1	192,5	224,2	264,7	317,8	390,5	495,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,8	-4,4	-6,4	-9,0	-12,5	-17,4	-24,5	-35,0	-51,8	-80,6	-4,7
Total	DM	2,57	4,50	7,53	11,93	18,10	27,34	104,90	162,37	51,59	67,38	306,16	—
	DMA	15,05	13,69	17,25	28,57	46,70	76,59	322,40	351,00	132,07	141,40	416,55	—
	PDMA	31,74	32,47	48,78	87,00	154,58	310,75	3388,37	805,54	464,62	464,75	735,37	—
CPI	DM	19,90	16,99	15,16	14,35	13,75	10,34	-21,02	466,15	88,82	83,71	89,65	—
	DMA	20,66	24,85	31,36	45,60	66,35	92,95	151,25	522,86	156,33	163,56	190,56	—
	PDMA	20,05	24,02	44,42	71,41	105,31	146,68	207,07	380,27	317,99	394,18	495,85	—
SPI	DM	-10,14	-4,66	1,93	10,17	21,29	39,81	197,23	-60,41	24,29	55,41	464,93	—
	DMA	10,93	5,51	6,91	16,07	32,29	64,59	447,90	224,96	114,28	125,15	582,28	—
	PDMA	40,32	38,66	51,97	98,44	190,72	431,06	5721,33	1117,40	572,14	516,50	911,02	—
ΔCS	DM	30,04	21,65	13,23	4,18	-7,55	-29,47	-218,25	526,57	64,52	28,30	-375,28	—
	DMA	9,74	19,33	24,46	29,53	34,05	28,36	-296,65	297,90	42,05	38,41	-391,72	—
	PDMA	-20,26	-14,64	-7,54	-27,02	-85,41	-284,39	-5514,26	-737,14	-254,15	-122,31	-415,18	—

Tabela 8.69: Constantes de acoplamento M062X com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	412,7	416,2	420,2	425,9	434,2	446,3	463,2	486,0	515,7	553,2	599,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	4,5	5,5	6,5	7,4	8,0	8,2	7,9	6,8	4,5	0,6	-6,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,2	-74,4	-77,0	-80,1	-83,8	-88,3	-93,8	-100,5	-108,6	-118,3	-130,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	4,4	2,9	1,1	-1,3	-4,3	-8,1	-13,0	-19,1	-26,8	-36,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,9	40,9	43,1	45,7	48,7	52,3	56,6	61,6	67,6	74,9	83,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	1,1	0,2	-1,2	-3,1	-5,5	-8,6	-12,7	-18,0	-25,0	-34,3	-46,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,7	126,9	130,0	135,4	143,3	154,3	168,8	187,8	211,9	242,7	282,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1440,5	-1487,0	-1531,5	-1571,2	-1601,9	-1620,2	-1625,8	-1621,2	-1611,0	-1600,9	-1594,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-171,3	-167,8	-160,9	-151,2	-139,6	-126,6	-112,2	-96,8	-80,4	-63,3	-45,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-91,5	-82,4	-71,1	-58,2	-43,9	-28,6	-12,2	5,3	24,5	45,6	68,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-169,7	-212,8	-259,3	-308,9	-361,5	-418,0	-481,9	-563,2	-698,2	-1318,3	-2175,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	88,7	96,0	104,4	114,4	126,0	139,8	156,2	175,9	199,7	228,9	265,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,5	-1,6	-3,1	-5,1	-7,6	-10,8	-15,0	-20,4	-27,6	-37,1	-49,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	168,1	175,1	183,3	193,0	205,0	220,5	241,9	274,3	332,1	473,2	1542,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	145,5	162,5	182,0	204,2	229,8	259,8	295,5	339,9	400,1	503,6	1040,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	47,1	49,5	52,0	54,3	56,2	57,3	56,6	52,1	37,2	-14,2	-491,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	4,8	5,3	5,8	6,5	7,5	9,0	11,4	15,9	25,3	51,9	274,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,9	63,7	67,4	72,1	78,4	87,1	99,9	121,1	162,7	285,2	14163,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,0	111,1	122,7	136,2	152,0	170,8	193,8	223,1	265,0	347,4	6657,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	6,0	5,3	4,4	3,2	1,4	-1,3	-5,7	-13,5	-30,4	-83,4	-6359,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,3	7,3	7,1	6,7	6,0	4,7	2,5	-1,5	-10,1	-36,7	-3080,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,4	9,8	10,2	10,8	11,5	12,6	14,4	17,7	25,1	49,8	3090,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	9,9	11,2	12,5	14,1	15,9	18,2	21,3	26,4	36,0	64,3	3278,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,2	30,7	33,8	37,4	41,9	47,2	53,8	62,0	72,3	85,6	103,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	85,8	93,5	102,6	113,2	125,6	140,2	157,6	178,4	203,5	234,4	272,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-7,7	-11,0	-15,5	-21,9	-4,7
Total	DM	-16,83	-17,48	-17,60	-16,98	-15,40	-12,56	-8,32	-2,56	4,49	1,83	686,17	—
	DMA	31,84	28,65	25,28	22,30	22,04	25,00	30,91	39,70	59,08	116,85	1624,81	—
	PDMA	91,90	83,06	72,49	61,16	48,46	35,08	35,52	67,77	140,52	346,80	18291,68	—
CPI	DM	-17,96	-24,65	-30,84	-36,19	-40,38	-43,13	-44,65	-46,01	-50,82	-98,71	-167,50	—
	DMA	47,56	45,55	42,27	39,34	43,11	45,40	46,97	49,25	64,69	133,27	226,63	—
	PDMA	117,31	106,71	93,27	78,68	65,35	50,22	40,61	42,96	64,69	123,39	198,87	—
SPI	DM	-15,99	-12,23	-7,90	-2,90	2,92	9,85	18,33	29,31	45,05	75,55	1312,20	—
	DMA	20,31	16,25	12,82	9,81	6,59	10,04	19,13	32,71	54,97	104,81	2650,15	—
	PDMA	73,26	65,71	57,25	48,31	36,08	23,99	31,79	85,96	196,14	510,64	31559,74	—
ΔCS	DM	-1,97	-12,43	-22,94	-33,29	-43,30	-52,98	-62,97	-75,32	-95,87	-174,26	-1479,70	—
	DMA	27,25	29,29	29,45	29,53	36,52	35,36	27,85	16,54	9,72	28,47	-2423,52	—
	PDMA	44,05	41,00	36,02	30,38	29,26	26,23	8,82	-43,00	-131,45	-387,25	-31360,87	—

Tabela 8.70: Constantes de acoplamento OLYP com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	330,2	358,4	386,9	415,9	445,3	475,0	505,2	535,7	566,5	597,7	629,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	22,6	20,3	17,9	15,4	12,8	10,2	7,4	4,6	1,7	-1,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-68,2	-71,5	-74,9	-78,3	-81,8	-85,3	-88,9	-92,5	-96,1	-99,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-6,9	-7,9	-8,8	-9,7	-10,7	-11,7	-12,7	-13,8	-14,8	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,9	42,2	43,4	44,7	46,0	47,3	48,6	50,0	51,3	52,7	54,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-16,8	-17,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,5	160,2	168,8	177,2	185,5	193,7	201,7	209,5	217,2	224,6	231,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1700,4	-1683,9	-1663,6	-1640,2	-1614,4	-1586,7	-1557,6	-1527,6	-1497,0	-1466,1	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-185,9	-165,3	-145,2	-125,6	-106,5	-88,0	-70,1	-52,7	-35,9	-19,6	-3,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-92,7	-69,6	-47,2	-25,3	-4,0	16,6	36,7	56,2	75,2	93,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-267,7	-304,0	-341,0	-380,2	-423,7	-474,9	-539,6	-629,6	-773,7	-1069,7	-2266,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	123,4	126,4	129,4	132,5	135,6	138,7	141,9	145,2	148,4	151,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,8	-14,5	-15,2	-15,9	-16,6	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,8	192,4	197,5	203,0	209,2	216,1	223,9	232,7	242,9	254,8	268,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,5	261,2	266,1	271,1	276,3	281,8	287,7	294,0	300,8	308,2	316,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	53,4	53,2	52,8	52,1	51,1	49,7	48,0	45,6	42,5	38,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,1	12,7	13,4	14,2	15,2	16,4	17,8	19,4	21,4	23,7	26,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,2	65,0	69,1	73,6	78,6	84,3	90,9	98,8	108,5	121,3	139,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,5	158,3	162,2	166,2	170,4	174,9	179,7	185,0	191,1	198,3	207,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,3	-3,4	-4,6	-5,9	-7,5	-9,5	-11,9	-15,1	-19,4	-25,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,7	3,1	2,5	1,8	1,1	0,3	-0,8	-2,0	-3,6	-5,8	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,9	13,4	13,9	14,5	15,2	16,1	17,3	18,8	20,9	24,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,3	20,8	21,5	22,2	23,1	24,1	25,5	27,3	29,8	33,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,2	28,7	31,2	33,8	36,4	39,2	41,9	44,7	47,6	50,5	53,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,2	123,3	126,4	129,6	132,8	136,0	139,3	142,6	145,9	149,3	152,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,7
Total	DM	-23,60	-20,55	-17,40	-14,20	-11,05	-8,09	-5,57	-3,89	-4,16	-10,08	-50,34	—
	DMA	30,64	25,39	23,16	21,60	20,51	20,60	24,61	32,04	41,79	57,75	109,44	—
	PDMA	48,27	36,38	30,07	27,08	26,99	30,09	46,17	64,58	86,04	112,87	157,28	—
CPI	DM	-56,35	-51,35	-46,21	-41,04	-36,13	-31,87	-28,79	-28,04	-32,25	-50,34	-150,43	—
	DMA	67,00	54,83	48,57	42,51	36,95	33,80	39,54	52,71	70,67	102,34	216,94	—
	PDMA	93,28	71,41	54,74	39,72	26,54	18,65	37,91	59,43	82,41	109,53	163,81	—
SPI	DM	0,42	2,04	3,73	5,49	7,35	9,35	11,47	13,82	16,44	19,43	23,05	—
	DMA	3,98	3,80	4,53	6,26	8,45	10,92	13,67	16,89	20,61	25,05	30,61	—
	PDMA	15,26	10,69	11,99	17,80	27,32	38,48	52,22	68,35	88,71	115,32	152,50	—
ΔCS	DM	-56,77	-53,39	-49,94	-46,52	-43,47	-41,22	-40,26	-41,86	-48,69	-69,77	-173,48	—
	DMA	63,02	51,03	44,05	36,25	28,49	22,88	25,87	35,82	50,06	77,29	186,32	—
	PDMA	78,01	60,73	42,75	21,91	-0,78	-19,82	-14,31	-8,92	-6,29	-5,79	11,31	—

Tabela 8.71: Constantes de acoplamento PBE com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	342,8	364,6	386,5	408,7	431,1	453,7	476,6	499,6	522,9	546,4	570,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,3	21,6	19,9	18,1	16,2	14,3	12,3	10,3	8,2	6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-68,3	-70,6	-73,0	-75,4	-77,8	-80,2	-82,7	-85,2	-87,7	-90,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,0	45,8	46,5	47,3	48,1	48,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,6	-11,6	-12,6	-13,6	-14,6	-15,7	-16,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,4	134,8	143,1	151,4	159,6	167,8	175,8	183,8	191,6	199,4	207,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1799,2	-1775,1	-1746,3	-1713,5	-1677,6	-1639,0	-1598,5	-1556,3	-1513,1	-1469,1	-1424,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,3	-160,4	-143,7	-127,2	-111,0	-94,9	-79,1	-63,5	-48,2	-33,1	-18,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,0	-59,7	-41,6	-23,9	-6,4	10,7	27,7	44,4	60,8	77,0	93,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,1	-329,4	-368,0	-408,7	-453,6	-506,6	-573,9	-668,6	-822,3	-1142,6	-2466,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	123,0	124,4	125,8	127,3	128,8	130,3	131,9	133,5	135,1	136,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,1	-16,9	-17,7	-18,5	-19,3	-20,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,1	191,9	195,0	198,7	203,0	208,0	214,1	221,4	230,6	242,3	257,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,9	255,3	257,9	260,7	263,8	267,2	271,1	275,6	281,0	287,7	296,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,5	54,5	54,1	53,6	52,6	51,3	49,4	46,9	43,3	38,5	31,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	11,6	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	23,0	26,6	31,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,7	64,4	67,4	70,8	74,8	79,5	85,4	93,2	104,0	120,7	151,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,6	155,7	157,9	160,3	162,9	165,8	169,3	173,4	178,9	187,0	200,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,7	-2,8	-4,0	-5,4	-7,2	-9,4	-12,5	-16,8	-23,7	-36,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,0	3,1	2,1	1,0	-0,2	-1,8	-3,8	-6,7	-11,1	-19,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,4	12,8	13,3	13,9	14,8	16,0	17,6	20,0	24,0	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,8	25,7	28,5	33,0	41,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,5	28,4	30,2	32,1	34,1	36,0	38,0	40,1	42,1	44,2	46,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	122,9	124,5	126,1	127,8	129,5	131,2	133,0	134,8	136,6	138,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-27,66	-25,37	-22,92	-20,36	-17,79	-15,38	-13,33	-12,14	-12,97	-19,75	-64,28	—
	DMA	33,11	29,98	27,58	25,61	24,12	23,20	24,52	28,53	37,29	53,63	111,52	—
	PDMA	48,93	38,58	29,83	24,78	24,73	27,68	40,51	59,97	85,20	121,08	188,88	—
CPI	DM	-66,10	-61,91	-57,36	-52,70	-48,17	-44,18	-41,34	-40,90	-45,77	-65,75	-176,96	—
	DMA	73,14	66,27	60,65	54,88	49,52	44,91	44,97	50,46	66,03	97,54	223,15	—
	PDMA	89,21	72,57	56,53	40,76	27,50	17,31	26,00	43,49	63,83	89,67	145,87	—
SPI	DM	0,53	1,42	2,33	3,36	4,49	5,75	7,21	8,95	11,09	13,99	18,36	—
	DMA	3,76	3,37	3,32	4,15	5,50	7,28	9,52	12,44	16,21	21,43	29,67	—
	PDMA	19,39	13,66	10,26	13,06	22,70	35,29	51,14	72,05	100,87	144,12	220,43	—
ΔCS	DM	-66,63	-63,33	-59,70	-56,06	-52,66	-49,93	-48,55	-49,85	-56,87	-79,74	-195,32	—
	DMA	69,38	62,91	57,33	50,74	44,02	37,63	35,45	38,02	49,81	76,11	193,48	—
	PDMA	69,82	58,91	46,28	27,70	4,80	-17,97	-25,15	-28,55	-37,04	-54,45	-74,56	—

Tabela 8.72: Constantes de acoplamento PW91 com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	331,0	354,2	377,6	401,3	425,1	449,2	473,5	498,0	522,8	547,8	573,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,7	24,0	22,3	20,4	18,5	16,6	14,5	12,4	10,2	8,0	5,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,1	-67,5	-70,0	-72,5	-75,0	-77,5	-80,1	-82,7	-85,3	-88,0	-90,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,4	-5,4	-6,5	-7,6	-8,7	-9,8	-11,0	-12,1	-13,3	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,5	42,2	42,9	43,6	44,4	45,2	45,9	46,7	47,5	48,3	49,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,1	-8,0	-8,9	-9,9	-10,8	-11,8	-12,7	-13,7	-14,7	-15,7	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,3	138,6	146,7	154,8	162,7	170,6	178,4	186,0	193,5	200,9	208,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,4	-1788,3	-1758,5	-1724,6	-1687,5	-1647,7	-1605,8	-1562,4	-1517,9	-1472,5	-1426,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,1	-164,9	-147,9	-130,9	-114,1	-97,5	-81,0	-64,7	-48,6	-32,7	-17,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,1	-64,5	-46,0	-27,8	-9,8	8,0	25,6	43,1	60,3	77,4	94,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-303,6	-341,9	-380,6	-421,2	-466,1	-519,1	-586,6	-681,8	-836,9	-1162,0	-2538,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,4	123,8	125,2	126,6	128,1	129,6	131,1	132,7	134,2	135,8	137,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-13,1	-13,9	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,8	-18,6	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,2	192,0	195,1	198,9	203,2	208,4	214,6	222,2	231,7	243,7	259,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,6	257,9	260,4	263,0	265,9	269,2	272,9	277,4	282,7	289,2	297,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,0	54,9	54,5	53,9	53,0	51,6	49,6	47,0	43,4	38,4	31,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	11,7	12,5	13,5	14,7	16,2	18,0	20,2	23,0	26,6	31,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,0	63,7	66,8	70,3	74,4	79,3	85,4	93,3	104,5	121,6	152,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,8	156,9	159,1	161,4	164,0	166,9	170,3	174,5	180,0	188,0	201,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,6	-2,6	-3,8	-5,3	-7,1	-9,4	-12,4	-16,8	-23,8	-36,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	3,9	3,1	2,1	1,0	-0,2	-1,8	-3,9	-6,8	-11,1	-18,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,5	12,9	13,4	14,1	15,0	16,1	17,7	20,1	24,1	31,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	19,8	20,3	20,9	21,6	22,6	24,0	25,9	28,6	33,1	41,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,9	27,8	29,8	31,8	33,9	35,9	38,1	40,2	42,4	44,6	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,1	123,7	125,3	126,9	128,6	130,3	132,0	133,8	135,5	137,3	139,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,11	-26,74	-24,17	-21,49	-18,79	-16,22	-14,05	-12,73	-13,44	-20,25	-66,64	—
	DMA	34,28	31,76	29,27	27,23	25,62	24,53	25,37	29,39	38,33	54,95	114,82	—
	PDMA	50,91	40,60	31,41	26,23	26,36	28,95	40,35	60,10	85,80	122,05	190,48	—
CPI	DM	-70,02	-65,58	-60,79	-55,84	-51,01	-46,69	-43,55	-42,82	-47,46	-67,52	-183,19	—
	DMA	75,69	70,16	64,26	58,18	52,52	47,55	46,49	51,96	67,92	100,01	230,30	—
	PDMA	93,00	76,59	60,24	44,34	30,90	20,00	25,02	43,14	64,25	90,85	149,68	—
SPI	DM	0,89	1,75	2,69	3,70	4,83	6,12	7,58	9,34	11,51	14,42	18,83	—
	DMA	3,91	3,60	3,61	4,53	5,89	7,65	9,87	12,83	16,64	21,90	30,14	—
	PDMA	20,04	14,21	10,27	12,95	23,03	35,52	51,58	72,54	101,61	144,93	220,40	—
ΔCS	DM	-70,90	-67,33	-63,48	-59,54	-55,84	-52,81	-51,13	-52,16	-58,97	-81,94	-202,02	—
	DMA	71,78	66,56	60,66	53,66	46,63	39,89	36,62	39,13	51,28	78,11	200,16	—
	PDMA	72,96	62,39	49,97	31,39	7,87	-15,52	-26,56	-29,39	-37,36	-54,09	-70,72	—

Tabela 8.73: Constantes de acoplamento TPSSh com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	332,8	357,4	381,9	406,5	431,0	455,5	479,9	504,2	528,4	552,6	576,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,5	21,1	19,6	18,1	16,5	14,8	13,1	11,3	9,5	7,6	5,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,0	-71,3	-73,7	-76,1	-78,4	-80,8	-83,1	-85,4	-87,7	-89,9	-92,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-3,9	-5,2	-6,4	-7,7	-8,9	-10,1	-11,3	-12,5	-13,7	-14,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,0	46,5	47,1	47,6	48,0	48,5	49,0	49,5	49,9	50,4	50,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-7,2	-8,4	-9,5	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,0	-16,1	-17,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,4	193,2	197,7	202,0	206,1	209,9	213,5	216,8	219,9	222,7	225,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1755,7	-1729,9	-1701,5	-1671,2	-1639,3	-1606,2	-1572,3	-1537,9	-1503,1	-1468,2	-1433,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-161,2	-147,0	-132,9	-118,8	-104,7	-90,6	-76,6	-62,6	-48,7	-34,8	-20,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,0	-49,4	-32,9	-16,5	-0,4	15,6	31,6	47,4	63,0	78,6	94,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-295,8	-333,2	-372,6	-415,6	-464,4	-523,1	-598,3	-703,5	-871,0	-1205,8	-2416,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,3	141,1	141,9	142,7	143,4	144,2	144,9	145,5	146,1	146,7	147,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,5	-11,6	-12,7	-13,7	-14,8	-15,8	-16,8	-17,7	-18,7	-19,6	-20,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	191,2	195,0	199,3	204,3	210,2	217,1	225,4	235,3	247,4	262,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	283,7	285,4	287,2	289,2	291,4	293,9	296,8	300,2	304,4	309,5	316,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,7	58,1	57,3	56,2	54,7	52,8	50,4	47,3	43,4	38,4	31,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,5	13,1	14,0	15,0	16,2	17,8	19,6	21,9	24,6	28,0	32,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,2	71,9	74,9	78,4	82,5	87,4	93,5	101,3	112,0	127,8	153,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	174,5	176,1	177,9	179,8	181,9	184,3	187,1	190,7	195,4	202,3	213,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-2,0	-3,3	-4,8	-6,5	-8,6	-11,2	-14,6	-19,2	-25,9	-37,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,7	8,5	7,1	5,7	4,1	2,3	0,3	-2,2	-5,5	-10,0	-17,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,3	12,8	13,3	14,0	14,8	15,8	17,2	18,9	21,4	25,2	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,6	23,0	23,4	24,0	24,7	25,7	27,1	28,9	31,6	35,7	42,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,7	35,2	36,6	38,0	39,5	40,9	42,3	43,7	45,0	46,4	47,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	139,7	140,7	141,8	142,8	143,7	144,7	145,6	146,5	147,3	148,1	148,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-4,0	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,2	-8,7	-4,7
Total	DM	-18,53	-16,51	-14,46	-12,44	-10,57	-8,95	-7,84	-7,77	-9,88	-18,07	-59,32	—
	DMA	30,77	29,04	27,76	26,74	26,07	26,10	28,95	34,20	43,80	60,53	112,82	—
	PDMA	54,17	44,18	36,86	32,60	30,16	30,45	47,29	68,23	94,32	129,45	189,92	—
CPI	DM	-55,23	-51,33	-47,44	-43,71	-40,45	-38,00	-37,01	-38,76	-46,20	-68,86	-171,19	—
	DMA	61,15	56,33	52,20	48,22	44,88	42,91	46,92	55,55	73,38	106,41	220,41	—
	PDMA	77,02	62,23	47,76	33,63	22,64	16,70	32,12	49,95	70,13	95,54	147,18	—
SPI	DM	8,39	9,03	9,72	10,49	11,35	12,36	13,55	14,97	16,75	19,18	22,71	—
	DMA	8,49	9,03	9,84	10,99	12,28	13,77	15,77	18,55	22,11	26,89	33,91	—
	PDMA	37,41	30,94	28,87	31,85	35,67	40,54	58,42	81,64	112,06	154,31	221,26	—
ΔCS	DM	-63,61	-60,35	-57,16	-54,20	-51,79	-50,36	-50,56	-53,73	-62,95	-88,04	-193,90	—
	DMA	52,66	47,30	42,36	37,23	32,60	29,14	31,14	36,99	51,27	79,52	186,50	—
	PDMA	39,61	31,29	18,89	1,79	-13,03	-23,84	-26,30	-31,70	-41,92	-58,78	-74,08	—

Tabela 8.74: Constantes de acoplamento X3LYP com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,1	389,0	414,1	439,4	465,0	490,9	516,9	543,2	569,7	596,5	623,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,3	20,5	18,5	16,4	14,2	11,9	9,6	7,1	4,6	2,0	-0,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,1	-73,8	-76,4	-79,2	-81,9	-84,6	-87,4	-90,3	-93,1	-96,0	-98,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-5,0	-6,1	-7,2	-8,3	-9,5	-10,7	-11,9	-13,1	-14,3	-15,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,2	46,0	46,8	47,6	48,5	49,3	50,1	51,0	51,9	52,7	53,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,4	-9,4	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-14,3	-15,4	-16,4	-17,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,0	159,5	167,9	176,2	184,3	192,3	200,2	207,9	215,4	222,7	229,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,9	-1785,6	-1755,8	-1722,2	-1685,6	-1646,4	-1605,3	-1562,8	-1519,2	-1474,9	-1430,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,5	-154,9	-137,4	-120,1	-102,9	-85,9	-69,1	-52,4	-36,0	-19,8	-3,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-71,7	-52,6	-33,6	-14,9	3,5	21,8	39,9	57,8	75,6	93,1	110,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-293,4	-330,3	-367,3	-406,0	-448,6	-498,3	-561,0	-648,4	-788,5	-1074,7	-2186,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	134,1	135,6	137,2	138,8	140,4	142,0	143,7	145,3	147,0	148,7	150,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,0	-16,8	-17,6	-18,3	-19,0	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,0	203,0	206,4	210,4	214,9	220,3	226,5	234,0	243,0	254,0	267,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	275,5	278,0	280,5	283,2	286,1	289,3	292,9	296,9	301,6	307,1	313,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,4	57,3	57,0	56,5	55,6	54,4	52,7	50,5	47,6	43,8	38,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,6	11,2	11,9	12,8	13,8	15,0	16,4	18,2	20,3	22,9	26,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,3	70,2	73,5	77,1	81,2	86,0	91,7	98,8	107,9	120,3	138,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,1	170,3	172,6	175,1	177,7	180,6	183,8	187,5	192,0	197,8	205,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,1	-0,9	-1,9	-3,1	-4,4	-6,0	-8,0	-10,5	-13,8	-18,4	-25,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,4	5,7	4,9	4,0	3,0	2,0	0,7	-0,7	-2,6	-5,2	-8,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,8	13,1	13,4	13,8	14,2	14,9	15,7	16,7	18,2	20,3	23,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,4	20,7	21,0	21,5	22,0	22,8	23,7	25,0	26,7	29,2	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,2	32,3	34,5	36,7	38,9	41,2	43,5	45,9	48,3	50,7	53,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	133,1	134,9	136,6	138,4	140,2	142,1	143,9	145,8	147,7	149,6	151,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,3	-6,8	-7,4	-7,9	-4,7
Total	DM	-22,78	-20,20	-17,44	-14,57	-11,71	-8,94	-6,55	-4,95	-5,17	-10,76	-47,71	—
	DMA	32,82	30,21	28,03	26,12	24,69	24,58	28,69	34,75	43,22	57,77	105,67	—
	PDMA	50,04	40,29	30,67	24,13	21,78	26,07	41,87	59,74	81,17	108,66	153,78	—
CPI	DM	-62,66	-57,86	-52,69	-47,38	-42,18	-37,43	-33,73	-32,18	-35,36	-51,82	-143,35	—
	DMA	67,92	60,88	54,64	48,35	43,04	40,41	47,36	58,45	74,20	103,13	209,07	—
	PDMA	79,78	62,64	45,75	30,43	21,08	21,38	40,12	60,35	82,15	108,12	159,40	—
SPI	DM	6,46	7,41	8,41	9,49	10,63	11,95	13,37	15,03	16,98	19,35	22,43	—
	DMA	7,07	7,72	8,53	9,81	11,23	12,97	15,00	17,36	20,50	24,51	29,84	—
	PDMA	28,22	23,90	19,61	19,52	22,28	29,52	43,15	59,30	80,45	109,06	149,66	—
ΔCS	DM	-69,12	-65,28	-61,10	-56,88	-52,82	-49,38	-47,10	-47,21	-52,34	-71,17	-165,77	—
	DMA	60,84	53,16	46,11	38,53	31,80	27,44	32,36	41,09	53,70	78,61	179,23	—
	PDMA	51,56	38,73	26,14	10,91	-1,20	-8,14	-3,03	1,04	1,69	-0,95	9,74	—

Tabela 8.75: Constantes de acoplamento B1B95 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	369,1	392,7	416,4	440,4	464,5	488,8	513,2	537,8	562,6	587,5	612,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,4	20,6	18,8	16,8	14,7	12,5	10,3	8,0	5,6	3,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,9	-71,4	-73,9	-76,5	-79,0	-81,6	-84,2	-86,8	-89,4	-92,1	-94,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-3,7	-4,7	-5,7	-6,7	-7,7	-8,8	-9,8	-10,9	-12,0	-13,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,4	43,2	43,9	44,6	45,4	46,1	46,9	47,7	48,4	49,2	50,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,0	-7,9	-8,7	-9,6	-10,5	-11,3	-12,2	-13,1	-14,0	-15,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	139,2	146,9	154,3	161,7	169,0	176,1	183,1	189,9	196,6	203,2	209,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1714,4	-1692,8	-1666,8	-1637,0	-1604,2	-1568,9	-1531,5	-1492,7	-1452,7	-1411,9	-1370,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-179,1	-162,2	-145,4	-128,6	-111,9	-95,4	-79,0	-62,7	-46,6	-30,7	-14,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,9	-25,6	-7,5	10,4	28,1	45,7	63,1	80,4	97,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-282,2	-316,6	-350,2	-384,0	-419,6	-459,0	-505,3	-564,1	-646,5	-780,4	-1063,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,1	124,4	125,7	127,1	128,5	129,9	131,4	132,8	134,3	135,8	137,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-11,3	-12,0	-12,7	-13,3	-14,0	-14,7	-15,3	-16,0	-16,7	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,1	193,8	196,7	200,2	204,1	208,6	213,9	220,1	227,5	236,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,8	255,7	257,7	259,8	262,0	264,4	266,9	269,7	272,8	276,4	280,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,7	55,9	55,9	55,7	55,4	54,8	54,0	52,8	51,3	49,3	46,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,8	10,2	10,7	11,3	11,9	12,7	13,7	14,8	16,1	17,7	19,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,2	64,8	67,5	70,6	74,0	77,8	82,2	87,5	93,8	101,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,4	157,3	159,2	161,2	163,3	165,5	167,9	170,5	173,4	176,7	180,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,5	-0,2	-0,9	-1,8	-2,8	-3,9	-5,2	-6,8	-8,6	-10,9	-13,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,6	4,9	4,2	3,5	2,7	1,8	0,8	-0,3	-1,7	-3,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,1	12,3	12,6	12,9	13,2	13,7	14,3	15,1	16,0	17,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,2	19,5	19,7	20,1	20,6	21,1	21,8	22,7	23,9	25,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,0	28,0	29,9	31,9	33,9	35,9	38,0	40,1	42,2	44,4	46,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,4	124,0	125,5	127,1	128,7	130,3	131,9	133,6	135,2	136,8	138,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,3	-3,8	-4,2	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,1	-4,7
Total	DM	-22,50	-20,17	-17,65	-14,97	-12,20	-9,48	-6,91	-4,70	-3,30	-3,76	-9,83	—
	DMA	28,87	24,99	22,44	19,96	17,76	16,13	17,50	21,64	27,15	37,08	54,03	—
	PDMA	54,44	44,22	34,52	24,74	16,86	13,44	21,52	35,38	50,60	68,35	90,27	—
CPI	DM	-54,59	-50,15	-45,32	-40,14	-34,88	-29,81	-25,20	-21,62	-20,13	-23,28	-40,05	—
	DMA	62,81	54,05	48,10	41,92	35,65	30,23	31,45	38,96	49,42	69,77	105,88	—
	PDMA	90,25	72,78	56,40	40,38	24,36	13,32	22,45	40,48	59,72	80,89	106,87	—
SPI	DM	1,03	1,81	2,64	3,49	4,44	5,43	6,51	7,70	9,04	10,55	12,33	—
	DMA	3,97	3,68	3,63	3,85	4,64	5,79	7,27	8,94	10,83	13,10	16,00	—
	PDMA	28,17	23,28	18,48	13,27	11,35	13,53	20,84	31,64	43,92	59,16	78,10	—
ΔCS	DM	-55,62	-51,97	-47,96	-43,63	-39,32	-35,24	-31,71	-29,32	-29,17	-33,84	-52,38	—
	DMA	58,84	50,37	44,47	38,06	31,01	24,44	24,19	30,02	38,59	56,67	89,88	—
	PDMA	62,08	49,50	37,92	27,11	13,01	-0,21	1,61	8,83	15,80	21,72	28,76	—

Tabela 8.76: Constantes de acoplamento B3LYP com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	358,6	383,6	408,8	434,3	460,0	486,0	512,2	538,6	565,2	592,1	619,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,4	20,6	18,6	16,5	14,3	12,1	9,7	7,2	4,7	2,1	-0,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-73,0	-75,7	-78,4	-81,1	-83,9	-86,7	-89,6	-92,4	-95,3	-98,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-4,9	-6,0	-7,1	-8,2	-9,3	-10,5	-11,7	-12,9	-14,1	-15,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	45,5	46,3	47,1	48,0	48,8	49,7	50,5	51,4	52,3	53,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-8,5	-9,5	-10,4	-11,4	-12,4	-13,4	-14,4	-15,4	-16,4	-17,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,1	158,6	167,0	175,2	183,4	191,3	199,2	206,8	214,3	221,7	228,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1808,1	-1782,4	-1752,3	-1718,6	-1681,8	-1642,6	-1601,6	-1559,2	-1515,9	-1471,8	-1427,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,1	-154,6	-137,1	-119,8	-102,6	-85,6	-68,8	-52,2	-35,8	-19,6	-3,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-72,4	-53,2	-34,3	-15,5	2,9	21,2	39,3	57,3	75,0	92,6	110,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-295,3	-332,1	-369,0	-407,6	-450,1	-499,7	-562,3	-649,3	-788,6	-1072,0	-2153,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,4	135,0	136,5	138,1	139,8	141,4	143,1	144,8	146,5	148,3	150,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-13,0	-13,7	-14,5	-15,2	-16,0	-16,7	-17,5	-18,2	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,2	203,2	206,7	210,6	215,2	220,5	226,7	234,2	243,2	254,1	267,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	274,3	276,7	279,3	282,1	285,0	288,2	291,8	295,8	300,5	305,9	312,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,1	57,0	56,7	56,2	55,3	54,1	52,5	50,3	47,4	43,7	38,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	11,4	12,1	13,0	14,0	15,2	16,6	18,3	20,4	22,9	26,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,6	70,5	73,8	77,4	81,5	86,3	92,1	99,1	108,2	120,6	138,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	167,4	169,7	172,0	174,5	177,1	180,0	183,2	187,0	191,5	197,2	205,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,2	-1,0	-2,1	-3,2	-4,6	-6,2	-8,2	-10,6	-13,9	-18,5	-25,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,5	4,7	3,8	2,9	1,8	0,6	-0,8	-2,7	-5,3	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,8	13,1	13,4	13,8	14,2	14,9	15,7	16,7	18,2	20,3	23,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,5	20,7	21,1	21,5	22,1	22,9	23,8	25,1	26,8	29,2	33,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	32,2	34,4	36,6	38,8	41,1	43,5	45,8	48,2	50,7	53,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,3	134,1	135,9	137,7	139,5	141,4	143,3	145,1	147,0	149,0	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,6	-4,1	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-23,12	-20,52	-17,73	-14,84	-11,95	-9,18	-6,77	-5,15	-5,35	-10,83	-46,62	—
	DMA	32,77	30,31	28,12	26,20	24,69	24,46	28,24	34,27	42,73	57,19	104,12	—
	PDMA	49,77	40,08	30,39	24,35	22,01	26,41	42,02	59,61	81,07	108,43	153,00	—
CPI	DM	-63,15	-58,30	-53,10	-47,75	-42,50	-37,73	-34,01	-32,45	-35,57	-51,75	-140,53	—
	DMA	68,14	61,39	55,10	48,80	43,26	40,33	46,48	57,54	73,23	101,95	205,64	—
	PDMA	80,30	63,22	46,37	31,19	21,29	20,59	39,30	59,54	81,17	107,14	157,30	—
SPI	DM	6,24	7,19	8,21	9,29	10,45	11,75	13,21	14,87	16,81	19,19	22,25	—
	DMA	6,83	7,52	8,34	9,63	11,07	12,82	14,87	17,20	20,37	24,36	29,67	—
	PDMA	27,37	23,12	18,67	19,34	22,53	30,68	44,02	59,66	81,00	109,37	149,84	—
ΔCS	DM	-69,39	-65,49	-61,31	-57,04	-52,95	-49,48	-47,22	-47,31	-52,39	-70,94	-162,77	—
	DMA	61,31	53,87	46,76	39,17	32,20	27,51	31,62	40,34	52,85	77,59	175,96	—
	PDMA	52,93	40,10	27,69	11,85	-1,24	-10,09	-4,72	-0,12	0,16	-2,23	7,47	—

Tabela 8.77: Constantes de acoplamento B3P86 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	322,9	346,6	370,6	394,7	419,2	443,8	468,7	493,7	519,0	544,5	570,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,4	23,8	22,0	20,2	18,2	16,2	14,1	12,0	9,8	7,5	5,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,8	-66,4	-68,9	-71,5	-74,1	-76,7	-79,4	-82,0	-84,7	-87,5	-90,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-4,1	-5,0	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,3	-11,4	-12,5	-13,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,6	42,3	43,1	43,9	44,7	45,5	46,3	47,1	48,0	48,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,9	-8,7	-9,6	-10,5	-11,4	-12,3	-13,3	-14,2	-15,1	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,9	139,1	147,1	155,1	163,0	170,7	178,3	185,8	193,1	200,3	207,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,8	-1776,1	-1745,9	-1712,2	-1675,6	-1636,6	-1595,8	-1553,7	-1510,6	-1466,9	-1422,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-179,9	-162,8	-145,8	-129,0	-112,3	-95,7	-79,3	-63,1	-47,1	-31,3	-15,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,6	-64,8	-46,3	-28,0	-9,9	7,9	25,6	43,1	60,5	77,7	94,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-303,1	-340,2	-377,6	-416,7	-459,9	-510,4	-574,0	-662,2	-801,7	-1077,2	-2008,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	123,2	124,7	126,2	127,8	129,4	131,0	132,6	134,2	135,9	137,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,7	-16,4	-17,1	-17,8	-18,5	-19,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,7	193,4	196,6	200,2	204,4	209,4	215,3	222,4	231,1	241,9	255,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,2	256,6	259,0	261,7	264,6	267,7	271,3	275,4	280,1	285,9	293,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,9	54,8	54,6	54,1	53,2	52,0	50,4	48,1	45,1	41,1	35,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	11,6	12,3	13,2	14,3	15,6	17,1	19,0	21,3	24,2	27,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,6	64,4	67,4	70,9	74,8	79,5	85,2	92,5	102,2	116,3	139,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,0	156,1	158,4	160,8	163,3	166,2	169,5	173,3	178,2	184,8	195,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,4	-8,4	-11,1	-14,8	-20,2	-29,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	4,2	3,4	2,5	1,5	0,3	-1,0	-2,7	-5,0	-8,3	-13,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,1	13,7	14,4	15,4	16,7	18,6	21,5	26,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,3	19,6	20,0	20,6	21,2	22,1	23,2	24,8	27,0	30,3	35,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,9	27,9	29,9	32,0	34,1	36,2	38,4	40,6	42,8	45,1	47,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,2	122,9	124,6	126,3	128,0	129,8	131,6	133,4	135,2	137,1	138,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-28,90	-26,41	-23,74	-20,98	-18,22	-15,59	-13,30	-11,81	-12,07	-17,22	-47,04	—
	DMA	34,20	31,52	28,90	26,72	24,88	23,70	24,45	28,01	35,82	50,11	92,11	—
	PDMA	51,81	41,81	31,97	25,48	23,31	25,37	35,65	53,62	76,27	106,40	156,40	—
CPI	DM	-69,38	-64,74	-59,74	-54,63	-49,64	-45,14	-41,70	-40,42	-43,74	-59,40	-134,70	—
	DMA	75,31	69,55	63,46	57,19	51,20	46,01	45,01	49,78	63,66	91,44	182,06	—
	PDMA	93,69	77,14	60,90	44,46	30,02	18,48	23,95	41,57	62,06	87,08	132,29	—
SPI	DM	0,78	1,70	2,65	3,70	4,83	6,08	7,52	9,17	11,15	13,71	17,25	—
	DMA	4,05	3,62	3,56	4,37	5,59	7,33	9,37	12,04	15,39	19,81	26,14	—
	PDMA	21,09	15,90	10,75	11,55	18,40	30,42	44,23	62,45	86,69	120,57	174,09	—
ΔCS	DM	-70,16	-66,44	-62,39	-58,33	-54,46	-51,22	-49,22	-49,59	-54,89	-73,11	-151,95	—
	DMA	71,26	65,93	59,90	52,82	45,61	38,68	35,64	37,74	48,27	71,63	155,92	—
	PDMA	72,60	61,24	50,15	32,91	11,62	-11,94	-20,29	-20,89	-24,63	-33,49	-41,80	—

Tabela 8.78: Constantes de acoplamento B971 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	392,5	409,1	426,6	445,2	464,9	485,8	508,0	531,3	556,0	581,9	609,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,5	15,4	14,2	12,9	11,4	9,7	8,0	6,0	3,9	1,7	-0,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,4	-70,7	-73,1	-75,6	-78,3	-81,1	-84,1	-87,4	-90,8	-94,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,9	-0,1	-1,2	-2,3	-3,6	-4,9	-6,2	-7,7	-9,3	-11,0	-12,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,1	39,1	40,1	41,2	42,4	43,6	44,9	46,4	47,8	49,4	51,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-3,5	-4,4	-5,5	-6,6	-7,8	-9,1	-10,4	-11,9	-13,5	-15,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,4	160,6	167,2	174,1	181,4	189,1	197,1	205,6	214,4	223,6	233,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1611,4	-1606,1	-1595,2	-1579,6	-1559,9	-1536,9	-1511,2	-1483,4	-1454,0	-1423,6	-1392,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-149,4	-134,9	-120,0	-104,9	-89,5	-74,0	-58,4	-42,8	-27,2	-11,6	3,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-57,9	-41,1	-24,1	-6,9	10,2	27,5	44,9	62,3	79,7	97,1	114,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-205,1	-236,9	-270,1	-305,1	-343,0	-385,7	-436,5	-502,2	-597,8	-768,1	-1236,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,9	108,1	111,5	115,1	118,9	123,0	127,4	132,0	136,8	142,0	147,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-7,0	-7,9	-8,8	-9,9	-11,0	-12,1	-13,4	-14,7	-16,1	-17,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,0	191,0	195,3	200,3	205,9	212,5	220,3	229,7	241,4	256,3	276,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	203,8	210,5	217,5	224,9	232,7	241,1	250,2	260,1	271,2	283,8	298,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,4	53,2	52,7	51,4	49,3	45,8	40,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,9	7,3	7,8	8,3	9,1	10,0	11,2	12,7	14,7	17,4	21,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,4	67,1	70,1	73,5	77,4	81,8	87,2	93,8	102,2	113,9	131,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,1	132,5	137,2	142,1	147,4	153,2	159,4	166,3	174,1	183,3	195,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,4	0,6	-0,3	-1,3	-2,6	-4,2	-6,3	-9,0	-13,0	-19,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,2	5,8	5,4	4,9	4,3	3,6	2,7	1,6	0,2	-1,8	-4,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,7	10,0	10,2	10,6	10,9	11,4	12,0	12,8	14,0	15,7	18,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,0	14,5	15,0	15,6	16,3	17,1	18,1	19,3	20,9	23,2	26,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,3	28,5	30,9	33,3	36,0	38,7	41,7	44,8	48,1	51,6	55,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,0	106,5	110,2	114,1	118,3	122,7	127,3	132,2	137,4	143,0	148,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,3	-1,9	-2,4	-3,0	-3,7	-4,4	-5,1	-5,9	-6,8	-7,7	-4,7
Total	DM	-16,72	-14,80	-12,62	-10,18	-7,56	-4,84	-2,12	0,30	1,92	1,09	-10,60	—
	DMA	28,77	24,28	19,58	14,95	12,57	12,04	14,67	20,71	28,61	41,48	67,87	—
	PDMA	58,87	49,03	38,87	28,39	18,35	15,99	22,19	35,08	54,96	80,50	117,41	—
CPI	DM	-30,11	-27,97	-25,32	-22,26	-18,98	-15,71	-12,77	-10,90	-11,52	-18,71	-52,85	—
	DMA	52,75	44,08	34,61	25,28	21,11	21,15	26,43	36,32	49,28	72,31	125,05	—
	PDMA	78,49	63,10	47,45	31,68	17,60	20,87	32,83	48,88	69,94	93,85	127,43	—
SPI	DM	-6,90	-5,14	-3,30	-1,31	0,82	3,13	5,69	8,52	11,77	15,61	20,38	—
	DMA	11,19	9,77	8,55	7,38	6,30	5,37	6,05	9,27	13,45	18,87	25,94	—
	PDMA	44,48	38,71	32,58	25,99	18,90	12,42	14,38	24,96	43,97	70,71	110,06	—
ΔCS	DM	-23,21	-22,83	-22,02	-20,95	-19,80	-18,84	-18,47	-19,42	-23,29	-34,32	-73,23	—
	DMA	41,55	34,32	26,06	17,90	14,81	15,78	20,37	27,05	35,83	53,44	99,11	—
	PDMA	34,01	24,39	14,87	5,69	-1,30	8,45	18,45	23,92	25,97	23,14	17,37	—

Tabela 8.79: Constantes de acoplamento B972 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	385,8	406,7	428,9	452,4	477,2	503,4	531,0	560,2	590,8	623,0	656,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	16,0	14,2	12,2	9,9	7,5	4,9	2,1	-0,9	-4,1	-7,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,4	-68,2	-71,1	-74,2	-77,5	-80,9	-84,6	-88,6	-92,7	-97,1	-101,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,3	-0,7	-1,7	-2,8	-4,0	-5,2	-6,5	-8,0	-9,5	-11,1	-12,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,8	38,0	39,4	40,8	42,3	43,9	45,6	47,5	49,4	51,4	53,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,3	-12,8	-14,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,9	152,0	159,5	167,5	175,9	184,7	193,9	203,6	213,7	224,1	235,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1624,2	-1618,8	-1608,2	-1593,1	-1574,4	-1552,8	-1529,0	-1503,5	-1476,9	-1449,9	-1422,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-155,8	-139,1	-122,0	-104,7	-87,3	-69,8	-52,4	-35,1	-17,8	-0,9	15,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,2	-46,8	-27,3	-7,6	11,9	31,6	51,3	70,9	90,5	110,0	129,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-202,6	-233,2	-265,1	-299,0	-335,9	-377,8	-428,2	-494,2	-592,7	-777,0	-1364,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	97,0	101,0	105,2	109,6	114,3	119,3	124,6	130,2	136,1	142,3	148,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-6,4	-7,2	-8,1	-9,0	-10,0	-11,0	-12,2	-13,3	-14,6	-15,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	173,6	178,4	183,7	189,7	196,5	204,3	213,4	224,3	237,5	254,0	275,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	193,1	200,6	208,6	216,9	225,8	235,2	245,4	256,3	268,4	281,8	297,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,3	50,2	51,0	51,6	52,0	52,1	51,7	50,8	49,1	46,3	41,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	7,2	7,6	8,1	8,8	9,6	10,6	11,9	13,6	15,8	18,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	55,6	59,0	62,7	67,0	71,8	77,3	83,9	92,0	102,4	116,7	138,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	124,9	130,4	136,1	142,3	148,9	156,1	163,9	172,8	183,1	196,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,1	1,5	0,8	0,0	-0,9	-2,2	-3,7	-5,7	-8,5	-12,4	-18,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,8	5,6	5,3	4,9	4,4	3,9	3,2	2,4	1,3	-0,3	-2,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,1	10,5	11,0	11,5	12,2	13,2	14,7	17,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,5	14,0	14,5	15,1	15,8	16,6	17,5	18,6	20,1	22,1	25,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	22,8	25,4	28,2	31,1	34,2	37,5	41,0	44,7	48,7	52,9	57,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	95,0	99,2	103,6	108,2	113,2	118,4	123,9	129,7	135,9	142,4	149,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,1	-1,6	-2,1	-2,6	-3,2	-3,8	-4,4	-5,1	-5,9	-6,7	-4,7
Total	DM	-20,73	-18,21	-15,39	-12,33	-9,08	-5,73	-2,43	0,57	2,68	1,90	-13,73	—
	DMA	32,08	26,90	21,54	15,79	12,70	12,57	15,96	22,39	31,22	44,16	75,06	—
	PDMA	63,19	52,29	41,51	30,12	19,48	18,64	25,22	35,88	55,08	80,64	118,20	—
CPI	DM	-33,84	-30,76	-27,15	-23,15	-19,01	-14,88	-11,23	-8,72	-8,94	-16,85	-61,25	—
	DMA	57,20	47,49	37,20	26,11	20,77	21,90	30,90	42,19	56,86	79,50	142,34	—
	PDMA	85,28	66,92	49,74	32,24	16,67	24,58	39,84	58,04	81,37	107,62	146,74	—
SPI	DM	-11,12	-9,01	-6,77	-4,39	-1,80	0,97	4,01	7,37	11,21	15,65	21,11	—
	DMA	13,67	11,79	10,06	8,22	6,77	5,73	5,00	7,87	12,41	18,24	25,72	—
	PDMA	46,99	41,55	35,48	28,57	21,53	14,28	14,49	19,63	35,80	60,86	97,28	—
ΔCS	DM	-22,72	-21,76	-20,38	-18,75	-17,21	-15,86	-15,24	-16,09	-20,14	-32,50	-82,35	—
	DMA	43,53	35,70	27,14	17,89	14,00	16,17	25,90	34,32	44,46	61,26	116,62	—
	PDMA	38,29	25,37	14,25	3,66	-4,86	10,30	25,35	38,41	45,57	46,75	49,46	—

Tabela 8.80: Constantes de acoplamento B98 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,8	393,3	411,0	429,8	449,8	471,1	493,7	517,7	543,1	570,0	598,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,3	16,2	14,9	13,5	11,9	10,2	8,4	6,3	4,1	1,7	-0,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,6	-66,8	-69,1	-71,6	-74,2	-77,0	-80,0	-83,2	-86,7	-90,3	-94,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	0,8	-0,2	-1,2	-2,4	-3,6	-4,9	-6,4	-7,9	-9,5	-11,2	-13,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,5	38,6	39,7	40,9	42,2	43,6	45,1	46,6	48,3	50,1	52,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-3,6	-4,6	-5,6	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,4	-14,1	-16,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,4	164,7	171,5	178,6	186,2	194,2	202,6	211,4	220,6	230,3	240,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1620,4	-1615,4	-1604,9	-1589,4	-1569,9	-1546,9	-1521,2	-1493,4	-1464,0	-1433,5	-1402,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,5	-139,9	-125,0	-109,6	-94,0	-78,2	-62,2	-46,2	-30,1	-14,0	1,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,7	-46,9	-29,9	-12,6	4,8	22,3	40,0	57,8	75,7	93,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-211,8	-244,2	-278,1	-314,2	-353,5	-398,3	-452,6	-524,3	-632,7	-838,8	-1522,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,5	107,1	110,9	115,0	119,3	123,9	128,9	134,1	139,7	145,6	151,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,1	-8,0	-9,0	-10,1	-11,3	-12,5	-13,8	-15,3	-16,8	-18,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,4	189,7	194,4	199,8	205,9	213,1	221,5	231,8	244,5	260,9	283,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	201,2	208,5	216,1	224,3	232,9	242,2	252,2	263,2	275,5	289,7	306,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,8	51,7	52,5	53,1	53,4	53,4	52,8	51,6	49,4	45,6	39,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	7,2	7,7	8,3	9,1	10,1	11,3	13,0	15,2	18,2	22,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,2	66,2	69,5	73,2	77,4	82,3	88,2	95,5	105,0	118,4	139,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,4	131,2	136,3	141,8	147,7	154,0	160,9	168,6	177,4	187,9	201,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,3	-2,6	-4,3	-6,5	-9,5	-14,0	-21,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	-0,1	-2,3	-6,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,7	9,9	10,2	10,6	11,0	11,5	12,2	13,1	14,3	16,3	19,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,8	14,3	14,9	15,6	16,3	17,2	18,3	19,6	21,5	24,0	28,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,8	30,4	33,1	36,0	39,1	42,4	45,9	49,7	53,7	58,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,6	105,5	109,6	113,9	118,6	123,5	128,8	134,3	140,2	146,5	153,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,4	-1,9	-2,5	-3,1	-3,8	-4,5	-5,3	-6,1	-7,1	-8,1	-4,7
Total	DM	-18,59	-16,60	-14,32	-11,77	-9,03	-6,19	-3,40	-0,94	0,49	-1,33	-20,78	—
	DMA	30,11	25,47	20,62	16,53	14,10	13,23	15,81	21,97	30,74	44,72	80,16	—
	PDMA	60,53	50,25	40,01	29,48	19,46	14,23	20,81	36,00	57,36	85,40	129,28	—
CPI	DM	-33,44	-31,37	-28,78	-25,77	-22,55	-19,35	-16,63	-15,17	-16,77	-27,01	-80,50	—
	DMA	55,27	46,41	36,87	29,03	24,89	24,20	28,30	37,77	52,15	76,92	149,55	—
	PDMA	83,04	66,70	51,08	35,72	21,52	17,90	29,53	46,96	69,03	94,56	135,42	—
SPI	DM	-7,70	-5,77	-3,72	-1,51	0,87	3,46	6,31	9,49	13,15	17,50	23,01	—
	DMA	11,66	10,11	8,69	7,37	6,18	5,19	6,65	10,37	15,03	21,11	29,27	—
	PDMA	44,02	38,19	31,89	24,91	17,96	11,54	14,41	27,96	48,81	78,69	124,77	—
ΔCS	DM	-25,74	-25,60	-25,06	-24,27	-23,42	-22,81	-22,93	-24,67	-29,93	-44,51	-103,51	—
	DMA	43,61	36,30	28,18	21,65	18,71	19,01	21,65	27,40	37,12	55,80	120,29	—
	PDMA	39,02	28,51	19,19	10,81	3,56	6,36	15,12	18,99	20,22	15,87	10,66	—

Tabela 8.81: Constantes de acoplamento BHandH com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	385,8	406,3	427,6	449,6	472,4	496,0	520,5	545,8	572,1	599,4	627,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,5	23,6	21,6	19,4	17,0	14,4	11,7	8,7	5,6	2,3	-1,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,5	-71,0	-73,7	-76,4	-79,3	-82,3	-85,5	-88,8	-92,3	-95,9	-99,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,8	-2,9	-4,0	-5,3	-6,5	-7,9	-9,3	-10,8	-12,4	-14,1	-15,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,9	41,0	42,2	43,4	44,7	46,0	47,5	49,0	50,5	52,2	53,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,7	-6,7	-7,9	-9,1	-10,3	-11,7	-13,1	-14,6	-16,2	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	128,0	136,8	146,0	155,5	165,4	175,6	186,2	197,1	208,4	219,9	231,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,2	-1794,9	-1770,9	-1741,3	-1706,8	-1668,2	-1626,1	-1581,2	-1534,0	-1485,1	-1434,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-191,8	-173,9	-155,6	-137,2	-118,4	-99,6	-80,5	-61,4	-42,2	-23,0	-3,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-82,0	-63,3	-44,5	-25,5	-6,3	12,9	32,4	52,0	71,7	91,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-287,4	-323,5	-359,3	-395,8	-435,1	-480,3	-536,7	-615,3	-743,2	-1016,1	-2269,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,4	111,8	115,4	119,2	123,1	127,3	131,8	136,4	141,3	146,4	151,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-9,2	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-14,8	-16,0	-17,3	-18,7	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	176,4	180,5	185,1	190,3	196,3	203,3	211,5	221,5	233,7	249,2	269,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	229,6	235,5	241,6	248,2	255,2	262,7	271,0	280,1	290,5	302,4	316,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,4	52,3	52,9	53,4	53,5	53,2	52,4	50,9	48,4	44,4	38,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,9	8,5	9,2	10,1	11,2	12,5	14,1	16,2	18,8	22,2	26,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,4	54,8	58,6	62,8	67,7	73,3	79,9	88,3	99,2	114,8	140,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,2	142,5	147,0	151,9	157,0	162,6	168,8	175,7	183,8	193,8	207,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-0,3	-0,9	-1,8	-2,9	-4,3	-6,1	-8,5	-11,9	-17,0	-25,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,2	4,6	4,0	3,3	2,4	1,3	0,1	-1,8	-4,5	-9,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,2	12,6	13,1	13,7	14,5	15,6	17,2	19,7	24,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,0	17,4	18,0	18,6	19,4	20,3	21,5	23,1	25,2	28,3	33,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	19,6	22,2	24,9	27,8	30,9	34,2	37,6	41,3	45,2	49,3	53,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	107,9	111,5	115,2	119,1	123,3	127,6	132,2	137,0	142,0	147,2	152,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-2,3	-2,8	-3,3	-3,9	-4,5	-5,1	-5,8	-6,5	-7,2	-8,0	-4,7
Total	DM	-30,72	-28,08	-25,06	-21,73	-18,16	-14,54	-11,00	-7,97	-6,45	-9,99	-50,42	—
	DMA	35,40	31,48	28,15	24,57	21,47	20,06	23,20	29,80	38,97	54,51	109,57	—
	PDMA	60,48	49,33	38,25	26,66	16,89	13,25	26,78	46,16	70,14	101,80	158,00	—
CPI	DM	-64,55	-60,76	-56,20	-51,13	-45,72	-40,42	-35,67	-32,63	-33,75	-47,81	-150,75	—
	DMA	72,60	65,33	59,53	53,11	46,46	40,82	43,87	54,35	69,66	98,19	216,99	—
	PDMA	96,97	79,14	61,89	43,92	26,14	13,71	28,14	50,52	74,97	104,35	163,81	—
SPI	DM	-5,91	-4,12	-2,22	-0,17	2,05	4,44	7,10	10,12	13,58	17,75	23,16	—
	DMA	8,11	6,67	5,14	3,63	3,14	4,84	8,05	11,80	16,46	22,48	30,79	—
	PDMA	33,73	27,47	20,92	14,01	10,11	12,91	25,78	42,96	66,60	99,94	153,75	—
ΔCS	DM	-58,63	-56,64	-53,98	-50,96	-47,76	-44,86	-42,77	-42,75	-47,33	-65,56	-173,91	—
	DMA	64,49	58,66	54,39	49,48	43,32	35,98	35,83	42,55	53,20	75,71	186,20	—
	PDMA	63,24	51,67	40,97	29,90	16,03	0,80	2,36	7,56	8,38	4,41	10,06	—

Tabela 8.82: Constantes de acoplamento BMK com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	456,6	468,0	480,4	493,9	508,7	524,9	542,6	562,2	583,9	607,7	634,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,5	15,0	15,3	15,5	15,5	15,3	14,8	14,0	12,7	10,9	8,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,9	-71,4	-72,0	-72,7	-73,5	-74,5	-75,6	-76,9	-78,4	-80,0	-81,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,3	3,3	2,1	1,0	-0,3	-1,7	-3,2	-4,9	-6,6	-8,5	-10,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	37,1	37,2	37,3	37,6	37,9	38,2	38,7	39,2	39,8	40,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,1	-0,8	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,5	-11,2	-13,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	118,3	117,9	117,9	118,5	119,5	121,0	123,0	125,5	128,6	132,2	136,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1527,2	-1525,4	-1515,7	-1498,5	-1474,1	-1443,0	-1406,0	-1363,7	-1316,8	-1266,2	-1212,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-147,5	-136,1	-122,6	-107,2	-89,8	-70,5	-49,3	-26,3	-1,7	24,7	52,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-53,3	-39,4	-23,6	-6,0	13,2	34,4	57,2	81,9	108,2	136,2	165,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-162,8	-189,2	-216,3	-243,7	-271,3	-299,7	-330,1	-364,5	-407,6	-469,5	-582,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,5	107,1	108,9	111,1	113,6	116,6	119,9	123,7	128,1	133,1	138,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,0	-9,5	-11,2	-13,1	-15,2	-17,6	-20,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	245,4	250,1	255,3	261,4	268,5	277,2	288,1	302,4	322,0	350,4	395,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	181,1	187,2	193,7	200,8	208,6	217,2	227,0	238,5	252,2	269,7	294,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	55,5	56,2	56,7	56,8	56,5	55,4	53,2	49,2	41,9	28,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,0	6,3	6,7	7,2	7,9	8,9	10,2	12,0	14,6	18,5	24,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	90,5	92,0	93,9	96,3	99,2	102,8	107,6	113,8	122,5	135,4	156,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,5	125,6	129,2	133,1	137,5	142,5	148,3	155,0	163,2	173,5	187,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,0	3,1	2,1	1,0	-0,4	-1,9	-3,9	-6,5	-10,2	-15,6	-24,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,9	7,4	6,8	6,0	5,1	4,0	2,7	0,9	-1,2	-4,4	-9,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	9,7	9,8	10,0	10,2	10,6	11,1	11,9	13,2	15,3	19,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,0	12,5	13,0	13,6	14,2	15,0	16,0	17,3	19,1	21,8	26,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,0	31,9	33,0	34,2	35,7	37,4	39,4	41,6	44,2	47,3	50,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,2	105,1	107,4	110,0	112,9	116,2	120,0	124,3	129,1	134,6	140,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-0,2	-1,0	-1,7	-2,6	-3,5	-4,5	-5,6	-6,9	-8,3	-9,9	-4,7
Total	DM	-7,90	-6,81	-5,17	-2,95	-0,16	3,23	7,17	11,63	16,57	21,80	26,58	—
	DMA	30,43	27,43	23,83	19,68	15,71	14,30	18,46	23,63	31,37	42,90	59,03	—
	PDMA	72,61	63,62	53,34	41,91	29,23	26,48	30,42	43,55	64,38	96,74	143,80	—
CPI	DM	-15,62	-14,72	-12,72	-9,59	-5,39	-0,17	5,85	12,47	19,19	25,02	26,95	—
	DMA	46,20	40,06	32,65	24,03	15,79	13,68	24,48	36,96	51,10	68,25	91,27	—
	PDMA	84,32	71,21	56,47	40,39	22,98	30,70	45,14	60,80	78,06	103,08	133,62	—
SPI	DM	-2,25	-1,01	0,37	1,93	3,67	5,73	8,13	11,02	14,65	19,43	26,31	—
	DMA	18,86	18,17	17,37	16,49	15,65	14,75	14,04	13,86	16,89	24,30	35,39	—
	PDMA	64,03	58,06	51,04	43,02	33,81	23,39	19,63	30,90	54,34	92,10	151,27	—
ΔCS	DM	-13,37	-13,71	-13,08	-11,52	-9,06	-5,90	-2,29	1,45	4,54	5,58	0,63	—
	DMA	27,34	21,90	15,28	7,54	0,14	-1,07	10,44	23,10	34,21	43,95	55,88	—
	PDMA	20,30	13,16	5,43	-2,62	-10,84	7,30	25,51	29,90	23,72	10,98	-17,65	—

Tabela 8.83: Constantes de acoplamento BP86 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	320,5	344,1	368,0	392,1	416,5	441,0	465,9	490,9	516,2	541,7	567,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,6	23,9	22,2	20,4	18,4	16,5	14,4	12,3	10,1	7,8	5,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,4	-65,9	-68,4	-71,0	-73,6	-76,2	-78,8	-81,5	-84,1	-86,9	-89,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-4,0	-5,0	-6,0	-7,0	-8,1	-9,1	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	41,2	42,0	42,7	43,5	44,3	45,1	45,9	46,7	47,5	48,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,6	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,0	-16,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	129,4	137,4	145,3	153,2	160,9	168,5	176,0	183,3	190,6	197,6	204,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1800,3	-1775,2	-1745,7	-1712,5	-1676,3	-1637,7	-1597,3	-1555,5	-1512,7	-1469,2	-1425,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,3	-165,3	-148,4	-131,6	-115,0	-98,4	-82,1	-65,9	-49,9	-34,1	-18,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,5	-66,8	-48,4	-30,1	-12,0	5,8	23,5	41,1	58,4	75,6	92,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-305,4	-342,7	-380,3	-419,7	-463,1	-514,0	-577,9	-666,3	-805,7	-1079,6	-1988,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,9	121,3	122,8	124,3	125,8	127,3	128,9	130,5	132,1	133,8	135,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,8	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,4	-17,1	-17,8	-18,4	-19,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,2	190,8	193,9	197,4	201,5	206,3	212,0	218,9	227,3	237,8	251,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,9	255,3	257,9	260,7	263,8	267,3	271,3	276,0	281,6	288,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,8	54,8	54,6	54,1	53,3	52,1	50,5	48,3	45,4	41,5	36,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	11,6	12,3	13,2	14,2	15,5	17,1	18,9	21,2	24,0	27,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,5	63,2	66,2	69,5	73,4	77,9	83,4	90,4	99,7	113,2	134,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,7	153,8	156,0	158,3	160,8	163,6	166,7	170,5	175,2	181,6	191,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,3	-2,2	-3,4	-4,7	-6,2	-8,2	-10,8	-14,4	-19,6	-28,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,1	3,3	2,4	1,4	0,2	-1,0	-2,7	-5,0	-8,2	-13,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,1	13,7	14,4	15,4	16,7	18,5	21,4	26,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,6	20,0	20,5	21,1	22,0	23,1	24,6	26,8	30,0	35,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,1	31,1	33,2	35,3	37,4	39,6	41,8	44,1	46,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	121,0	122,7	124,4	126,1	127,8	129,6	131,4	133,1	135,0	136,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,3	-3,8	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,7	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-29,78	-27,35	-24,73	-22,03	-19,32	-16,75	-14,52	-13,07	-13,37	-18,52	-47,57	—
	DMA	34,63	32,02	29,29	26,85	24,91	23,62	23,99	27,49	34,84	49,00	89,79	—
	PDMA	52,58	42,74	32,89	26,01	23,98	25,33	34,06	51,70	73,90	103,44	151,73	—
CPI	DM	-70,17	-65,64	-60,75	-55,73	-50,82	-46,41	-43,04	-41,81	-45,15	-60,72	-133,99	—
	DMA	76,21	70,60	64,61	58,44	52,51	47,32	45,49	50,23	63,15	90,77	178,92	—
	PDMA	95,50	79,23	62,90	46,62	32,07	20,15	22,26	39,74	59,91	84,85	129,30	—
SPI	DM	-0,17	0,73	1,69	2,68	3,79	5,01	6,40	8,01	9,94	12,43	15,80	—
	DMA	4,14	3,73	3,39	3,69	4,67	6,23	8,23	10,81	14,07	18,36	24,43	—
	PDMA	21,11	15,99	10,89	10,89	18,05	29,13	42,72	60,47	84,16	117,07	168,17	—
ΔCS	DM	-70,01	-66,37	-62,44	-58,41	-54,60	-51,42	-49,44	-49,82	-55,09	-73,14	-149,79	—
	DMA	72,07	66,87	61,22	54,74	47,84	41,08	37,26	39,41	49,08	72,41	154,49	—
	PDMA	74,39	63,25	52,02	35,74	14,03	-8,98	-20,46	-20,73	-24,25	-32,22	-38,88	—

Tabela 8.84: Constantes de acoplamento BPW91 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	318,5	342,6	367,1	391,8	416,7	441,9	467,4	493,1	519,0	545,1	571,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,9	24,3	22,5	20,7	18,8	16,8	14,7	12,5	10,3	8,0	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,5	-66,1	-68,7	-71,3	-74,0	-76,7	-79,4	-82,1	-84,9	-87,7	-90,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,6	-4,6	-5,6	-6,6	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,7	41,5	42,3	43,1	43,9	44,7	45,5	46,3	47,2	48,0	48,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,4	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,9	-16,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	129,8	138,1	146,4	154,5	162,6	170,5	178,3	185,9	193,4	200,8	208,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1808,4	-1782,3	-1751,9	-1717,8	-1680,9	-1641,6	-1600,5	-1558,1	-1514,7	-1470,7	-1426,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,4	-165,2	-148,2	-131,2	-114,4	-97,7	-81,2	-64,8	-48,7	-32,7	-16,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-85,5	-66,7	-48,0	-29,6	-11,3	6,7	24,5	42,3	59,8	77,2	94,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-307,0	-345,2	-383,9	-424,5	-469,7	-523,0	-591,0	-686,7	-842,7	-1168,9	-2541,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	122,8	124,3	125,9	127,5	129,1	130,8	132,4	134,1	135,8	137,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-13,6	-14,3	-15,0	-15,8	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,8	198,6	203,1	208,4	214,7	222,5	232,1	244,2	259,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,3	256,8	259,4	262,3	265,3	268,8	272,7	277,3	282,7	289,3	297,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,9	54,8	54,4	53,8	52,8	51,3	49,3	46,7	43,0	38,1	31,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,5	12,2	13,1	14,1	15,3	16,8	18,6	20,8	23,5	27,0	31,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,9	63,7	66,9	70,5	74,7	79,7	85,9	94,0	105,3	122,5	153,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,9	156,1	158,4	160,9	163,6	166,7	170,3	174,6	180,2	188,4	202,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,9	-2,9	-4,1	-5,6	-7,4	-9,7	-12,9	-17,3	-24,2	-36,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,5	2,7	1,7	0,6	-0,6	-2,2	-4,3	-7,2	-11,5	-19,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,7	13,1	13,7	14,4	15,2	16,4	18,1	20,5	24,4	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,2	20,7	21,3	22,1	23,1	24,4	26,3	29,1	33,5	41,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,4	29,4	31,5	33,6	35,7	37,9	40,1	42,4	44,7	47,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,0	122,7	124,4	126,2	128,0	129,8	131,6	133,5	135,3	137,2	139,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,86	-27,37	-24,69	-21,90	-19,14	-16,53	-14,32	-12,97	-13,67	-20,49	-66,72	—
	DMA	34,97	32,33	29,75	27,63	25,96	24,84	25,62	29,66	38,39	55,17	114,95	—
	PDMA	50,83	40,57	32,31	28,67	28,75	31,13	41,97	62,08	87,73	123,85	191,20	—
CPI	DM	-71,26	-66,63	-61,65	-56,55	-51,64	-47,28	-44,13	-43,40	-48,11	-68,27	-183,52	—
	DMA	77,15	71,41	65,29	59,15	53,29	48,23	46,89	52,31	67,69	100,16	230,35	—
	PDMA	94,64	78,10	61,51	46,27	32,65	21,41	24,72	42,85	64,05	90,96	149,69	—
SPI	DM	0,51	1,41	2,41	3,51	4,69	6,03	7,54	9,35	11,58	14,55	18,94	—
	DMA	4,03	3,68	3,69	4,51	5,92	7,69	10,02	13,05	16,90	22,17	30,31	—
	PDMA	18,69	13,04	10,90	15,76	25,90	38,26	54,61	76,19	105,10	147,97	221,65	—
ΔCS	DM	-71,77	-68,04	-64,07	-60,06	-56,33	-53,31	-51,67	-52,75	-59,69	-82,82	-202,46	—
	DMA	73,13	67,73	61,60	54,63	47,37	40,53	36,87	39,26	50,79	77,99	200,04	—
	PDMA	75,95	65,05	50,61	30,51	6,75	-16,85	-29,89	-33,34	-41,05	-57,01	-71,97	—

Tabela 8.85: Constantes de acoplamento M05 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	812,2	805,3	798,7	792,5	786,6	781,1	776,0	771,0	766,3	761,6	756,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,5	14,4	12,0	9,2	6,0	2,4	-1,4	-5,5	-10,0	-14,8	-19,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-107,5	-107,3	-107,1	-106,9	-106,8	-106,6	-106,6	-106,6	-106,6	-106,7	-106,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-17,1	-17,2	-17,2	-17,1	-16,8	-16,4	-15,9	-15,2	-14,4	-13,5	-12,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,6	42,8	43,9	45,0	46,1	47,2	48,3	49,3	50,3	51,3	52,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-12,7	-13,6	-14,4	-15,1	-15,6	-15,9	-16,1	-16,0	-15,7	-15,1	-14,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,0	159,3	160,7	165,5	172,8	181,4	190,6	199,7	208,4	216,6	224,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1355,4	-1373,8	-1384,3	-1386,7	-1381,4	-1369,8	-1353,1	-1332,6	-1309,6	-1284,8	-1259,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-2,2	3,8	10,5	17,9	26,1	35,1	45,1	56,1	68,4	81,9	96,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	100,7	108,9	117,6	126,9	136,8	147,6	159,2	171,9	185,6	200,5	216,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-234,2	-269,0	-298,1	-322,9	-345,3	-366,9	-390,0	-417,5	-454,4	-510,2	-607,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	83,3	89,6	95,9	102,2	108,5	114,8	121,1	127,4	133,5	139,5	145,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-21,1	-21,4	-21,5	-21,5	-21,3	-21,1	-20,7	-20,1	-19,5	-18,8	-18,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	183,8	192,9	202,5	212,7	223,5	234,9	247,0	259,7	273,3	287,6	302,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,2	235,3	244,1	252,7	260,8	268,6	275,9	282,5	288,4	293,4	297,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	36,0	36,3	36,6	36,8	36,9	36,9	37,0	36,9	36,6	36,1	35,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	20,3	20,8	21,1	21,3	21,4	21,4	21,3	21,1	20,9	20,8	20,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	65,1	71,7	78,9	86,7	95,1	104,3	114,2	124,9	136,6	149,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	129,7	137,5	145,2	152,8	160,4	167,8	175,1	182,1	189,0	195,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,9	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,7	-17,8	-18,9	-20,1	-21,4	-22,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-15,8	-15,5	-14,9	-14,2	-13,4	-12,4	-11,2	-9,9	-8,6	-7,3	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,9	15,6	16,2	16,7	17,1	17,4	17,6	17,7	17,7	17,7	17,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,3	17,7	18,9	20,1	21,2	22,1	22,9	23,6	24,1	24,6	25,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	16,1	19,4	22,8	26,5	30,3	34,2	38,4	42,8	47,3	52,1	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	81,9	88,4	94,8	101,3	107,8	114,4	120,9	127,4	133,8	140,2	146,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,3	-6,8	-7,2	-7,7	-8,2	-4,7
Total	DM	14,05	14,07	14,81	16,25	18,26	20,70	23,43	26,24	28,87	30,93	31,52	—
	DMA	36,37	33,56	31,55	32,51	34,11	36,27	39,50	44,01	49,73	56,38	64,82	—
	PDMA	100,22	102,16	104,33	108,59	113,30	118,16	123,85	130,21	137,56	145,77	155,67	—
CPI	DM	51,09	46,61	43,76	42,49	42,51	43,48	45,02	46,70	47,95	47,81	44,18	—
	DMA	63,67	59,79	57,05	59,65	63,02	66,95	72,09	79,37	87,95	98,57	113,27	—
	PDMA	89,00	95,17	101,91	110,92	120,15	129,87	140,38	152,09	164,75	178,59	194,37	—
SPI	DM	-13,12	-9,79	-6,43	-2,99	0,48	4,00	7,61	11,24	14,87	18,55	22,23	—
	DMA	16,35	14,32	12,84	12,61	12,91	13,77	15,61	18,08	21,71	25,43	29,29	—
	PDMA	108,44	107,29	106,11	106,88	108,27	109,58	111,72	114,16	117,62	121,70	127,30	—
ΔCS	DM	64,21	56,40	50,19	45,48	42,03	39,48	37,41	35,46	33,07	29,26	21,95	—
	DMA	47,33	45,47	44,21	47,05	50,11	53,18	56,48	61,29	66,23	73,14	83,99	—
	PDMA	-19,44	-12,13	-4,20	4,04	11,88	20,29	28,66	37,93	47,12	56,89	67,07	—

Tabela 8.86: Constantes de acoplamento M06 com correção vibracionais no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	557,0	585,3	617,8	655,3	698,6	748,1	803,8	865,7	933,0	1004,7	1079,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	18,3	18,6	18,5	17,7	16,1	13,7	10,2	5,7	-0,1	-7,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-84,6	-89,2	-94,7	-101,3	-109,2	-118,6	-129,8	-143,1	-158,8	-177,5	-199,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-7,6	-11,8	-16,9	-23,3	-31,3	-41,2	-53,4	-68,7	-87,8	-111,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,7	46,6	50,1	54,2	59,1	64,9	72,1	80,8	91,6	105,2	122,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-9,9	-13,8	-18,9	-25,5	-34,2	-45,7	-61,2	-82,3	-111,5	-153,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	191,8	206,9	225,0	247,0	274,1	307,6	350,0	404,3	475,7	570,2	693,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1435,0	-1474,4	-1506,7	-1531,4	-1550,0	-1564,9	-1577,3	-1586,0	-1588,8	-1583,9	-1571,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-71,7	-62,3	-50,4	-35,9	-19,1	-0,7	18,5	37,3	54,3	67,2	71,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	24,8	36,9	51,2	68,0	87,5	109,3	133,0	157,9	183,4	209,2	235,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-176,4	-226,4	-281,2	-343,5	-421,4	-545,3	-991,0	4252,5	-30,8	-237,6	-336,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,7	117,1	130,8	147,2	167,2	191,7	222,3	261,3	312,3	381,4	479,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-16,9	-21,8	-28,2	-36,6	-47,6	-62,5	-83,1	-112,6	-156,5	-225,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	162,6	171,6	183,4	200,4	228,3	286,3	503,2	-631,8	-13,1	129,1	5816,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	212,0	240,5	274,5	316,3	370,9	453,6	664,4	-163,6	363,9	498,5	-158,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,9	51,5	51,8	49,2	39,8	9,2	-140,9	758,5	315,6	283,0	1065,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,3	10,4	13,9	20,0	31,9	61,0	184,7	-514,1	-157,6	-116,6	-1,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	52,1	55,6	60,6	68,7	84,1	127,0	1248,1	-63,0	-9,1	7,5	14,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,3	148,9	168,9	193,8	227,2	284,2	1106,7	220,8	306,5	378,2	460,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-1,4	-4,0	-8,6	-18,2	-46,8	-835,4	91,4	56,4	48,3	48,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-5,7	-9,4	-15,4	-26,5	-56,2	-791,8	62,0	21,2	1,8	-16,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,4	12,9	15,1	19,0	27,2	52,9	783,0	-78,5	-48,7	-45,0	-50,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,8	15,3	18,8	24,2	34,4	63,1	821,8	-67,2	-32,0	-22,6	-20,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,0	23,8	27,3	31,7	37,3	44,4	53,8	66,6	84,5	111,0	153,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,0	115,0	129,2	146,3	167,1	192,5	224,2	264,7	317,8	390,5	495,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,8	-4,4	-6,4	-9,0	-12,5	-17,4	-24,5	-35,0	-51,8	-80,6	-4,7
Total	DM	2,49	4,42	7,45	11,86	18,02	27,26	104,82	162,29	51,52	67,30	306,08	—
	DMA	14,82	13,44	17,08	28,64	46,78	76,68	322,49	350,75	131,83	141,17	416,52	—
	PDMA	31,33	32,20	49,19	87,65	155,26	311,47	3389,09	804,80	463,88	464,34	735,04	—
CPI	DM	19,57	16,66	14,84	14,02	13,42	10,01	-21,35	465,83	88,49	83,38	89,33	—
	DMA	20,32	24,41	30,93	45,56	66,31	92,94	151,24	522,45	155,91	163,15	190,55	—
	PDMA	19,91	23,78	44,18	71,30	105,19	146,68	207,07	380,13	317,86	394,05	495,85	—
SPI	DM	-10,03	-4,55	2,04	10,27	21,40	39,91	197,34	-60,31	24,40	55,51	465,04	—
	DMA	10,79	5,39	6,93	16,23	32,47	64,77	448,07	224,84	114,17	125,06	582,24	—
	PDMA	39,70	38,38	52,87	99,65	191,97	432,32	5722,58	1116,22	570,96	515,89	910,45	—
ΔCS	DM	29,61	21,22	12,80	3,74	-7,98	-29,90	-218,69	526,13	64,09	27,87	-375,71	—
	DMA	9,52	19,02	23,99	29,33	33,84	28,17	-296,84	297,61	41,74	38,09	-391,69	—
	PDMA	-19,79	-14,60	-8,69	-28,35	-86,77	-285,64	-5515,51	-736,09	-253,10	-121,85	-414,61	—

Tabela 8.87: Constantes de acoplamento M062X com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,1	414,6	418,6	424,3	432,6	444,7	461,6	484,4	514,1	551,6	597,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	4,4	5,4	6,4	7,3	7,9	8,1	7,8	6,7	4,4	0,5	-6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,0	-74,2	-76,8	-79,9	-83,6	-88,1	-93,6	-100,3	-108,4	-118,1	-129,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	4,5	3,0	1,2	-1,2	-4,2	-8,0	-12,9	-19,0	-26,7	-36,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,7	40,7	42,9	45,5	48,5	52,1	56,4	61,4	67,4	74,7	83,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	1,0	0,1	-1,3	-3,2	-5,6	-8,7	-12,8	-18,1	-25,1	-34,4	-46,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,5	126,7	129,8	135,2	143,1	154,1	168,6	187,6	211,7	242,5	282,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1440,1	-1486,6	-1531,1	-1570,8	-1601,5	-1619,8	-1625,4	-1620,8	-1610,6	-1600,5	-1594,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-171,2	-167,7	-160,8	-151,1	-139,5	-126,5	-112,1	-96,7	-80,3	-63,2	-45,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-91,5	-82,4	-71,1	-58,2	-43,9	-28,6	-12,2	5,3	24,5	45,6	68,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-171,9	-215,0	-261,5	-311,1	-363,7	-420,2	-484,1	-565,4	-700,4	-1320,5	-2177,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	88,8	96,1	104,5	114,5	126,1	139,9	156,3	176,0	199,8	229,0	265,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,5	-1,6	-3,1	-5,1	-7,6	-10,8	-15,0	-20,4	-27,6	-37,1	-49,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	168,6	175,6	183,8	193,5	205,5	221,0	242,4	274,8	332,6	473,7	1543,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	145,6	162,6	182,1	204,3	229,9	259,9	295,6	340,0	400,2	503,7	1040,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	46,9	49,3	51,8	54,1	56,0	57,1	56,4	51,9	37,0	-14,4	-491,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,0	5,5	6,0	6,7	7,7	9,2	11,6	16,1	25,5	52,1	275,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,5	64,3	68,0	72,7	79,0	87,7	100,5	121,7	163,3	285,8	14164,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	111,3	122,9	136,4	152,2	171,0	194,0	223,3	265,2	347,6	6658,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	5,8	5,1	4,2	3,0	1,2	-1,5	-5,9	-13,7	-30,6	-83,6	-6359,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,2	7,2	7,0	6,6	5,9	4,6	2,4	-1,6	-10,2	-36,8	-3080,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,5	9,9	10,3	10,9	11,6	12,7	14,5	17,8	25,2	49,9	3090,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	10,1	11,4	12,7	14,3	16,1	18,4	21,5	26,6	36,2	64,5	3278,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,3	30,8	33,9	37,5	42,0	47,3	53,9	62,1	72,4	85,7	103,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	85,8	93,5	102,6	113,2	125,6	140,2	157,6	178,4	203,5	234,4	272,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-7,7	-11,0	-15,5	-21,9	-4,7
Total	DM	-16,90	-17,56	-17,68	-17,06	-15,48	-12,64	-8,39	-2,63	4,42	1,75	686,10	—
	DMA	31,77	28,58	25,23	22,43	22,16	25,15	31,11	39,91	59,18	116,94	1624,90	—
	PDMA	91,25	82,43	71,88	60,61	47,91	34,61	35,90	68,49	141,25	347,53	18292,40	—
CPI	DM	-18,29	-24,98	-31,16	-36,52	-40,71	-43,45	-44,97	-46,34	-51,15	-99,04	-167,83	—
	DMA	47,60	45,51	42,24	39,66	43,40	45,69	47,26	49,54	64,67	133,25	226,61	—
	PDMA	117,42	106,82	93,37	78,84	65,46	50,33	40,66	43,02	64,69	123,39	198,86	—
SPI	DM	-15,89	-12,12	-7,79	-2,79	3,03	9,96	18,43	29,41	45,16	75,66	1312,31	—
	DMA	20,17	16,17	12,77	9,79	6,59	10,09	19,26	32,85	55,15	104,98	2650,32	—
	PDMA	72,06	64,55	56,12	47,25	35,04	23,08	32,41	87,16	197,39	511,89	31560,99	—
ΔCS	DM	-2,40	-12,86	-23,37	-33,72	-43,74	-53,41	-63,41	-75,75	-96,31	-174,70	-1480,13	—
	DMA	27,43	29,34	29,47	29,87	36,81	35,60	28,00	16,68	9,53	28,27	-2423,71	—
	PDMA	45,36	42,27	37,26	31,59	30,42	27,25	8,25	-44,14	-132,70	-388,50	-31362,13	—

Tabela 8.88: Constantes de acoplamento OLYP com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	328,6	356,8	385,3	414,3	443,7	473,4	503,6	534,1	564,9	596,1	627,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	22,5	20,2	17,8	15,3	12,7	10,1	7,3	4,5	1,6	-1,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,7	-68,0	-71,3	-74,7	-78,1	-81,6	-85,1	-88,7	-92,3	-95,9	-99,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,6	-12,6	-13,7	-14,7	-15,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,7	42,0	43,2	44,5	45,8	47,1	48,4	49,8	51,1	52,5	53,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-9,6	-10,5	-11,3	-12,2	-13,1	-14,0	-14,9	-15,9	-16,9	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,3	160,0	168,6	177,0	185,3	193,5	201,5	209,3	217,0	224,4	231,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1700,0	-1683,5	-1663,2	-1639,8	-1614,0	-1586,3	-1557,2	-1527,2	-1496,6	-1465,7	-1434,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-185,8	-165,2	-145,1	-125,5	-106,4	-87,9	-70,0	-52,6	-35,8	-19,5	-3,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-92,7	-69,6	-47,2	-25,3	-4,0	16,6	36,7	56,2	75,2	93,6	111,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-269,9	-306,2	-343,2	-382,4	-425,9	-477,1	-541,8	-631,8	-775,9	-1071,9	-2269,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	123,5	126,5	129,5	132,6	135,7	138,8	142,0	145,3	148,5	151,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,8	-14,5	-15,2	-15,9	-16,6	-17,3	-18,0	-18,7	-19,4	-20,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,3	192,9	198,0	203,5	209,7	216,6	224,4	233,2	243,4	255,3	269,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,6	261,3	266,2	271,2	276,4	281,9	287,8	294,1	300,9	308,3	316,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,2	53,0	52,6	51,9	50,9	49,5	47,8	45,4	42,3	38,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,3	12,9	13,6	14,4	15,4	16,6	18,0	19,6	21,6	23,9	26,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,8	65,6	69,7	74,2	79,2	84,9	91,5	99,4	109,1	121,9	140,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,7	158,5	162,4	166,4	170,6	175,1	179,9	185,2	191,3	198,5	207,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,5	-3,6	-4,8	-6,1	-7,7	-9,7	-12,1	-15,3	-19,6	-25,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,6	3,0	2,4	1,7	1,0	0,2	-0,9	-2,1	-3,7	-5,9	-9,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,6	13,0	13,5	14,0	14,6	15,3	16,2	17,4	18,9	21,0	24,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,1	20,5	21,0	21,7	22,4	23,3	24,3	25,7	27,5	30,0	33,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,3	28,8	31,3	33,9	36,5	39,3	42,0	44,8	47,7	50,6	53,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,2	123,3	126,4	129,6	132,8	136,0	139,3	142,6	145,9	149,3	152,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,7
Total	DM	-23,67	-20,63	-17,48	-14,27	-11,12	-8,17	-5,64	-3,97	-4,24	-10,16	-50,42	—
	DMA	30,60	25,54	23,38	21,80	20,73	20,79	24,70	32,13	41,88	57,84	109,57	—
	PDMA	47,88	36,37	30,44	27,74	27,73	30,80	46,89	65,30	86,77	113,59	158,00	—
CPI	DM	-56,67	-51,68	-46,54	-41,36	-36,45	-32,20	-29,12	-28,36	-32,58	-50,66	-150,75	—
	DMA	66,95	55,17	48,92	42,82	37,27	34,05	39,52	52,69	70,65	102,32	216,99	—
	PDMA	93,27	71,54	54,81	39,71	26,64	18,69	37,91	59,43	82,41	109,52	163,81	—
SPI	DM	0,53	2,15	3,83	5,59	7,45	9,45	11,57	13,93	16,55	19,54	23,16	—
	DMA	3,95	3,81	4,65	6,39	8,60	11,07	13,84	17,06	20,79	25,22	30,79	—
	PDMA	14,59	10,58	12,57	18,97	28,52	39,67	53,48	69,60	89,96	116,57	153,75	—
ΔCS	DM	-57,20	-53,83	-50,37	-46,96	-43,91	-41,65	-40,69	-42,29	-49,13	-70,20	-173,91	—
	DMA	62,99	51,36	44,27	36,42	28,67	22,99	25,68	35,63	49,87	77,10	186,20	—
	PDMA	78,69	60,96	42,24	20,74	-1,88	-20,99	-15,56	-10,18	-7,55	-7,05	10,06	—

8.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

280

Tabela 8.89: Constantes de acoplamento PBE com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	341,2	363,0	384,9	407,1	429,5	452,1	475,0	498,0	521,3	544,8	568,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	23,2	21,5	19,8	18,0	16,1	14,2	12,2	10,2	8,1	6,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,8	-68,1	-70,4	-72,8	-75,2	-77,6	-80,0	-82,5	-85,0	-87,5	-90,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-4,2	-5,2	-6,3	-7,4	-8,5	-9,6	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,3	42,0	42,7	43,4	44,1	44,8	45,6	46,3	47,1	47,9	48,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,9	-8,8	-9,8	-10,7	-11,7	-12,7	-13,7	-14,7	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,2	134,6	142,9	151,2	159,4	167,6	175,6	183,6	191,4	199,2	206,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1798,8	-1774,7	-1745,9	-1713,1	-1677,2	-1638,6	-1598,1	-1555,9	-1512,7	-1468,7	-1424,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,2	-160,3	-143,6	-127,1	-110,9	-94,8	-79,0	-63,4	-48,1	-33,0	-18,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,0	-59,7	-41,6	-23,9	-6,4	10,7	27,7	44,4	60,8	77,0	93,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-293,3	-331,6	-370,2	-410,9	-455,8	-508,8	-576,1	-670,8	-824,5	-1144,8	-2468,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	123,1	124,5	125,9	127,4	128,9	130,4	132,0	133,6	135,2	136,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,1	-16,9	-17,7	-18,5	-19,3	-20,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,6	192,4	195,5	199,2	203,5	208,5	214,6	221,9	231,1	242,8	258,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,0	255,4	258,0	260,8	263,9	267,3	271,2	275,7	281,1	287,8	296,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,3	54,3	53,9	53,4	52,4	51,1	49,2	46,7	43,1	38,3	31,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	11,8	12,6	13,6	14,8	16,3	18,1	20,3	23,2	26,8	31,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,3	65,0	68,0	71,4	75,4	80,1	86,0	93,8	104,6	121,3	151,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,8	155,9	158,1	160,5	163,1	166,0	169,5	173,6	179,1	187,2	201,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-1,9	-3,0	-4,2	-5,6	-7,4	-9,6	-12,7	-17,0	-23,9	-36,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,9	3,0	2,0	0,9	-0,3	-1,9	-3,9	-6,8	-11,2	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,5	12,9	13,4	14,0	14,9	16,1	17,7	20,1	24,1	31,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,7	20,2	20,8	21,6	22,6	24,0	25,9	28,7	33,2	41,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,6	28,5	30,3	32,2	34,2	36,1	38,1	40,2	42,2	44,3	46,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	122,9	124,5	126,1	127,8	129,5	131,2	133,0	134,8	136,6	138,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-27,73	-25,45	-23,00	-20,43	-17,87	-15,45	-13,40	-12,22	-13,04	-19,83	-64,35	—
	DMA	33,07	30,11	27,77	25,84	24,33	23,42	24,77	28,76	37,38	53,72	111,65	—
	PDMA	48,54	38,25	30,20	25,58	25,39	28,41	41,28	60,72	85,92	121,80	189,61	—
CPI	DM	-66,43	-62,24	-57,69	-53,03	-48,50	-44,51	-41,66	-41,23	-46,10	-66,08	-177,29	—
	DMA	73,08	66,62	61,00	55,25	49,83	45,24	45,32	50,77	66,01	97,52	223,20	—
	PDMA	89,21	72,70	56,66	41,08	27,49	17,41	26,12	43,57	63,83	89,66	145,87	—
SPI	DM	0,64	1,53	2,44	3,47	4,59	5,85	7,32	9,05	11,20	14,09	18,47	—
	DMA	3,73	3,34	3,40	4,28	5,63	7,43	9,69	12,61	16,39	21,60	29,84	—
	PDMA	18,71	12,98	10,79	14,22	23,86	36,48	52,40	73,30	102,12	145,37	221,68	—
ΔCS	DM	-67,07	-63,76	-60,13	-56,49	-53,09	-50,36	-48,98	-50,28	-57,30	-80,18	-195,76	—
	DMA	69,35	63,28	57,60	50,97	44,19	37,81	35,62	38,16	49,62	75,92	193,36	—
	PDMA	70,49	59,72	45,88	26,86	3,63	-19,07	-26,28	-29,73	-38,29	-55,71	-75,81	—

Tabela 8.90: Constantes de acoplamento PW91 com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	329,4	352,6	376,0	399,7	423,5	447,6	471,9	496,4	521,2	546,2	571,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,6	23,9	22,2	20,3	18,4	16,5	14,4	12,3	10,1	7,9	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,3	-69,8	-72,3	-74,8	-77,3	-79,9	-82,5	-85,1	-87,8	-90,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,3	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,0	-13,2	-14,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,3	42,0	42,7	43,4	44,2	45,0	45,7	46,5	47,3	48,1	48,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,2	-8,1	-9,0	-10,0	-10,9	-11,9	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-16,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	130,1	138,4	146,5	154,6	162,5	170,4	178,2	185,8	193,3	200,7	208,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,0	-1787,9	-1758,1	-1724,2	-1687,1	-1647,3	-1605,4	-1562,0	-1517,5	-1472,1	-1426,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-182,0	-164,8	-147,8	-130,8	-114,0	-97,4	-80,9	-64,6	-48,5	-32,6	-16,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,1	-64,5	-46,0	-27,8	-9,8	8,0	25,6	43,1	60,3	77,4	94,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-305,8	-344,1	-382,8	-423,4	-468,3	-521,3	-588,8	-684,0	-839,1	-1164,2	-2541,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,5	123,9	125,3	126,7	128,2	129,7	131,2	132,8	134,3	135,9	137,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-13,1	-13,9	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,8	-18,6	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,7	192,5	195,6	199,4	203,7	208,9	215,1	222,7	232,2	244,2	259,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,7	258,0	260,5	263,1	266,0	269,3	273,0	277,5	282,8	289,3	297,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,8	54,7	54,3	53,7	52,8	51,4	49,4	46,8	43,2	38,2	31,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	11,9	12,7	13,7	14,9	16,4	18,2	20,4	23,2	26,8	31,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,6	64,3	67,4	70,9	75,0	79,9	86,0	93,9	105,1	122,2	153,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,0	157,1	159,3	161,6	164,2	167,1	170,5	174,7	180,2	188,2	202,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,8	-2,8	-4,0	-5,5	-7,3	-9,6	-12,6	-17,0	-24,0	-36,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,8	3,0	2,0	0,9	-0,3	-1,9	-4,0	-6,9	-11,2	-19,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,3	12,6	13,0	13,5	14,2	15,1	16,2	17,8	20,2	24,2	31,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,7	20,0	20,5	21,1	21,8	22,8	24,2	26,1	28,8	33,3	41,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,0	27,9	29,9	31,9	34,0	36,0	38,2	40,3	42,5	44,7	47,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,1	123,7	125,3	126,9	128,6	130,3	132,0	133,8	135,5	137,3	139,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,3	-4,7
Total	DM	-29,19	-26,82	-24,25	-21,57	-18,87	-16,30	-14,13	-12,80	-13,52	-20,32	-66,72	—
	DMA	34,41	31,91	29,43	27,46	25,82	24,75	25,61	29,62	38,43	55,04	114,95	—
	PDMA	50,58	40,28	31,73	27,03	27,02	29,64	41,12	60,85	86,53	122,77	191,20	—
CPI	DM	-70,35	-65,91	-61,12	-56,16	-51,34	-47,02	-43,87	-43,15	-47,79	-67,85	-183,52	—
	DMA	76,04	70,51	64,61	58,55	52,83	47,85	46,84	52,27	67,90	99,99	230,35	—
	PDMA	93,14	76,72	60,37	44,66	30,89	19,99	25,14	43,22	64,25	90,84	149,69	—
SPI	DM	0,99	1,85	2,79	3,81	4,94	6,23	7,69	9,45	11,61	14,53	18,94	—
	DMA	3,89	3,60	3,63	4,66	6,02	7,80	10,05	13,01	16,81	22,07	30,31	—
	PDMA	19,37	13,55	10,73	14,11	24,19	36,71	52,83	73,79	102,86	146,19	221,65	—
ΔCS	DM	-71,34	-67,76	-63,91	-59,97	-56,28	-53,24	-51,56	-52,59	-59,40	-82,37	-202,46	—
	DMA	72,15	66,91	60,98	53,89	46,81	40,05	36,79	39,27	51,09	77,92	200,04	—
	PDMA	73,77	63,18	49,65	30,55	6,70	-16,73	-27,69	-30,57	-38,61	-55,34	-71,97	—

Tabela 8.91: Constantes de acoplamento TPSSh com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	331,2	355,8	380,3	404,9	429,4	453,9	478,3	502,6	526,8	551,0	575,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,4	21,0	19,5	18,0	16,4	14,7	13,0	11,2	9,4	7,5	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,8	-71,1	-73,5	-75,9	-78,2	-80,6	-82,9	-85,2	-87,5	-89,7	-92,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,8	-5,1	-6,3	-7,6	-8,8	-10,0	-11,2	-12,4	-13,6	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	46,3	46,9	47,4	47,8	48,3	48,8	49,3	49,7	50,2	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-7,3	-8,5	-9,6	-10,8	-11,9	-13,0	-14,1	-15,1	-16,2	-17,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,2	193,0	197,5	201,8	205,9	209,7	213,3	216,6	219,7	222,5	225,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1755,3	-1729,5	-1701,1	-1670,8	-1638,9	-1605,8	-1571,9	-1537,5	-1502,7	-1467,8	-1433,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-161,1	-146,9	-132,8	-118,7	-104,6	-90,5	-76,5	-62,5	-48,6	-34,7	-20,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,0	-49,4	-32,9	-16,5	-0,4	15,6	31,6	47,4	63,0	78,6	94,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-298,0	-335,4	-374,8	-417,8	-466,6	-525,3	-600,5	-705,7	-873,2	-1208,0	-2418,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,4	141,2	142,0	142,8	143,5	144,3	145,0	145,6	146,2	146,8	147,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,5	-11,6	-12,7	-13,7	-14,8	-15,8	-16,8	-17,7	-18,7	-19,6	-20,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,4	191,7	195,5	199,8	204,8	210,7	217,6	225,9	235,8	247,9	263,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	283,8	285,5	287,3	289,3	291,5	294,0	296,9	300,3	304,5	309,6	316,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,5	57,9	57,1	56,0	54,5	52,6	50,2	47,1	43,2	38,2	31,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,7	13,3	14,2	15,2	16,4	18,0	19,8	22,1	24,8	28,2	32,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,8	72,5	75,5	79,0	83,1	88,0	94,1	101,9	112,6	128,4	154,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	174,7	176,3	178,1	180,0	182,1	184,5	187,3	190,9	195,6	202,5	213,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,2	-3,5	-5,0	-6,7	-8,8	-11,4	-14,8	-19,4	-26,1	-37,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,6	8,4	7,0	5,6	4,0	2,2	0,2	-2,3	-5,6	-10,1	-17,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,9	13,4	14,1	14,9	15,9	17,3	19,0	21,5	25,3	31,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,8	23,2	23,6	24,2	24,9	25,9	27,3	29,1	31,8	35,9	42,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,8	35,3	36,7	38,1	39,6	41,0	42,4	43,8	45,1	46,5	47,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	139,7	140,7	141,8	142,8	143,7	144,7	145,6	146,5	147,3	148,1	148,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-4,0	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-8,2	-8,7	-4,7
Total	DM	-18,60	-16,58	-14,54	-12,52	-10,64	-9,02	-7,92	-7,84	-9,96	-18,15	-59,40	—
	DMA	30,77	29,22	27,95	26,93	26,27	26,29	29,15	34,30	43,90	60,62	112,94	—
	PDMA	53,82	43,91	37,23	32,97	30,50	31,16	48,01	68,96	95,04	130,17	190,64	—
CPI	DM	-55,55	-51,65	-47,76	-44,04	-40,77	-38,33	-37,34	-39,09	-46,53	-69,19	-171,52	—
	DMA	61,03	56,60	52,47	48,49	45,15	43,16	47,19	55,53	73,36	106,39	220,46	—
	PDMA	76,91	62,26	47,79	33,66	22,61	16,73	32,18	49,95	70,13	95,53	147,19	—
SPI	DM	8,49	9,13	9,83	10,60	11,45	12,47	13,65	15,07	16,86	19,29	22,82	—
	DMA	8,59	9,13	9,97	11,12	12,41	13,92	15,92	18,73	22,29	27,06	34,09	—
	PDMA	36,88	30,45	29,49	32,46	36,29	41,73	59,62	82,90	113,31	155,57	222,51	—
ΔCS	DM	-64,05	-60,79	-57,59	-54,64	-52,23	-50,79	-50,99	-54,16	-63,39	-88,48	-194,34	—
	DMA	52,44	47,47	42,50	37,37	32,74	29,24	31,27	36,80	51,08	79,33	186,38	—
	PDMA	40,03	31,81	18,30	1,20	-13,68	-25,00	-27,45	-32,95	-43,18	-60,03	-75,33	—

Tabela 8.92: Constantes de acoplamento X3LYP com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	362,5	387,4	412,5	437,8	463,4	489,3	515,3	541,6	568,1	594,9	621,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,2	20,4	18,4	16,3	14,1	11,8	9,5	7,0	4,5	1,9	-0,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,9	-73,6	-76,2	-79,0	-81,7	-84,4	-87,2	-90,1	-92,9	-95,8	-98,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-4,9	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,6	-11,8	-13,0	-14,2	-15,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,0	45,8	46,6	47,4	48,3	49,1	49,9	50,8	51,7	52,5	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-8,5	-9,5	-10,4	-11,4	-12,4	-13,4	-14,4	-15,5	-16,5	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,8	159,3	167,7	176,0	184,1	192,1	200,0	207,7	215,2	222,5	229,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,5	-1785,2	-1755,4	-1721,8	-1685,2	-1646,0	-1604,9	-1562,4	-1518,8	-1474,5	-1429,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,4	-154,8	-137,3	-120,0	-102,8	-85,8	-69,0	-52,3	-35,9	-19,7	-3,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-71,7	-52,6	-33,6	-14,9	3,5	21,8	39,9	57,8	75,6	93,1	110,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-295,6	-332,5	-369,5	-408,2	-450,8	-500,5	-563,2	-650,6	-790,7	-1076,9	-2189,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	134,2	135,7	137,3	138,9	140,5	142,1	143,8	145,4	147,1	148,8	150,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,3	-16,0	-16,8	-17,6	-18,3	-19,0	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,5	203,5	206,9	210,9	215,4	220,8	227,0	234,5	243,5	254,5	268,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	275,6	278,1	280,6	283,3	286,2	289,4	293,0	297,0	301,7	307,2	313,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,2	57,1	56,8	56,3	55,4	54,2	52,5	50,3	47,4	43,6	38,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,4	12,1	13,0	14,0	15,2	16,6	18,4	20,5	23,1	26,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,9	70,8	74,1	77,7	81,8	86,6	92,3	99,4	108,5	120,9	139,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,3	170,5	172,8	175,3	177,9	180,8	184,0	187,7	192,2	198,0	206,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-1,1	-2,1	-3,3	-4,6	-6,2	-8,2	-10,7	-14,0	-18,6	-25,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,6	4,8	3,9	2,9	1,9	0,6	-0,8	-2,7	-5,3	-9,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,9	13,2	13,5	13,9	14,3	15,0	15,8	16,8	18,3	20,4	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,6	20,9	21,2	21,7	22,2	23,0	23,9	25,2	26,9	29,4	33,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,3	32,4	34,6	36,8	39,0	41,3	43,6	46,0	48,4	50,8	53,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	133,1	134,9	136,6	138,4	140,2	142,1	143,9	145,8	147,7	149,6	151,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,3	-6,8	-7,4	-7,9	-4,7
Total	DM	-22,86	-20,28	-17,52	-14,65	-11,79	-9,02	-6,63	-5,02	-5,24	-10,83	-47,78	—
	DMA	32,81	30,40	28,23	26,34	24,89	24,77	28,77	34,82	43,31	57,87	105,79	—
	PDMA	49,66	40,00	30,40	24,64	22,16	26,78	42,56	60,43	81,89	109,38	154,51	—
CPI	DM	-62,99	-58,19	-53,02	-47,71	-42,51	-37,75	-34,05	-32,51	-35,69	-52,15	-143,67	—
	DMA	67,83	61,19	54,95	48,69	43,33	40,66	47,35	58,44	74,18	103,11	209,13	—
	PDMA	79,69	62,68	45,79	30,78	21,14	21,41	40,12	60,34	82,14	108,11	159,40	—
SPI	DM	6,57	7,52	8,51	9,60	10,74	12,06	13,48	15,13	17,09	19,46	22,53	—
	DMA	7,13	7,81	8,63	9,95	11,37	13,11	15,15	17,51	20,67	24,69	30,01	—
	PDMA	27,63	23,37	19,11	20,13	22,90	30,72	44,35	60,50	81,71	110,31	150,92	—
ΔCS	DM	-69,56	-65,71	-61,53	-57,31	-53,25	-49,81	-47,53	-47,64	-52,78	-71,61	-166,21	—
	DMA	60,70	53,38	46,31	38,74	31,96	27,55	32,20	40,93	53,51	78,42	179,11	—
	PDMA	52,06	39,31	26,68	10,64	-1,77	-9,30	-4,23	-0,16	0,44	-2,20	8,49	—

8.3.1.3 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos - Geometrias Otimizadas

Tabela 8.93: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	416,3	408,5	466,9	405,8	459,7	487,8	453,1	480,7	510,0	500,6	502,9	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,1	17,6	11,4	15,3	10,9	9,7	11,1	9,3	8,0	6,9	7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,3	-73,1	-75,9	-68,9	-75,7	-78,6	-74,9	-78,4	-81,4	-80,8	-81,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-4,7	-3,6	-3,6	-3,3	-4,9	-4,6	-4,6	-6,2	-5,6	-5,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,1	44,2	42,7	40,8	42,8	43,9	43,2	44,0	45,2	45,6	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-8,1	-6,5	-6,5	-6,3	-7,7	-7,4	-7,5	-9,0	-8,4	-8,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,9	189,6	182,1	175,9	187,2	189,8	188,9	194,7	197,8	201,7	202,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,0	-1547,0	-1561,4	-1459,0	-1477,4	-1538,4	-1449,0	-1458,7	-1512,7	-1428,3	-1437,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-128,1	-134,1	-89,4	-122,4	-95,4	-73,9	-92,6	-79,8	-58,3	-63,7	-64,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,0	-41,5	10,3	-30,8	-0,6	27,6	3,6	16,9	45,0	37,1	34,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-333,1	-271,5	-342,0	-332,9	-276,7	-384,7	-296,0	-312,9	-435,5	-260,1	-354,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	131,8	119,0	123,9	119,4	123,1	126,9	123,6	127,5	130,0	127,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,3	-9,9	-9,6	-9,8	-11,0	-10,8	-10,9	-12,1	-12,0	-12,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	214,5	214,5	205,7	208,1	205,8	212,3	214,3	212,2	220,1	220,9	219,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,6	263,5	232,8	242,3	231,9	241,2	247,2	240,2	250,3	252,3	249,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,6	53,5	53,6	53,5	53,3	53,4	53,4	52,8	52,9	52,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,9	9,0	9,7	8,8	9,9	10,3	9,7	11,1	11,1	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,8	81,2	77,1	79,4	79,5	81,5	84,2	83,8	86,9	89,3	88,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,7	162,6	147,3	151,5	145,5	153,1	155,4	151,1	159,3	159,5	157,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-2,2	-1,2	-0,8	-1,0	-2,5	-2,3	-2,2	-4,1	-3,9	-3,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	2,6	4,3	4,5	3,2	3,6	3,5	2,5	2,7	2,3	1,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,5	10,8	10,6	11,3	11,3	11,4	11,8	11,9	12,3	12,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	16,2	17,2	16,7	17,0	17,9	17,5	18,0	18,8	18,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,8	37,4	36,0	37,2	37,6	38,7	40,3	40,4	41,7	43,4	43,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,0	130,4	118,4	122,6	117,8	122,8	125,8	122,2	127,4	128,9	126,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-3,0	-2,8	-3,0	-3,7	-3,6	-3,6	-4,4	-4,3	-4,3	-4,7
Total	DM	-12,11	-6,26	-7,48	-7,07	-2,41	-4,76	0,17	0,40	-2,04	7,75	3,28	—
	DMA	20,61	17,13	12,45	13,13	9,48	11,98	6,59	6,23	14,82	8,63	8,39	—
	PDMA	24,84	26,50	18,51	31,04	20,13	15,87	14,72	10,77	22,10	18,87	18,49	—
CPI	DM	-37,47	-23,73	-18,75	-20,65	-6,88	-15,48	-5,95	-3,38	-12,55	9,46	0,03	—
	DMA	39,84	31,56	20,85	24,02	13,34	21,06	8,74	6,98	26,80	11,23	11,65	—
	PDMA	42,15	49,18	17,44	45,43	24,32	20,96	18,05	12,35	33,14	26,46	24,29	—
SPI	DM	6,49	6,55	0,79	2,89	0,87	3,10	4,65	3,17	5,67	6,49	5,67	—
	DMA	6,51	6,55	6,29	5,15	6,65	5,33	5,01	5,68	6,03	6,72	6,01	—
	PDMA	12,14	9,87	19,30	20,49	17,06	12,13	12,27	9,61	13,99	13,31	14,24	—
ΔCS	DM	-43,97	-30,28	-19,55	-23,54	-7,76	-18,58	-10,61	-6,56	-18,21	2,97	-5,65	—
	DMA	33,33	25,01	14,56	18,86	6,69	15,74	3,72	1,30	20,77	4,51	5,64	—
	PDMA	30,01	39,31	-1,87	24,93	7,26	8,83	5,78	2,74	19,15	13,15	10,06	—

Tabela 8.94: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	410,0	414,2	454,4	369,1	458,3	479,2	419,8	483,1	505,4	470,9	509,2	533,0	522,7	536,9	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,0	17,8	12,2	18,3	10,9	9,9	13,6	8,7	7,5	8,7	6,3	4,9	3,7	3,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,4	-73,3	-74,5	-64,6	-75,3	-77,8	-71,3	-78,6	-81,2	-77,9	-82,1	-84,9	-84,5	-85,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,7	-2,8	-3,2	-2,6	-4,0	-4,0	-3,8	-5,2	-4,9	-5,0	-6,5	-5,9	-6,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	42,8	41,1	38,4	41,4	42,6	41,1	42,9	44,2	43,8	44,5	45,9	46,5	46,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-8,1	-5,1	-5,4	-5,1	-6,2	-6,2	-6,1	-7,3	-7,0	-7,2	-8,5	-8,0	-8,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	177,2	184,8	168,2	151,2	175,4	176,6	166,9	183,7	185,4	182,3	192,4	194,6	198,0	201,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1660,5	-1562,2	-1594,6	-1476,3	-1515,6	-1575,9	-1482,2	-1500,9	-1554,3	-1471,6	-1483,3	-1530,5	-1450,8	-1463,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-134,2	-137,1	-104,6	-150,8	-107,6	-87,2	-119,6	-90,1	-69,7	-89,0	-72,6	-52,3	-59,6	-55,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-38,7	-45,4	-7,5	-65,4	-14,1	12,0	-28,4	5,6	31,7	7,2	25,5	51,4	41,5	45,3	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-330,3	-234,0	-298,0	-355,9	-203,7	-334,9	-324,7	-232,7	-376,8	-293,0	-264,6	-427,2	-261,8	-300,9	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	121,3	109,7	115,3	109,7	114,4	119,1	114,4	119,4	123,1	119,4	124,7	127,1	124,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,6	-11,6	-8,1	-7,7	-8,1	-9,0	-8,7	-9,0	-10,0	-9,8	-10,0	-11,0	-10,9	-11,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,2	198,3	189,5	190,4	189,8	196,3	197,8	196,4	204,1	205,6	203,9	213,2	214,0	212,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	248,5	217,0	229,4	215,2	225,9	235,1	224,0	235,3	241,0	233,3	245,5	247,2	243,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,1	51,7	52,0	51,8	52,1	52,2	52,2	52,2	52,3	51,8	52,0	52,0	52,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	10,7	8,0	9,0	7,8	8,7	9,3	8,4	9,5	9,8	9,2	10,5	10,4	10,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,8	71,3	66,7	68,3	69,4	71,5	73,8	74,0	77,0	79,6	79,2	83,6	85,9	85,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,2	151,3	136,0	141,4	133,6	142,2	146,1	139,6	148,8	151,0	146,0	156,0	156,0	153,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,0	0,1	0,6	0,3	-0,8	-0,5	-0,6	-2,1	-1,8	-1,8	-3,6	-3,4	-3,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,1	4,9	5,4	3,8	4,4	4,6	3,3	3,9	3,7	3,2	2,7	3,2	2,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	12,1	10,0	9,5	10,6	10,4	10,2	11,0	10,9	10,9	11,4	11,4	11,8	12,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,9	15,0	16,1	15,5	15,7	16,7	16,2	16,5	17,4	17,0	17,4	18,1	17,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,5	33,3	31,1	32,5	33,0	34,2	35,9	36,1	37,5	39,3	39,4	41,0	42,8	42,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	119,2	108,3	113,3	107,0	113,3	117,2	111,9	118,5	121,2	117,1	124,0	125,3	122,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,4	-2,1	-1,8	-2,0	-2,6	-2,4	-2,6	-3,2	-3,0	-3,1	-3,8	-3,7	-3,8	-4,7
Total	DM	-16,29	-8,85	-12,25	-16,00	-5,60	-9,00	-8,98	-2,23	-5,65	-1,36	1,31	-2,35	6,62	4,98	—
	DMA	19,90	17,41	15,77	20,50	16,44	12,58	13,55	11,20	12,67	6,84	8,63	16,09	8,85	9,15	—
	PDMA	25,53	26,40	30,35	49,30	31,67	19,64	31,82	20,56	18,97	15,73	15,98	25,18	20,83	20,80	—
CPI	DM	-40,23	-22,46	-22,92	-35,05	-7,17	-18,78	-21,45	-2,65	-14,65	-6,49	2,02	-11,00	9,17	6,63	—
	DMA	42,68	36,61	26,03	39,81	27,32	20,51	24,35	16,52	22,15	9,16	11,82	31,27	13,97	14,12	—
	PDMA	48,03	52,06	32,13	75,10	39,21	16,51	44,14	21,65	24,82	16,51	20,36	40,15	32,11	33,48	—
SPI	DM	1,27	1,13	-4,42	-2,03	-4,45	-1,83	0,15	-1,92	0,95	2,41	0,79	3,99	4,75	3,77	—
	DMA	3,19	3,33	8,25	6,33	8,46	6,76	5,62	7,31	5,72	5,14	6,30	4,96	5,09	5,51	—
	PDMA	9,03	7,58	29,04	30,37	26,14	21,94	22,78	19,75	14,68	15,15	12,77	14,20	12,55	11,50	—
ΔCS	DM	-41,49	-23,60	-18,50	-33,02	-2,73	-16,96	-21,60	-0,73	-15,60	-8,90	1,22	-14,99	4,43	2,85	—
	DMA	39,50	33,28	17,78	33,48	18,86	13,75	18,73	9,21	16,43	4,02	5,52	26,31	8,88	8,61	—
	PDMA	39,00	44,48	3,09	44,73	13,08	-5,43	21,36	1,90	10,14	1,36	7,59	25,95	19,55	21,99	—

Tabela 8.95: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	398,4	392,9	451,8	384,9	446,7	473,1	433,0	468,0	495,7	481,7	490,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,2	18,3	11,9	16,2	11,1	10,2	11,9	9,4	8,4	7,6	7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,4	-71,5	-74,5	-66,8	-74,6	-77,3	-73,1	-77,4	-80,3	-79,3	-80,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,0	-3,6	-3,6	-3,2	-4,9	-4,6	-4,6	-6,4	-5,7	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,7	43,9	42,5	40,4	42,7	43,9	43,1	44,1	45,4	45,6	45,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-8,4	-6,7	-6,6	-6,5	-7,9	-7,6	-7,7	-9,3	-8,7	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	189,6	195,9	186,9	180,4	192,7	194,9	193,9	200,5	203,3	207,1	208,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1665,7	-1559,4	-1571,4	-1468,2	-1489,2	-1548,4	-1459,2	-1470,1	-1522,7	-1439,1	-1448,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-133,4	-137,5	-93,9	-129,6	-98,0	-78,1	-99,8	-82,1	-62,1	-70,7	-66,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,2	-45,3	4,9	-39,7	-3,6	22,4	-5,1	14,0	40,1	28,5	31,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-351,2	-278,9	-352,5	-362,0	-276,8	-397,3	-327,0	-313,6	-451,6	-292,8	-356,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,8	131,2	119,4	124,5	119,7	124,0	128,1	124,4	129,0	131,8	129,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,8	-10,1	-9,8	-10,1	-11,3	-11,1	-11,3	-12,5	-12,4	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,6	213,4	205,7	208,2	205,7	212,9	215,0	212,6	221,3	222,3	220,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,4	262,9	233,0	243,0	231,6	242,3	248,7	240,8	252,3	254,8	250,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	53,2	53,5	53,7	53,6	53,5	53,5	53,6	52,9	53,0	53,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,3	11,0	9,0	9,8	8,8	10,0	10,4	9,7	11,2	11,3	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,0	80,4	77,1	79,5	79,6	82,0	84,8	84,3	87,9	90,4	89,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,4	162,0	147,6	152,1	145,5	153,9	156,7	151,7	160,8	161,4	158,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,8	-2,5	-1,2	-0,9	-1,0	-2,5	-2,3	-2,3	-4,2	-4,0	-3,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,1	4,1	4,4	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,7	10,9	10,5	11,4	11,4	11,4	11,9	12,1	12,3	12,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,7	16,2	17,3	16,8	17,1	18,1	17,6	18,2	19,0	18,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,3	36,9	36,0	37,1	37,6	39,1	40,5	40,7	42,4	44,0	44,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,7	130,0	118,7	123,3	118,0	123,6	127,1	123,0	128,9	130,9	128,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,1	-2,8	-3,1	-3,8	-3,6	-3,7	-4,5	-4,4	-4,5	-4,7
Total	DM	-14,21	-7,83	-8,95	-9,60	-3,33	-6,11	-2,27	-0,35	-3,32	5,45	2,70	—
	DMA	22,60	18,29	13,98	15,81	10,78	13,18	9,62	7,23	15,78	7,67	9,19	—
	PDMA	26,24	27,03	19,63	33,61	20,65	14,10	17,41	9,97	20,66	16,56	18,29	—
CPI	DM	-41,99	-26,90	-22,32	-26,86	-9,05	-19,12	-12,31	-5,49	-16,40	3,03	-2,06	—
	DMA	44,95	34,79	24,63	30,59	16,49	24,12	15,56	9,55	28,25	7,95	12,79	—
	PDMA	47,18	52,14	21,35	52,43	26,87	17,99	25,06	12,05	29,70	19,34	22,51	—
SPI	DM	6,16	6,15	0,85	3,05	0,87	3,43	5,10	3,41	6,28	7,23	6,20	—
	DMA	6,21	6,19	6,17	4,97	6,59	5,15	5,26	5,53	6,63	7,47	6,55	—
	PDMA	10,89	8,62	18,36	19,81	16,09	11,25	11,80	8,45	14,03	14,52	15,20	—
ΔCS	DM	-48,15	-33,05	-23,16	-29,92	-9,92	-22,55	-17,41	-8,90	-22,68	-4,20	-8,26	—
	DMA	38,74	28,60	18,46	25,62	9,90	18,96	10,30	4,01	21,63	0,49	6,24	—
	PDMA	36,30	43,53	2,99	32,62	10,77	6,74	13,26	3,60	15,68	4,82	7,31	—

Tabela 8.96: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	437,6	437,6	466,5	482,8	466,5	490,8	519,6	490,8	515,2	555,7	515,2	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,1	17,2	16,8	13,3	14,8	14,7	10,1	12,8	12,5	6,9	10,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,2	-77,3	-79,3	-82,4	-80,3	-81,9	-86,3	-82,8	-84,5	-90,1	-85,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,1	-6,7	-5,8	-6,3	-7,7	-6,6	-7,3	-8,8	-7,4	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,8	45,4	45,7	46,9	46,3	46,4	48,0	47,0	47,2	49,0	47,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-8,2	-9,5	-8,9	-9,2	-10,4	-9,6	-10,1	-11,2	-10,3	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,0	169,0	169,7	180,7	177,2	176,8	190,0	184,0	183,8	198,8	190,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1644,8	-1531,5	-1605,7	-1499,9	-1499,3	-1570,4	-1466,1	-1469,6	-1533,0	-1427,1	-1437,9	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,9	-130,0	-111,8	-103,2	-110,1	-95,3	-81,5	-93,6	-78,9	-60,3	-77,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,1	-30,3	-7,4	0,0	-8,5	10,5	24,5	9,3	28,2	48,1	27,1	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-376,2	-263,3	-418,6	-235,4	-294,4	-458,0	-213,6	-321,7	-504,3	-193,5	-351,4	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,9	126,6	128,6	127,7	128,3	130,0	128,5	129,7	131,5	129,4	131,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-13,3	-13,4	-13,3	-14,0	-14,0	-14,0	-14,7	-14,7	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,9	196,2	200,0	199,8	199,9	203,9	203,1	203,5	208,4	206,6	207,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	256,5	262,1	257,0	259,1	264,5	257,6	261,3	267,0	258,2	263,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,9	56,0	55,5	55,8	55,7	54,9	55,4	55,2	54,1	54,9	54,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	10,6	11,8	11,1	11,4	12,6	11,7	12,1	13,6	12,3	13,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,7	69,6	70,3	72,8	72,8	73,7	75,6	75,8	77,5	78,6	79,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,7	157,3	163,2	158,7	159,6	165,4	159,9	161,6	167,8	161,2	163,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-1,3	-2,7	-2,4	-2,4	-3,8	-3,4	-3,4	-5,1	-4,4	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,0	3,5	2,1	2,1	2,7	1,3	1,3	1,8	0,5	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	13,2	12,8	13,7	13,5	13,1	14,1	13,9	13,6	14,5	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,2	20,0	20,5	20,6	20,5	20,8	21,0	21,0	21,2	21,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,5	33,4	33,9	35,6	35,7	35,9	37,5	37,7	38,0	39,6	39,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,9	124,9	128,8	126,2	126,8	130,4	127,1	128,3	132,0	128,1	129,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-4,2	-4,3	-4,2	-4,7	-4,7	-4,7	-5,2	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-15,42	-6,60	-12,12	0,15	-3,18	-9,40	5,92	-0,27	-6,83	11,75	2,67	—
	DMA	20,39	13,77	17,65	9,65	8,72	16,03	9,02	6,54	17,57	13,75	8,11	—
	PDMA	26,88	23,86	16,58	12,27	13,57	13,11	14,25	12,03	21,28	27,50	20,52	—
CPI	DM	-40,95	-19,76	-34,65	-4,80	-13,11	-29,58	7,96	-7,46	-24,97	20,81	-1,89	—
	DMA	42,97	28,13	35,44	17,51	14,89	30,05	14,71	8,05	31,68	24,41	9,80	—
	PDMA	43,53	41,39	24,32	19,27	21,81	13,16	15,13	9,08	22,50	35,67	17,08	—
SPI	DM	3,31	3,06	4,41	3,79	4,10	5,40	4,43	5,01	6,48	5,11	6,02	—
	DMA	3,83	3,25	4,60	3,89	4,19	5,75	4,85	5,44	7,23	5,94	6,87	—
	PDMA	14,67	11,01	10,90	7,14	7,53	13,07	13,61	14,19	20,38	21,50	23,05	—
ΔCS	DM	-44,26	-22,82	-39,07	-8,59	-17,21	-34,98	3,54	-12,48	-31,45	15,70	-7,91	—
	DMA	39,15	24,88	30,84	13,62	10,70	24,31	9,86	2,61	24,46	18,47	2,93	—
	PDMA	28,86	30,38	13,42	12,13	14,28	0,09	1,52	-5,10	2,12	14,17	-5,97	—

Tabela 8.97: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	498,0	513,9	451,6	440,1	468,0	474,4	476,8	490,6	522,5	551,5	538,1	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,4	8,7	19,4	15,6	13,5	17,0	12,2	11,1	11,7	5,1	6,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-82,6	-86,4	-76,7	-77,4	-80,6	-79,6	-82,0	-83,5	-85,8	-90,9	-89,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-6,4	-5,3	-4,3	-3,8	-6,5	-5,3	-5,1	-9,3	-7,5	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,3	48,5	43,7	45,3	45,9	45,0	47,0	47,2	47,8	50,3	50,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,0	-7,8	-6,7	-6,6	-9,0	-7,8	-7,8	-11,6	-10,1	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	176,3	188,3	156,2	160,6	169,0	166,1	174,5	178,5	186,9	202,1	198,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1669,7	-1553,8	-1742,8	-1621,3	-1623,5	-1708,3	-1590,7	-1590,5	-1627,6	-1511,3	-1514,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-99,5	-77,1	-137,1	-120,7	-113,8	-118,3	-98,8	-95,5	-80,4	-55,6	-58,6	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	13,0	36,7	-25,4	-9,4	-0,6	-6,2	13,7	17,9	32,5	59,3	55,5	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-479,3	-179,8	-394,8	-188,2	-138,1	-434,1	-183,5	-158,6	-535,7	-177,6	-202,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,4	126,9	119,3	119,9	118,8	123,2	123,2	122,8	131,9	130,6	131,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,6	-13,6	-11,3	-11,3	-11,3	-12,4	-12,4	-12,4	-14,8	-14,8	-14,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	203,1	202,6	190,1	191,1	191,1	196,1	196,6	196,5	211,3	209,3	209,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	262,8	256,6	248,3	246,3	242,7	255,3	251,3	249,4	271,1	262,4	264,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	54,1	53,5	53,8	53,8	53,6	54,1	54,1	52,5	53,7	53,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	11,3	10,0	9,5	9,2	11,1	10,4	10,2	14,0	12,5	12,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	73,0	75,5	62,5	66,4	66,3	67,4	70,7	70,6	79,6	80,9	81,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,5	157,6	151,8	149,0	147,5	156,9	153,2	152,4	168,7	162,3	163,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-4,2	-3,8	-1,7	-1,6	-1,6	-2,8	-2,6	-2,6	-6,0	-5,2	-5,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,4	1,4	4,0	3,2	3,0	3,3	2,3	2,2	1,3	0,4	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,6	14,7	12,5	13,6	13,7	13,0	14,1	14,2	14,4	15,4	15,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	20,8	18,5	19,5	19,2	19,3	20,1	20,0	21,4	21,7	21,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,2	37,1	27,8	31,5	30,9	30,9	34,2	33,9	37,6	39,8	40,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,7	124,7	119,2	117,2	116,5	123,4	120,9	120,5	132,3	128,7	129,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,5	-4,6	-3,3	-3,5	-3,4	-3,9	-4,0	-4,0	-5,1	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-14,46	3,84	-21,65	-7,95	-4,58	-18,08	-2,18	-0,50	-10,92	10,11	8,42	—
	DMA	19,97	13,83	24,46	19,43	19,74	21,36	14,61	14,91	23,28	17,78	16,15	—
	PDMA	12,91	19,04	26,72	20,73	19,18	16,62	10,14	11,13	26,54	33,74	32,14	—
CPI	DM	-40,19	3,88	-50,90	-18,85	-10,14	-45,49	-7,71	-3,33	-35,45	15,85	11,34	—
	DMA	40,65	26,85	52,85	41,10	41,14	46,25	30,16	30,91	44,10	32,69	28,32	—
	PDMA	13,55	26,10	43,75	33,31	29,49	26,10	15,29	17,28	28,19	45,18	41,02	—
SPI	DM	4,41	3,81	-0,19	0,03	-0,51	2,02	1,87	1,58	7,07	5,89	6,29	—
	DMA	4,80	4,29	3,65	3,54	4,05	3,10	3,20	3,18	8,01	6,85	7,23	—
	PDMA	12,45	13,86	14,23	11,51	11,62	9,67	6,37	6,61	25,33	25,36	25,62	—
ΔCS	DM	-44,60	0,07	-50,71	-18,88	-9,62	-47,51	-9,58	-4,91	-42,52	9,96	5,05	—
	DMA	35,85	22,55	49,20	37,56	37,09	43,15	26,96	27,73	36,09	25,84	21,08	—
	PDMA	1,09	12,24	29,52	21,79	17,87	16,43	8,93	10,68	2,87	19,82	15,40	—

Tabela 8.98: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	398,0	394,9	386,9	376,5	383,8	409,1	413,1	406,0	431,5	449,2	428,5	454,1	484,9	451,2	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,6	19,1	21,5	20,6	19,9	19,8	17,6	18,2	18,0	14,5	16,4	16,1	11,6	14,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,9	-72,4	-70,7	-70,4	-71,2	-73,1	-74,3	-73,6	-75,5	-78,5	-75,9	-77,9	-82,3	-78,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,4	-5,2	-4,9	-4,9	-6,3	-5,9	-5,9	-7,4	-6,6	-7,0	-8,5	-7,5	-8,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,8	43,0	43,1	43,4	43,7	44,4	44,2	44,4	45,6	44,9	45,1	46,7	45,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-8,9	-8,7	-8,6	-8,5	-9,7	-9,4	-9,4	-10,6	-10,1	-10,4	-11,6	-10,9	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	147,8	154,5	143,6	148,7	150,4	151,9	160,1	158,5	160,1	171,2	166,4	168,3	181,8	174,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1731,4	-1626,3	-1747,4	-1633,5	-1639,0	-1714,6	-1611,4	-1612,8	-1678,7	-1580,7	-1583,2	-1640,1	-1543,2	-1550,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,3	-135,1	-143,5	-146,5	-143,3	-127,0	-124,2	-126,8	-110,8	-102,0	-110,6	-94,7	-80,9	-94,5	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-32,6	-35,6	-41,5	-49,0	-44,5	-23,8	-23,2	-26,7	-6,3	1,5	-9,1	10,8	25,2	8,1	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-389,2	-265,3	-369,2	-275,7	-250,6	-409,9	-255,9	-280,3	-454,8	-236,3	-311,7	-507,8	-216,3	-346,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,3	125,5	124,6	125,0	124,8	126,0	126,0	126,3	127,5	127,0	127,7	129,0	128,0	129,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-14,1	-14,0	-13,7	-13,6	-13,6	-14,5	-14,5	-14,4	-15,3	-15,3	-16,1	-16,1	-16,1	-16,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,1	197,3	195,3	195,7	195,7	199,0	199,0	199,1	203,3	202,7	203,1	208,3	206,7	207,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	257,8	258,1	257,3	256,4	260,9	258,3	259,2	264,0	259,4	262,1	267,4	260,8	265,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	54,0	54,0	54,2	54,2	53,5	53,8	53,7	52,5	53,1	52,9	51,2	52,3	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	13,0	12,6	12,5	12,3	12,2	13,5	13,0	13,1	14,7	13,9	14,3	16,2	14,9	15,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,4	72,0	67,7	70,5	70,5	71,1	73,6	73,6	75,1	76,9	77,2	79,8	80,6	81,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	159,2	156,5	158,0	155,7	155,4	160,4	157,2	157,6	163,0	158,8	160,0	165,9	160,6	162,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,1	-2,9	-2,6	-2,6	-4,1	-3,7	-3,7	-5,5	-4,9	-5,0	-7,3	-6,3	-6,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,5	1,4	3,0	1,9	1,8	2,0	0,9	0,9	0,9	-0,1	0,0	-0,3	-1,2	-1,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	13,7	12,8	13,4	13,5	13,3	14,0	13,9	13,9	14,6	14,5	14,8	15,3	15,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,4	21,0	20,1	20,8	20,8	20,7	21,3	21,3	21,5	21,8	22,0	22,5	22,5	22,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,3	33,5	30,3	32,6	32,6	32,2	34,4	34,5	34,2	36,2	36,4	36,1	38,0	38,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,4	123,9	124,6	123,4	123,1	126,2	124,5	124,8	127,9	125,7	126,4	129,6	126,8	128,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,1	-4,1	-4,1	-4,5	-4,6	-4,6	-5,1	-5,1	-5,1	-5,6	-5,6	-5,6	-4,7
Total	DM	-21,64	-12,84	-22,92	-15,47	-14,18	-20,35	-10,03	-11,47	-17,79	-4,33	-8,67	-15,37	1,59	-5,82	—
	DMA	26,58	20,30	27,62	22,12	22,59	25,70	18,35	18,12	24,21	14,84	14,90	23,30	12,62	13,58	—
	PDMA	26,70	27,00	29,85	30,16	29,09	25,17	24,35	25,29	25,04	21,70	24,25	28,06	26,73	26,98	—
CPI	DM	-55,15	-34,33	-57,46	-40,05	-36,85	-52,80	-28,18	-31,77	-48,27	-15,74	-26,60	-44,28	-2,89	-21,47	—
	DMA	57,84	43,09	60,74	47,71	48,82	54,96	37,96	37,32	49,60	28,15	27,71	45,01	21,05	22,22	—
	PDMA	48,40	47,41	56,50	59,22	56,28	40,72	36,28	38,53	27,26	17,70	22,98	17,18	15,22	13,20	—
SPI	DM	2,93	2,91	2,41	2,56	2,44	3,44	3,27	3,41	4,57	4,04	4,47	5,83	4,88	5,65	—
	DMA	3,67	3,59	3,33	3,36	3,36	4,24	3,97	4,04	5,59	5,08	5,51	7,39	6,43	7,24	—
	PDMA	10,79	12,04	10,31	8,85	9,14	13,77	15,60	15,58	23,40	24,64	25,18	36,03	35,17	37,08	—
ΔCS	DM	-58,08	-37,24	-59,88	-42,61	-39,29	-56,24	-31,46	-35,19	-52,84	-19,78	-31,07	-50,11	-7,77	-27,13	—
	DMA	54,17	39,50	57,40	44,35	45,46	50,72	34,00	33,28	44,01	23,07	22,20	37,62	14,63	14,98	—
	PDMA	37,61	35,37	46,19	50,36	47,13	26,96	20,68	22,96	3,86	-6,95	-2,20	-18,85	-19,95	-23,88	—

Tabela 8.99: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	415,9	408,1	466,5	405,4	459,3	487,4	452,7	480,3	509,6	500,2	502,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,2	17,7	11,5	15,4	11,0	9,8	11,2	9,4	8,1	7,0	7,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,2	-73,0	-75,8	-68,8	-75,6	-78,5	-74,8	-78,3	-81,3	-80,7	-81,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-4,8	-3,7	-3,7	-3,4	-5,0	-4,7	-4,7	-6,3	-5,7	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,1	42,6	40,7	42,7	43,8	43,1	43,9	45,1	45,5	45,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-8,1	-6,5	-6,5	-6,3	-7,7	-7,4	-7,5	-9,0	-8,4	-8,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,4	189,1	181,6	175,4	186,7	189,3	188,4	194,2	197,3	201,2	202,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1654,9	-1545,9	-1560,3	-1457,9	-1476,3	-1537,3	-1447,9	-1457,6	-1511,6	-1427,2	-1436,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-128,3	-134,3	-89,6	-122,6	-95,6	-74,1	-92,8	-80,0	-58,5	-63,9	-64,3	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,1	-41,6	10,2	-30,9	-0,7	27,5	3,5	16,8	44,9	37,0	34,5	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-331,9	-270,3	-340,8	-331,7	-275,5	-383,5	-294,8	-311,7	-434,3	-258,9	-353,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,1	131,6	118,8	123,7	119,2	122,9	126,7	123,4	127,3	129,8	127,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,3	-9,9	-9,6	-9,8	-11,0	-10,8	-10,9	-12,1	-12,0	-12,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	214,2	214,2	205,4	207,8	205,5	212,0	214,0	211,9	219,8	220,6	219,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,4	263,3	232,6	242,1	231,7	241,0	247,0	240,0	250,1	252,1	249,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,6	53,7	53,6	53,7	53,6	53,4	53,5	53,5	52,9	53,0	53,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	10,8	8,9	9,6	8,7	9,8	10,2	9,6	11,0	11,0	10,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,5	80,9	76,8	79,1	79,2	81,2	83,9	83,5	86,6	89,0	88,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,6	162,5	147,2	151,4	145,4	153,0	155,3	151,0	159,2	159,4	157,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,1	-1,1	-0,7	-0,9	-2,4	-2,2	-2,1	-4,0	-3,8	-3,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,9	2,7	4,4	4,6	3,3	3,7	3,6	2,6	2,8	2,4	1,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,5	10,8	10,6	11,3	11,3	11,4	11,8	11,9	12,3	12,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	19,5	16,1	17,1	16,6	16,9	17,8	17,4	17,9	18,7	18,4	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,7	37,3	35,9	37,1	37,5	38,6	40,2	40,3	41,6	43,3	43,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,9	130,3	118,3	122,5	117,7	122,7	125,7	122,1	127,3	128,8	126,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-3,0	-2,8	-3,0	-3,7	-3,6	-3,6	-4,4	-4,3	-4,3	-4,7
Total	DM	-12,11	-6,26	-7,48	-7,08	-2,41	-4,77	0,16	0,40	-2,04	7,75	3,28	—
	DMA	20,52	17,10	12,42	13,10	9,54	11,87	6,58	6,13	14,62	8,61	8,27	—
	PDMA	24,78	26,74	18,85	31,30	20,51	15,70	14,97	10,93	21,88	18,70	17,95	—
CPI	DM	-37,37	-23,63	-18,65	-20,55	-6,78	-15,38	-5,85	-3,28	-12,45	9,56	0,13	—
	DMA	39,74	31,59	20,75	23,92	13,45	20,80	8,76	6,72	26,45	11,29	11,49	—
	PDMA	42,14	49,20	17,36	45,35	24,32	20,63	18,00	12,02	32,77	26,18	23,94	—
SPI	DM	6,41	6,47	0,71	2,81	0,79	3,02	4,57	3,09	5,59	6,41	5,59	—
	DMA	6,43	6,47	6,31	5,17	6,67	5,33	4,99	5,69	5,95	6,64	5,91	—
	PDMA	12,05	10,26	19,95	21,00	17,71	12,09	12,75	10,12	13,90	13,21	13,56	—
ΔCS	DM	-43,79	-30,10	-19,37	-23,36	-7,58	-18,40	-10,43	-6,38	-18,03	3,15	-5,47	—
	DMA	33,31	25,12	14,43	18,75	6,78	15,47	3,78	1,02	20,50	4,65	5,58	—
	PDMA	30,10	38,93	-2,59	24,34	6,60	8,54	5,25	1,89	18,87	12,97	10,37	—

Tabela 8.100: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	409,6	413,8	454,0	368,7	457,9	478,8	419,4	482,7	505,0	470,5	508,8	532,6	522,3	536,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,1	17,9	12,3	18,4	11,0	10,0	13,7	8,8	7,6	8,8	6,4	5,0	3,8	3,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-73,2	-74,4	-64,5	-75,2	-77,7	-71,2	-78,5	-81,1	-77,8	-82,0	-84,8	-84,4	-85,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-5,8	-2,9	-3,3	-2,7	-4,1	-4,1	-3,9	-5,3	-5,0	-5,1	-6,6	-6,0	-6,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,4	42,7	41,0	38,3	41,3	42,5	41,0	42,8	44,1	43,7	44,4	45,8	46,4	46,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-8,1	-5,1	-5,4	-5,1	-6,2	-6,2	-6,1	-7,3	-7,0	-7,2	-8,5	-8,0	-8,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	176,7	184,3	167,7	150,7	174,9	176,1	166,4	183,2	184,9	181,8	191,9	194,1	197,5	201,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1659,4	-1561,1	-1593,5	-1475,2	-1514,5	-1574,8	-1481,1	-1499,8	-1553,2	-1470,5	-1482,2	-1529,4	-1449,7	-1462,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-134,4	-137,3	-104,8	-151,0	-107,8	-87,4	-119,8	-90,3	-69,9	-89,2	-72,8	-52,5	-59,8	-55,3	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-38,8	-45,5	-7,6	-65,5	-14,2	11,9	-28,5	5,5	31,6	7,1	25,4	51,3	41,4	45,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-329,1	-232,8	-296,8	-354,7	-202,5	-333,7	-323,5	-231,5	-375,6	-291,8	-263,4	-426,0	-260,6	-299,7	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,1	121,1	109,5	115,1	109,5	114,2	118,9	114,2	119,2	122,9	119,2	124,5	126,9	124,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,6	-11,6	-8,1	-7,7	-8,1	-9,0	-8,7	-9,0	-10,0	-9,8	-10,0	-11,0	-10,9	-11,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,9	198,0	189,2	190,1	189,5	196,0	197,5	196,1	203,8	205,3	203,6	212,9	213,7	212,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,4	248,3	216,8	229,2	215,0	225,7	234,9	223,8	235,1	240,8	233,1	245,3	247,0	243,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,1	51,2	51,8	52,1	51,9	52,2	52,3	52,3	52,3	52,3	52,4	51,9	52,1	52,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	10,6	7,9	8,9	7,7	8,6	9,2	8,3	9,4	9,7	9,1	10,4	10,3	10,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,5	71,0	66,4	68,0	69,1	71,2	73,5	73,7	76,7	79,3	78,9	83,3	85,6	85,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,1	151,2	135,9	141,3	133,5	142,1	146,0	139,5	148,7	150,9	145,9	155,9	155,9	152,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,3	-1,9	0,2	0,7	0,4	-0,7	-0,4	-0,5	-2,0	-1,7	-1,7	-3,5	-3,3	-3,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,2	5,0	5,5	3,9	4,5	4,7	3,4	4,0	3,8	2,8	3,3	2,8	2,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	12,1	10,0	9,5	10,6	10,4	10,2	11,0	10,9	10,9	11,4	11,4	11,8	12,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,2	18,8	14,9	16,0	15,4	15,6	16,6	16,1	16,4	17,3	16,9	17,3	18,0	17,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,4	33,2	31,0	32,4	32,9	34,1	35,8	36,0	37,4	39,2	39,3	40,9	42,7	42,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	119,1	108,2	113,2	106,9	113,2	117,1	111,8	118,4	121,1	117,0	123,9	125,2	122,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,4	-2,1	-1,8	-2,0	-2,6	-2,4	-2,6	-3,2	-3,0	-3,1	-3,8	-3,7	-3,8	-4,7
Total	DM	-16,29	-8,85	-12,25	-16,00	-5,60	-9,00	-8,99	-2,23	-5,66	-1,36	1,31	-2,36	6,62	4,98	—
	DMA	19,86	17,46	15,87	20,48	16,51	12,56	13,52	11,27	12,57	6,90	8,59	15,94	8,77	9,02	—
	PDMA	25,85	26,42	30,78	49,71	32,06	20,01	32,16	20,93	19,21	16,02	16,23	25,00	20,66	20,29	—
CPI	DM	-40,13	-22,36	-22,82	-34,95	-7,07	-18,68	-21,35	-2,55	-14,55	-6,39	2,12	-10,90	9,27	6,73	—
	DMA	42,60	36,75	26,15	39,73	27,44	20,41	24,25	16,64	21,88	9,28	11,68	30,92	13,84	13,82	—
	PDMA	48,06	52,17	32,13	75,14	39,21	16,43	44,06	21,65	24,50	16,51	20,06	39,78	31,81	33,13	—
SPI	DM	1,19	1,05	-4,50	-2,11	-4,53	-1,91	0,07	-2,00	0,87	2,33	0,71	3,91	4,67	3,69	—
	DMA	3,19	3,32	8,33	6,37	8,50	6,80	5,65	7,33	5,75	5,15	6,33	4,96	5,05	5,49	—
	PDMA	9,57	7,54	29,79	31,06	26,83	22,63	23,43	20,40	15,34	15,67	13,42	14,16	12,48	10,88	—
ΔCS	DM	-41,31	-23,42	-18,32	-32,84	-2,55	-16,78	-21,42	-0,55	-15,42	-8,72	1,40	-14,81	4,61	3,03	—
	DMA	39,41	33,43	17,82	33,35	18,94	13,61	18,61	9,30	16,14	4,13	5,36	25,96	8,78	8,32	—
	PDMA	38,50	44,63	2,34	44,08	12,38	-6,20	20,64	1,25	9,17	0,84	6,64	25,62	19,33	22,26	—

Tabela 8.101: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	398,0	392,5	451,4	384,5	446,3	472,7	432,6	467,6	495,3	481,3	490,3	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,3	18,4	12,0	16,3	11,2	10,3	12,0	9,5	8,5	7,7	7,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,3	-71,4	-74,4	-66,7	-74,5	-77,2	-73,0	-77,3	-80,2	-79,2	-80,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,1	-3,7	-3,7	-3,3	-5,0	-4,7	-4,7	-6,5	-5,8	-6,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,6	43,8	42,4	40,3	42,6	43,8	43,0	44,0	45,3	45,5	45,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-8,4	-6,7	-6,6	-6,5	-7,9	-7,6	-7,7	-9,3	-8,7	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	189,1	195,4	186,4	179,9	192,2	194,4	193,4	200,0	202,8	206,6	208,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1664,6	-1558,3	-1570,3	-1467,1	-1488,1	-1547,3	-1458,1	-1469,0	-1521,6	-1438,0	-1447,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-133,6	-137,7	-94,1	-129,8	-98,2	-78,3	-100,0	-82,3	-62,3	-70,9	-66,3	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,3	-45,4	4,8	-39,8	-3,7	22,3	-5,2	13,9	40,0	28,4	31,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-350,0	-277,7	-351,3	-360,8	-275,6	-396,1	-325,8	-312,4	-450,4	-291,6	-355,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,6	131,0	119,2	124,3	119,5	123,8	127,9	124,2	128,8	131,6	129,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,8	-10,1	-9,8	-10,1	-11,3	-11,1	-11,3	-12,5	-12,4	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,3	213,1	205,4	207,9	205,4	212,6	214,7	212,3	221,0	222,0	220,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,2	262,7	232,8	242,8	231,4	242,1	248,5	240,6	252,1	254,6	250,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,6	53,8	53,7	53,6	53,6	53,7	53,0	53,1	53,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	10,9	8,9	9,7	8,7	9,9	10,3	9,6	11,1	11,2	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	77,7	80,1	76,8	79,2	79,3	81,7	84,5	84,0	87,6	90,1	89,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,3	161,9	147,5	152,0	145,4	153,8	156,6	151,6	160,7	161,3	158,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-2,4	-1,1	-0,8	-0,9	-2,4	-2,2	-2,2	-4,1	-3,9	-3,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,2	4,2	4,5	3,1	3,5	3,4	2,4	2,6	2,2	1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,7	10,9	10,5	11,4	11,4	11,4	11,9	12,1	12,3	12,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	16,1	17,2	16,7	17,0	18,0	17,5	18,1	18,9	18,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,2	36,8	35,9	37,0	37,5	39,0	40,4	40,6	42,3	43,9	43,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,6	129,9	118,6	123,2	117,9	123,5	127,0	122,9	128,8	130,8	128,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,1	-2,8	-3,1	-3,8	-3,6	-3,7	-4,5	-4,4	-4,5	-4,7
Total	DM	-14,22	-7,84	-8,96	-9,61	-3,33	-6,11	-2,27	-0,36	-3,32	5,45	2,70	—
	DMA	22,48	18,24	13,95	15,78	10,80	13,07	9,50	7,13	15,62	7,68	9,02	—
	PDMA	26,14	26,61	19,97	33,87	21,00	13,94	17,62	10,18	20,46	16,07	17,76	—
CPI	DM	-41,89	-26,80	-22,22	-26,76	-8,95	-19,02	-12,21	-5,39	-16,30	3,13	-1,96	—
	DMA	44,78	34,82	24,53	30,49	16,52	23,85	15,37	9,30	27,99	8,11	12,53	—
	PDMA	47,17	52,16	21,27	52,35	26,81	17,66	24,93	11,84	29,37	19,09	22,17	—
SPI	DM	6,08	6,07	0,77	2,97	0,79	3,35	5,02	3,33	6,20	7,15	6,12	—
	DMA	6,12	6,08	6,19	4,99	6,61	5,15	5,19	5,55	6,55	7,37	6,45	—
	PDMA	10,72	7,87	19,01	20,32	16,74	11,21	12,26	8,96	13,93	13,85	14,52	—
ΔCS	DM	-47,97	-32,87	-22,98	-29,74	-9,74	-22,37	-17,23	-8,72	-22,50	-4,02	-8,08	—
	DMA	38,66	28,74	18,33	25,50	9,90	18,70	10,18	3,75	21,44	0,74	6,07	—
	PDMA	36,45	44,29	2,26	32,03	10,07	6,45	12,67	2,88	15,44	5,25	7,65	—

Tabela 8.102: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	437,2	437,2	466,1	482,4	466,1	490,4	519,2	490,4	514,8	555,3	514,8	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,2	17,3	16,9	13,4	14,9	14,8	10,2	12,9	12,6	7,0	10,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,1	-77,2	-79,2	-82,3	-80,2	-81,8	-86,2	-82,7	-84,4	-90,0	-85,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,6	-5,2	-6,8	-5,9	-6,4	-7,8	-6,7	-7,4	-8,9	-7,5	-8,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	45,3	45,6	46,8	46,2	46,3	47,9	46,9	47,1	48,9	47,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-8,2	-9,5	-8,9	-9,2	-10,4	-9,6	-10,1	-11,2	-10,3	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,5	168,5	169,2	180,2	176,7	176,3	189,5	183,5	183,3	198,3	190,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1643,7	-1530,4	-1604,6	-1498,8	-1498,2	-1569,3	-1465,0	-1468,5	-1531,9	-1426,0	-1436,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,1	-130,2	-112,0	-103,4	-110,3	-95,5	-81,7	-93,8	-79,1	-60,5	-77,4	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,2	-30,4	-7,5	-0,1	-8,6	10,4	24,4	9,2	28,1	48,0	27,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-375,0	-262,1	-417,4	-234,2	-293,2	-456,8	-212,4	-320,5	-503,1	-192,3	-350,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,7	126,4	128,4	127,5	128,1	129,8	128,3	129,5	131,3	129,2	130,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-13,3	-13,4	-13,3	-14,0	-14,0	-14,0	-14,7	-14,7	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,6	195,9	199,7	199,5	199,6	203,6	202,8	203,2	208,1	206,3	207,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,3	256,3	261,9	256,8	258,9	264,3	257,4	261,1	266,8	258,0	263,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,0	56,1	55,6	55,9	55,8	55,0	55,5	55,3	54,2	55,0	54,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,9	10,5	11,7	11,0	11,3	12,5	11,6	12,0	13,5	12,2	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,4	69,3	70,0	72,5	72,5	73,4	75,3	75,5	77,2	78,3	78,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	157,2	163,1	158,6	159,5	165,3	159,8	161,5	167,7	161,1	163,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-1,2	-2,6	-2,3	-2,3	-3,7	-3,3	-3,3	-5,0	-4,3	-4,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,1	3,6	2,2	2,2	2,8	1,4	1,4	1,9	0,6	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	13,2	12,8	13,7	13,5	13,1	14,1	13,9	13,6	14,5	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	20,1	19,9	20,4	20,5	20,4	20,7	20,9	20,9	21,1	21,4	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,4	33,3	33,8	35,5	35,6	35,8	37,4	37,6	37,9	39,5	39,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,8	124,8	128,7	126,1	126,7	130,3	127,0	128,2	131,9	128,0	129,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-4,2	-4,3	-4,2	-4,7	-4,7	-4,7	-5,2	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-15,42	-6,60	-12,12	0,15	-3,18	-9,40	5,92	-0,27	-6,83	11,75	2,67	—
	DMA	20,33	13,79	17,56	9,63	8,71	15,93	8,90	6,43	17,41	13,73	7,99	—
	PDMA	27,16	24,14	16,50	12,13	13,44	13,06	13,69	11,64	20,82	27,05	20,05	—
CPI	DM	-40,85	-19,66	-34,55	-4,70	-13,01	-29,48	8,06	-7,36	-24,87	20,91	-1,79	—
	DMA	42,87	28,25	35,34	17,59	14,99	29,94	14,57	7,93	31,44	24,49	9,66	—
	PDMA	43,52	41,46	24,32	19,20	21,76	13,26	14,83	9,19	22,43	35,64	16,97	—
SPI	DM	3,23	2,98	4,33	3,71	4,02	5,32	4,35	4,93	6,40	5,03	5,94	—
	DMA	3,80	3,19	4,52	3,80	4,10	5,65	4,75	5,33	7,12	5,83	6,77	—
	PDMA	15,16	11,45	10,77	6,95	7,34	12,91	12,86	13,44	19,64	20,76	22,30	—
ΔCS	DM	-44,08	-22,64	-38,89	-8,41	-17,03	-34,80	3,72	-12,30	-31,27	15,88	-7,73	—
	DMA	39,07	25,05	30,82	13,79	10,89	24,28	9,83	2,59	24,32	18,66	2,90	—
	PDMA	28,36	30,01	13,54	12,25	14,42	0,36	1,97	-4,25	2,79	14,88	-5,33	—

Tabela 8.103: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	497,6	513,5	451,2	439,7	467,6	474,0	476,4	490,2	522,1	551,1	537,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,5	8,8	19,5	15,7	13,6	17,1	12,3	11,2	11,8	5,2	6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-82,5	-86,3	-76,6	-77,3	-80,5	-79,5	-81,9	-83,4	-85,7	-90,8	-89,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-6,5	-5,4	-4,4	-3,9	-6,6	-5,4	-5,2	-9,4	-7,6	-7,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,2	48,4	43,6	45,2	45,8	44,9	46,9	47,1	47,7	50,2	49,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,0	-7,8	-6,7	-6,6	-9,0	-7,8	-7,8	-11,6	-10,1	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,8	187,8	155,7	160,1	168,5	165,6	174,0	178,0	186,4	201,6	197,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1668,6	-1552,7	-1741,7	-1620,2	-1622,4	-1707,2	-1589,6	-1589,4	-1626,5	-1510,2	-1513,0	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-99,7	-77,3	-137,3	-120,9	-114,0	-118,5	-99,0	-95,7	-80,6	-55,8	-58,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	12,9	36,6	-25,5	-9,5	-0,7	-6,3	13,6	17,8	32,4	59,2	55,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-478,1	-178,6	-393,6	-187,0	-136,9	-432,9	-182,3	-157,4	-534,5	-176,4	-201,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,2	126,7	119,1	119,7	118,6	123,0	123,0	122,6	131,7	130,4	131,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,6	-13,6	-11,3	-11,3	-11,3	-12,4	-12,4	-12,4	-14,8	-14,8	-14,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,8	202,3	189,8	190,8	190,8	195,8	196,3	196,2	211,0	209,0	209,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	262,6	256,4	248,1	246,1	242,5	255,1	251,1	249,2	270,9	262,2	264,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	54,2	53,6	53,9	53,9	53,7	54,2	54,2	52,6	53,8	53,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,3	11,2	9,9	9,4	9,1	11,0	10,3	10,1	13,9	12,4	12,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,7	75,2	62,2	66,1	66,0	67,1	70,4	70,3	79,3	80,6	80,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,4	157,5	151,7	148,9	147,4	156,8	153,1	152,3	168,6	162,2	163,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-3,7	-1,6	-1,5	-1,5	-2,7	-2,5	-2,5	-5,9	-5,1	-5,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,5	1,5	4,1	3,3	3,1	3,4	2,4	2,3	1,4	0,5	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,6	14,7	12,5	13,6	13,7	13,0	14,1	14,2	14,4	15,4	15,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,1	20,7	18,4	19,4	19,1	19,2	20,0	19,9	21,3	21,6	21,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,1	37,0	27,7	31,4	30,8	30,8	34,1	33,8	37,5	39,7	40,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,6	124,6	119,1	117,1	116,4	123,3	120,8	120,4	132,2	128,6	129,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,5	-4,6	-3,3	-3,5	-3,4	-3,9	-4,0	-4,0	-5,1	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-14,46	3,84	-21,65	-7,96	-4,59	-18,08	-2,19	-0,50	-10,92	10,10	8,42	—
	DMA	19,87	13,75	24,45	19,51	19,82	21,32	14,63	14,92	23,11	17,67	16,04	—
	PDMA	12,89	18,51	27,08	21,10	19,55	16,60	10,06	10,66	26,08	33,29	31,69	—
CPI	DM	-40,09	3,98	-50,80	-18,75	-10,04	-45,39	-7,61	-3,23	-35,35	15,95	11,44	—
	DMA	40,53	26,78	52,76	41,20	41,24	46,15	30,25	30,97	43,85	32,57	28,20	—
	PDMA	13,65	25,84	43,79	33,26	29,44	26,09	15,22	17,09	28,12	45,13	40,98	—
SPI	DM	4,33	3,73	-0,27	-0,05	-0,59	1,94	1,79	1,50	6,99	5,81	6,21	—
	DMA	4,72	4,20	3,69	3,61	4,11	3,10	3,17	3,14	7,90	6,75	7,13	—
	PDMA	12,33	13,13	14,83	12,19	12,30	9,64	6,28	5,94	24,58	24,61	24,87	—
ΔCS	DM	-44,42	0,25	-50,53	-18,70	-9,44	-47,33	-9,40	-4,73	-42,34	10,14	5,23	—
	DMA	35,81	22,58	49,08	37,59	37,12	43,05	27,07	27,83	35,95	25,83	21,07	—
	PDMA	1,33	12,71	28,96	21,07	17,15	16,46	8,94	11,15	3,54	20,52	16,10	—

Tabela 8.104: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	397,6	394,5	386,5	376,1	383,4	408,7	412,7	405,6	431,1	448,8	428,1	453,7	484,5	450,8	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,7	19,2	21,6	20,7	20,0	19,9	17,7	18,3	18,1	14,6	16,5	16,2	11,7	14,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,8	-72,3	-70,6	-70,3	-71,1	-73,0	-74,2	-73,5	-75,4	-78,4	-75,8	-77,8	-82,2	-78,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-5,5	-5,3	-5,0	-5,0	-6,4	-6,0	-6,0	-7,5	-6,7	-7,1	-8,6	-7,6	-8,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,2	43,7	42,9	43,0	43,3	43,6	44,3	44,1	44,3	45,5	44,8	45,0	46,6	45,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-8,9	-8,7	-8,6	-8,5	-9,7	-9,4	-9,4	-10,6	-10,1	-10,4	-11,6	-10,9	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	147,3	154,0	143,1	148,2	149,9	151,4	159,6	158,0	159,6	170,7	165,9	167,8	181,3	173,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1730,3	-1625,2	-1746,3	-1632,4	-1637,9	-1713,5	-1610,3	-1611,7	-1677,6	-1579,6	-1582,1	-1639,0	-1542,1	-1549,7	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,5	-135,3	-143,7	-146,7	-143,5	-127,2	-124,4	-127,0	-111,0	-102,2	-110,8	-94,9	-81,1	-94,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-32,7	-35,7	-41,6	-49,1	-44,6	-23,9	-23,3	-26,8	-6,4	1,4	-9,2	10,7	25,1	8,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-388,0	-264,1	-368,0	-274,5	-249,4	-408,7	-254,7	-279,1	-453,6	-235,1	-310,5	-506,6	-215,1	-344,9	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,1	125,3	124,4	124,8	124,6	125,8	125,8	126,1	127,3	126,8	127,5	128,8	127,8	129,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-14,1	-14,0	-13,7	-13,6	-13,6	-14,5	-14,5	-14,4	-15,3	-15,3	-16,1	-16,1	-16,1	-16,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,8	197,0	195,0	195,4	195,4	198,7	198,7	198,8	203,0	202,4	202,8	208,0	206,4	207,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,3	257,6	257,9	257,1	256,2	260,7	258,1	259,0	263,8	259,2	261,9	267,2	260,6	265,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,9	54,1	54,1	54,3	54,3	53,6	53,9	53,8	52,6	53,2	53,0	51,3	52,4	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,9	12,5	12,4	12,2	12,1	13,4	12,9	13,0	14,6	13,8	14,2	16,1	14,8	15,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,1	71,7	67,4	70,2	70,2	70,8	73,3	73,3	74,8	76,6	76,9	79,5	80,3	81,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	159,1	156,4	157,9	155,6	155,3	160,3	157,1	157,5	162,9	158,7	159,9	165,8	160,5	162,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,0	-2,8	-2,5	-2,5	-4,0	-3,6	-3,6	-5,4	-4,8	-4,9	-7,2	-6,2	-6,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,6	1,5	3,1	2,0	1,9	2,1	1,0	1,0	0,0	0,0	0,1	-0,2	-1,1	-1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	13,7	12,8	13,4	13,5	13,3	14,0	13,9	13,9	14,6	14,5	14,8	15,3	15,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,3	20,9	20,0	20,7	20,7	20,6	21,2	21,2	21,4	21,7	21,9	22,4	22,4	22,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,2	33,4	30,2	32,5	32,5	32,1	34,3	34,4	34,1	36,1	36,3	36,0	37,9	38,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,3	123,8	124,5	123,3	123,0	126,1	124,4	124,7	127,8	125,6	126,3	129,5	126,7	128,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,1	-4,1	-4,1	-4,5	-4,6	-4,6	-5,1	-5,1	-5,1	-5,6	-5,6	-5,6	-4,7
Total	DM	-21,64	-12,85	-22,92	-15,47	-14,19	-20,36	-10,04	-11,48	-17,79	-4,33	-8,68	-15,38	1,59	-5,83	—
	DMA	26,52	20,32	27,58	22,16	22,63	25,61	18,35	18,12	24,12	14,82	14,80	23,20	12,57	13,47	—
	PDMA	26,66	26,65	29,83	29,82	28,75	24,78	23,98	24,91	24,73	21,25	23,81	27,68	26,30	26,60	—
CPI	DM	-55,05	-34,23	-57,36	-39,95	-36,75	-52,70	-28,08	-31,67	-48,17	-15,64	-26,50	-44,18	-2,79	-21,37	—
	DMA	57,75	43,23	60,65	47,85	48,95	54,88	38,08	37,44	49,52	28,25	27,61	44,91	21,10	22,12	—
	PDMA	48,43	47,51	56,53	59,32	56,38	40,76	36,35	38,60	27,50	17,65	22,97	17,31	15,23	13,33	—
SPI	DM	2,85	2,83	2,33	2,48	2,36	3,36	3,19	3,33	4,49	3,96	4,39	5,75	4,80	5,57	—
	DMA	3,61	3,51	3,32	3,32	3,32	4,15	3,89	3,96	5,50	4,97	5,41	7,28	6,32	7,13	—
	PDMA	10,68	11,34	10,26	8,19	8,48	13,06	14,91	14,88	22,70	23,90	24,43	35,29	34,42	36,34	—
ΔCS	DM	-57,90	-37,06	-59,70	-42,43	-39,11	-56,06	-31,28	-35,01	-52,66	-19,60	-30,89	-49,93	-7,59	-26,95	—
	DMA	54,14	39,71	57,33	44,53	45,63	50,74	34,20	33,48	44,02	23,28	22,20	37,63	14,78	14,98	—
	PDMA	37,75	36,17	46,28	51,14	47,90	27,70	21,44	23,72	4,80	-6,25	-1,46	-17,97	-19,19	-23,00	—

Tabela 8.105: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	414,3	406,5	464,9	403,8	457,7	485,8	451,1	478,7	508,0	498,6	500,9	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,1	17,6	11,4	15,3	10,9	9,7	11,1	9,3	8,0	6,9	7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-72,8	-75,6	-68,6	-75,4	-78,3	-74,6	-78,1	-81,1	-80,5	-81,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-4,7	-3,6	-3,6	-3,3	-4,9	-4,6	-4,6	-6,2	-5,6	-5,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,8	43,9	42,4	40,5	42,5	43,6	42,9	43,7	44,9	45,3	45,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-8,2	-6,6	-6,6	-6,4	-7,8	-7,5	-7,6	-9,1	-8,5	-8,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,2	188,9	181,4	175,2	186,5	189,1	188,2	194,0	197,1	201,0	201,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1654,5	-1545,5	-1559,9	-1457,5	-1475,9	-1536,9	-1447,5	-1457,2	-1511,2	-1426,8	-1435,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-128,2	-134,2	-89,5	-122,5	-95,5	-74,0	-92,7	-79,9	-58,4	-63,8	-64,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,1	-41,6	10,2	-30,9	-0,7	27,5	3,5	16,8	44,9	37,0	34,5	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-334,1	-272,5	-343,0	-333,9	-277,7	-385,7	-297,0	-313,9	-436,5	-261,1	-355,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,2	131,7	118,9	123,8	119,3	123,0	126,8	123,5	127,4	129,9	127,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,3	-9,9	-9,6	-9,8	-11,0	-10,8	-10,9	-12,1	-12,0	-12,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	214,7	214,7	205,9	208,3	206,0	212,5	214,5	212,4	220,3	221,1	220,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,5	263,4	232,7	242,2	231,8	241,1	247,1	240,1	250,2	252,2	249,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	53,5	53,4	53,5	53,4	53,2	53,3	53,3	52,7	52,8	52,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	11,0	9,1	9,8	8,9	10,0	10,4	9,8	11,2	11,2	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	79,1	81,5	77,4	79,7	79,8	81,8	84,5	84,1	87,2	89,6	89,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,8	162,7	147,4	151,6	145,6	153,2	155,5	151,2	159,4	159,6	157,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,3	-1,3	-0,9	-1,1	-2,6	-2,4	-2,3	-4,2	-4,0	-3,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	2,6	4,3	4,5	3,2	3,6	3,5	2,5	2,7	2,3	1,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,6	10,9	10,7	11,4	11,4	11,5	11,9	12,0	12,4	12,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,7	16,3	17,3	16,8	17,1	18,0	17,6	18,1	18,9	18,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,8	37,4	36,0	37,2	37,6	38,7	40,3	40,4	41,7	43,4	43,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,9	130,3	118,3	122,5	117,7	122,7	125,7	122,1	127,3	128,8	126,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-3,0	-2,8	-3,0	-3,7	-3,6	-3,6	-4,4	-4,3	-4,3	-4,7
Total	DM	-12,19	-6,34	-7,56	-7,15	-2,49	-4,84	0,08	0,32	-2,12	7,67	3,20	—
	DMA	20,72	17,11	12,57	13,26	9,52	12,04	6,57	6,28	14,67	8,64	8,37	—
	PDMA	25,12	26,41	18,35	30,96	19,94	15,99	14,56	10,63	22,19	18,97	18,59	—
CPI	DM	-37,70	-23,95	-18,98	-20,88	-7,11	-15,71	-6,18	-3,61	-12,77	9,24	-0,20	—
	DMA	40,05	31,46	21,11	24,28	13,42	21,15	8,69	7,05	26,43	11,22	11,55	—
	PDMA	42,19	49,09	17,60	45,59	24,42	20,87	18,08	12,22	32,83	26,18	24,00	—
SPI	DM	6,52	6,58	0,82	2,91	0,90	3,13	4,68	3,20	5,69	6,52	5,70	—
	DMA	6,55	6,58	6,30	5,18	6,66	5,37	5,01	5,72	6,05	6,75	6,03	—
	PDMA	12,60	9,77	18,90	20,22	16,65	12,42	11,98	9,46	14,38	13,69	14,62	—
ΔCS	DM	-44,22	-30,53	-19,80	-23,80	-8,01	-18,84	-10,86	-6,81	-18,47	2,72	-5,90	—
	DMA	33,50	24,88	14,81	19,10	6,76	15,78	3,68	1,33	20,37	4,47	5,51	—
	PDMA	29,60	39,32	-1,30	25,37	7,77	8,45	6,10	2,76	18,45	12,49	9,38	—

Tabela 8.106: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	408,0	412,2	452,4	367,1	456,3	477,2	417,8	481,1	503,4	468,9	507,2	531,0	520,7	534,9	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,0	17,8	12,2	18,3	10,9	9,9	13,6	8,7	7,5	8,7	6,3	4,9	3,7	3,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,1	-73,0	-74,2	-64,3	-75,0	-77,5	-71,0	-78,3	-80,9	-77,6	-81,8	-84,6	-84,2	-85,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,7	-2,8	-3,2	-2,6	-4,0	-4,0	-3,8	-5,2	-4,9	-5,0	-6,5	-5,9	-6,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,2	42,5	40,8	38,1	41,1	42,3	40,8	42,6	43,9	43,5	44,2	45,6	46,2	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-8,2	-5,2	-5,5	-5,2	-6,3	-6,3	-6,2	-7,4	-7,1	-7,3	-8,6	-8,1	-8,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	176,5	184,1	167,5	150,5	174,7	175,9	166,2	183,0	184,7	181,6	191,7	193,9	197,3	200,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1659,0	-1560,7	-1593,1	-1474,8	-1514,1	-1574,4	-1480,7	-1499,4	-1552,8	-1470,1	-1481,8	-1529,0	-1449,3	-1461,9	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-134,3	-137,2	-104,7	-150,9	-107,7	-87,3	-119,7	-90,2	-69,8	-89,1	-72,7	-52,4	-59,7	-55,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-38,8	-45,5	-7,6	-65,5	-14,2	11,9	-28,5	5,5	31,6	7,1	25,4	51,3	41,4	45,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-331,3	-235,0	-299,0	-356,9	-204,7	-335,9	-325,7	-233,7	-377,8	-294,0	-265,6	-428,2	-262,8	-301,9	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,2	121,2	109,6	115,2	109,6	114,3	119,0	114,3	119,3	123,0	119,3	124,6	127,0	124,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,6	-11,6	-8,1	-7,7	-8,1	-9,0	-8,7	-9,0	-10,0	-9,8	-10,0	-11,0	-10,9	-11,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,4	198,5	189,7	190,6	190,0	196,5	198,0	196,6	204,3	205,8	204,1	213,4	214,2	212,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,5	248,4	216,9	229,3	215,1	225,8	235,0	223,9	235,2	240,9	233,2	245,4	247,1	243,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,9	51,0	51,6	51,9	51,7	52,0	52,1	52,1	52,1	52,1	52,2	51,7	51,9	51,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,8	8,1	9,1	7,9	8,8	9,4	8,5	9,6	9,9	9,3	10,6	10,5	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,1	71,6	67,0	68,6	69,7	71,8	74,1	74,3	77,3	79,9	79,5	83,9	86,2	85,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,3	151,4	136,1	141,5	133,7	142,3	146,2	139,7	148,9	151,1	146,1	156,1	156,1	153,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-2,1	0,0	0,5	0,2	-0,9	-0,6	-0,7	-2,2	-1,9	-1,9	-3,7	-3,5	-3,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,1	4,9	5,4	3,8	4,4	4,6	3,3	3,9	3,7	3,2	2,7	2,7	2,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	12,2	10,1	9,6	10,7	10,5	10,3	11,1	11,0	11,0	11,5	11,5	11,9	12,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	19,0	15,1	16,2	15,6	15,8	16,8	16,3	16,6	17,5	17,1	17,5	18,2	18,0	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,5	33,3	31,1	32,5	33,0	34,2	35,9	36,1	37,5	39,3	39,4	41,0	42,8	42,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	119,1	108,2	113,2	106,9	113,2	117,1	111,8	118,4	121,1	117,0	123,9	125,2	122,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,4	-2,1	-1,8	-2,0	-2,6	-2,4	-2,6	-3,2	-3,0	-3,1	-3,8	-3,7	-3,8	-4,7
Total	DM	-16,37	-8,93	-12,33	-16,08	-5,68	-9,08	-9,07	-2,31	-5,73	-1,44	1,23	-2,43	6,54	4,90	—
	DMA	20,02	17,46	15,79	20,62	16,48	12,70	13,67	11,25	12,57	6,89	8,41	15,96	8,63	9,02	—
	PDMA	25,76	26,35	30,12	49,13	31,48	19,48	31,65	20,36	18,64	15,62	15,59	25,22	20,89	20,90	—
CPI	DM	-40,45	-22,69	-23,15	-35,27	-7,40	-19,01	-21,67	-2,87	-14,88	-6,72	1,79	-11,23	8,95	6,40	—
	DMA	42,95	36,69	26,11	40,07	27,40	20,77	24,62	16,60	21,90	9,25	11,26	30,90	13,42	13,75	—
	PDMA	48,19	52,16	32,24	75,27	39,32	16,67	44,31	21,76	24,58	16,61	19,99	39,84	31,73	33,17	—
SPI	DM	1,29	1,16	-4,39	-2,00	-4,42	-1,80	0,18	-1,89	0,97	2,43	0,82	4,01	4,77	3,80	—
	DMA	3,21	3,36	8,22	6,35	8,47	6,77	5,63	7,32	5,73	5,17	6,31	5,00	5,12	5,56	—
	PDMA	9,31	7,42	28,57	29,96	25,73	21,53	22,37	19,34	14,28	14,89	12,36	14,49	12,94	11,90	—
ΔCS	DM	-41,75	-23,85	-18,75	-33,27	-2,98	-17,21	-21,85	-0,98	-15,86	-9,15	0,97	-15,24	4,17	2,60	—
	DMA	39,73	33,33	17,89	33,73	18,93	14,00	18,98	9,28	16,17	4,08	4,95	25,90	8,30	8,19	—
	PDMA	38,88	44,74	3,66	45,30	13,59	-4,86	21,93	2,41	10,30	1,73	7,62	25,35	18,80	21,27	—

Tabela 8.107: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	396,4	390,9	449,8	382,9	444,7	471,1	431,0	466,0	493,7	479,7	488,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,2	18,3	11,9	16,2	11,1	10,2	11,9	9,4	8,4	7,6	7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,1	-71,2	-74,2	-66,5	-74,3	-77,0	-72,8	-77,1	-80,0	-79,0	-80,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,0	-3,6	-3,6	-3,2	-4,9	-4,6	-4,6	-6,4	-5,7	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,4	43,6	42,2	40,1	42,4	43,6	42,8	43,8	45,1	45,3	45,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,5	-6,8	-6,7	-6,6	-8,0	-7,7	-7,8	-9,4	-8,8	-9,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,9	195,2	186,2	179,7	192,0	194,2	193,2	199,8	202,6	206,4	207,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1664,2	-1557,9	-1569,9	-1466,7	-1487,7	-1546,9	-1457,7	-1468,6	-1521,2	-1437,6	-1446,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-133,5	-137,6	-94,0	-129,7	-98,1	-78,2	-99,9	-82,2	-62,2	-70,8	-66,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,3	-45,4	4,8	-39,8	-3,7	22,3	-5,2	13,9	40,0	28,4	31,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-352,2	-279,9	-353,5	-363,0	-277,8	-398,3	-328,0	-314,6	-452,6	-293,8	-357,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,7	131,1	119,3	124,4	119,6	123,9	128,0	124,3	128,9	131,7	129,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,8	-10,1	-9,8	-10,1	-11,3	-11,1	-11,3	-12,5	-12,4	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,8	213,6	205,9	208,4	205,9	213,1	215,2	212,8	221,5	222,5	220,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,3	262,8	232,9	242,9	231,5	242,2	248,6	240,7	252,2	254,7	250,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,1	53,4	53,6	53,5	53,4	53,4	53,5	52,8	52,9	53,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,4	11,1	9,1	9,9	8,9	10,1	10,5	9,8	11,3	11,4	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,3	80,7	77,4	79,8	79,9	82,3	85,1	84,6	88,2	90,7	90,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,5	162,1	147,7	152,2	145,6	154,0	156,8	151,8	160,9	161,5	158,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-2,6	-1,3	-1,0	-1,1	-2,6	-2,4	-2,4	-4,3	-4,1	-3,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,1	4,1	4,4	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,8	11,0	10,6	11,5	11,5	11,5	12,0	12,2	12,4	12,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,8	16,3	17,4	16,9	17,2	18,2	17,7	18,3	19,1	18,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,3	36,9	36,0	37,1	37,6	39,1	40,5	40,7	42,4	44,0	44,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,6	129,9	118,6	123,2	117,9	123,5	127,0	122,9	128,8	130,8	128,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,1	-2,8	-3,1	-3,8	-3,6	-3,7	-4,5	-4,4	-4,5	-4,7
Total	DM	-14,29	-7,92	-9,03	-9,68	-3,41	-6,19	-2,35	-0,43	-3,40	5,37	2,62	—
	DMA	22,68	18,28	14,10	15,94	10,77	13,23	9,68	7,28	15,81	7,75	9,22	—
	PDMA	26,55	27,29	19,46	33,52	20,43	14,23	17,29	9,86	20,81	16,73	18,44	—
CPI	DM	-42,22	-27,13	-22,55	-27,09	-9,28	-19,35	-12,54	-5,72	-16,63	2,80	-2,29	—
	DMA	45,09	34,73	24,89	30,85	16,45	24,20	15,70	9,61	28,30	8,09	12,84	—
	PDMA	47,28	52,14	21,52	52,59	26,90	17,90	25,16	12,00	29,53	19,13	22,33	—
SPI	DM	6,19	6,17	0,87	3,08	0,89	3,46	5,13	3,44	6,31	7,25	6,23	—
	DMA	6,25	6,23	6,18	5,00	6,60	5,19	5,26	5,57	6,65	7,51	6,57	—
	PDMA	11,34	9,07	17,96	19,54	15,69	11,54	11,52	8,30	14,41	14,98	15,58	—
ΔCS	DM	-48,40	-33,30	-23,42	-30,17	-10,18	-22,81	-17,66	-9,16	-22,93	-4,45	-8,52	—
	DMA	38,84	28,50	18,71	25,85	9,85	19,01	10,44	4,04	21,65	0,58	6,26	—
	PDMA	35,94	43,07	3,56	33,05	11,22	6,36	13,64	3,70	15,12	4,15	6,75	—

Tabela 8.108: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	435,6	435,6	464,5	480,8	464,5	488,8	517,6	488,8	513,2	553,7	513,2	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,1	17,2	16,8	13,3	14,8	14,7	10,1	12,8	12,5	6,9	10,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,9	-77,0	-79,0	-82,1	-80,0	-81,6	-86,0	-82,5	-84,2	-89,8	-85,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,1	-6,7	-5,8	-6,3	-7,7	-6,6	-7,3	-8,8	-7,4	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	45,1	45,4	46,6	46,0	46,1	47,7	46,7	46,9	48,7	47,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,5	-8,3	-9,6	-9,0	-9,3	-10,5	-9,7	-10,2	-11,3	-10,4	-11,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,3	168,3	169,0	180,0	176,5	176,1	189,3	183,3	183,1	198,1	189,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1643,3	-1530,0	-1604,2	-1498,4	-1497,8	-1568,9	-1464,6	-1468,1	-1531,5	-1425,6	-1436,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,0	-130,1	-111,9	-103,3	-110,2	-95,4	-81,6	-93,7	-79,0	-60,4	-77,3	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,2	-30,4	-7,5	-0,1	-8,6	10,4	24,4	9,2	28,1	48,0	27,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-377,2	-264,3	-419,6	-236,4	-295,4	-459,0	-214,6	-322,7	-505,3	-194,5	-352,4	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,8	126,5	128,5	127,6	128,2	129,9	128,4	129,6	131,4	129,3	131,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-13,3	-13,4	-13,3	-14,0	-14,0	-14,0	-14,7	-14,7	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,1	196,4	200,2	200,0	200,1	204,1	203,3	203,7	208,6	206,8	207,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,4	256,4	262,0	256,9	259,0	264,4	257,5	261,2	266,9	258,1	263,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,8	55,9	55,4	55,7	55,6	54,8	55,3	55,1	54,0	54,8	54,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,7	11,9	11,2	11,5	12,7	11,8	12,2	13,7	12,4	13,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,0	69,9	70,6	73,1	73,1	74,0	75,9	76,1	77,8	78,9	79,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,8	157,4	163,3	158,8	159,7	165,5	160,0	161,7	167,9	161,3	163,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-1,4	-2,8	-2,5	-2,5	-3,9	-3,5	-3,5	-5,2	-4,5	-4,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,0	3,5	2,1	2,1	2,7	1,3	1,3	1,8	0,5	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	13,3	12,9	13,8	13,6	13,2	14,2	14,0	13,7	14,6	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,7	20,3	20,1	20,6	20,7	20,6	20,9	21,1	21,1	21,3	21,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,5	33,4	33,9	35,6	35,7	35,9	37,5	37,7	38,0	39,6	39,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,8	124,8	128,7	126,1	126,7	130,3	127,0	128,2	131,9	128,0	129,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-4,2	-4,3	-4,2	-4,7	-4,7	-4,7	-5,2	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-15,50	-6,68	-12,20	0,07	-3,26	-9,48	5,84	-0,35	-6,91	11,67	2,59	—
	DMA	20,47	13,81	17,76	9,67	8,75	16,13	8,82	6,64	17,50	13,67	8,10	—
	PDMA	26,81	23,80	16,86	12,50	13,82	13,44	14,43	12,36	21,52	27,69	20,74	—
CPI	DM	-41,18	-19,99	-34,88	-5,03	-13,34	-29,81	7,74	-7,69	-25,20	20,58	-2,12	—
	DMA	43,18	28,15	35,65	17,48	14,92	30,23	14,17	8,22	31,45	24,15	9,72	—
	PDMA	43,57	41,37	24,36	19,18	21,79	13,32	14,94	9,24	22,45	35,51	16,98	—
SPI	DM	3,33	3,09	4,44	3,81	4,13	5,43	4,45	5,04	6,51	5,14	6,05	—
	DMA	3,81	3,29	4,64	3,93	4,23	5,79	4,89	5,48	7,27	5,98	6,91	—
	PDMA	14,51	10,92	11,35	7,60	7,98	13,53	14,06	14,64	20,84	21,96	23,50	—
ΔCS	DM	-44,52	-23,08	-39,32	-8,84	-17,46	-35,24	3,28	-12,73	-31,71	15,44	-8,16	—
	DMA	39,37	24,87	31,01	13,55	10,68	24,44	9,28	2,74	24,19	18,17	2,80	—
	PDMA	29,06	30,45	13,01	11,58	13,80	-0,21	0,88	-5,40	1,61	13,55	-6,52	—

Tabela 8.109: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	496,0	511,9	449,6	438,1	466,0	472,4	474,8	488,6	520,5	549,5	536,1	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,4	8,7	19,4	15,6	13,5	17,0	12,2	11,1	11,7	5,1	6,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-82,3	-86,1	-76,4	-77,1	-80,3	-79,3	-81,7	-83,2	-85,5	-90,6	-89,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-6,4	-5,3	-4,3	-3,8	-6,5	-5,3	-5,1	-9,3	-7,5	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,0	48,2	43,4	45,0	45,6	44,7	46,7	46,9	47,5	50,0	49,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-9,1	-7,9	-6,8	-6,7	-9,1	-7,9	-7,9	-11,7	-10,2	-10,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,6	187,6	155,5	159,9	168,3	165,4	173,8	177,8	186,2	201,4	197,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1668,2	-1552,3	-1741,3	-1619,8	-1622,0	-1706,8	-1589,2	-1589,0	-1626,1	-1509,8	-1512,6	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-99,6	-77,2	-137,2	-120,8	-113,9	-118,4	-98,9	-95,6	-80,5	-55,7	-58,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	12,9	36,6	-25,5	-9,5	-0,7	-6,3	13,6	17,8	32,4	59,2	55,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-480,3	-180,8	-395,8	-189,2	-139,1	-435,1	-184,5	-159,6	-536,7	-178,6	-203,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,3	126,8	119,2	119,8	118,7	123,1	123,1	122,7	131,8	130,5	131,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,6	-13,6	-11,3	-11,3	-11,3	-12,4	-12,4	-12,4	-14,8	-14,8	-14,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	203,3	202,8	190,3	191,3	191,3	196,3	196,8	196,7	211,5	209,5	210,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	262,7	256,5	248,2	246,2	242,6	255,2	251,2	249,3	271,0	262,3	264,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	54,0	53,4	53,7	53,7	53,5	54,0	54,0	52,4	53,6	53,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,5	11,4	10,1	9,6	9,3	11,2	10,5	10,3	14,1	12,6	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	73,3	75,8	62,8	66,7	66,6	67,7	71,0	70,9	79,9	81,2	81,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,6	157,7	151,9	149,1	147,6	157,0	153,3	152,5	168,8	162,4	163,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-3,9	-1,8	-1,7	-1,7	-2,9	-2,7	-2,7	-6,1	-5,3	-5,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,4	1,4	4,0	3,2	3,0	3,3	2,3	2,2	1,3	0,4	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,7	14,8	12,6	13,7	13,8	13,1	14,2	14,3	14,5	15,5	15,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,3	20,9	18,6	19,6	19,3	19,4	20,2	20,1	21,5	21,8	21,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,2	37,1	27,8	31,5	30,9	30,9	34,2	33,9	37,6	39,8	40,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,6	124,6	119,1	117,1	116,4	123,3	120,8	120,4	132,2	128,6	129,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,5	-4,6	-3,3	-3,5	-3,4	-3,9	-4,0	-4,0	-5,1	-5,2	-5,2	-4,7
Total	DM	-14,54	3,76	-21,73	-8,03	-4,67	-18,16	-2,27	-0,58	-11,00	10,03	8,34	—
	DMA	20,06	13,68	24,57	19,44	19,75	21,47	14,63	14,92	23,20	17,58	15,95	—
	PDMA	13,25	19,17	26,66	20,56	19,01	16,89	10,37	11,31	26,78	33,93	32,32	—
CPI	DM	-40,42	3,65	-51,13	-19,07	-10,36	-45,72	-7,94	-3,55	-35,67	15,63	11,11	—
	DMA	40,82	26,40	53,11	41,13	41,16	46,46	30,14	30,86	43,87	32,15	27,78	—
	PDMA	13,71	25,78	43,92	33,28	29,47	26,14	15,20	17,07	28,14	45,00	40,84	—
SPI	DM	4,44	3,84	-0,17	0,06	-0,49	2,05	1,89	1,61	7,10	5,92	6,31	—
	DMA	4,84	4,35	3,63	3,54	4,05	3,14	3,25	3,23	8,05	6,89	7,27	—
	PDMA	12,91	14,33	14,01	11,23	11,34	10,11	6,83	7,08	25,78	25,81	26,07	—
ΔCS	DM	-44,86	-0,19	-50,96	-19,13	-9,88	-47,76	-9,83	-5,16	-42,77	9,71	4,80	—
	DMA	35,98	22,05	49,48	37,59	37,12	43,32	26,88	27,63	35,83	25,26	20,51	—
	PDMA	0,80	11,46	29,90	22,05	18,13	16,03	8,37	10,00	2,36	19,18	14,77	—

Tabela 8.110: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias com correção vibracional no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	396,0	392,9	384,9	374,5	381,8	407,1	411,1	404,0	429,5	447,2	426,5	452,1	482,9	449,2	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,6	19,1	21,5	20,6	19,9	19,8	17,6	18,2	18,0	14,5	16,4	16,1	11,6	14,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,6	-72,1	-70,4	-70,1	-70,9	-72,8	-74,0	-73,3	-75,2	-78,2	-75,6	-77,6	-82,0	-78,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,4	-5,2	-4,9	-4,9	-6,3	-5,9	-5,9	-7,4	-6,6	-7,0	-8,5	-7,5	-8,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,0	43,5	42,7	42,8	43,1	43,4	44,1	43,9	44,1	45,3	44,6	44,8	46,4	45,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,0	-8,8	-8,7	-8,6	-9,8	-9,5	-9,5	-10,7	-10,2	-10,5	-11,7	-11,0	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	147,1	153,8	142,9	148,0	149,7	151,2	159,4	157,8	159,4	170,5	165,7	167,6	181,1	173,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1729,9	-1624,8	-1745,9	-1632,0	-1637,5	-1713,1	-1609,9	-1611,3	-1677,2	-1579,2	-1581,7	-1638,6	-1541,7	-1549,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,4	-135,2	-143,6	-146,6	-143,4	-127,1	-124,3	-126,9	-110,9	-102,1	-110,7	-94,8	-81,0	-94,6	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-32,7	-35,7	-41,6	-49,1	-44,6	-23,9	-23,3	-26,8	-6,4	1,4	-9,2	10,7	25,1	8,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-390,2	-266,3	-370,2	-276,7	-251,6	-410,9	-256,9	-281,3	-455,8	-237,3	-312,7	-508,8	-217,3	-347,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,2	125,4	124,5	124,9	124,7	125,9	125,9	126,2	127,4	126,9	127,6	128,9	127,9	129,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-14,1	-14,0	-13,7	-13,6	-13,6	-14,5	-14,5	-14,4	-15,3	-15,3	-16,1	-16,1	-16,1	-16,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,3	197,5	195,5	195,9	195,9	199,2	199,2	199,3	203,5	202,9	203,3	208,5	206,9	208,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,4	257,7	258,0	257,2	256,3	260,8	258,2	259,1	263,9	259,3	262,0	267,3	260,7	265,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,7	53,9	53,9	54,1	54,1	53,4	53,7	53,6	52,4	53,0	52,8	51,1	52,2	51,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	13,1	12,7	12,6	12,4	12,3	13,6	13,1	13,2	14,8	14,0	14,4	16,3	15,0	15,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,7	72,3	68,0	70,8	70,8	71,4	73,9	73,9	75,4	77,2	77,5	80,1	80,9	81,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	159,3	156,6	158,1	155,8	155,5	160,5	157,3	157,7	163,1	158,9	160,1	166,0	160,7	162,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,2	-3,0	-2,7	-2,7	-4,2	-3,8	-3,8	-5,6	-5,0	-5,1	-7,4	-6,4	-6,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,5	1,4	3,0	1,9	1,8	2,0	0,9	0,9	0,9	-0,1	0,0	-0,3	-1,2	-1,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,1	13,8	12,9	13,5	13,6	13,4	14,1	14,0	14,0	14,7	14,6	14,9	15,4	15,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,5	21,1	20,2	20,9	20,9	20,8	21,4	21,4	21,6	21,9	22,1	22,6	22,6	23,0	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,3	33,5	30,3	32,6	32,6	32,2	34,4	34,5	34,2	36,2	36,4	36,1	38,0	38,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,3	123,8	124,5	123,3	123,0	126,1	124,4	124,7	127,8	125,6	126,3	129,5	126,7	128,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,1	-4,1	-4,1	-4,5	-4,6	-4,6	-5,1	-5,1	-5,1	-5,6	-5,6	-5,6	-4,7
Total	DM	-21,72	-12,92	-23,00	-15,55	-14,27	-20,43	-10,12	-11,55	-17,87	-4,41	-8,75	-15,45	1,51	-5,90	—
	DMA	26,73	20,37	27,77	22,19	22,66	25,84	18,39	18,16	24,33	14,88	15,02	23,42	12,62	13,70	—
	PDMA	27,04	27,31	30,20	30,47	29,40	25,58	24,61	25,55	25,39	22,04	24,61	28,41	26,97	27,34	—
CPI	DM	-55,37	-34,55	-57,69	-40,28	-37,08	-53,03	-28,41	-32,00	-48,50	-15,96	-26,83	-44,51	-3,12	-21,70	—
	DMA	58,10	43,17	61,00	47,79	48,90	55,25	37,99	37,35	49,83	28,20	27,94	45,24	21,01	22,45	—
	PDMA	48,57	47,51	56,66	59,32	56,38	41,08	36,26	38,51	27,49	17,86	23,21	17,41	15,17	13,43	—
SPI	DM	2,96	2,94	2,44	2,59	2,47	3,47	3,30	3,44	4,59	4,07	4,50	5,85	4,91	5,68	—
	DMA	3,72	3,65	3,40	3,41	3,41	4,28	4,02	4,09	5,63	5,12	5,55	7,43	6,47	7,28	—
	PDMA	11,25	12,50	10,79	9,32	9,61	14,22	16,07	16,04	23,86	25,10	25,63	36,48	35,62	37,54	—
ΔCS	DM	-58,33	-37,49	-60,13	-42,87	-39,55	-56,49	-31,71	-35,44	-53,09	-20,03	-31,33	-50,36	-8,02	-27,38	—
	DMA	54,38	39,53	57,60	44,38	45,49	50,97	33,97	33,25	44,19	23,08	22,38	37,81	14,54	15,17	—
	PDMA	37,31	35,01	45,88	50,00	46,77	26,86	20,20	22,47	3,63	-7,23	-2,42	-19,07	-20,45	-24,10	—

8.3.2 Utilização de CAISS empíricas

8.3.2.1 Precisão dos funcionais da literatura

Tabela 8.111: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	Func.	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Emp.
	% E_X^{HF}	0,00	0,00	0,00	0,00	10,00	11,61	15,77	19,00	20,00	20,00	20,00	21,00	21,00	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	364,2	355,3	455,6	390,6	396,4	497,9	455,6	407,3	445,4	408,9	449,1	442,8	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	24,9	24,9	23,9	20,3	21,9	19,1	18,3	21,6	18,2	21,6	17,4	18,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-66,3	-64,8	-71,8	-72,5	-69,4	-76,5	-77,7	-70,1	-76,8	-70,6	-74,4	-73,5	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-4,8	-4,6	-6,6	-5,3	-8,0	-6,4	-7,4	-6,3	-7,2	-6,8	-6,5	-7,5	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	40,8	40,0	39,0	45,8	41,1	41,5	45,2	41,4	45,3	41,7	43,3	41,7	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,0	-7,8	-8,5	-8,1	-10,1	-8,7	-10,2	-9,3	-9,9	-9,8	-9,1	-9,1	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	137,6	136,9	159,3	200,5	165,5	165,0	162,3	152,3	171,9	154,6	190,7	184,0	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1815,2	-1802,5	-1663,0	-1731,7	-1687,8	-1643,0	-1749,1	-1749,4	-1755,9	-1751,4	-1656,7	-1661,2	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-177,6	-177,9	-111,8	-142,5	-157,4	-97,5	-125,7	-143,2	-134,5	-142,6	-123,8	-129,9	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-80,9	-83,3	-14,8	-47,2	-63,7	3,3	-22,4	-45,2	-33,2	-44,5	-27,9	-36,6	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-290,5	-290,1	-310,7	-320,1	-297,3	-326,5	-386,6	-360,6	-352,0	-362,9	-318,8	-316,0	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,1	117,5	109,4	138,8	119,5	112,5	128,9	120,0	131,7	121,0	128,8	118,8	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,0	-11,8	-11,2	-11,3	-13,2	-11,3	-13,2	-12,9	-13,0	-13,4	-12,0	-11,3	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	188,8	187,3	194,2	190,8	191,5	193,0	202,0	193,4	193,8	193,8	213,8	197,5	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,5	247,4	236,3	282,3	254,5	240,2	266,9	251,9	271,8	254,0	261,3	247,3	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,6	54,6	51,8	57,7	52,6	53,4	57,0	54,0	56,1	54,0	53,2	50,7	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,5	10,2	10,4	12,6	11,8	10,0	11,1	11,2	11,1	11,7	10,5	10,4	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	60,6	59,5	65,6	71,5	63,9	64,5	70,6	64,7	71,0	65,3	78,1	68,1	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,0	149,7	142,7	174,3	154,4	145,4	164,4	153,7	167,1	155,1	162,8	152,3	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,4	0,0	-2,2	-1,7	-1,9	-1,3	-1,7	-1,6	-1,4	-2,0	-2,1	-2,0	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	4,5	4,6	2,3	8,2	2,8	2,9	4,0	3,2	4,5	2,8	3,6	3,1	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	11,9	11,6	11,5	12,5	12,3	11,5	13,3	12,1	12,8	12,4	11,7	11,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	18,5	17,0	22,5	19,3	17,2	20,0	19,0	20,0	19,4	18,4	17,7	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	25,1	24,2	28,5	34,4	27,5	29,1	32,5	28,0	32,4	28,3	34,9	30,6	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	120,3	117,6	109,0	138,9	119,9	112,4	129,1	120,6	131,7	121,6	129,1	118,9	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-2,9	-2,7	-3,2	-3,8	-3,6	-3,2	-3,6	-3,5	-3,4	-3,7	-3,6	-3,2	-4,5
Total	DM	-27,65	-29,11	-29,70	-16,69	-16,50	-20,93	-13,16	-19,35	-24,40	-18,45	-24,16	-12,11	-16,29	—
	DMA	33,04	34,30	34,52	20,43	29,17	25,27	16,27	27,23	28,88	27,54	28,79	20,61	19,90	—
	PDMA	46,40	48,32	50,37	21,17	42,98	33,06	16,12	25,63	31,21	29,89	29,34	23,65	24,07	—
CPI	DM	-66,20	-70,12	-69,95	-36,81	-51,43	-51,30	-29,75	-53,93	-59,73	-53,11	-59,75	-37,47	-40,23	—
	DMA	73,00	75,77	75,95	40,86	56,52	54,88	32,08	55,84	63,58	55,27	63,34	39,84	42,68	—
	PDMA	81,57	85,13	87,25	36,49	56,93	63,98	20,83	38,36	57,49	44,30	55,93	38,44	43,92	—
SPI	DM	0,61	0,97	-0,19	-1,93	9,11	1,35	-0,99	6,01	1,51	6,97	1,95	6,49	1,27	—
	DMA	3,73	3,89	4,14	5,45	9,11	3,55	4,67	6,25	3,43	7,20	3,45	6,51	3,19	—
	PDMA	20,60	21,32	23,32	9,93	32,76	10,38	12,66	16,30	11,94	19,31	9,85	12,80	9,51	—
Δ CS	DM	-66,81	-71,08	-69,75	-34,88	-60,53	-52,65	-28,77	-59,94	-61,24	-60,08	-61,70	-43,97	-41,49	—
	DMA	69,27	71,89	71,81	35,41	47,41	51,34	27,42	49,58	60,15	48,07	59,88	33,33	39,50	—
	PDMA	60,97	63,81	63,93	26,57	24,17	53,59	8,17	22,06	45,54	24,99	46,08	25,64	34,41	—

Tabela 8.112: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	Func.	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Emp.
HF	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,80	21,98	22,20	25,00	27,00	28,00	28,00	42,00	50,00	50,00	54,00	56,00	100,00	—
CO	$^1J_{\text{HF}}$	453,2	431,2	484,2	430,8	678,3	470,4	828,5	550,8	530,8	526,8	485,6	583,3	177,7	532,8
H ₂ O	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,5	19,6	19,9	17,9	18,4	9,1	18,7	13,7	10,9	7,4	3,9	4,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,8	-72,5	-74,7	-73,0	-100,6	-77,3	-108,3	-86,9	-83,7	-86,5	-91,6	-89,3	-54,8	-81,7
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-6,9	-6,4	-7,3	-16,8	-7,0	-18,6	-6,7	-9,4	-11,2	-7,1	-4,6	8,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	42,9	41,9	42,5	52,4	44,0	44,3	47,8	45,5	49,0	53,2	43,8	37,7	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,5	-9,0	-10,1	-18,0	-9,3	-15,8	-10,2	-11,1	-13,5	-11,0	-6,3	-5,4	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,3	196,4	176,7	154,6	247,5	167,8	171,8	137,9	183,1	201,3	166,9	118,3	159,3	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1753,0	-1666,4	-1637,8	-1732,1	-1526,9	-1645,5	-1389,0	-1646,1	-1670,4	-1651,5	-1625,7	-1705,4	-1876,6	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,5	-129,1	-103,1	-131,0	-36,1	-127,6	20,8	-104,0	-95,2	-81,9	-116,5	-105,2	-275,0	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,1	-34,1	-3,0	-30,5	64,9	-27,0	127,1	5,1	15,1	24,3	-20,0	-3,5	-196,7	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-359,4	-336,9	-333,4	-374,9	-308,4	-361,9	-302,9	-377,3	-465,0	-488,0	-429,2	-520,8	-1503,5	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,3	114,7	122,8	139,6	124,4	98,5	159,2	124,9	140,7	143,7	115,3	67,5	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-12,5	-11,8	-13,8	-25,9	-12,2	-21,2	-14,3	-13,3	-16,0	-12,1	-6,6	-15,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,4	212,9	191,3	196,4	193,6	195,2	209,7	342,7	202,4	220,1	227,8	224,7	251,3	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	273,8	261,1	245,6	256,2	299,5	256,2	247,8	296,0	259,5	288,5	270,2	208,7	90,6	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,2	52,8	53,7	53,5	50,3	55,6	36,5	62,0	53,0	54,1	56,9	49,6	45,3	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	10,7	10,1	12,4	17,1	10,4	20,6	12,0	11,8	14,8	9,3	7,4	5,2	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,0	77,3	63,7	68,7	64,8	66,0	76,4	127,3	72,3	86,0	91,2	85,1	85,9	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,6	162,5	148,1	157,3	183,7	158,8	141,6	195,6	160,6	180,1	177,6	141,8	-61,3	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,4	-1,0	-3,0	-6,4	-1,1	-13,9	-4,7	-3,8	-6,0	-2,5	-1,6	13,0	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,1	3,0	2,3	-13,4	4,2	-14,6	5,2	2,2	1,6	3,7	6,1	4,1	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	11,8	11,5	12,7	17,1	12,1	16,2	13,5	13,3	14,9	12,9	9,5	4,5	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	18,5	17,5	19,8	21,6	19,0	19,2	21,1	19,6	22,7	18,8	14,9	5,8	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,1	34,4	29,0	30,4	29,4	30,6	24,8	48,7	33,3	40,6	48,9	40,9	46,8	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,8	115,2	123,5	139,1	125,0	98,2	160,2	125,8	141,3	145,0	117,4	81,1	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,8	-3,3	-4,1	-5,5	-3,5	-4,6	-5,1	-4,3	-5,1	-3,7	-2,7	-3,3	-4,5
Total	DM	-17,68	-14,21	-13,24	-21,64	10,47	-15,42	15,98	2,38	-14,46	-8,79	-11,03	-21,61	-107,30	—
	DMA	27,28	22,60	16,49	26,58	24,54	20,39	32,17	33,13	19,97	25,35	27,11	32,99	120,93	—
	PDMA	28,15	24,94	18,09	25,71	75,56	26,16	110,03	37,83	13,67	29,72	30,39	36,12	148,95	—
CPI	DM	-52,09	-41,99	-30,95	-55,15	14,43	-40,95	42,86	-33,31	-40,19	-37,80	-43,95	-52,85	-219,96	—
	DMA	53,96	44,95	33,65	57,84	40,30	42,97	58,99	38,44	40,65	41,35	46,12	63,70	228,98	—
	PDMA	40,89	43,19	24,84	44,85	56,70	40,11	98,72	22,08	13,62	21,89	42,02	43,26	218,41	—
SPI	DM	7,55	6,16	-0,25	2,93	7,57	3,31	-3,73	28,55	4,41	12,48	13,11	1,29	-24,67	—
	DMA	7,71	6,21	3,91	3,67	12,98	3,83	12,50	29,23	4,80	13,63	13,17	10,47	41,69	—
	PDMA	18,82	11,56	13,14	11,66	89,39	15,93	118,32	49,38	13,70	35,47	21,87	30,88	98,00	—
Δ CS	DM	-59,64	-48,15	-30,70	-58,08	6,86	-44,26	46,59	-61,86	-44,60	-50,28	-57,06	-54,14	-195,29	—
	DMA	46,25	38,74	29,74	54,17	27,32	39,15	46,49	9,20	35,85	27,72	32,94	53,23	187,30	—
	PDMA	22,07	31,63	11,70	33,19	-32,69	24,18	-19,60	-27,30	-0,09	-13,57	20,15	12,39	120,40	—

8.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

304

Tabela 8.113: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	0,00	0,00	0,00	0,00	10,00	11,61	15,77	19,00	20,00	20,00	20,00	21,00	21,00	—
CO	$^1J_{\text{CO}}$	376,0	364,2	355,3	455,6	390,6	396,4	497,9	455,6	407,3	445,4	408,9	449,1	442,8	533,2
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	24,1	24,9	24,9	23,9	20,3	21,9	19,1	18,3	21,6	18,2	21,6	17,4	18,3	15,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-67,2	-66,3	-64,8	-71,8	-72,5	-69,4	-76,5	-77,7	-70,1	-76,8	-70,6	-74,4	-73,5	-81,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	-4,7	-4,8	-4,6	-6,6	-5,3	-8,0	-6,4	-7,4	-6,3	-7,2	-6,8	-6,5	-7,5	-8,7
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	40,8	40,8	40,0	39,0	45,8	41,1	41,5	45,2	41,4	45,3	41,7	43,3	41,7	43,1
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	-7,8	-8,0	-7,8	-8,5	-8,1	-10,1	-8,7	-10,2	-9,3	-9,9	-9,8	-9,1	-9,1	-10,5
PH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	133,7	137,6	136,9	159,3	200,5	165,5	165,0	162,3	152,3	171,9	154,6	190,7	184,0	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1815,2	-1802,5	-1663,0	-1731,7	-1687,8	-1643,0	-1749,1	-1749,4	-1755,9	-1751,4	-1656,7	-1661,2	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-177,6	-177,9	-111,8	-142,5	-157,4	-97,5	-125,7	-143,2	-134,5	-142,6	-123,8	-129,9	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-80,9	-83,3	-14,8	-47,2	-63,7	3,3	-22,4	-45,2	-33,2	-44,5	-27,9	-36,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-290,5	-290,1	-310,7	-320,1	-297,3	-326,5	-386,6	-360,6	-352,0	-362,9	-318,8	-316,0	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,1	117,5	109,4	138,8	119,5	112,5	128,9	120,0	131,7	121,0	128,8	118,8	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,0	-11,8	-11,2	-11,3	-13,2	-11,3	-13,2	-12,9	-13,0	-13,4	-12,0	-11,3	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	188,8	187,3	194,2	190,8	191,5	193,0	202,0	193,4	203,3	193,8	213,8	197,5	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,5	247,4	236,3	282,3	254,5	240,2	266,9	251,9	271,8	254,0	261,3	247,3	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,6	54,6	51,8	57,7	52,6	53,4	57,0	54,0	56,1	54,0	53,2	50,7	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,5	10,2	10,4	12,6	11,8	10,0	11,1	11,2	11,1	11,7	10,5	10,4	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	60,6	59,5	65,6	71,5	63,9	64,5	70,6	64,7	71,0	65,3	78,1	68,1	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,0	149,7	142,7	174,3	154,4	145,4	164,4	153,7	167,1	155,1	162,8	152,3	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,4	0,0	-2,2	-1,7	-1,9	-1,3	-1,7	-1,6	-1,4	-2,0	-2,1	-2,0	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	4,5	4,6	2,3	8,2	2,8	2,9	4,0	3,2	4,5	2,8	3,6	3,1	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	11,9	11,6	11,5	12,5	12,3	11,5	13,3	12,1	12,8	12,4	11,7	11,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	18,5	17,0	22,5	19,3	17,2	20,0	19,0	20,0	19,4	18,4	17,7	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	25,1	24,2	28,5	34,4	27,5	29,1	32,5	28,0	32,4	28,3	34,9	30,6	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	120,3	117,6	109,0	138,9	119,9	112,4	129,1	120,6	131,7	121,6	129,1	118,9	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-2,9	-2,7	-3,2	-3,8	-3,6	-3,2	-3,6	-3,5	-3,4	-3,7	-3,6	-3,2	-4,5
Total	DM	-27,66	-29,11	-29,71	-16,69	-16,51	-20,93	-13,16	-19,35	-24,40	-18,45	-24,16	-12,11	-16,29	—
	DMA	33,11	34,28	34,50	20,43	29,04	25,25	16,27	27,15	28,86	27,46	28,76	20,52	19,86	—
	PDMA	46,79	48,66	50,68	21,19	43,69	33,38	16,53	26,01	31,57	30,28	29,69	23,67	24,47	—
CPI	DM	-66,10	-70,02	-69,85	-36,71	-51,33	-51,20	-29,65	-53,83	-59,63	-53,01	-59,65	-37,37	-40,13	—
	DMA	73,14	75,69	75,86	40,78	56,33	54,80	32,00	55,74	63,50	55,17	63,25	39,74	42,60	—
	PDMA	81,49	84,97	87,08	36,49	56,75	63,82	20,87	38,26	57,39	44,18	55,83	38,34	43,83	—
SPI	DM	0,53	0,89	-0,27	-2,01	9,03	1,27	-1,07	5,93	1,43	6,89	1,87	6,41	1,19	—
	DMA	3,76	3,91	4,17	5,51	9,03	3,57	4,73	6,19	3,46	7,13	3,47	6,43	3,19	—
	PDMA	21,33	22,04	23,99	9,96	34,11	11,05	13,35	17,03	12,64	20,08	10,53	12,90	10,27	—
Δ CS	DM	-66,63	-70,90	-69,57	-34,70	-60,35	-52,47	-28,59	-59,76	-61,06	-59,90	-61,52	-43,79	-41,31	—
	DMA	69,38	71,78	71,70	35,28	47,30	51,23	27,27	49,55	60,04	48,04	59,79	33,31	39,41	—
	PDMA	60,16	62,93	63,09	26,53	22,64	52,76	7,52	21,22	44,75	24,10	45,30	25,44	33,56	—

Tabela 8.114: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func.	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Emp.
HF	% E_X^{HF}	21,80	21,98	22,20	25,00	27,00	28,00	28,00	42,00	50,00	50,00	54,00	56,00	100,00	—
CO	$^1J_{\text{HF}}$	453,2	431,2	484,2	430,8	678,3	470,4	828,5	550,8	530,8	526,8	485,6	583,3	177,7	533,2
H ₂ O	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,5	19,6	19,9	17,9	18,4	9,1	18,7	13,7	10,9	7,4	3,9	4,4	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,8	-72,5	-74,7	-73,0	-100,6	-77,3	-108,3	-86,9	-83,7	-86,5	-91,6	-89,3	-54,8	-81,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-6,9	-6,4	-7,3	-16,8	-7,0	-18,6	-6,7	-9,4	-11,2	-7,1	-4,6	8,8	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	42,9	41,9	42,5	52,4	44,0	44,3	47,8	45,5	49,0	53,2	43,8	37,7	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,5	-9,0	-10,1	-18,0	-9,3	-15,8	-10,2	-11,1	-13,5	-11,0	-6,3	-5,4	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,3	196,4	176,7	154,6	247,5	167,8	171,8	137,9	183,1	201,3	166,9	118,3	159,3	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1753,0	-1666,4	-1637,8	-1732,1	-1526,9	-1645,5	-1389,0	-1646,1	-1670,4	-1651,5	-1625,7	-1705,4	-1876,6	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,5	-129,1	-103,1	-131,0	-36,1	-127,6	20,8	-104,0	-95,2	-81,9	-116,5	-105,2	-275,0	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,1	-34,1	-3,0	-30,5	64,9	-27,0	127,1	5,1	15,1	24,3	-20,0	-3,5	-196,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-359,4	-336,9	-333,4	-374,9	-308,4	-361,9	-302,9	-377,3	-465,0	-488,0	-429,2	-520,8	-1503,5	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,3	114,7	122,8	139,6	124,4	98,5	159,2	124,9	140,7	143,7	115,3	67,5	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-12,5	-11,8	-13,8	-25,9	-12,2	-21,2	-14,3	-13,3	-16,0	-12,1	-6,6	-15,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,4	212,9	191,3	196,4	193,6	195,2	209,7	342,7	202,4	220,1	227,8	224,7	251,3	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	273,8	261,1	245,6	256,2	299,5	256,2	247,8	296,0	259,5	288,5	270,2	208,7	90,6	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,2	52,8	53,7	53,5	50,3	55,6	36,5	62,0	53,0	54,1	56,9	49,6	45,3	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	10,7	10,1	12,4	17,1	10,4	20,6	12,0	11,8	14,8	9,3	7,4	5,2	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,0	77,3	63,7	68,7	64,8	66,0	76,4	127,3	72,3	86,0	91,2	85,1	85,9	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,6	162,5	148,1	157,3	183,7	158,8	141,6	195,6	160,6	180,1	177,6	141,8	-61,3	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,4	-1,0	-3,0	-6,4	-1,1	-13,9	-4,7	-3,8	-6,0	-2,5	-1,6	13,0	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,1	3,0	2,3	-13,4	4,2	-14,6	5,2	2,2	1,6	3,7	6,1	4,1	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	11,8	11,5	12,7	17,1	12,1	16,2	13,5	13,3	14,9	12,9	9,5	4,5	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	18,5	17,5	19,8	21,6	19,0	19,2	21,1	19,6	22,7	18,8	14,9	5,8	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,1	34,4	29,0	30,4	29,4	30,6	24,8	48,7	33,3	40,6	48,9	40,9	46,8	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,8	115,2	123,5	139,1	125,0	98,2	160,2	125,8	141,3	145,0	117,4	81,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,8	-3,3	-4,1	-5,5	-3,5	-4,6	-5,1	-4,3	-5,1	-3,7	-2,7	-3,3	-4,5
Total	DM	-17,68	-14,22	-13,25	-21,64	10,47	-15,42	15,98	2,38	-14,46	-8,80	-11,04	-21,62	-107,30	—
	DMA	27,20	22,48	16,48	26,52	24,37	20,33	32,12	32,99	19,87	25,20	27,00	32,91	120,89	—
	PDMA	28,56	24,84	18,47	25,52	76,07	26,55	109,85	37,71	13,44	28,84	30,29	36,77	147,86	—
CPI	DM	-51,99	-41,89	-30,85	-55,05	14,53	-40,85	42,96	-33,21	-40,09	-37,70	-43,85	-52,75	-219,86	—
	DMA	53,86	44,78	33,56	57,75	39,98	42,87	58,95	38,25	40,53	41,12	45,98	63,49	228,88	—
	PDMA	40,77	43,07	24,86	44,78	56,63	40,01	98,46	22,04	13,68	21,81	41,80	43,11	217,81	—
SPI	DM	7,47	6,08	-0,33	2,85	7,49	3,23	-3,81	28,47	4,33	12,40	13,03	1,21	-24,75	—
	DMA	7,65	6,12	3,95	3,61	12,93	3,80	12,45	29,14	4,72	13,52	13,08	10,48	41,70	—
	PDMA	19,60	11,47	13,79	11,40	90,33	16,68	118,20	49,20	13,27	34,00	21,85	32,12	96,56	—
Δ CS	DM	-59,46	-47,97	-30,52	-57,90	7,04	-44,08	46,77	-61,68	-44,42	-50,10	-56,88	-53,96	-195,11	—
	DMA	46,22	38,66	29,62	54,14	27,06	39,07	46,50	9,11	35,81	27,60	32,90	53,01	187,18	—
	PDMA	21,17	31,61	11,08	33,38	-33,71	23,33	-19,74	-27,16	0,40	-12,20	19,95	10,99	121,25	—

8.3. CORREÇÕES VIBRACIONAIS PARA OS FUNCIONAIS TESTADOS

306

Tabela 8.115: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (0 a 21% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func. % E_X^{HF}	PBE	PW91	BP86	ω B97	TPSSH	O3LYP	ω B97X	CAMB3	B3P86	B3LYP	B3W91	B971	B972	Emp.
HF	${}^1J_{\text{HF}}$	0,00	0,00	0,00	0,00	10,00	11,61	15,77	19,00	20,00	20,00	20,00	21,00	21,00	—
CO	${}^1J_{\text{CO}}$	376,0	364,2	355,3	455,6	390,6	396,4	497,9	455,6	407,3	445,4	408,9	449,1	442,8	534,8
H ₂ O	${}^1J_{\text{OH}}$	24,1	24,9	24,9	23,9	20,3	21,9	19,1	18,3	21,6	18,2	21,6	17,4	18,3	15,7
H ₂ O	${}^2J_{\text{HH}}$	-67,2	-66,3	-64,8	-71,8	-72,5	-69,4	-76,5	-77,7	-70,1	-76,8	-70,6	-74,4	-73,5	-82,0
NH ₃	${}^1J_{\text{NH}}$	-4,7	-4,8	-4,6	-6,6	-5,3	-8,0	-6,4	-7,4	-6,3	-7,2	-6,8	-6,5	-7,5	-8,8
NH ₃	${}^2J_{\text{HH}}$	40,8	40,8	40,0	39,0	45,8	41,1	41,5	45,2	41,4	45,3	41,7	43,3	41,7	43,3
PH ₃	${}^1J_{\text{PH}}$	-7,8	-8,0	-7,8	-8,5	-8,1	-10,1	-8,7	-10,2	-9,3	-9,9	-9,8	-9,1	-9,1	-10,4
PH ₃	${}^2J_{\text{HH}}$	133,7	137,6	136,9	159,3	200,5	165,5	165,0	162,3	152,3	171,9	154,6	190,7	184,0	195,7
PF ₃	${}^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1815,2	-1802,5	-1663,0	-1731,7	-1687,8	-1643,0	-1749,1	-1749,4	-1755,9	-1751,4	-1656,7	-1661,2	-1.443,2
BHF ₂	${}^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-177,6	-177,9	-111,8	-142,5	-157,4	-97,5	-125,7	-143,2	-134,5	-142,6	-123,8	-129,9	-79,6
BF ₃	${}^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-80,9	-83,3	-14,8	-47,2	-63,7	3,3	-22,4	-45,2	-33,2	-44,5	-27,9	-36,6	17,2
F ₂ O	${}^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-290,5	-290,1	-310,7	-320,1	-297,3	-326,5	-386,6	-360,6	-352,0	-362,9	-318,8	-316,0	-284,7
CH ₄	${}^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,1	117,5	109,4	138,8	119,5	112,5	128,9	120,0	131,7	121,0	128,8	118,8	122,9
CH ₄	${}^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,0	-11,8	-11,2	-11,3	-13,2	-11,3	-13,2	-12,9	-13,0	-13,4	-12,0	-11,3	-12,5
C ₂ H ₂	${}^1J_{\text{CC}}$	188,7	188,8	187,3	194,2	190,8	191,5	193,0	202,0	193,4	203,3	193,8	213,8	197,5	173,9
C ₂ H ₂	${}^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,5	247,4	236,3	282,3	254,5	240,2	266,9	251,9	271,8	254,0	261,3	247,3	244,4
C ₂ H ₂	${}^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,6	54,6	51,8	57,7	52,6	53,4	57,0	54,0	56,1	54,0	53,2	50,7	49,9
C ₂ H ₂	${}^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,5	10,2	10,4	12,6	11,8	10,0	11,1	11,2	11,1	11,7	10,5	10,4	8,9
C ₂ H ₄	${}^1J_{\text{CC}}$	61,3	60,6	59,5	65,6	71,5	63,9	64,5	70,6	64,7	71,0	65,3	78,1	68,1	66,6
C ₂ H ₄	${}^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,0	149,7	142,7	174,3	154,4	145,4	164,4	153,7	167,1	155,1	162,8	152,3	154,3
C ₂ H ₄	${}^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,4	0,0	-2,2	-1,7	-1,9	-1,3	-1,7	-1,6	-1,4	-2,0	-2,1	-2,0	-1,9
C ₂ H ₄	${}^2J_{\text{HH}}$	4,5	4,5	4,6	2,3	8,2	2,8	2,9	4,0	3,2	4,5	2,8	3,6	3,1	2,1
C ₂ H ₄	${}^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	11,9	11,6	11,5	12,5	12,3	11,5	13,3	12,1	12,8	12,4	11,7	11,2	11,3
C ₂ H ₄	${}^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	18,5	17,0	22,5	19,3	17,2	20,0	19,0	20,0	19,4	18,4	17,7	18,3
C ₂ H ₆	${}^1J_{\text{CC}}$	25,7	25,1	24,2	28,5	34,4	27,5	29,1	32,5	28,0	32,4	28,3	34,9	30,6	33,6
C ₂ H ₆	${}^1J_{\text{CH}}$	119,5	120,3	117,6	109,0	138,9	119,9	112,4	129,1	120,6	131,7	121,6	129,1	118,9	123,4
C ₂ H ₆	${}^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-2,9	-2,7	-3,2	-3,8	-3,6	-3,2	-3,6	-3,5	-3,4	-3,7	-3,6	-3,2	-4,5
Total	DM	-27,73	-29,19	-29,78	-16,77	-16,58	-21,01	-13,24	-19,43	-24,48	-18,53	-24,24	-12,19	-16,37	—
	DMA	33,07	34,41	34,63	20,55	29,22	25,38	16,38	27,33	28,99	27,64	28,92	20,72	20,02	—
	PDMA	46,36	48,31	50,39	21,47	42,85	32,93	16,09	25,55	31,13	29,82	29,64	23,94	24,28	—
CPI	DM	-66,43	-70,35	-70,17	-37,04	-51,65	-51,53	-29,98	-54,15	-59,95	-53,34	-59,98	-37,70	-40,45	—
	DMA	73,08	76,04	76,21	41,13	56,60	55,15	32,35	56,05	63,85	55,48	63,60	40,05	42,95	—
	PDMA	81,38	84,99	87,10	36,56	56,71	63,88	20,96	38,28	57,46	44,19	55,90	38,35	43,92	—
SPI	DM	0,64	0,99	-0,17	-1,91	9,13	1,37	-0,96	6,04	1,54	7,00	1,97	6,52	1,29	—
	DMA	3,73	3,89	4,14	5,47	9,13	3,56	4,67	6,28	3,43	7,23	3,48	6,55	3,21	—
	PDMA	20,67	21,41	23,47	10,40	32,69	10,22	12,51	16,22	11,83	19,28	10,37	13,37	9,88	—
Δ CS	DM	-67,07	-71,34	-70,01	-35,13	-60,79	-52,90	-29,02	-60,19	-61,49	-60,34	-61,96	-44,22	-41,75	—
	DMA	69,35	72,15	72,07	35,66	47,47	51,59	27,68	49,77	60,41	48,26	60,12	33,50	39,73	—
	PDMA	60,72	63,58	63,63	26,16	24,02	53,66	8,45	22,06	45,63	24,90	45,53	24,98	34,04	—

Tabela 8.116: Constantes de acoplamento utilizando funcionais da literatura (21 a 100% E_X^{HF}) e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	Func.	X3LYP	B98	ω 97XD	PBE0	M06	B1B95	M05	BMK	BHH	BHLYP	M062X	M052X	M06HF	Emp.
HF	% E_X^{HF}	21,80	21,98	22,20	25,00	27,00	28,00	28,00	42,00	50,00	50,00	54,00	56,00	100,00	—
CO	$^1J_{\text{HF}}$	453,2	431,2	484,2	430,8	678,3	470,4	828,5	550,8	530,8	526,8	485,6	583,3	177,7	534,8
H ₂ O	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,5	19,6	19,9	17,9	18,4	9,1	18,7	13,7	10,9	7,4	3,9	4,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,8	-72,5	-74,7	-73,0	-100,6	-77,3	-108,3	-86,9	-83,7	-86,5	-91,6	-89,3	-54,8	-82,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-6,9	-6,4	-7,3	-16,8	-7,0	-18,6	-6,7	-9,4	-11,2	-7,1	-4,6	8,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	42,9	41,9	42,5	52,4	44,0	44,3	47,8	45,5	49,0	53,2	43,8	37,7	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,5	-9,0	-10,1	-18,0	-9,3	-15,8	-10,2	-11,1	-13,5	-11,0	-6,3	-5,4	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,3	196,4	176,7	154,6	247,5	167,8	171,8	137,9	183,1	201,3	166,9	118,3	159,3	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1753,0	-1666,4	-1637,8	-1732,1	-1526,9	-1645,5	-1389,0	-1646,1	-1670,4	-1651,5	-1625,7	-1705,4	-1876,6	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,5	-129,1	-103,1	-131,0	-36,1	-127,6	20,8	-104,0	-95,2	-81,9	-116,5	-105,2	-275,0	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-29,1	-34,1	-3,0	-30,5	64,9	-27,0	127,1	5,1	15,1	24,3	-20,0	-3,5	-196,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-359,4	-336,9	-333,4	-374,9	-308,4	-361,9	-302,9	-377,3	-465,0	-488,0	-429,2	-520,8	-1503,5	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,3	114,7	122,8	139,6	124,4	98,5	159,2	124,9	140,7	143,7	115,3	67,5	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-12,5	-11,8	-13,8	-25,9	-12,2	-21,2	-14,3	-13,3	-16,0	-12,1	-6,6	-15,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,4	212,9	191,3	196,4	193,6	195,2	209,7	342,7	202,4	220,1	227,8	224,7	251,3	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	273,8	261,1	245,6	256,2	299,5	256,2	247,8	296,0	259,5	288,5	270,2	208,7	90,6	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,2	52,8	53,7	53,5	50,3	55,6	36,5	62,0	53,0	54,1	56,9	49,6	45,3	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	10,7	10,1	12,4	17,1	10,4	20,6	12,0	11,8	14,8	9,3	7,4	5,2	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,0	77,3	63,7	68,7	64,8	66,0	76,4	127,3	72,3	86,0	91,2	85,1	85,9	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,6	162,5	148,1	157,3	183,7	158,8	141,6	195,6	160,6	180,1	177,6	141,8	-61,3	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,4	-1,0	-3,0	-6,4	-1,1	-13,9	-4,7	-3,8	-6,0	-2,5	-1,6	13,0	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,1	3,0	2,3	-13,4	4,2	-14,6	5,2	2,2	1,6	3,7	6,1	4,1	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	11,8	11,5	12,7	17,1	12,1	16,2	13,5	13,3	14,9	12,9	9,5	4,5	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	18,5	17,5	19,8	21,6	19,0	19,2	21,1	19,6	22,7	18,8	14,9	5,8	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,1	34,4	29,0	30,4	29,4	30,6	24,8	48,7	33,3	40,6	48,9	40,9	46,8	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	128,8	115,2	123,5	139,1	125,0	98,2	160,2	125,8	141,3	145,0	117,4	81,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,8	-3,3	-4,1	-5,5	-3,5	-4,6	-5,1	-4,3	-5,1	-3,7	-2,7	-3,3	-4,5
Total	DM	-17,76	-14,29	-13,32	-21,72	10,39	-15,50	15,90	2,30	-14,54	-8,87	-11,12	-21,69	-107,38	—
	DMA	27,38	22,68	16,59	26,73	24,39	20,47	32,23	33,06	20,06	25,39	27,21	32,92	121,05	—
	PDMA	28,07	25,28	18,08	26,15	76,24	26,10	111,49	38,40	14,25	30,48	30,78	35,87	150,11	—
CPI	DM	-52,32	-42,22	-31,18	-55,37	14,20	-41,18	42,64	-33,54	-40,42	-38,03	-44,18	-53,07	-220,19	—
	DMA	54,17	45,09	33,91	58,10	39,95	43,18	59,04	38,23	40,82	41,37	46,29	63,49	229,25	—
	PDMA	40,78	43,14	24,95	44,87	56,46	40,03	98,37	21,94	13,77	21,88	42,04	43,14	218,07	—
SPI	DM	7,58	6,19	-0,23	2,96	7,59	3,33	-3,70	28,58	4,44	12,51	13,13	1,32	-24,65	—
	DMA	7,74	6,25	3,89	3,72	12,98	3,81	12,57	29,27	4,84	13,67	13,21	10,49	41,71	—
	PDMA	18,75	12,19	13,04	12,43	90,74	15,88	121,11	50,46	14,59	36,79	22,51	30,53	100,28	—
Δ CS	DM	-59,90	-48,40	-30,96	-58,33	6,61	-44,52	46,34	-62,12	-44,86	-50,53	-57,32	-54,39	-195,54	—
	DMA	46,43	38,84	30,02	54,38	26,97	39,37	46,47	8,95	35,98	27,71	33,08	53,00	187,53	—
	PDMA	22,03	30,95	11,91	32,44	-34,28	24,14	-22,74	-28,52	-0,82	-14,91	19,53	12,62	117,79	—

8.3.2.2 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos - Geometrias Experimentais

Tabela 8.117: Constantes de acoplamento B1B95 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	403,9	427,5	451,2	475,2	499,3	523,6	548,0	572,6	597,4	622,3	647,4	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,4	21,7	19,9	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	2,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-72,8	-75,3	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-88,2	-90,8	-93,5	-96,2	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	42,7	43,4	44,1	44,9	45,6	46,4	47,2	47,9	48,7	49,5	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	146,7	154,4	161,8	169,2	176,5	183,6	190,6	197,4	204,1	210,7	217,0	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1716,6	-1695,0	-1669,0	-1639,2	-1606,4	-1571,1	-1533,7	-1494,9	-1454,9	-1414,1	-1372,8	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-174,7	-157,8	-141,0	-124,2	-107,5	-91,0	-74,6	-58,3	-42,2	-26,3	-10,5	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,7	-60,1	-41,7	-23,4	-5,3	12,6	30,3	47,9	65,3	82,6	99,7	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,9	-301,3	-334,9	-368,7	-404,3	-443,7	-490,0	-548,8	-631,2	-765,1	-1048,5	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	122,0	123,3	124,7	126,1	127,5	129,0	130,4	131,9	133,4	134,9	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,0	-13,7	-14,4	-15,0	-15,7	-16,4	-17,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,2	192,9	195,8	199,3	203,2	207,7	213,0	219,2	226,6	235,5	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,5	254,5	256,6	258,8	261,2	263,7	266,5	269,6	273,2	277,3	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,7	55,5	55,2	54,6	53,8	52,6	51,1	49,1	46,4	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,5	10,0	10,6	11,2	12,0	13,0	14,1	15,4	17,0	18,9	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	61,2	63,8	66,5	69,6	73,0	76,8	81,2	86,5	92,8	100,8	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,4	155,3	157,2	159,2	161,3	163,5	165,9	168,5	171,4	174,7	178,7	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,4	4,7	4,0	3,3	2,5	1,6	0,6	-0,5	-1,9	-3,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,8	13,3	13,9	14,7	15,6	16,9	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,0	19,4	19,9	20,4	21,1	22,0	23,2	24,7	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,0	31,0	33,0	35,0	37,1	39,2	41,3	43,5	45,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	122,2	123,7	125,3	126,9	128,5	130,1	131,8	133,4	135,0	136,7	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,7	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,5
Total	DM	-22,42	-20,09	-17,57	-14,88	-12,12	-9,40	-6,83	-4,62	-3,22	-3,68	-9,75	—
	DMA	28,84	24,87	22,36	19,88	17,65	16,03	17,57	21,77	27,28	37,08	54,03	—
	PDMA	52,92	42,95	33,65	24,14	16,34	13,69	22,00	36,05	51,53	69,77	92,57	—
CPI	DM	-54,36	-49,93	-45,09	-39,91	-34,65	-29,58	-24,97	-21,39	-19,90	-23,05	-39,82	—
	DMA	62,73	53,78	47,89	41,71	35,44	30,05	31,68	39,32	49,77	69,85	105,96	—
	PDMA	82,29	66,32	51,66	37,24	22,81	13,00	21,49	38,20	56,08	75,95	100,87	—
SPI	DM	1,00	1,79	2,61	3,47	4,41	5,40	6,48	7,67	9,01	10,53	12,31	—
	DMA	3,99	3,67	3,64	3,87	4,60	5,75	7,23	8,90	10,79	13,05	15,95	—
	PDMA	31,38	25,82	20,45	14,53	11,60	14,19	22,37	34,47	48,19	65,24	86,48	—
ΔCS	DM	-55,36	-51,71	-47,70	-43,38	-39,07	-34,98	-31,45	-29,06	-28,91	-33,58	-52,12	—
	DMA	58,74	50,12	44,25	37,84	30,84	24,31	24,46	30,42	38,99	56,81	90,02	—
	PDMA	50,91	40,50	31,22	22,72	11,21	-1,20	-0,88	3,74	7,89	10,71	14,38	—

Tabela 8.118: Constantes de acoplamento B3LYP e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	393,4	418,4	443,6	469,1	494,8	520,8	547,0	573,4	600,0	626,9	654,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	19,9	17,9	15,8	13,6	11,4	9,0	6,5	4,0	1,4	-1,2	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,7	-74,4	-77,1	-79,8	-82,5	-85,3	-88,1	-91,0	-93,8	-96,7	-99,6	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-15,6	-16,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	49,2	50,0	50,9	51,8	52,7	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,2	-17,2	-18,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,6	166,1	174,5	182,7	190,9	198,8	206,7	214,3	221,8	229,2	236,3	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,3	-1784,6	-1754,5	-1720,8	-1684,0	-1644,8	-1603,8	-1561,4	-1518,1	-1474,0	-1429,6	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-167,7	-150,2	-132,7	-115,4	-98,2	-81,2	-64,4	-47,8	-31,4	-15,2	0,7	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,2	-51,0	-32,1	-13,3	5,1	23,4	41,5	59,5	77,2	94,8	112,2	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,0	-316,8	-353,7	-392,3	-434,8	-484,4	-547,0	-634,0	-773,3	-1056,7	-2138,3	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,0	132,6	134,1	135,7	137,4	139,0	140,7	142,4	144,1	145,9	147,6	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,9	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,7	-16,4	-17,2	-17,9	-18,6	-19,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,3	202,3	205,8	209,7	214,3	219,6	225,8	233,3	242,3	253,2	266,8	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	271,1	273,5	276,1	278,9	281,8	285,0	288,6	292,6	297,3	302,7	309,4	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	56,8	56,5	56,0	55,1	53,9	52,3	50,1	47,2	43,5	38,5	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,6	19,7	22,2	25,4	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,6	69,5	72,8	76,4	80,5	85,3	91,1	98,1	107,2	119,6	137,7	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,4	167,7	170,0	172,5	175,1	178,0	181,2	185,0	189,5	195,2	203,3	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,5	-1,6	-2,7	-4,1	-5,7	-7,7	-10,1	-13,4	-18,0	-24,8	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,3	4,5	3,6	2,7	1,6	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,7	13,0	13,4	13,8	14,5	15,3	16,3	17,8	19,9	23,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,0	20,4	20,8	21,4	22,2	23,1	24,4	26,1	28,5	32,3	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,2	31,3	33,5	35,7	37,9	40,2	42,6	44,9	47,3	49,8	52,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,5	132,3	134,1	135,9	137,7	139,6	141,5	143,3	145,2	147,2	149,1	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,7	-4,5
Total	DM	-23,04	-20,44	-17,65	-14,76	-11,87	-9,10	-6,68	-5,07	-5,27	-10,75	-46,54	—
	DMA	32,76	30,21	28,02	26,08	24,59	24,42	28,37	34,39	42,85	57,31	104,12	—
	PDMA	48,44	39,03	29,58	23,78	22,31	27,44	43,39	61,46	83,84	112,76	160,34	—
CPI	DM	-62,93	-58,07	-52,87	-47,52	-42,27	-37,50	-33,78	-32,22	-35,35	-51,53	-140,30	—
	DMA	68,11	61,18	54,89	48,57	43,09	40,30	46,84	57,89	73,58	102,31	205,72	—
	PDMA	73,35	57,88	42,71	28,89	20,26	19,92	37,25	56,07	76,37	101,24	151,51	—
SPI	DM	6,21	7,16	8,18	9,27	10,43	11,73	13,19	14,84	16,79	19,16	22,22	—
	DMA	6,84	7,49	8,31	9,59	11,03	12,78	14,83	17,16	20,32	24,31	29,62	—
	PDMA	30,17	25,21	19,96	20,04	23,81	32,96	47,89	65,42	89,32	121,21	166,82	—
ΔCS	DM	-69,14	-65,23	-61,05	-56,78	-52,70	-49,23	-46,97	-47,06	-52,13	-70,69	-162,52	—
	DMA	61,27	53,69	46,58	38,99	32,06	27,52	32,01	40,73	53,26	78,00	176,10	—
	PDMA	43,18	32,67	22,75	8,85	-3,55	-13,04	-10,63	-9,36	-12,95	-19,98	-15,31	—

Tabela 8.119: Constantes de acoplamento B3P86 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	357,7	381,4	405,4	429,5	454,0	478,6	503,5	528,5	553,8	579,3	605,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	23,1	21,3	19,5	17,5	15,5	13,4	11,3	9,1	6,8	4,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,2	-67,8	-70,3	-72,9	-75,5	-78,1	-80,8	-83,4	-86,1	-88,9	-91,6	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,6	-6,5	-7,6	-8,6	-9,6	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,3	41,1	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,0	-15,9	-16,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	138,4	146,6	154,6	162,6	170,5	178,2	185,8	193,3	200,6	207,8	214,8	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1804,0	-1778,3	-1748,1	-1714,4	-1677,8	-1638,8	-1598,0	-1555,9	-1512,8	-1469,1	-1425,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-175,5	-158,4	-141,4	-124,6	-107,9	-91,3	-74,9	-58,7	-42,7	-26,9	-11,3	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-81,4	-62,6	-44,1	-25,8	-7,7	10,1	27,8	45,3	62,7	79,9	96,9	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-287,8	-324,9	-362,3	-401,4	-444,6	-495,1	-558,7	-646,9	-786,4	-1061,9	-1993,1	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,8	122,3	123,8	125,4	127,0	128,6	130,2	131,8	133,5	135,2	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,4	-16,1	-16,8	-17,5	-18,2	-18,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,8	192,5	195,7	199,3	203,5	208,5	214,4	221,5	230,2	241,0	254,8	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,0	253,4	255,8	258,5	261,4	264,5	268,1	272,2	276,9	282,7	289,8	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,4	53,9	53,0	51,8	50,2	47,9	44,9	40,9	35,4	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,6	14,9	16,4	18,3	20,6	23,5	27,1	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,4	66,4	69,9	73,8	78,5	84,2	91,5	101,2	115,3	138,2	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,0	154,1	156,4	158,8	161,3	164,2	167,5	171,3	176,2	182,8	193,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,2	-5,9	-7,9	-10,6	-14,3	-19,7	-28,7	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,0	3,2	2,3	1,3	0,1	-1,2	-2,9	-5,2	-8,5	-13,8	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,2	21,1	26,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,6	18,9	19,3	19,9	20,5	21,4	22,5	24,1	26,3	29,6	35,2	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,0	27,0	29,0	31,1	33,2	35,3	37,5	39,7	41,9	44,2	46,5	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	121,1	122,8	124,5	126,2	128,0	129,8	131,6	133,4	135,3	137,1	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-28,82	-26,33	-23,66	-20,90	-18,13	-15,51	-13,22	-11,73	-11,99	-17,14	-46,96	—
	DMA	34,08	31,40	28,78	26,58	24,77	23,58	24,35	27,92	35,93	50,23	92,11	—
	PDMA	49,65	39,98	30,36	24,31	23,28	26,62	37,73	56,40	80,27	112,38	166,30	—
CPI	DM	-69,15	-64,51	-59,51	-54,40	-49,41	-44,91	-41,47	-40,19	-43,51	-59,17	-134,47	—
	DMA	75,05	69,29	63,20	56,93	50,97	45,78	44,82	49,65	64,02	91,79	182,15	—
	PDMA	85,57	70,65	56,01	41,19	28,15	17,73	22,91	39,30	58,67	82,62	127,73	—
SPI	DM	0,75	1,67	2,63	3,67	4,80	6,05	7,49	9,15	11,13	13,69	17,22	—
	DMA	4,05	3,62	3,55	4,33	5,55	7,29	9,33	11,99	15,34	19,75	26,09	—
	PDMA	23,32	17,48	11,56	11,93	19,71	33,15	48,59	68,95	96,12	134,20	194,58	—
ΔCS	DM	-69,91	-66,18	-62,14	-58,07	-54,21	-50,96	-48,97	-49,34	-54,64	-72,86	-151,69	—
	DMA	71,00	65,67	59,65	52,60	45,43	38,49	35,48	37,66	48,68	72,04	156,06	—
	PDMA	62,25	53,17	44,45	29,26	8,44	-15,42	-25,69	-29,65	-37,45	-51,57	-66,85	—

Tabela 8.120: Constantes de acoplamento B971 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	427,3	443,9	461,4	480,0	499,7	520,6	542,8	566,1	590,8	616,7	643,9	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	14,7	13,5	12,2	10,7	9,0	7,3	5,3	3,2	1,0	-1,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,7	-69,8	-72,1	-74,5	-77,0	-79,7	-82,5	-85,5	-88,8	-92,2	-95,7	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,6	38,6	39,6	40,7	41,9	43,1	44,4	45,9	47,3	48,9	50,6	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,9	168,1	174,7	181,6	188,9	196,6	204,6	213,1	221,9	231,1	240,7	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1613,6	-1608,3	-1597,4	-1581,8	-1562,1	-1539,1	-1513,4	-1485,6	-1456,2	-1425,8	-1394,8	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-145,0	-130,5	-115,6	-100,5	-85,1	-69,6	-54,0	-38,4	-22,8	-7,2	8,1	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-55,7	-38,9	-21,9	-4,7	12,4	29,7	47,1	64,5	81,9	99,3	116,8	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-189,8	-221,6	-254,8	-289,8	-327,7	-370,4	-421,2	-486,9	-582,5	-752,8	-1221,3	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	102,5	105,7	109,1	112,7	116,5	120,6	125,0	129,6	134,4	139,6	145,1	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-13,1	-14,4	-15,8	-17,3	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,1	190,1	194,4	199,4	205,0	211,6	219,4	228,8	240,5	255,4	275,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	200,6	207,3	214,3	221,7	229,5	237,9	247,0	256,9	268,0	280,6	295,5	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,5	53,0	53,2	53,0	52,5	51,2	49,1	45,6	40,1	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,2	6,6	7,1	7,6	8,4	9,3	10,5	12,0	14,0	16,7	20,5	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,4	66,1	69,1	72,5	76,4	80,8	86,2	92,8	101,2	112,9	130,5	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	130,5	135,2	140,1	145,4	151,2	157,4	164,3	172,1	181,3	193,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,9	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,8	-8,5	-12,5	-18,8	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,6	9,8	10,2	10,5	11,0	11,6	12,4	13,6	15,3	18,0	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,4	18,6	20,2	22,5	25,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,6	30,0	32,4	35,1	37,8	40,8	43,9	47,2	50,7	54,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	104,7	108,4	112,3	116,5	120,9	125,5	130,4	135,6	141,2	147,0	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,2	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,5
Total	DM	-16,64	-14,72	-12,53	-10,10	-7,48	-4,76	-2,04	0,38	2,00	1,17	-10,52	—
	DMA	28,75	24,27	19,53	14,83	12,45	11,98	14,82	20,84	28,73	41,48	67,88	—
	PDMA	58,42	48,88	38,94	28,67	18,85	15,67	21,98	35,14	55,59	82,29	121,51	—
CPI	DM	-29,88	-27,75	-25,09	-22,04	-18,75	-15,48	-12,55	-10,67	-11,29	-18,48	-52,63	—
	DMA	52,66	44,00	34,53	25,02	20,85	21,06	26,80	36,67	49,64	72,39	125,14	—
	PDMA	71,01	57,07	42,91	28,62	16,22	19,69	31,17	46,08	65,63	88,09	120,65	—
SPI	DM	-6,93	-5,17	-3,33	-1,34	0,79	3,10	5,67	8,49	11,75	15,59	20,35	—
	DMA	11,22	9,79	8,54	7,37	6,29	5,33	6,03	9,23	13,40	18,81	25,89	—
	PDMA	49,19	42,88	36,03	28,71	20,78	12,73	15,23	27,11	48,23	78,04	122,14	—
ΔCS	DM	-22,96	-22,58	-21,76	-20,70	-19,55	-18,58	-18,21	-19,17	-23,04	-34,07	-72,98	—
	DMA	41,44	34,21	25,99	17,65	14,56	15,74	20,77	27,45	36,24	53,58	99,25	—
	PDMA	21,82	14,19	6,88	-0,09	-4,57	6,96	15,93	18,97	17,40	10,05	-1,49	—

Tabela 8.121: Constantes de acoplamento B972 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,5	463,7	487,2	512,0	538,2	565,8	595,0	625,6	657,8	691,6	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	15,3	13,5	11,5	9,2	6,8	4,2	1,4	-1,6	-4,8	-8,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,8	-69,6	-72,5	-75,6	-78,9	-82,3	-86,0	-90,0	-94,1	-98,5	-103,1	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,2	-2,2	-3,2	-4,3	-5,5	-6,7	-8,0	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,3	37,5	38,9	40,3	41,8	43,4	45,1	47,0	48,9	50,9	53,1	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,7	-12,1	-13,6	-15,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	152,4	159,5	167,0	175,0	183,4	192,2	201,4	211,1	221,2	231,6	242,5	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1626,4	-1621,0	-1610,4	-1595,3	-1576,6	-1555,0	-1531,2	-1505,7	-1479,1	-1452,1	-1424,9	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-151,4	-134,7	-117,6	-100,3	-82,9	-65,4	-48,0	-30,7	-13,4	3,5	20,3	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-64,0	-44,6	-25,1	-5,4	14,1	33,8	53,5	73,1	92,7	112,2	131,6	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-187,3	-217,9	-249,8	-283,7	-320,6	-362,5	-412,9	-478,9	-577,4	-761,7	-1349,0	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	94,6	98,6	102,8	107,2	111,9	116,9	122,2	127,8	133,7	139,9	146,5	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,1	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,7	-11,9	-13,0	-14,3	-15,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	172,7	177,5	182,8	188,8	195,6	203,4	212,5	223,4	236,6	253,1	274,3	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	189,9	197,4	205,4	213,7	222,6	232,0	242,2	253,1	265,2	278,6	294,1	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,1	50,0	50,8	51,4	51,8	51,9	51,5	50,6	48,9	46,1	41,6	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	6,9	7,4	8,1	8,9	9,9	11,2	12,9	15,1	18,0	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	54,6	58,0	61,7	66,0	70,8	76,3	82,9	91,0	101,4	115,7	137,0	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,8	122,9	128,4	134,1	140,3	146,9	154,1	161,9	170,8	181,1	194,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-8,0	-11,9	-18,1	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	5,4	5,1	4,7	4,2	3,7	3,0	2,2	1,1	-0,5	-2,9	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,8	12,8	14,3	16,6	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,8	13,3	13,8	14,4	15,1	15,9	16,8	17,9	19,4	21,4	24,4	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,9	24,5	27,3	30,2	33,3	36,6	40,1	43,8	47,8	52,0	56,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	93,2	97,4	101,8	106,4	111,4	116,6	122,1	127,9	134,1	140,6	147,5	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,7	-6,5	-4,5
Total	DM	-20,65	-18,13	-15,31	-12,25	-9,00	-5,65	-2,35	0,65	2,77	1,98	-13,65	—
	DMA	32,07	26,88	21,52	15,77	12,58	12,67	16,09	22,52	31,33	44,28	75,06	—
	PDMA	62,56	52,06	41,66	30,61	20,25	18,83	24,83	35,42	55,00	81,60	121,33	—
CPI	DM	-33,61	-30,54	-26,92	-22,92	-18,78	-14,65	-11,00	-8,49	-8,71	-16,62	-61,02	—
	DMA	57,12	47,41	37,12	26,03	20,51	22,15	31,27	42,55	57,22	79,85	142,42	—
	PDMA	77,34	60,59	45,07	29,28	15,50	23,36	37,80	54,67	76,38	101,12	139,31	—
SPI	DM	-11,15	-9,03	-6,79	-4,42	-1,83	0,95	3,99	7,35	11,18	15,63	21,08	—
	DMA	13,71	11,82	10,09	8,25	6,76	5,72	4,96	7,84	12,35	18,19	25,67	—
	PDMA	51,71	45,80	39,16	31,59	23,74	15,52	15,32	21,30	39,33	67,28	108,15	—
ΔCS	DM	-22,46	-21,50	-20,12	-18,50	-16,96	-15,60	-14,99	-15,84	-19,89	-32,24	-82,10	—
	DMA	43,41	35,59	27,03	17,78	13,75	16,43	26,31	34,71	44,86	61,67	116,75	—
	PDMA	25,63	14,79	5,91	-2,31	-8,24	7,84	22,48	33,37	37,05	33,84	31,16	—

Tabela 8.122: Constantes de acoplamento B98 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,6	428,1	445,8	464,6	484,6	505,9	528,5	552,5	577,9	604,8	633,1	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	15,5	14,2	12,8	11,2	9,5	7,7	5,6	3,4	1,0	-1,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-68,2	-70,5	-73,0	-75,6	-78,4	-81,4	-84,6	-88,1	-91,7	-95,6	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,7	-14,6	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	49,6	51,5	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,9	-16,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	172,2	179,0	186,1	193,7	201,7	210,1	218,9	228,1	237,8	247,9	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1622,6	-1617,6	-1607,1	-1591,6	-1572,1	-1549,1	-1523,4	-1495,6	-1466,2	-1435,7	-1404,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,1	-135,5	-120,6	-105,2	-89,6	-73,8	-57,8	-41,8	-25,7	-9,6	6,2	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,5	-44,7	-27,7	-10,4	7,0	24,5	42,2	60,0	77,9	95,8	113,8	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-196,5	-228,9	-262,8	-298,9	-338,2	-383,0	-437,3	-509,0	-617,4	-823,5	-1507,1	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	104,7	108,5	112,6	116,9	121,5	126,5	131,7	137,3	143,2	149,5	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-15,0	-16,5	-18,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,5	188,8	193,5	198,9	205,0	212,2	220,6	230,9	243,6	260,0	282,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	198,0	205,3	212,9	221,1	229,7	239,0	249,0	260,0	272,3	286,5	303,3	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	51,5	52,3	52,9	53,2	53,2	52,6	51,4	49,2	45,4	39,3	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,6	12,3	14,5	17,5	21,7	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,2	65,2	68,5	72,2	76,4	81,3	87,2	94,5	104,0	117,4	138,3	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	129,2	134,3	139,8	145,7	152,0	158,9	166,6	175,4	185,9	199,6	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,8	-2,1	-3,8	-6,0	-9,0	-13,5	-20,9	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,4	5,0	4,5	3,9	3,2	2,3	1,2	-0,3	-2,5	-6,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	13,9	15,9	19,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,1	13,6	14,2	14,9	15,6	16,5	17,6	18,9	20,8	23,3	27,5	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,9	29,5	32,2	35,1	38,2	41,5	45,0	48,8	52,8	57,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,8	103,7	107,8	112,1	116,8	121,7	127,0	132,5	138,4	144,7	151,4	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,9	-7,9	-4,5
Total	DM	-18,51	-16,52	-14,24	-11,69	-8,95	-6,11	-3,32	-0,86	0,57	-1,25	-20,70	—
	DMA	30,09	25,45	20,57	16,42	13,98	13,18	15,78	22,09	30,86	44,73	80,16	—
	PDMA	59,88	49,87	39,84	29,53	19,77	14,03	20,72	36,30	58,35	87,77	134,55	—
CPI	DM	-33,21	-31,15	-28,55	-25,55	-22,32	-19,12	-16,40	-14,95	-16,55	-26,78	-80,27	—
	DMA	55,19	46,33	36,79	28,76	24,63	24,12	28,25	38,13	52,51	77,00	149,64	—
	PDMA	75,19	60,26	46,12	32,28	19,77	17,08	28,15	44,42	64,96	89,07	129,18	—
SPI	DM	-7,73	-5,80	-3,75	-1,53	0,85	3,43	6,28	9,47	13,13	17,47	22,99	—
	DMA	11,69	10,13	8,68	7,36	6,17	5,15	6,63	10,33	14,98	21,06	29,21	—
	PDMA	48,66	42,26	35,24	27,51	19,78	11,79	15,27	30,34	53,49	86,83	138,49	—
ΔCS	DM	-25,48	-25,35	-24,81	-24,01	-23,16	-22,55	-22,68	-24,41	-29,67	-44,26	-103,26	—
	DMA	43,50	36,19	28,11	21,40	18,46	18,96	21,63	27,79	37,53	55,94	120,42	—
	PDMA	26,52	18,00	10,88	4,78	-0,01	5,30	12,88	14,09	11,47	2,24	-9,31	—

Tabela 8.123: Constantes de acoplamento BHandH e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,1	462,4	484,4	507,2	530,8	555,3	580,6	606,9	634,2	662,5	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	22,9	20,9	18,7	16,3	13,7	11,0	8,0	4,9	1,6	-1,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-72,4	-75,1	-77,8	-80,7	-83,7	-86,9	-90,2	-93,7	-97,3	-101,1	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,4	-5,5	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,3	-13,9	-15,6	-17,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	40,5	41,7	42,9	44,2	45,5	47,0	48,5	50,0	51,7	53,4	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,5	-7,5	-8,7	-9,9	-11,1	-12,5	-13,9	-15,4	-17,0	-18,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,5	144,3	153,5	163,0	172,9	183,1	193,7	204,6	215,9	227,4	239,2	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1814,4	-1797,1	-1773,1	-1743,5	-1709,0	-1670,4	-1628,3	-1583,4	-1536,2	-1487,3	-1437,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,4	-169,5	-151,2	-132,8	-114,0	-95,2	-76,1	-57,0	-37,8	-18,6	0,6	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,8	-61,1	-42,3	-23,3	-4,1	15,1	34,6	54,2	73,9	93,8	113,8	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,1	-308,2	-344,0	-380,5	-419,8	-465,0	-521,4	-600,0	-727,9	-1000,8	-2253,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	109,4	113,0	116,8	120,7	124,9	129,4	134,0	138,9	144,0	149,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-18,4	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	179,6	184,2	189,4	195,4	202,4	210,6	220,6	232,8	248,3	268,4	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,4	232,3	238,4	245,0	252,0	259,5	267,8	276,9	287,3	299,2	313,5	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,3	53,0	52,2	50,7	48,2	44,2	38,1	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,4	15,5	18,1	21,5	26,0	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,4	53,8	57,6	61,8	66,7	72,3	78,9	87,3	98,2	113,8	139,0	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,2	140,5	145,0	149,9	155,0	160,6	166,8	173,7	181,8	191,8	205,7	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,2	-0,4	-1,3	-2,4	-3,8	-5,6	-8,0	-11,4	-16,5	-25,4	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,0	4,4	3,8	3,1	2,2	1,1	-0,1	-2,0	-4,7	-9,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	14,1	15,2	16,8	19,3	23,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,3	16,7	17,3	17,9	18,7	19,6	20,8	22,4	24,5	27,6	32,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,7	21,3	24,0	26,9	30,0	33,3	36,7	40,4	44,3	48,4	52,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,1	109,7	113,4	117,3	121,5	125,8	130,4	135,2	140,2	145,4	150,9	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-4,5
Total	DM	-30,64	-28,00	-24,98	-21,65	-18,08	-14,46	-10,92	-7,88	-6,37	-9,91	-50,34	—
	DMA	35,38	31,38	28,05	24,46	21,36	19,97	23,28	29,93	39,09	54,63	109,57	—
	PDMA	59,01	48,09	37,36	25,99	16,41	13,67	27,48	47,29	72,14	105,47	165,55	—
CPI	DM	-64,32	-60,54	-55,97	-50,90	-45,49	-40,19	-35,45	-32,40	-33,53	-47,58	-150,53	—
	DMA	72,52	65,06	59,26	52,85	46,25	40,65	44,10	54,71	70,02	98,55	217,07	—
	PDMA	88,71	72,44	56,84	40,59	24,66	13,62	26,78	47,60	70,46	98,42	157,92	—
SPI	DM	-5,94	-4,15	-2,25	-0,19	2,02	4,41	7,07	10,09	13,55	17,72	23,13	—
	DMA	8,14	6,68	5,15	3,65	3,10	4,80	8,01	11,76	16,41	22,43	30,73	—
	PDMA	37,23	30,23	23,08	15,29	10,35	13,70	27,99	47,06	73,37	110,64	171,15	—
ΔCS	DM	-58,38	-56,39	-53,73	-50,71	-47,51	-44,60	-42,52	-42,49	-47,08	-65,30	-173,66	—
	DMA	64,38	58,38	54,11	49,20	43,15	35,85	36,09	42,95	53,61	76,12	186,34	—
	PDMA	51,48	42,21	33,76	25,30	14,31	-0,09	-1,21	0,53	-2,91	-12,22	-13,23	—

Tabela 8.124: Constantes de acoplamento BMK e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,4	502,8	515,2	528,7	543,5	559,7	577,4	597,0	618,7	642,5	669,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,8	14,3	14,6	14,8	14,8	14,6	14,1	13,3	12,0	10,2	7,7	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-72,8	-73,4	-74,1	-74,9	-75,9	-77,0	-78,3	-79,8	-81,4	-83,3	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,8	0,6	-0,5	-1,8	-3,2	-4,7	-6,4	-8,1	-10,0	-12,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,5	36,6	36,7	36,8	37,1	37,4	37,7	38,2	38,7	39,3	40,0	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,6	-2,5	-3,5	-4,7	-5,9	-7,2	-8,7	-10,3	-12,0	-13,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,8	125,4	125,4	126,0	127,0	128,5	130,5	133,0	136,1	139,7	144,0	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1529,4	-1527,6	-1517,9	-1500,7	-1476,3	-1445,2	-1408,2	-1365,9	-1319,0	-1268,4	-1214,4	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-143,1	-131,7	-118,2	-102,8	-85,4	-66,1	-44,9	-21,9	2,7	29,1	56,9	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,1	-37,2	-21,4	-3,8	15,4	36,6	59,4	84,1	110,4	138,4	167,9	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-147,5	-173,9	-201,0	-228,4	-256,0	-284,4	-314,8	-349,2	-392,3	-454,2	-567,5	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	104,7	106,5	108,7	111,2	114,2	117,5	121,3	125,7	130,7	136,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,0	-4,0	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,9	-12,8	-14,9	-17,3	-20,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	244,5	249,2	254,4	260,5	267,6	276,3	287,2	301,5	321,1	349,5	394,6	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	177,9	184,0	190,5	197,6	205,4	214,0	223,8	235,3	249,0	266,5	290,8	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	55,3	56,0	56,5	56,6	56,3	55,2	53,0	49,0	41,7	28,3	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,3	5,6	6,0	6,5	7,2	8,2	9,5	11,3	13,9	17,8	24,2	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	89,5	91,0	92,9	95,3	98,2	101,8	106,6	112,8	121,5	134,4	155,3	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	123,6	127,2	131,1	135,5	140,5	146,3	153,0	161,2	171,5	185,9	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,5	3,6	2,6	1,5	0,1	-1,4	-3,4	-6,0	-9,7	-15,1	-24,0	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,7	7,2	6,6	5,8	4,9	3,8	2,5	0,7	-1,4	-4,6	-9,6	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,3	9,4	9,6	9,8	10,2	10,7	11,5	12,8	14,9	18,6	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,3	11,8	12,3	12,9	13,5	14,3	15,3	16,6	18,4	21,1	25,6	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	31,0	32,1	33,3	34,8	36,5	38,5	40,7	43,3	46,4	49,9	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,4	103,3	105,6	108,2	111,1	114,4	118,2	122,5	127,3	132,8	139,1	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	0,0	-0,8	-1,5	-2,4	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,1	-9,7	-4,5
Total	DM	-7,82	-6,73	-5,09	-2,87	-0,08	3,31	7,25	11,72	16,65	21,88	26,66	—
	DMA	30,38	27,39	23,79	19,63	15,82	14,43	18,38	23,55	31,28	42,80	58,96	—
	PDMA	72,95	64,06	53,89	42,55	29,95	26,13	29,15	42,76	64,69	98,60	148,68	—
CPI	DM	-15,39	-14,49	-12,49	-9,36	-5,16	0,05	6,07	12,70	19,42	25,25	27,17	—
	DMA	46,12	39,98	32,56	23,95	16,07	14,00	24,35	36,83	50,96	68,10	91,17	—
	PDMA	76,36	64,46	51,11	36,54	20,85	27,77	41,03	55,52	71,54	94,34	122,55	—
SPI	DM	-2,27	-1,03	0,34	1,90	3,65	5,70	8,11	10,99	14,63	19,41	26,29	—
	DMA	18,85	18,15	17,35	16,47	15,63	14,74	14,00	13,81	16,84	24,25	35,34	—
	PDMA	70,45	63,76	55,93	46,97	36,62	24,93	20,44	33,41	59,66	101,73	167,84	—
ΔCS	DM	-13,12	-13,46	-12,83	-11,26	-8,81	-5,65	-2,03	1,71	4,79	5,84	0,89	—
	DMA	27,27	21,83	15,21	7,47	0,44	-0,74	10,35	23,02	34,12	43,85	55,83	—
	PDMA	5,91	0,70	-4,82	-10,42	-15,77	2,85	20,58	22,11	11,87	-7,39	-45,30	—

Tabela 8.125: Constantes de acoplamento BP86 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	355,3	378,9	402,8	426,9	451,3	475,8	500,7	525,7	551,0	576,5	602,2	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,7	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,8	-67,3	-69,8	-72,4	-75,0	-77,6	-80,2	-82,9	-85,5	-88,3	-91,0	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,5	-8,5	-9,6	-10,6	-11,7	-12,8	-13,9	-15,1	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,0	40,7	41,5	42,2	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,8	-16,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	136,9	144,9	152,8	160,7	168,4	176,0	183,5	190,8	198,1	205,1	212,1	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1802,5	-1777,4	-1747,9	-1714,7	-1678,5	-1639,9	-1599,5	-1557,7	-1514,9	-1471,4	-1427,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,9	-160,9	-144,0	-127,2	-110,6	-94,0	-77,7	-61,5	-45,5	-29,7	-14,1	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,6	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,3	60,6	77,8	94,8	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,1	-327,4	-365,0	-404,4	-447,8	-498,7	-562,6	-651,0	-790,4	-1064,3	-1973,1	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,5	118,9	120,4	121,9	123,4	124,9	126,5	128,1	129,7	131,4	133,0	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,2	-13,9	-14,6	-15,3	-16,1	-16,8	-17,5	-18,1	-18,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,3	189,9	193,0	196,5	200,6	205,4	211,1	218,0	226,4	236,9	250,2	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,4	249,7	252,1	254,7	257,5	260,6	264,1	268,1	272,8	278,4	285,3	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,1	51,9	50,3	48,1	45,2	41,3	35,9	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,4	18,2	20,5	23,3	26,9	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,5	62,2	65,2	68,5	72,4	76,9	82,4	89,4	98,7	112,2	133,8	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	151,8	154,0	156,3	158,8	161,6	164,7	168,5	173,2	179,6	189,3	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,3	-13,9	-19,1	-27,6	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,9	3,1	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,2	-8,4	-13,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,1	21,0	25,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	18,9	19,3	19,8	20,4	21,3	22,4	23,9	26,1	29,3	34,7	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	26,2	28,2	30,2	32,3	34,4	36,5	38,7	40,9	43,2	45,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,6	119,2	120,9	122,6	124,3	126,0	127,8	129,6	131,3	133,2	135,0	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-29,70	-27,27	-24,65	-21,95	-19,23	-16,67	-14,43	-12,98	-13,29	-18,44	-47,49	—
	DMA	34,52	31,91	29,18	26,70	24,77	23,50	23,89	27,40	34,96	49,12	89,79	—
	PDMA	50,37	40,83	31,25	24,74	23,84	26,46	36,13	54,45	77,83	109,27	161,26	—
CPI	DM	-69,95	-65,41	-60,53	-55,50	-50,59	-46,18	-42,81	-41,58	-44,93	-60,49	-133,76	—
	DMA	75,95	70,34	64,35	58,17	52,23	47,09	45,30	50,09	63,51	91,13	179,00	—
	PDMA	87,25	72,59	57,87	43,20	29,93	19,25	21,38	37,63	56,69	80,57	124,88	—
SPI	DM	-0,19	0,71	1,66	2,65	3,76	4,98	6,37	7,99	9,91	12,40	15,77	—
	DMA	4,14	3,73	3,39	3,63	4,63	6,19	8,19	10,76	14,02	18,31	24,37	—
	PDMA	23,32	17,55	11,73	11,21	19,38	31,75	46,95	66,78	93,33	130,31	187,93	—
ΔCS	DM	-69,75	-66,12	-62,19	-58,15	-54,35	-51,16	-49,18	-49,57	-54,84	-72,89	-149,54	—
	DMA	71,81	66,60	60,95	54,55	47,60	40,90	37,11	39,33	49,49	72,82	154,63	—
	PDMA	63,93	55,04	46,14	31,99	10,55	-12,50	-25,57	-29,15	-36,64	-49,74	-63,05	—

Tabela 8.126: Constantes de acoplamento BPW91 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	353,3	377,4	401,9	426,6	451,5	476,7	502,2	527,9	553,8	579,9	606,3	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,2	23,6	21,8	20,0	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,5	-70,1	-72,7	-75,4	-78,1	-80,8	-83,5	-86,3	-89,1	-91,9	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,2	-11,3	-12,5	-13,6	-14,8	-16,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,7	47,5	48,4	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,7	-15,7	-16,7	-17,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,6	153,9	162,0	170,1	178,0	185,8	193,4	200,9	208,3	215,5	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,6	-1784,5	-1754,1	-1720,0	-1683,1	-1643,8	-1602,7	-1560,3	-1516,9	-1472,9	-1428,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,0	-160,8	-143,8	-126,8	-110,0	-93,3	-76,8	-60,4	-44,3	-28,3	-12,5	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,5	-45,8	-27,4	-9,1	8,9	26,7	44,5	62,0	79,4	96,6	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,7	-329,9	-368,6	-409,2	-454,4	-507,7	-575,7	-671,4	-827,4	-1153,6	-2525,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	121,9	123,5	125,1	126,7	128,4	130,0	131,7	133,4	135,2	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,7	193,9	197,7	202,2	207,5	213,8	221,6	231,2	243,3	259,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	253,6	256,2	259,1	262,1	265,6	269,5	274,1	279,5	286,1	294,6	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,1	46,5	42,8	37,9	31,2	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	22,8	26,3	30,7	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,7	65,9	69,5	73,7	78,7	84,9	93,0	104,3	121,5	152,0	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	154,1	156,4	158,9	161,6	164,7	168,3	172,6	178,2	186,4	200,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,4	-16,8	-23,7	-36,2	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,3	2,5	1,5	0,4	-0,8	-2,4	-4,5	-7,4	-11,7	-19,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,3	14,0	14,8	16,0	17,7	20,1	24,0	31,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,7	25,6	28,4	32,8	40,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,5	28,5	30,6	32,7	34,8	37,0	39,2	41,5	43,8	46,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	120,9	122,6	124,4	126,2	128,0	129,8	131,7	133,5	135,4	137,3	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,78	-27,29	-24,61	-21,82	-19,06	-16,45	-14,24	-12,88	-13,59	-20,41	-66,63	—
	DMA	34,85	32,22	29,63	27,48	25,84	24,72	25,51	29,57	38,51	55,29	114,95	—
	PDMA	48,49	38,46	30,39	27,73	29,15	32,81	44,67	65,74	92,95	131,74	204,82	—
CPI	DM	-71,04	-66,40	-61,43	-56,32	-51,41	-47,05	-43,90	-43,17	-47,88	-68,05	-183,29	—
	DMA	76,89	71,15	65,03	58,86	53,06	48,00	46,70	52,17	68,05	100,52	230,44	—
	PDMA	86,55	71,65	56,69	42,80	30,62	20,41	23,58	40,46	60,54	86,43	145,70	—
SPI	DM	0,48	1,39	2,39	3,49	4,67	6,00	7,51	9,33	11,55	14,52	18,91	—
	DMA	4,03	3,68	3,67	4,47	5,88	7,65	9,97	12,99	16,85	22,12	30,26	—
	PDMA	20,57	14,13	11,11	16,69	28,06	41,90	60,14	84,29	116,72	164,97	248,18	—
ΔCS	DM	-71,52	-67,79	-63,81	-59,80	-56,08	-53,05	-51,41	-52,50	-59,44	-82,57	-202,20	—
	DMA	72,86	67,47	61,36	54,39	47,18	40,35	36,73	39,18	51,20	78,40	200,18	—
	PDMA	65,97	57,52	45,58	26,11	2,56	-21,49	-36,56	-43,83	-56,18	-78,54	-102,47	—

Tabela 8.127: Constantes de acoplamento M05 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	847,0	840,1	833,5	827,3	821,4	815,9	810,8	805,8	801,1	796,4	791,7	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	13,7	11,3	8,5	5,3	1,7	-2,1	-6,2	-10,7	-15,5	-20,5	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-108,9	-108,7	-108,5	-108,3	-108,2	-108,0	-108,0	-108,0	-108,0	-108,1	-108,2	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-18,6	-18,7	-18,7	-18,6	-18,3	-17,9	-17,4	-16,7	-15,9	-15,0	-13,9	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,1	42,3	43,4	44,5	45,6	46,7	47,8	48,8	49,8	50,8	51,7	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-14,4	-15,2	-15,9	-16,4	-16,7	-16,9	-16,8	-16,5	-15,9	-15,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,5	166,8	168,2	173,0	180,3	188,9	198,1	207,2	215,9	224,1	231,8	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1357,6	-1376,0	-1386,5	-1388,9	-1383,6	-1372,0	-1355,3	-1334,8	-1311,8	-1287,0	-1261,2	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	2,2	8,2	14,9	22,3	30,5	39,5	49,5	60,5	72,8	86,3	101,3	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	102,9	111,1	119,8	129,1	139,0	149,8	161,4	174,1	187,8	202,7	218,9	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-218,9	-253,7	-282,8	-307,6	-330,0	-351,6	-374,7	-402,2	-439,1	-494,9	-592,4	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	80,9	87,2	93,5	99,8	106,1	112,4	118,7	125,0	131,1	137,1	142,9	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-20,8	-21,1	-21,2	-21,2	-21,0	-20,8	-20,4	-19,8	-19,2	-18,5	-17,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	182,9	192,0	201,6	211,8	222,6	234,0	246,1	258,8	272,4	286,7	302,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	223,0	232,1	240,9	249,5	257,6	265,4	272,7	279,3	285,2	290,2	294,4	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	35,8	36,1	36,4	36,6	36,7	36,7	36,8	36,7	36,4	35,9	34,9	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	19,6	20,1	20,4	20,6	20,7	20,7	20,6	20,4	20,2	20,1	20,2	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,9	64,1	70,7	77,9	85,7	94,1	103,3	113,2	123,9	135,6	148,4	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	127,7	135,5	143,2	150,8	158,4	165,8	173,1	180,1	187,0	193,6	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,4	-12,2	-13,1	-14,1	-15,1	-16,2	-17,3	-18,4	-19,6	-20,9	-22,4	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-16,0	-15,7	-15,1	-14,4	-13,6	-12,6	-11,4	-10,1	-8,8	-7,5	-6,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,5	15,2	15,8	16,3	16,7	17,0	17,2	17,3	17,3	17,3	17,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	15,6	17,0	18,2	19,4	20,5	21,4	22,2	22,9	23,4	23,9	24,4	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	15,2	18,5	21,9	25,6	29,4	33,3	37,5	41,9	46,4	51,2	56,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	80,1	86,6	93,0	99,5	106,0	112,6	119,1	125,6	132,0	138,4	144,6	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,5
Total	DM	14,13	14,15	14,89	16,33	18,34	20,78	23,52	26,32	28,95	31,01	31,60	—
	DMA	36,39	33,58	31,57	32,45	34,05	36,21	39,49	44,02	49,74	56,38	64,82	—
	PDMA	102,83	104,67	106,74	110,90	115,60	120,43	126,10	132,40	139,72	147,94	157,96	—
CPI	DM	51,32	46,84	43,99	42,72	42,74	43,71	45,25	46,93	48,17	48,04	44,41	—
	DMA	63,75	59,87	57,19	59,61	62,97	66,91	72,17	79,45	88,03	98,65	113,35	—
	PDMA	80,42	85,90	92,12	100,50	109,20	118,38	128,39	139,52	151,58	164,82	180,05	—
SPI	DM	-13,15	-9,81	-6,45	-3,02	0,45	3,97	7,58	11,21	14,85	18,53	22,21	—
	DMA	16,32	14,29	12,77	12,54	12,84	13,69	15,53	18,03	21,66	25,38	29,23	—
	PDMA	119,27	118,43	117,46	118,53	120,28	121,94	124,42	127,19	131,03	135,55	141,77	—
ΔCS	DM	64,46	56,65	50,44	45,74	42,28	39,74	37,67	35,71	33,33	29,51	22,20	—
	DMA	47,43	45,58	44,42	47,07	50,13	53,22	56,65	61,43	66,37	73,27	84,12	—
	PDMA	-38,85	-32,52	-25,34	-18,02	-11,08	-3,56	3,97	12,32	20,55	29,28	38,28	—

Tabela 8.128: Constantes de acoplamento M06 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	591,8	620,1	652,6	690,1	733,4	782,9	838,6	900,5	967,8	1039,5	1113,9	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	17,6	17,9	17,8	17,0	15,4	13,0	9,5	5,0	-0,8	-7,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-86,0	-90,6	-96,1	-102,7	-110,6	-120,0	-131,2	-144,5	-160,2	-178,9	-201,1	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-9,1	-13,3	-18,4	-24,8	-32,8	-42,7	-54,9	-70,2	-89,3	-113,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,2	46,1	49,6	53,7	58,6	64,4	71,6	80,3	91,1	104,7	122,2	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-10,7	-14,6	-19,7	-26,3	-35,0	-46,5	-62,0	-83,1	-112,3	-153,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	199,3	214,4	232,5	254,5	281,6	315,1	357,5	411,8	483,2	577,7	701,3	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1437,2	-1476,6	-1508,9	-1533,6	-1552,2	-1567,1	-1579,5	-1588,2	-1591,0	-1586,1	-1573,4	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-67,3	-57,9	-46,0	-31,5	-14,7	3,7	22,9	41,7	58,7	71,6	75,6	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	27,0	39,1	53,4	70,2	89,7	111,5	135,2	160,1	185,6	211,4	237,7	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-161,1	-211,1	-265,9	-328,2	-406,1	-530,0	-975,7	4267,8	-15,5	-222,3	-320,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,3	114,7	128,4	144,8	164,8	189,3	219,9	258,9	309,9	379,0	477,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-16,6	-21,5	-27,9	-36,3	-47,3	-62,2	-82,8	-112,3	-156,2	-225,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	161,7	170,7	182,5	199,5	227,4	285,4	502,3	-632,7	-14,0	128,2	5815,3	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,8	237,3	271,3	313,1	367,7	450,4	661,2	-166,8	360,7	495,3	-161,9	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,7	51,3	51,6	49,0	39,6	9,0	-141,1	758,3	315,4	282,8	1065,0	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,6	9,7	13,2	19,3	31,2	60,3	184,0	-514,8	-158,3	-117,3	-2,3	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,1	54,6	59,6	67,7	83,1	126,0	1247,1	-64,0	-10,1	6,5	13,8	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,3	146,9	166,9	191,8	225,2	282,2	1104,7	218,8	304,5	376,2	458,4	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,7	-0,9	-3,5	-8,1	-17,7	-46,3	-834,9	91,9	56,9	48,8	48,6	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-5,9	-9,6	-15,6	-26,7	-56,4	-792,0	61,8	21,0	1,6	-16,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,0	12,5	14,7	18,6	26,8	52,5	782,6	-78,9	-49,1	-45,4	-50,8	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,1	14,6	18,1	23,5	33,7	62,4	821,1	-67,9	-32,7	-23,3	-21,2	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,1	22,9	26,4	30,8	36,4	43,5	52,9	65,7	83,6	110,1	152,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	113,2	127,4	144,5	165,3	190,7	222,4	262,9	316,0	388,7	493,8	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,6	-4,2	-6,2	-8,8	-12,3	-17,2	-24,3	-34,8	-51,6	-80,4	-4,5
Total	DM	2,57	4,50	7,53	11,94	18,10	27,34	104,90	162,37	51,60	67,38	306,17	—
	DMA	14,96	13,68	17,32	28,76	46,90	76,80	322,61	351,02	132,10	141,45	416,70	—
	PDMA	33,15	33,58	50,03	90,01	161,76	331,76	3793,60	854,73	480,83	472,01	740,71	—
CPI	DM	19,80	16,89	15,06	14,25	13,65	10,24	-21,12	466,05	88,72	83,61	89,55	—
	DMA	20,58	24,95	31,46	45,92	66,66	93,29	151,59	522,98	156,45	163,68	190,90	—
	PDMA	18,81	22,40	40,46	64,81	95,47	133,09	189,41	362,74	287,15	354,68	445,95	—
SPI	DM	-10,06	-4,58	2,01	10,25	21,37	39,89	197,31	-60,33	24,37	55,49	465,01	—
	DMA	10,83	5,42	6,95	16,18	32,41	64,71	448,02	224,91	114,25	125,14	582,28	—
	PDMA	43,66	41,78	57,06	108,49	210,37	477,45	6436,66	1215,51	622,86	558,05	956,87	—
ΔCS	DM	29,86	21,47	13,05	4,00	-7,73	-29,65	-218,43	526,39	64,34	28,12	-375,46	—
	DMA	9,75	19,53	24,52	29,74	34,25	28,58	-296,43	298,08	42,19	38,54	-391,38	—
	PDMA	-24,86	-19,38	-16,60	-43,68	-114,90	-344,35	-6247,25	-852,77	-335,71	-203,37	-510,92	—

Tabela 8.129: Constantes de acoplamento M062X e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	445,9	449,4	453,4	459,1	467,4	479,5	496,4	519,2	548,9	586,4	632,6	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	3,7	4,7	5,7	6,6	7,2	7,4	7,1	6,0	3,7	-0,2	-6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,4	-75,6	-78,2	-81,3	-85,0	-89,5	-95,0	-101,7	-109,8	-119,5	-131,3	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,0	1,5	-0,3	-2,7	-5,7	-9,5	-14,4	-20,5	-28,2	-38,1	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,2	40,2	42,4	45,0	48,0	51,6	55,9	60,9	66,9	74,2	83,1	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,7	-2,1	-4,0	-6,4	-9,5	-13,6	-18,9	-25,9	-35,2	-47,6	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,0	134,2	137,3	142,7	150,6	161,6	176,1	195,1	219,2	250,0	289,5	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1442,3	-1488,8	-1533,3	-1573,0	-1603,7	-1622,0	-1627,6	-1623,0	-1612,8	-1602,7	-1596,7	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-166,8	-163,3	-156,4	-146,7	-135,1	-122,1	-107,7	-92,3	-75,9	-58,8	-41,4	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-89,3	-80,2	-68,9	-56,0	-41,7	-26,4	-10,0	7,5	26,7	47,8	70,9	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-156,6	-199,7	-246,2	-295,8	-348,4	-404,9	-468,8	-550,1	-685,1	-1305,2	-2162,3	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	86,4	93,7	102,1	112,1	123,7	137,5	153,9	173,6	197,4	226,6	262,9	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,2	-1,3	-2,8	-4,8	-7,3	-10,5	-14,7	-20,1	-27,3	-36,8	-49,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	167,7	174,7	182,9	192,6	204,6	220,1	241,5	273,9	331,7	472,8	1542,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	142,4	159,4	178,9	201,1	226,7	256,7	292,4	336,8	397,0	500,5	1037,2	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	46,7	49,1	51,6	53,9	55,8	56,9	56,2	51,7	36,8	-14,6	-491,4	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	4,3	4,8	5,3	6,0	7,0	8,5	10,9	15,4	24,8	51,4	274,4	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,5	63,3	67,0	71,7	78,0	86,7	99,5	120,7	162,3	284,8	14163,1	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	99,2	109,3	120,9	134,4	150,2	169,0	192,0	221,3	263,2	345,6	6656,1	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	6,3	5,6	4,7	3,5	1,7	-1,0	-5,4	-13,2	-30,1	-83,1	-6358,9	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,0	7,0	6,8	6,4	5,7	4,4	2,2	-1,8	-10,4	-37,0	-3080,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,1	9,5	9,9	10,5	11,2	12,3	14,1	17,4	24,8	49,5	3090,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	9,4	10,7	12,0	13,6	15,4	17,7	20,8	25,9	35,5	63,8	3278,1	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,4	29,9	33,0	36,6	41,1	46,4	53,0	61,2	71,5	84,8	102,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	84,0	91,7	100,8	111,4	123,8	138,4	155,8	176,6	201,7	232,6	271,0	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,5	0,7	-0,2	-1,5	-3,0	-5,0	-7,5	-10,8	-15,3	-21,7	-4,5
Total	DM	-16,82	-17,48	-17,60	-16,98	-15,40	-12,56	-8,31	-2,55	4,50	1,83	686,18	—
	DMA	31,69	28,56	25,19	22,33	22,10	25,09	31,01	39,82	59,30	117,06	1625,02	—
	PDMA	91,00	82,25	71,75	60,56	47,86	34,21	36,18	72,25	151,85	379,69	20883,81	—
CPI	DM	-18,06	-24,75	-30,94	-36,29	-40,48	-43,23	-44,75	-46,11	-50,92	-98,81	-167,60	—
	DMA	47,35	45,43	42,15	39,45	43,25	45,54	47,09	49,38	65,03	133,61	226,96	—
	PDMA	106,57	96,87	84,57	71,49	59,98	46,92	38,70	41,02	61,28	117,07	189,18	—
SPI	DM	-15,91	-12,15	-7,82	-2,82	3,00	9,93	18,41	29,39	45,13	75,63	1312,28	—
	DMA	20,21	16,19	12,75	9,78	6,60	10,09	19,22	32,81	55,09	104,93	2650,27	—
	PDMA	79,59	71,53	62,35	52,55	38,97	24,88	34,34	95,14	218,27	572,28	36059,87	—
ΔCS	DM	-2,15	-12,61	-23,12	-33,47	-43,48	-53,16	-63,15	-75,50	-96,05	-174,44	-1479,88	—
	DMA	27,15	29,24	29,40	29,67	36,65	35,44	27,87	16,57	9,93	28,68	-2423,30	—
	PDMA	26,98	25,34	22,22	18,95	21,01	22,04	4,36	-54,13	-156,99	-455,21	-35870,68	—

Tabela 8.130: Constantes de acoplamento OLYP e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	363,4	391,6	420,1	449,1	478,5	508,2	538,4	568,9	599,7	630,9	662,5	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,0	21,8	19,5	17,1	14,6	12,0	9,4	6,6	3,8	0,9	-1,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-69,4	-72,7	-76,1	-79,5	-83,0	-86,5	-90,1	-93,7	-97,3	-101,1	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-17,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,5	42,7	44,0	45,3	46,6	47,9	49,3	50,6	52,0	53,4	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,7	-16,7	-17,7	-18,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,8	167,5	176,1	184,5	192,8	201,0	209,0	216,8	224,5	231,9	239,2	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1702,2	-1685,7	-1665,4	-1642,0	-1616,2	-1588,5	-1559,4	-1529,4	-1498,8	-1467,9	-1437,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-181,4	-160,8	-140,7	-121,1	-102,0	-83,5	-65,6	-48,2	-31,4	-15,1	0,6	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-90,5	-67,4	-45,0	-23,1	-1,8	18,8	38,9	58,4	77,4	95,8	113,8	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-254,6	-290,9	-327,9	-367,1	-410,6	-461,8	-526,5	-616,5	-760,6	-1056,6	-2253,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,2	121,1	124,1	127,1	130,2	133,3	136,4	139,6	142,9	146,1	149,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,4	192,0	197,1	202,6	208,8	215,7	223,5	232,3	242,5	254,4	268,4	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,4	258,1	263,0	268,0	273,2	278,7	284,6	290,9	297,7	305,1	313,5	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,0	52,8	52,4	51,7	50,7	49,3	47,6	45,2	42,1	38,1	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,2	12,9	13,7	14,7	15,9	17,3	18,9	20,9	23,2	26,0	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,8	64,6	68,7	73,2	78,2	83,9	90,5	98,4	108,1	120,9	139,0	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,7	156,5	160,4	164,4	168,6	173,1	177,9	183,2	189,3	196,5	205,7	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-3,1	-4,3	-5,6	-7,2	-9,2	-11,6	-14,8	-19,1	-25,4	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,8	2,2	1,5	0,8	0,0	-1,1	-2,3	-3,9	-6,1	-9,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,6	13,1	13,6	14,2	14,9	15,8	17,0	18,5	20,6	23,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,8	20,3	21,0	21,7	22,6	23,6	25,0	26,8	29,3	32,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,9	30,4	33,0	35,6	38,4	41,1	43,9	46,8	49,7	52,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,4	121,5	124,6	127,8	131,0	134,2	137,5	140,8	144,1	147,5	150,9	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-4,5
Total	DM	-23,59	-20,55	-17,40	-14,19	-11,04	-8,09	-5,56	-3,88	-4,16	-10,08	-50,34	—
	DMA	30,57	25,42	23,23	21,68	20,61	20,76	24,82	32,25	42,00	57,96	109,57	—
	PDMA	45,28	33,81	28,69	27,09	28,24	32,59	48,96	67,81	90,09	118,32	165,55	—
CPI	DM	-56,45	-51,45	-46,31	-41,14	-36,23	-31,97	-28,89	-28,14	-32,35	-50,44	-150,53	—
	DMA	66,86	54,91	48,64	42,59	37,05	34,03	39,87	53,05	71,01	102,67	217,07	—
	PDMA	85,37	65,39	50,00	36,34	24,60	17,97	35,73	55,77	77,37	103,38	157,92	—
SPI	DM	0,50	2,12	3,81	5,57	7,43	9,43	11,55	13,90	16,52	19,51	23,13	—
	DMA	3,95	3,79	4,61	6,35	8,56	11,03	13,79	17,01	20,73	25,17	30,73	—
	PDMA	15,88	10,65	13,06	20,30	30,90	43,31	58,66	76,64	99,42	129,28	171,15	—
ΔCS	DM	-56,95	-53,57	-50,12	-46,70	-43,65	-41,40	-40,44	-42,04	-48,87	-69,95	-173,66	—
	DMA	62,91	51,12	44,03	36,24	28,49	23,00	26,09	36,04	50,28	77,51	186,34	—
	PDMA	69,49	54,74	36,94	16,04	-6,30	-25,34	-22,92	-20,86	-22,05	-25,90	-13,23	—

Tabela 8.131: Constantes de acoplamento PBE e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	397,8	419,7	441,9	464,3	486,9	509,8	532,8	556,1	579,6	603,3	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,5	20,8	19,1	17,3	15,4	13,5	11,5	9,5	7,4	5,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-69,5	-71,8	-74,2	-76,6	-79,0	-81,4	-83,9	-86,4	-88,9	-91,5	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-10,0	-11,1	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,1	45,8	46,6	47,4	48,2	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	142,1	150,4	158,7	166,9	175,1	183,1	191,1	198,9	206,7	214,3	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1776,9	-1748,1	-1715,3	-1679,4	-1640,8	-1600,3	-1558,1	-1514,9	-1470,9	-1426,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-155,9	-139,2	-122,7	-106,5	-90,4	-74,6	-59,0	-43,7	-28,6	-13,8	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-57,5	-39,4	-21,7	-4,2	12,9	29,9	46,6	63,0	79,2	95,2	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-316,3	-354,9	-395,6	-440,5	-493,5	-560,8	-655,5	-809,2	-1129,5	-2453,2	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,7	122,1	123,5	125,0	126,5	128,0	129,6	131,2	132,8	134,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19,0	-19,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	191,5	194,6	198,3	202,6	207,6	213,7	221,0	230,2	241,9	257,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,2	254,8	257,6	260,7	264,1	268,0	272,5	277,9	284,6	293,3	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,1	53,7	53,2	52,2	50,9	49,0	46,5	42,9	38,1	31,2	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	11,1	11,9	12,9	14,1	15,6	17,4	19,6	22,5	26,1	30,9	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,0	67,0	70,4	74,4	79,1	85,0	92,8	103,6	120,3	150,7	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,9	156,1	158,5	161,1	164,0	167,5	171,6	177,1	185,2	199,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,1	-12,2	-16,5	-23,4	-36,1	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,7	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,1	-7,0	-11,4	-19,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,1	12,5	13,0	13,6	14,5	15,7	17,3	19,7	23,7	31,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	19,5	20,1	20,9	21,9	23,3	25,2	28,0	32,5	41,0	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	27,6	29,4	31,3	33,3	35,2	37,2	39,3	41,3	43,4	45,6	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	121,1	122,7	124,3	126,0	127,7	129,4	131,2	133,0	134,8	136,6	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-27,65	-25,37	-22,92	-20,35	-17,79	-15,37	-13,32	-12,14	-12,96	-19,75	-64,27	—
	DMA	33,04	30,00	27,62	25,70	24,21	23,30	24,65	28,67	37,50	53,84	111,65	—
	PDMA	46,40	36,32	28,42	24,75	25,89	30,17	43,81	64,19	90,94	129,53	203,23	—
CPI	DM	-66,20	-62,01	-57,46	-52,80	-48,27	-44,28	-41,44	-41,00	-45,87	-65,85	-177,06	—
	DMA	73,00	66,35	60,74	54,96	49,60	45,01	45,13	50,64	66,36	97,87	223,28	—
	PDMA	81,57	66,58	52,14	37,94	25,87	16,75	24,81	41,07	60,27	85,13	141,90	—
SPI	DM	0,61	1,50	2,41	3,44	4,57	5,83	7,29	9,03	11,17	14,07	18,44	—
	DMA	3,73	3,34	3,33	4,24	5,59	7,39	9,64	12,56	16,33	21,55	29,79	—
	PDMA	20,60	14,14	11,03	15,08	25,90	40,01	57,74	81,13	113,43	162,09	248,21	—
ΔCS	DM	-66,81	-63,51	-59,88	-56,24	-52,84	-50,11	-48,73	-50,03	-57,05	-79,92	-195,50	—
	DMA	69,27	63,01	57,40	50,72	44,01	37,62	35,49	38,08	50,03	76,33	193,50	—
	PDMA	60,97	52,45	41,11	22,86	-0,02	-23,26	-32,93	-40,06	-53,17	-76,96	-106,31	—

Tabela 8.132: Constantes de acoplamento PW91 e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,2	387,4	410,8	434,5	458,3	482,4	506,7	531,2	556,0	581,0	606,3	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,6	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,2	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,7	-71,2	-73,7	-76,2	-78,7	-81,3	-83,9	-86,5	-89,2	-91,9	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,4	-13,5	-14,7	-16,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,7	44,5	45,2	46,0	46,8	47,6	48,4	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,7	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,6	145,9	154,0	162,1	170,0	177,9	185,7	193,3	200,8	208,2	215,5	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1815,2	-1790,1	-1760,3	-1726,4	-1689,3	-1649,5	-1607,6	-1564,2	-1519,7	-1474,3	-1428,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,6	-160,4	-143,4	-126,4	-109,6	-93,0	-76,5	-60,2	-44,1	-28,2	-12,5	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,8	-25,6	-7,6	10,2	27,8	45,3	62,5	79,6	96,6	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,5	-328,8	-367,5	-408,1	-453,0	-506,0	-573,5	-668,7	-823,8	-1148,9	-2525,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	121,5	122,9	124,3	125,8	127,3	128,8	130,4	131,9	133,5	135,2	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,2	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,7	198,5	202,8	208,0	214,2	221,8	231,3	243,3	259,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,5	254,8	257,3	259,9	262,8	266,1	269,8	274,3	279,6	286,1	294,6	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,2	46,6	43,0	38,0	31,2	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,0	13,0	14,2	15,7	17,5	19,7	22,5	26,1	30,7	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,3	66,4	69,9	74,0	78,9	85,0	92,9	104,1	121,2	152,0	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,0	155,1	157,3	159,6	162,2	165,1	168,5	172,7	178,2	186,2	200,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,1	-12,1	-16,5	-23,5	-36,2	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-19,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,1	13,8	14,7	15,8	17,4	19,8	23,8	31,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,5	25,4	28,1	32,6	40,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,0	29,0	31,0	33,1	35,1	37,3	39,4	41,6	43,8	46,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	121,9	123,5	125,1	126,8	128,5	130,2	132,0	133,7	135,5	137,3	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,11	-26,73	-24,17	-21,48	-18,79	-16,22	-14,05	-12,72	-13,44	-20,24	-66,63	—
	DMA	34,30	31,79	29,32	27,32	25,70	24,63	25,50	29,53	38,55	55,16	114,95	—
	PDMA	48,32	38,26	29,85	26,05	27,39	31,28	43,71	64,34	91,58	130,54	204,82	—
CPI	DM	-70,12	-65,68	-60,89	-55,94	-51,11	-46,79	-43,65	-42,92	-47,56	-67,62	-183,29	—
	DMA	75,77	70,25	64,35	58,26	52,60	47,63	46,65	52,14	68,25	100,35	230,44	—
	PDMA	85,13	70,35	55,62	41,29	29,03	19,12	23,97	40,80	60,73	86,32	145,70	—
SPI	DM	0,97	1,83	2,77	3,78	4,91	6,20	7,66	9,42	11,59	14,50	18,91	—
	DMA	3,89	3,59	3,63	4,62	5,98	7,76	9,99	12,95	16,76	22,02	30,26	—
	PDMA	21,32	14,74	10,95	14,87	26,18	40,20	58,19	81,61	114,21	162,97	248,18	—
ΔCS	DM	-71,08	-67,51	-63,66	-59,72	-56,02	-52,99	-51,31	-52,34	-59,15	-82,12	-202,20	—
	DMA	71,89	66,66	60,71	53,64	46,62	39,87	36,65	39,18	51,49	78,33	200,18	—
	PDMA	63,81	55,61	44,66	26,42	2,84	-21,08	-34,22	-40,80	-53,47	-76,65	-102,47	—

Tabela 8.133: Constantes de acoplamento TPSSh e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	366,0	390,6	415,1	439,7	464,2	488,7	513,1	537,4	561,6	585,8	610,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	20,3	18,8	17,3	15,7	14,0	12,3	10,5	8,7	6,8	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,2	-72,5	-74,9	-77,3	-79,6	-82,0	-84,3	-86,6	-88,9	-91,1	-93,4	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-5,3	-6,6	-7,8	-9,1	-10,3	-11,5	-12,7	-13,9	-15,1	-16,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,3	45,8	46,4	46,9	47,3	47,8	48,3	48,8	49,2	49,7	50,1	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-8,1	-9,3	-10,4	-11,6	-12,7	-13,8	-14,9	-15,9	-17,0	-17,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,7	200,5	205,0	209,3	213,4	217,2	220,8	224,1	227,2	230,0	232,6	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1757,5	-1731,7	-1703,3	-1673,0	-1641,1	-1608,0	-1574,1	-1539,7	-1504,9	-1470,0	-1435,2	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-156,7	-142,5	-128,4	-114,3	-100,2	-86,1	-72,1	-58,1	-44,2	-30,3	-16,4	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,8	-47,2	-30,7	-14,3	1,8	17,8	33,8	49,6	65,2	80,8	96,3	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-282,7	-320,1	-359,5	-402,5	-451,3	-510,0	-585,2	-690,4	-857,9	-1192,7	-2403,5	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,0	138,8	139,6	140,4	141,1	141,9	142,6	143,2	143,8	144,4	144,9	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-11,3	-12,4	-13,4	-14,5	-15,5	-16,5	-17,4	-18,4	-19,3	-20,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,5	190,8	194,6	198,9	203,9	209,8	216,7	225,0	234,9	247,0	262,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	280,6	282,3	284,1	286,1	288,3	290,8	293,7	297,1	301,3	306,4	312,9	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,3	57,7	56,9	55,8	54,3	52,4	50,0	46,9	43,0	38,0	31,5	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,0	12,6	13,5	14,5	15,7	17,3	19,1	21,4	24,1	27,5	31,8	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,8	71,5	74,5	78,0	82,1	87,0	93,1	100,9	111,6	127,4	153,5	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	172,7	174,3	176,1	178,0	180,1	182,5	185,3	188,9	193,6	200,5	211,7	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,7	-3,0	-4,5	-6,2	-8,3	-10,9	-14,3	-18,9	-25,6	-36,8	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,4	8,2	6,8	5,4	3,8	2,0	0,0	-2,5	-5,8	-10,3	-17,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,5	13,0	13,7	14,5	15,5	16,9	18,6	21,1	24,9	31,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,1	22,5	22,9	23,5	24,2	25,2	26,6	28,4	31,1	35,2	42,2	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,9	34,4	35,8	37,2	38,7	40,1	41,5	42,9	44,2	45,6	46,9	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	137,9	138,9	140,0	141,0	141,9	142,9	143,8	144,7	145,5	146,3	147,1	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-4,5
Total	DM	-18,52	-16,50	-14,46	-12,43	-10,56	-8,94	-7,84	-7,76	-9,88	-18,07	-59,32	—
	DMA	30,80	29,17	27,90	26,87	26,20	26,26	29,12	34,42	44,02	60,74	112,94	—
	PDMA	52,80	42,98	36,67	33,37	31,71	33,31	50,85	72,92	100,67	138,47	204,13	—
CPI	DM	-55,33	-51,43	-47,54	-43,81	-40,55	-38,10	-37,11	-38,86	-46,30	-68,96	-171,29	—
	DMA	61,13	56,52	52,39	48,41	45,05	43,14	47,18	55,88	73,72	106,75	220,55	—
	PDMA	70,07	56,93	44,02	31,43	21,43	16,56	30,67	47,29	66,33	90,83	142,93	—
SPI	DM	8,47	9,11	9,80	10,57	11,43	12,44	13,63	15,05	16,83	19,26	22,79	—
	DMA	8,56	9,11	9,93	11,08	12,37	13,88	15,88	18,67	22,23	27,01	34,03	—
	PDMA	40,13	32,76	31,27	34,79	39,25	45,59	65,65	91,70	125,85	173,41	249,01	—
ΔCS	DM	-63,79	-60,53	-57,34	-54,38	-51,97	-50,54	-50,74	-53,91	-63,13	-88,22	-194,08	—
	DMA	52,57	47,41	42,46	37,33	32,68	29,26	31,30	37,21	51,48	79,74	186,51	—
	PDMA	29,94	24,17	12,75	-3,36	-17,82	-29,03	-34,98	-44,41	-59,52	-82,58	-106,08	—

Tabela 8.134: Constantes de acoplamento X3LYP e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	397,3	422,2	447,3	472,6	498,2	524,1	550,1	576,4	602,9	629,7	656,7	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,5	19,7	17,7	15,6	13,4	11,1	8,8	6,3	3,8	1,2	-1,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-75,0	-77,6	-80,4	-83,1	-85,8	-88,6	-91,5	-94,3	-97,2	-100,1	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	45,3	46,1	46,9	47,8	48,6	49,4	50,3	51,2	52,0	52,9	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,3	-17,3	-18,4	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,3	166,8	175,2	183,5	191,6	199,6	207,5	215,2	222,7	230,0	237,2	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,7	-1787,4	-1757,6	-1724,0	-1687,4	-1648,2	-1607,1	-1564,6	-1521,0	-1476,7	-1432,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-168,0	-150,4	-132,9	-115,6	-98,4	-81,4	-64,6	-47,9	-31,5	-15,3	0,7	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-69,5	-50,4	-31,4	-12,7	5,7	24,0	42,1	60,0	77,8	95,3	112,7	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,3	-317,2	-354,2	-392,9	-435,5	-485,2	-547,9	-635,3	-775,4	-1061,6	-2173,7	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,8	133,3	134,9	136,5	138,1	139,7	141,4	143,0	144,7	146,4	148,2	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,7	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,6	202,6	206,0	210,0	214,5	219,9	226,1	233,6	242,6	253,6	267,3	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	272,4	274,9	277,4	280,1	283,0	286,2	289,8	293,8	298,5	304,0	310,7	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,0	56,9	56,6	56,1	55,2	54,0	52,3	50,1	47,2	43,4	38,4	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,7	19,8	22,4	25,6	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,9	69,8	73,1	76,7	80,8	85,6	91,3	98,4	107,5	119,9	138,1	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,3	168,5	170,8	173,3	175,9	178,8	182,0	185,7	190,2	196,0	204,0	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,6	-1,6	-2,8	-4,1	-5,7	-7,7	-10,2	-13,5	-18,1	-25,0	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,4	4,6	3,7	2,7	1,7	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,1	13,5	13,9	14,6	15,4	16,4	17,9	20,0	23,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,2	20,5	21,0	21,5	22,3	23,2	24,5	26,2	28,7	32,4	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,4	31,5	33,7	35,9	38,1	40,4	42,7	45,1	47,5	49,9	52,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	133,1	134,8	136,6	138,4	140,3	142,1	144,0	145,9	147,8	149,7	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-4,5
Total	DM	-22,78	-20,20	-17,44	-14,57	-11,71	-8,93	-6,55	-4,94	-5,16	-10,75	-47,70	—
	DMA	32,78	30,29	28,12	26,22	24,79	24,73	28,90	34,95	43,43	57,98	105,80	—
	PDMA	48,31	38,96	29,63	24,14	22,48	27,77	43,90	62,31	84,67	113,74	161,91	—
CPI	DM	-62,76	-57,96	-52,79	-47,48	-42,28	-37,53	-33,83	-32,28	-35,46	-51,92	-143,45	—
	DMA	67,80	60,98	54,74	48,46	43,15	40,64	47,70	58,79	74,54	103,46	209,21	—
	PDMA	72,80	57,40	42,19	28,53	20,16	20,69	38,01	56,81	77,27	102,15	153,57	—
SPI	DM	6,54	7,49	8,49	9,57	10,71	12,03	13,45	15,11	17,06	19,43	22,51	—
	DMA	7,10	7,79	8,61	9,91	11,33	13,07	15,11	17,47	20,62	24,63	29,96	—
	PDMA	30,35	25,44	20,42	20,91	24,19	32,97	48,22	66,34	90,09	122,24	168,02	—
ΔCS	DM	-69,30	-65,46	-61,28	-57,06	-53,00	-49,56	-47,28	-47,39	-52,52	-71,35	-165,95	—
	DMA	60,70	53,20	46,13	38,56	31,83	27,56	32,59	41,32	53,92	78,83	179,25	—
	PDMA	42,46	31,96	21,77	7,62	-4,03	-12,29	-10,22	-9,53	-12,81	-20,08	-14,46	—

Tabela 8.135: Constantes de acoplamento B1B95 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	403,9	427,5	451,2	475,2	499,3	523,6	548,0	572,6	597,4	622,3	647,4	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,4	21,7	19,9	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	2,4	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-72,8	-75,3	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-88,2	-90,8	-93,5	-96,2	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	42,7	43,4	44,1	44,9	45,6	46,4	47,2	47,9	48,7	49,5	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	146,7	154,4	161,8	169,2	176,5	183,6	190,6	197,4	204,1	210,7	217,0	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1716,6	-1695,0	-1669,0	-1639,2	-1606,4	-1571,1	-1533,7	-1494,9	-1454,9	-1414,1	-1372,8	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-174,7	-157,8	-141,0	-124,2	-107,5	-91,0	-74,6	-58,3	-42,2	-26,3	-10,5	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,7	-60,1	-41,7	-23,4	-5,3	12,6	30,3	47,9	65,3	82,6	99,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,9	-301,3	-334,9	-368,7	-404,3	-443,7	-490,0	-548,8	-631,2	-765,1	-1048,5	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	122,0	123,3	124,7	126,1	127,5	129,0	130,4	131,9	133,4	134,9	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,0	-13,7	-14,4	-15,0	-15,7	-16,4	-17,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,2	192,9	195,8	199,3	203,2	207,7	213,0	219,2	226,6	235,5	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,5	254,5	256,6	258,8	261,2	263,7	266,5	269,6	273,2	277,3	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,7	55,5	55,2	54,6	53,8	52,6	51,1	49,1	46,4	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,5	10,0	10,6	11,2	12,0	13,0	14,1	15,4	17,0	18,9	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	61,2	63,8	66,5	69,6	73,0	76,8	81,2	86,5	92,8	100,8	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,4	155,3	157,2	159,2	161,3	163,5	165,9	168,5	171,4	174,7	178,7	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,4	4,7	4,0	3,3	2,5	1,6	0,6	-0,5	-1,9	-3,5	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,8	13,3	13,9	14,7	15,6	16,9	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,0	19,4	19,9	20,4	21,1	22,0	23,2	24,7	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,0	31,0	33,0	35,0	37,1	39,2	41,3	43,5	45,7	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	122,2	123,7	125,3	126,9	128,5	130,1	131,8	133,4	135,0	136,7	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,7	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,5
Total	DM	-22,43	-20,10	-17,57	-14,89	-12,12	-9,40	-6,83	-4,63	-3,22	-3,68	-9,75	—
	DMA	28,92	24,84	22,30	19,82	17,56	15,93	17,41	21,57	27,08	36,95	53,90	—
	PDMA	53,36	43,34	34,01	24,52	16,31	13,50	21,24	35,19	50,58	68,69	91,32	—
CPI	DM	-54,26	-49,83	-44,99	-39,81	-34,55	-29,48	-24,87	-21,29	-19,80	-22,95	-39,72	—
	DMA	62,86	53,70	47,79	41,61	35,34	29,94	31,44	38,98	49,44	69,72	105,83	—
	PDMA	82,22	66,20	51,54	37,15	22,74	13,05	21,36	37,99	55,83	75,66	100,52	—
SPI	DM	0,92	1,71	2,53	3,39	4,33	5,32	6,40	7,59	8,93	10,45	12,23	—
	DMA	4,03	3,68	3,61	3,84	4,52	5,65	7,12	8,79	10,68	12,93	15,83	—
	PDMA	32,19	26,57	21,16	15,27	11,59	13,84	21,14	33,13	46,72	63,58	84,58	—
ΔCS	DM	-55,18	-51,53	-47,52	-43,20	-38,89	-34,80	-31,27	-28,88	-28,73	-33,40	-51,94	—
	DMA	58,84	50,02	44,18	37,77	30,82	24,28	24,32	30,19	38,76	56,79	90,00	—
	PDMA	50,02	39,63	30,38	21,88	11,15	-0,79	0,22	4,86	9,11	12,08	15,94	—

Tabela 8.136: Constantes de acoplamento B3LYP e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	393,4	418,4	443,6	469,1	494,8	520,8	547,0	573,4	600,0	626,9	654,0	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	19,9	17,9	15,8	13,6	11,4	9,0	6,5	4,0	1,4	-1,2	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,7	-74,4	-77,1	-79,8	-82,5	-85,3	-88,1	-91,0	-93,8	-96,7	-99,6	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-15,6	-16,8	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	49,2	50,0	50,9	51,8	52,7	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,2	-17,2	-18,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,6	166,1	174,5	182,7	190,9	198,8	206,7	214,3	221,8	229,2	236,3	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,3	-1784,6	-1754,5	-1720,8	-1684,0	-1644,8	-1603,8	-1561,4	-1518,1	-1474,0	-1429,6	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-167,7	-150,2	-132,7	-115,4	-98,2	-81,2	-64,4	-47,8	-31,4	-15,2	0,7	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,2	-51,0	-32,1	-13,3	5,1	23,4	41,5	59,5	77,2	94,8	112,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,0	-316,8	-353,7	-392,3	-434,8	-484,4	-547,0	-634,0	-773,3	-1056,7	-2138,3	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,0	132,6	134,1	135,7	137,4	139,0	140,7	142,4	144,1	145,9	147,6	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,9	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,7	-16,4	-17,2	-17,9	-18,6	-19,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,3	202,3	205,8	209,7	214,3	219,6	225,8	233,3	242,3	253,2	266,8	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	271,1	273,5	276,1	278,9	281,8	285,0	288,6	292,6	297,3	302,7	309,4	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	56,8	56,5	56,0	55,1	53,9	52,3	50,1	47,2	43,5	38,5	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,6	19,7	22,2	25,4	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,6	69,5	72,8	76,4	80,5	85,3	91,1	98,1	107,2	119,6	137,7	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,4	167,7	170,0	172,5	175,1	178,0	181,2	185,0	189,5	195,2	203,3	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,5	-1,6	-2,7	-4,1	-5,7	-7,7	-10,1	-13,4	-18,0	-24,8	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,3	4,5	3,6	2,7	1,6	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,7	13,0	13,4	13,8	14,5	15,3	16,3	17,8	19,9	23,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,0	20,4	20,8	21,4	22,2	23,1	24,4	26,1	28,5	32,3	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,2	31,3	33,5	35,7	37,9	40,2	42,6	44,9	47,3	49,8	52,2	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,5	132,3	134,1	135,9	137,7	139,6	141,5	143,3	145,2	147,2	149,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,7	-4,5
Total	DM	-23,04	-20,44	-17,65	-14,76	-11,87	-9,10	-6,69	-5,07	-5,27	-10,75	-46,54	—
	DMA	32,80	30,13	27,94	25,98	24,49	24,27	28,17	34,19	42,64	57,10	104,00	—
	PDMA	48,86	39,40	29,99	23,70	22,06	26,59	42,41	60,37	82,56	111,26	158,46	—
CPI	DM	-62,83	-57,97	-52,77	-47,42	-42,17	-37,40	-33,68	-32,12	-35,25	-51,43	-140,20	—
	DMA	68,23	61,08	54,79	48,47	42,97	40,07	46,50	57,55	73,25	101,97	205,58	—
	PDMA	73,24	57,73	42,58	28,79	20,30	19,83	37,07	55,84	76,09	100,90	151,01	—
SPI	DM	6,13	7,08	8,10	9,19	10,35	11,65	13,11	14,76	16,71	19,08	22,14	—
	DMA	6,81	7,43	8,25	9,49	10,93	12,67	14,72	17,05	20,20	24,19	29,50	—
	PDMA	30,97	25,96	20,75	19,96	23,35	31,54	46,33	63,68	87,31	118,85	163,92	—
ΔCS	DM	-68,96	-65,05	-60,87	-56,60	-52,52	-49,05	-46,79	-46,88	-51,95	-70,51	-162,34	—
	DMA	61,41	53,66	46,54	38,98	32,04	27,40	31,78	40,50	53,05	77,79	176,08	—
	PDMA	42,27	31,76	21,83	8,84	-3,05	-11,71	-9,26	-7,85	-11,21	-17,95	-12,91	—

Tabela 8.137: Constantes de acoplamento B3P86 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	357,7	381,4	405,4	429,5	454,0	478,6	503,5	528,5	553,8	579,3	605,0	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	23,1	21,3	19,5	17,5	15,5	13,4	11,3	9,1	6,8	4,4	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,2	-67,8	-70,3	-72,9	-75,5	-78,1	-80,8	-83,4	-86,1	-88,9	-91,6	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,6	-6,5	-7,6	-8,6	-9,6	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,2	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,3	41,1	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,0	-15,9	-16,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	138,4	146,6	154,6	162,6	170,5	178,2	185,8	193,3	200,6	207,8	214,8	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1804,0	-1778,3	-1748,1	-1714,4	-1677,8	-1638,8	-1598,0	-1555,9	-1512,8	-1469,1	-1425,0	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-175,5	-158,4	-141,4	-124,6	-107,9	-91,3	-74,9	-58,7	-42,7	-26,9	-11,3	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-81,4	-62,6	-44,1	-25,8	-7,7	10,1	27,8	45,3	62,7	79,9	96,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-287,8	-324,9	-362,3	-401,4	-444,6	-495,1	-558,7	-646,9	-786,4	-1061,9	-1993,1	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,8	122,3	123,8	125,4	127,0	128,6	130,2	131,8	133,5	135,2	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,4	-16,1	-16,8	-17,5	-18,2	-18,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,8	192,5	195,7	199,3	203,5	208,5	214,4	221,5	230,2	241,0	254,8	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,0	253,4	255,8	258,5	261,4	264,5	268,1	272,2	276,9	282,7	289,8	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,4	53,9	53,0	51,8	50,2	47,9	44,9	40,9	35,4	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,6	14,9	16,4	18,3	20,6	23,5	27,1	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,4	66,4	69,9	73,8	78,5	84,2	91,5	101,2	115,3	138,2	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,0	154,1	156,4	158,8	161,3	164,2	167,5	171,3	176,2	182,8	193,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,2	-5,9	-7,9	-10,6	-14,3	-19,7	-28,7	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,0	3,2	2,3	1,3	0,1	-1,2	-2,9	-5,2	-8,5	-13,8	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,2	21,1	26,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,6	18,9	19,3	19,9	20,5	21,4	22,5	24,1	26,3	29,6	35,2	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,0	27,0	29,0	31,1	33,2	35,3	37,5	39,7	41,9	44,2	46,5	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	121,1	122,8	124,5	126,2	128,0	129,8	131,6	133,4	135,3	137,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-28,83	-26,33	-23,67	-20,90	-18,14	-15,51	-13,23	-11,73	-11,99	-17,14	-46,96	—
	DMA	34,07	31,38	28,76	26,50	24,67	23,47	24,22	27,78	35,72	50,02	91,98	—
	PDMA	49,98	40,33	30,73	24,12	22,63	25,96	36,92	55,45	79,13	110,99	164,49	—
CPI	DM	-69,05	-64,41	-59,41	-54,30	-49,31	-44,81	-41,37	-40,09	-43,41	-59,07	-134,37	—
	DMA	74,96	69,21	63,12	56,85	50,87	45,68	44,66	49,47	63,68	91,45	182,01	—
	PDMA	85,40	70,53	55,91	41,13	28,07	17,78	22,81	39,14	58,40	82,29	127,27	—
SPI	DM	0,67	1,59	2,55	3,59	4,72	5,97	7,41	9,07	11,05	13,61	17,14	—
	DMA	4,07	3,65	3,56	4,25	5,45	7,19	9,23	11,87	15,22	19,63	25,97	—
	PDMA	24,00	18,18	12,27	11,66	18,65	31,95	47,26	67,41	94,33	132,04	191,78	—
ΔCS	DM	-69,73	-66,00	-61,96	-57,89	-54,03	-50,78	-48,79	-49,16	-54,46	-72,68	-151,51	—
	DMA	70,89	65,56	59,56	52,60	45,42	38,50	35,44	37,61	48,46	71,82	156,04	—
	PDMA	61,40	52,35	43,64	29,47	9,42	-14,17	-24,45	-28,27	-35,93	-49,74	-64,52	—

Tabela 8.138: Constantes de acoplamento B971 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	427,3	443,9	461,4	480,0	499,7	520,6	542,8	566,1	590,8	616,7	643,9	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	14,7	13,5	12,2	10,7	9,0	7,3	5,3	3,2	1,0	-1,3	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,7	-69,8	-72,1	-74,5	-77,0	-79,7	-82,5	-85,5	-88,8	-92,2	-95,7	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,6	38,6	39,6	40,7	41,9	43,1	44,4	45,9	47,3	48,9	50,6	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,9	168,1	174,7	181,6	188,9	196,6	204,6	213,1	221,9	231,1	240,7	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1613,6	-1608,3	-1597,4	-1581,8	-1562,1	-1539,1	-1513,4	-1485,6	-1456,2	-1425,8	-1394,8	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-145,0	-130,5	-115,6	-100,5	-85,1	-69,6	-54,0	-38,4	-22,8	-7,2	8,1	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-55,7	-38,9	-21,9	-4,7	12,4	29,7	47,1	64,5	81,9	99,3	116,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-189,8	-221,6	-254,8	-289,8	-327,7	-370,4	-421,2	-486,9	-582,5	-752,8	-1221,3	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	102,5	105,7	109,1	112,7	116,5	120,6	125,0	129,6	134,4	139,6	145,1	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-13,1	-14,4	-15,8	-17,3	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,1	190,1	194,4	199,4	205,0	211,6	219,4	228,8	240,5	255,4	275,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	200,6	207,3	214,3	221,7	229,5	237,9	247,0	256,9	268,0	280,6	295,5	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,5	53,0	53,2	53,0	52,5	51,2	49,1	45,6	40,1	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,2	6,6	7,1	7,6	8,4	9,3	10,5	12,0	14,0	16,7	20,5	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,4	66,1	69,1	72,5	76,4	80,8	86,2	92,8	101,2	112,9	130,5	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	130,5	135,2	140,1	145,4	151,2	157,4	164,3	172,1	181,3	193,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,9	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,8	-8,5	-12,5	-18,8	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,6	9,8	10,2	10,5	11,0	11,6	12,4	13,6	15,3	18,0	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,4	18,6	20,2	22,5	25,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,6	30,0	32,4	35,1	37,8	40,8	43,9	47,2	50,7	54,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	104,7	108,4	112,3	116,5	120,9	125,5	130,4	135,6	141,2	147,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,2	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,5
Total	DM	-16,64	-14,72	-12,54	-10,10	-7,48	-4,77	-2,04	0,38	2,00	1,17	-10,53	—
	DMA	28,86	24,36	19,61	14,82	12,42	11,87	14,62	20,63	28,52	41,35	67,75	—
	PDMA	58,82	49,27	39,36	29,11	19,33	15,62	21,61	34,23	54,52	81,01	119,87	—
CPI	DM	-29,78	-27,65	-24,99	-21,94	-18,65	-15,38	-12,45	-10,57	-11,19	-18,38	-52,53	—
	DMA	52,80	44,12	34,65	24,92	20,75	20,80	26,45	36,34	49,30	72,25	125,00	—
	PDMA	71,00	56,99	42,88	28,55	16,19	19,39	30,76	45,82	65,33	87,76	120,23	—
SPI	DM	-7,01	-5,25	-3,41	-1,42	0,71	3,02	5,59	8,41	11,67	15,51	20,27	—
	DMA	11,30	9,87	8,58	7,41	6,31	5,33	5,95	9,12	13,28	18,69	25,77	—
	PDMA	49,89	43,62	36,78	29,52	21,63	12,86	14,90	25,74	46,59	76,06	119,60	—
ΔCS	DM	-22,78	-22,40	-21,58	-20,52	-19,37	-18,40	-18,03	-18,99	-22,86	-33,89	-72,80	—
	DMA	41,50	34,24	26,07	17,51	14,43	15,47	20,50	27,22	36,02	53,56	99,23	—
	PDMA	21,11	13,37	6,09	-0,97	-5,44	6,53	15,86	20,08	18,74	11,70	0,63	—

Tabela 8.139: Constantes de acoplamento B972 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,5	463,7	487,2	512,0	538,2	565,8	595,0	625,6	657,8	691,6	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	15,3	13,5	11,5	9,2	6,8	4,2	1,4	-1,6	-4,8	-8,3	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,8	-69,6	-72,5	-75,6	-78,9	-82,3	-86,0	-90,0	-94,1	-98,5	-103,1	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,2	-2,2	-3,2	-4,3	-5,5	-6,7	-8,0	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,3	37,5	38,9	40,3	41,8	43,4	45,1	47,0	48,9	50,9	53,1	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,7	-12,1	-13,6	-15,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	152,4	159,5	167,0	175,0	183,4	192,2	201,4	211,1	221,2	231,6	242,5	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1626,4	-1621,0	-1610,4	-1595,3	-1576,6	-1555,0	-1531,2	-1505,7	-1479,1	-1452,1	-1424,9	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-151,4	-134,7	-117,6	-100,3	-82,9	-65,4	-48,0	-30,7	-13,4	3,5	20,3	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-64,0	-44,6	-25,1	-5,4	14,1	33,8	53,5	73,1	92,7	112,2	131,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-187,3	-217,9	-249,8	-283,7	-320,6	-362,5	-412,9	-478,9	-577,4	-761,7	-1349,0	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	94,6	98,6	102,8	107,2	111,9	116,9	122,2	127,8	133,7	139,9	146,5	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,1	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,7	-11,9	-13,0	-14,3	-15,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	172,7	177,5	182,8	188,8	195,6	203,4	212,5	223,4	236,6	253,1	274,3	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	189,9	197,4	205,4	213,7	222,6	232,0	242,2	253,1	265,2	278,6	294,1	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,1	50,0	50,8	51,4	51,8	51,9	51,5	50,6	48,9	46,1	41,6	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	6,9	7,4	8,1	8,9	9,9	11,2	12,9	15,1	18,0	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	54,6	58,0	61,7	66,0	70,8	76,3	82,9	91,0	101,4	115,7	137,0	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,8	122,9	128,4	134,1	140,3	146,9	154,1	161,9	170,8	181,1	194,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-8,0	-11,9	-18,1	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	5,4	5,1	4,7	4,2	3,7	3,0	2,2	1,1	-0,5	-2,9	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,8	12,8	14,3	16,6	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,8	13,3	13,8	14,4	15,1	15,9	16,8	17,9	19,4	21,4	24,4	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,9	24,5	27,3	30,2	33,3	36,6	40,1	43,8	47,8	52,0	56,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	93,2	97,4	101,8	106,4	111,4	116,6	122,1	127,9	134,1	140,6	147,5	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,7	-6,5	-4,5
Total	DM	-20,65	-18,13	-15,31	-12,25	-9,00	-5,66	-2,36	0,64	2,76	1,98	-13,66	—
	DMA	32,19	26,97	21,62	15,87	12,56	12,57	15,94	22,33	31,12	44,07	74,93	—
	PDMA	62,89	52,41	42,08	31,09	20,72	19,24	24,59	34,94	53,88	80,22	119,54	—
CPI	DM	-33,51	-30,44	-26,82	-22,82	-18,68	-14,55	-10,90	-8,39	-8,61	-16,52	-60,92	—
	DMA	57,25	47,53	37,24	26,15	20,41	21,88	30,92	42,21	56,88	79,52	142,28	—
	PDMA	77,31	60,48	45,02	29,29	15,48	23,06	37,38	54,40	76,07	100,76	138,86	—
SPI	DM	-11,23	-9,11	-6,87	-4,50	-1,91	0,87	3,91	7,27	11,10	15,55	21,00	—
	DMA	13,81	11,90	10,17	8,33	6,80	5,75	4,96	7,76	12,23	18,07	25,55	—
	PDMA	52,32	46,49	39,92	32,41	24,57	16,45	15,21	20,67	37,61	65,16	105,38	—
ΔCS	DM	-22,28	-21,32	-19,94	-18,32	-16,78	-15,42	-14,81	-15,66	-19,71	-32,06	-81,92	—
	DMA	43,44	35,63	27,07	17,82	13,61	16,14	25,96	34,45	44,65	61,45	116,74	—
	PDMA	24,99	14,00	5,11	-3,13	-9,10	6,61	22,18	33,73	38,46	35,59	33,47	—

Tabela 8.140: Constantes de acoplamento B98 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,6	428,1	445,8	464,6	484,6	505,9	528,5	552,5	577,9	604,8	633,1	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	15,5	14,2	12,8	11,2	9,5	7,7	5,6	3,4	1,0	-1,4	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-68,2	-70,5	-73,0	-75,6	-78,4	-81,4	-84,6	-88,1	-91,7	-95,6	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,7	-14,6	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	49,6	51,5	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,9	-16,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	172,2	179,0	186,1	193,7	201,7	210,1	218,9	228,1	237,8	247,9	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1622,6	-1617,6	-1607,1	-1591,6	-1572,1	-1549,1	-1523,4	-1495,6	-1466,2	-1435,7	-1404,5	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,1	-135,5	-120,6	-105,2	-89,6	-73,8	-57,8	-41,8	-25,7	-9,6	6,2	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,5	-44,7	-27,7	-10,4	7,0	24,5	42,2	60,0	77,9	95,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-196,5	-228,9	-262,8	-298,9	-338,2	-383,0	-437,3	-509,0	-617,4	-823,5	-1507,1	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	104,7	108,5	112,6	116,9	121,5	126,5	131,7	137,3	143,2	149,5	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-15,0	-16,5	-18,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,5	188,8	193,5	198,9	205,0	212,2	220,6	230,9	243,6	260,0	282,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	198,0	205,3	212,9	221,1	229,7	239,0	249,0	260,0	272,3	286,5	303,3	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	51,5	52,3	52,9	53,2	53,2	52,6	51,4	49,2	45,4	39,3	49,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,6	12,3	14,5	17,5	21,7	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,2	65,2	68,5	72,2	76,4	81,3	87,2	94,5	104,0	117,4	138,3	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	129,2	134,3	139,8	145,7	152,0	158,9	166,6	175,4	185,9	199,6	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,8	-2,1	-3,8	-6,0	-9,0	-13,5	-20,9	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,4	5,0	4,5	3,9	3,2	2,3	1,2	-0,3	-2,5	-6,2	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	13,9	15,9	19,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,1	13,6	14,2	14,9	15,6	16,5	17,6	18,9	20,8	23,3	27,5	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,9	29,5	32,2	35,1	38,2	41,5	45,0	48,8	52,8	57,1	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,8	103,7	107,8	112,1	116,8	121,7	127,0	132,5	138,4	144,7	151,4	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,9	-7,9	-4,5
Total	DM	-18,51	-16,53	-14,25	-11,70	-8,96	-6,11	-3,32	-0,87	0,57	-1,25	-20,70	—
	DMA	30,20	25,54	20,65	16,40	13,95	13,07	15,62	21,89	30,65	44,60	80,03	—
	PDMA	60,25	50,24	40,24	29,95	20,23	13,96	20,35	35,40	57,26	86,44	132,79	—
CPI	DM	-33,11	-31,05	-28,45	-25,45	-22,22	-19,02	-16,30	-14,85	-16,45	-26,68	-80,17	—
	DMA	55,33	46,45	36,91	28,66	24,53	23,85	27,99	37,79	52,17	76,86	149,50	—
	PDMA	75,16	60,16	46,07	32,20	19,72	16,79	27,79	44,18	64,67	88,74	128,73	—
SPI	DM	-7,81	-5,88	-3,83	-1,61	0,77	3,35	6,20	9,39	13,05	17,39	22,91	—
	DMA	11,77	10,21	8,72	7,40	6,19	5,15	6,55	10,23	14,86	20,94	29,09	—
	PDMA	49,31	42,98	35,97	28,31	20,60	11,88	14,89	28,96	51,82	84,75	135,77	—
ΔCS	DM	-25,30	-25,17	-24,63	-23,83	-22,98	-22,37	-22,50	-24,23	-29,49	-44,08	-103,08	—
	DMA	43,56	36,23	28,19	21,26	18,33	18,70	21,44	27,56	37,31	55,92	120,41	—
	PDMA	25,85	17,18	10,09	3,89	-0,88	4,90	12,90	15,22	12,85	3,99	-7,03	—

Tabela 8.141: Constantes de acoplamento BHandH e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,1	462,4	484,4	507,2	530,8	555,3	580,6	606,9	634,2	662,5	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	22,9	20,9	18,7	16,3	13,7	11,0	8,0	4,9	1,6	-1,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-72,4	-75,1	-77,8	-80,7	-83,7	-86,9	-90,2	-93,7	-97,3	-101,1	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,4	-5,5	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,3	-13,9	-15,6	-17,3	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	40,5	41,7	42,9	44,2	45,5	47,0	48,5	50,0	51,7	53,4	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,5	-7,5	-8,7	-9,9	-11,1	-12,5	-13,9	-15,4	-17,0	-18,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,5	144,3	153,5	163,0	172,9	183,1	193,7	204,6	215,9	227,4	239,2	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1814,4	-1797,1	-1773,1	-1743,5	-1709,0	-1670,4	-1628,3	-1583,4	-1536,2	-1487,3	-1437,0	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,4	-169,5	-151,2	-132,8	-114,0	-95,2	-76,1	-57,0	-37,8	-18,6	0,6	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,8	-61,1	-42,3	-23,3	-4,1	15,1	34,6	54,2	73,9	93,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,1	-308,2	-344,0	-380,5	-419,8	-465,0	-521,4	-600,0	-727,9	-1000,8	-2253,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	109,4	113,0	116,8	120,7	124,9	129,4	134,0	138,9	144,0	149,4	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-18,4	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	179,6	184,2	189,4	195,4	202,4	210,6	220,6	232,8	248,3	268,4	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,4	232,3	238,4	245,0	252,0	259,5	267,8	276,9	287,3	299,2	313,5	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,3	53,0	52,2	50,7	48,2	44,2	38,1	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,4	15,5	18,1	21,5	26,0	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,4	53,8	57,6	61,8	66,7	72,3	78,9	87,3	98,2	113,8	139,0	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,2	140,5	145,0	149,9	155,0	160,6	166,8	173,7	181,8	191,8	205,7	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,2	-0,4	-1,3	-2,4	-3,8	-5,6	-8,0	-11,4	-16,5	-25,4	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,0	4,4	3,8	3,1	2,2	1,1	-0,1	-2,0	-4,7	-9,3	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	14,1	15,2	16,8	19,3	23,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,3	16,7	17,3	17,9	18,7	19,6	20,8	22,4	24,5	27,6	32,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,7	21,3	24,0	26,9	30,0	33,3	36,7	40,4	44,3	48,4	52,7	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,1	109,7	113,4	117,3	121,5	125,8	130,4	135,2	140,2	145,4	150,9	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-4,5
Total	DM	-30,64	-28,01	-24,98	-21,65	-18,08	-14,46	-10,92	-7,89	-6,37	-9,91	-50,34	—
	DMA	35,48	31,39	28,06	24,45	21,32	19,87	23,11	29,73	38,88	54,42	109,44	—
	PDMA	59,49	48,58	37,87	26,45	16,40	13,44	26,67	46,32	70,98	104,04	163,62	—
CPI	DM	-64,22	-60,44	-55,87	-50,80	-45,39	-40,09	-35,35	-32,30	-33,43	-47,48	-150,43	—
	DMA	72,65	64,98	59,18	52,76	46,15	40,53	43,85	54,37	69,68	98,21	216,94	—
	PDMA	88,65	72,34	56,77	40,54	24,60	13,68	26,64	47,37	70,19	98,09	157,42	—
SPI	DM	-6,02	-4,23	-2,33	-0,27	1,94	4,33	6,99	10,01	13,47	17,64	23,05	—
	DMA	8,22	6,76	5,23	3,69	3,10	4,72	7,90	11,65	16,29	22,31	30,61	—
	PDMA	38,11	31,15	24,01	16,12	10,40	13,27	26,69	45,55	71,56	108,40	168,17	—
ΔCS	DM	-58,20	-56,21	-53,55	-50,53	-47,33	-44,42	-42,34	-42,31	-46,90	-65,12	-173,48	—
	DMA	64,43	58,22	53,95	49,08	43,05	35,81	35,95	42,72	53,40	75,90	186,32	—
	PDMA	50,54	41,18	32,76	24,42	14,20	0,40	-0,05	1,83	-1,36	-10,31	-10,75	—

Tabela 8.142: Constantes de acoplamento BMK e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,4	502,8	515,2	528,7	543,5	559,7	577,4	597,0	618,7	642,5	669,0	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,8	14,3	14,6	14,8	14,8	14,6	14,1	13,3	12,0	10,2	7,7	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-72,8	-73,4	-74,1	-74,9	-75,9	-77,0	-78,3	-79,8	-81,4	-83,3	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,8	0,6	-0,5	-1,8	-3,2	-4,7	-6,4	-8,1	-10,0	-12,0	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,5	36,6	36,7	36,8	37,1	37,4	37,7	38,2	38,7	39,3	40,0	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,6	-2,5	-3,5	-4,7	-5,9	-7,2	-8,7	-10,3	-12,0	-13,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,8	125,4	125,4	126,0	127,0	128,5	130,5	133,0	136,1	139,7	144,0	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1529,4	-1527,6	-1517,9	-1500,7	-1476,3	-1445,2	-1408,2	-1365,9	-1319,0	-1268,4	-1214,4	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-143,1	-131,7	-118,2	-102,8	-85,4	-66,1	-44,9	-21,9	2,7	29,1	56,9	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,1	-37,2	-21,4	-3,8	15,4	36,6	59,4	84,1	110,4	138,4	167,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-147,5	-173,9	-201,0	-228,4	-256,0	-284,4	-314,8	-349,2	-392,3	-454,2	-567,5	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	104,7	106,5	108,7	111,2	114,2	117,5	121,3	125,7	130,7	136,4	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,0	-4,0	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,9	-12,8	-14,9	-17,3	-20,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	244,5	249,2	254,4	260,5	267,6	276,3	287,2	301,5	321,1	349,5	394,6	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	177,9	184,0	190,5	197,6	205,4	214,0	223,8	235,3	249,0	266,5	290,8	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	55,3	56,0	56,5	56,6	56,3	55,2	53,0	49,0	41,7	28,3	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,3	5,6	6,0	6,5	7,2	8,2	9,5	11,3	13,9	17,8	24,2	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	89,5	91,0	92,9	95,3	98,2	101,8	106,6	112,8	121,5	134,4	155,3	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	123,6	127,2	131,1	135,5	140,5	146,3	153,0	161,2	171,5	185,9	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,5	3,6	2,6	1,5	0,1	-1,4	-3,4	-6,0	-9,7	-15,1	-24,0	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,7	7,2	6,6	5,8	4,9	3,8	2,5	0,7	-1,4	-4,6	-9,6	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,3	9,4	9,6	9,8	10,2	10,7	11,5	12,8	14,9	18,6	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,3	11,8	12,3	12,9	13,5	14,3	15,3	16,6	18,4	21,1	25,6	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	31,0	32,1	33,3	34,8	36,5	38,5	40,7	43,3	46,4	49,9	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,4	103,3	105,6	108,2	111,1	114,4	118,2	122,5	127,3	132,8	139,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	0,0	-0,8	-1,5	-2,4	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,1	-9,7	-4,5
Total	DM	-7,83	-6,73	-5,09	-2,87	-0,08	3,31	7,24	11,71	16,65	21,87	26,66	—
	DMA	30,46	27,46	23,86	19,71	15,85	14,44	18,37	23,53	31,20	42,73	58,88	—
	PDMA	73,25	64,41	54,29	43,00	30,44	26,57	28,89	41,91	63,59	97,30	146,94	—
CPI	DM	-15,29	-14,39	-12,39	-9,26	-5,06	0,15	6,17	12,80	19,52	25,35	27,27	—
	DMA	46,24	40,10	32,68	24,06	16,12	13,99	24,32	36,80	50,94	68,09	91,15	—
	PDMA	76,29	64,42	51,10	36,57	20,91	27,62	40,72	55,12	71,05	93,99	122,11	—
SPI	DM	-2,35	-1,11	0,26	1,82	3,57	5,62	8,03	10,91	14,55	19,33	26,21	—
	DMA	18,89	18,19	17,39	16,51	15,66	14,77	14,00	13,79	16,73	24,13	35,22	—
	PDMA	71,02	64,40	56,63	47,72	37,42	25,80	20,20	32,23	58,13	99,72	165,15	—
ΔCS	DM	-12,94	-13,28	-12,65	-11,08	-8,63	-5,47	-1,85	1,89	4,97	6,02	1,07	—
	DMA	27,35	21,91	15,29	7,55	0,46	-0,78	10,32	23,01	34,20	43,96	55,93	—
	PDMA	5,26	0,02	-5,53	-11,15	-16,52	1,82	20,52	22,89	12,92	-5,74	-43,04	—

Tabela 8.143: Constantes de acoplamento BP86 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	355,3	378,9	402,8	426,9	451,3	475,8	500,7	525,7	551,0	576,5	602,2	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,7	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,8	-67,3	-69,8	-72,4	-75,0	-77,6	-80,2	-82,9	-85,5	-88,3	-91,0	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,5	-8,5	-9,6	-10,6	-11,7	-12,8	-13,9	-15,1	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,0	40,7	41,5	42,2	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,8	-16,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	136,9	144,9	152,8	160,7	168,4	176,0	183,5	190,8	198,1	205,1	212,1	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1802,5	-1777,4	-1747,9	-1714,7	-1678,5	-1639,9	-1599,5	-1557,7	-1514,9	-1471,4	-1427,5	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,9	-160,9	-144,0	-127,2	-110,6	-94,0	-77,7	-61,5	-45,5	-29,7	-14,1	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,6	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,3	60,6	77,8	94,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,1	-327,4	-365,0	-404,4	-447,8	-498,7	-562,6	-651,0	-790,4	-1064,3	-1973,1	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,5	118,9	120,4	121,9	123,4	124,9	126,5	128,1	129,7	131,4	133,0	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,2	-13,9	-14,6	-15,3	-16,1	-16,8	-17,5	-18,1	-18,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,3	189,9	193,0	196,5	200,6	205,4	211,1	218,0	226,4	236,9	250,2	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,4	249,7	252,1	254,7	257,5	260,6	264,1	268,1	272,8	278,4	285,3	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,1	51,9	50,3	48,1	45,2	41,3	35,9	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,4	18,2	20,5	23,3	26,9	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,5	62,2	65,2	68,5	72,4	76,9	82,4	89,4	98,7	112,2	133,8	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	151,8	154,0	156,3	158,8	161,6	164,7	168,5	173,2	179,6	189,3	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,3	-13,9	-19,1	-27,6	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,9	3,1	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,2	-8,4	-13,5	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,1	21,0	25,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	18,9	19,3	19,8	20,4	21,3	22,4	23,9	26,1	29,3	34,7	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	26,2	28,2	30,2	32,3	34,4	36,5	38,7	40,9	43,2	45,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,6	119,2	120,9	122,6	124,3	126,0	127,8	129,6	131,3	133,2	135,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-29,71	-27,27	-24,65	-21,95	-19,24	-16,67	-14,44	-12,99	-13,29	-18,44	-47,50	—
	DMA	34,50	31,89	29,16	26,65	24,68	23,40	23,76	27,26	34,75	48,90	89,67	—
	PDMA	50,68	41,17	31,61	24,56	23,22	25,87	35,34	53,52	76,73	107,93	159,52	—
CPI	DM	-69,85	-65,31	-60,43	-55,40	-50,49	-46,08	-42,71	-41,48	-44,83	-60,39	-133,66	—
	DMA	75,86	70,25	64,26	58,09	52,15	47,01	45,15	49,92	63,17	90,79	178,86	—
	PDMA	87,08	72,45	57,77	43,12	29,88	19,42	21,29	37,48	56,43	80,24	124,42	—
SPI	DM	-0,27	0,63	1,58	2,57	3,68	4,90	6,29	7,91	9,83	12,32	15,69	—
	DMA	4,17	3,76	3,42	3,59	4,53	6,09	8,08	10,64	13,90	18,19	24,25	—
	PDMA	23,99	18,23	12,42	10,95	18,33	30,60	45,65	65,29	91,61	128,23	185,27	—
ΔCS	DM	-69,57	-65,94	-62,01	-57,97	-54,17	-50,98	-49,00	-49,39	-54,66	-72,71	-149,36	—
	DMA	71,70	66,49	60,84	54,50	47,61	40,92	37,07	39,28	49,27	72,60	154,61	—
	PDMA	63,09	54,23	45,34	32,17	11,55	-11,19	-24,37	-27,81	-35,18	-47,99	-60,85	—

Tabela 8.144: Constantes de acoplamento BPW91 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	353,3	377,4	401,9	426,6	451,5	476,7	502,2	527,9	553,8	579,9	606,3	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,2	23,6	21,8	20,0	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,5	-70,1	-72,7	-75,4	-78,1	-80,8	-83,5	-86,3	-89,1	-91,9	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,2	-11,3	-12,5	-13,6	-14,8	-16,0	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,7	47,5	48,4	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,7	-15,7	-16,7	-17,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,6	153,9	162,0	170,1	178,0	185,8	193,4	200,9	208,3	215,5	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,6	-1784,5	-1754,1	-1720,0	-1683,1	-1643,8	-1602,7	-1560,3	-1516,9	-1472,9	-1428,5	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,0	-160,8	-143,8	-126,8	-110,0	-93,3	-76,8	-60,4	-44,3	-28,3	-12,5	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,5	-45,8	-27,4	-9,1	8,9	26,7	44,5	62,0	79,4	96,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,7	-329,9	-368,6	-409,2	-454,4	-507,7	-575,7	-671,4	-827,4	-1153,6	-2525,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	121,9	123,5	125,1	126,7	128,4	130,0	131,7	133,4	135,2	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,7	193,9	197,7	202,2	207,5	213,8	221,6	231,2	243,3	259,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	253,6	256,2	259,1	262,1	265,6	269,5	274,1	279,5	286,1	294,6	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,1	46,5	42,8	37,9	31,2	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	22,8	26,3	30,7	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,7	65,9	69,5	73,7	78,7	84,9	93,0	104,3	121,5	152,0	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	154,1	156,4	158,9	161,6	164,7	168,3	172,6	178,2	186,4	200,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,4	-16,8	-23,7	-36,2	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,3	2,5	1,5	0,4	-0,8	-2,4	-4,5	-7,4	-11,7	-19,2	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,3	14,0	14,8	16,0	17,7	20,1	24,0	31,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,7	25,6	28,4	32,8	40,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,5	28,5	30,6	32,7	34,8	37,0	39,2	41,5	43,8	46,1	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	120,9	122,6	124,4	126,2	128,0	129,8	131,7	133,5	135,4	137,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,78	-27,30	-24,62	-21,82	-19,06	-16,45	-14,24	-12,89	-13,60	-20,42	-66,64	—
	DMA	34,83	32,20	29,59	27,40	25,75	24,63	25,37	29,43	38,30	55,08	114,82	—
	PDMA	48,80	38,79	30,31	27,13	28,58	32,18	43,83	64,76	91,77	130,26	202,77	—
CPI	DM	-70,94	-66,30	-61,33	-56,22	-51,31	-46,95	-43,80	-43,07	-47,78	-67,95	-183,19	—
	DMA	76,81	71,06	64,95	58,78	52,98	47,92	46,55	52,00	67,71	100,18	230,30	—
	PDMA	86,38	71,51	56,58	42,72	30,75	20,58	23,49	40,31	60,28	86,09	145,18	—
SPI	DM	0,40	1,31	2,31	3,41	4,59	5,92	7,43	9,25	11,47	14,44	18,83	—
	DMA	4,05	3,71	3,67	4,38	5,79	7,55	9,85	12,87	16,73	22,00	30,14	—
	PDMA	21,24	14,80	11,04	15,69	26,99	40,68	58,75	82,70	114,86	162,65	245,00	—
ΔCS	DM	-71,34	-67,61	-63,63	-59,62	-55,90	-52,87	-51,23	-52,32	-59,26	-82,39	-202,02	—
	DMA	72,76	67,36	61,28	54,40	47,20	40,37	36,70	39,13	50,98	78,18	200,16	—
	PDMA	65,14	56,71	45,54	27,03	3,76	-20,09	-35,26	-42,39	-54,58	-76,56	-99,82	—

Tabela 8.145: Constantes de acoplamento M05 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	847,0	840,1	833,5	827,3	821,4	815,9	810,8	805,8	801,1	796,4	791,7	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	13,7	11,3	8,5	5,3	1,7	-2,1	-6,2	-10,7	-15,5	-20,5	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-108,9	-108,7	-108,5	-108,3	-108,2	-108,0	-108,0	-108,0	-108,0	-108,1	-108,2	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-18,6	-18,7	-18,7	-18,6	-18,3	-17,9	-17,4	-16,7	-15,9	-15,0	-13,9	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,1	42,3	43,4	44,5	45,6	46,7	47,8	48,8	49,8	50,8	51,7	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-14,4	-15,2	-15,9	-16,4	-16,7	-16,9	-16,8	-16,5	-15,9	-15,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,5	166,8	168,2	173,0	180,3	188,9	198,1	207,2	215,9	224,1	231,8	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1357,6	-1376,0	-1386,5	-1388,9	-1383,6	-1372,0	-1355,3	-1334,8	-1311,8	-1287,0	-1261,2	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	2,2	8,2	14,9	22,3	30,5	39,5	49,5	60,5	72,8	86,3	101,3	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	102,9	111,1	119,8	129,1	139,0	149,8	161,4	174,1	187,8	202,7	218,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-218,9	-253,7	-282,8	-307,6	-330,0	-351,6	-374,7	-402,2	-439,1	-494,9	-592,4	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	80,9	87,2	93,5	99,8	106,1	112,4	118,7	125,0	131,1	137,1	142,9	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-20,8	-21,1	-21,2	-21,2	-21,0	-20,8	-20,4	-19,8	-19,2	-18,5	-17,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	182,9	192,0	201,6	211,8	222,6	234,0	246,1	258,8	272,4	286,7	302,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	223,0	232,1	240,9	249,5	257,6	265,4	272,7	279,3	285,2	290,2	294,4	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	35,8	36,1	36,4	36,6	36,7	36,7	36,8	36,7	36,4	35,9	34,9	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	19,6	20,1	20,4	20,6	20,7	20,7	20,6	20,4	20,2	20,1	20,2	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,9	64,1	70,7	77,9	85,7	94,1	103,3	113,2	123,9	135,6	148,4	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	127,7	135,5	143,2	150,8	158,4	165,8	173,1	180,1	187,0	193,6	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,4	-12,2	-13,1	-14,1	-15,1	-16,2	-17,3	-18,4	-19,6	-20,9	-22,4	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-16,0	-15,7	-15,1	-14,4	-13,6	-12,6	-11,4	-10,1	-8,8	-7,5	-6,4	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,5	15,2	15,8	16,3	16,7	17,0	17,2	17,3	17,3	17,3	17,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	15,6	17,0	18,2	19,4	20,5	21,4	22,2	22,9	23,4	23,9	24,4	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	15,2	18,5	21,9	25,6	29,4	33,3	37,5	41,9	46,4	51,2	56,2	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	80,1	86,6	93,0	99,5	106,0	112,6	119,1	125,6	132,0	138,4	144,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,5
Total	DM	14,12	14,15	14,88	16,33	18,34	20,78	23,51	26,32	28,94	31,01	31,60	—
	DMA	36,49	33,67	31,63	32,40	34,00	36,15	39,39	43,89	49,61	56,25	64,70	—
	PDMA	103,20	104,89	106,77	110,68	115,20	119,83	125,22	131,27	138,34	146,29	156,05	—
CPI	DM	51,42	46,94	44,09	42,82	42,84	43,81	45,35	47,03	48,27	48,14	44,51	—
	DMA	63,96	60,06	57,36	59,56	62,93	66,86	72,04	79,32	87,89	98,52	113,22	—
	PDMA	80,43	85,79	91,95	100,24	108,92	118,07	128,00	139,10	151,12	164,32	179,49	—
SPI	DM	-13,23	-9,89	-6,53	-3,10	0,37	3,89	7,50	11,13	14,77	18,45	22,13	—
	DMA	16,35	14,32	12,76	12,49	12,79	13,63	15,45	17,91	21,54	25,26	29,11	—
	PDMA	119,90	118,89	117,63	118,34	119,80	121,12	123,18	125,53	128,97	133,06	138,86	—
ΔCS	DM	64,64	56,83	50,62	45,92	42,46	39,92	37,85	35,89	33,51	29,69	22,38	—
	DMA	47,62	45,74	44,60	47,08	50,14	53,24	56,59	61,41	66,35	73,26	84,10	—
	PDMA	-39,47	-33,10	-25,68	-18,10	-10,89	-3,05	4,82	13,56	22,15	31,26	40,63	—

Tabela 8.146: Constantes de acoplamento M06 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	591,8	620,1	652,6	690,1	733,4	782,9	838,6	900,5	967,8	1039,5	1113,9	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	17,6	17,9	17,8	17,0	15,4	13,0	9,5	5,0	-0,8	-7,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-86,0	-90,6	-96,1	-102,7	-110,6	-120,0	-131,2	-144,5	-160,2	-178,9	-201,1	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-9,1	-13,3	-18,4	-24,8	-32,8	-42,7	-54,9	-70,2	-89,3	-113,0	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,2	46,1	49,6	53,7	58,6	64,4	71,6	80,3	91,1	104,7	122,2	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-10,7	-14,6	-19,7	-26,3	-35,0	-46,5	-62,0	-83,1	-112,3	-153,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	199,3	214,4	232,5	254,5	281,6	315,1	357,5	411,8	483,2	577,7	701,3	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1437,2	-1476,6	-1508,9	-1533,6	-1552,2	-1567,1	-1579,5	-1588,2	-1591,0	-1586,1	-1573,4	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-67,3	-57,9	-46,0	-31,5	-14,7	3,7	22,9	41,7	58,7	71,6	75,6	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	27,0	39,1	53,4	70,2	89,7	111,5	135,2	160,1	185,6	211,4	237,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-161,1	-211,1	-265,9	-328,2	-406,1	-530,0	-975,7	4267,8	-15,5	-222,3	-320,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,3	114,7	128,4	144,8	164,8	189,3	219,9	258,9	309,9	379,0	477,4	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-16,6	-21,5	-27,9	-36,3	-47,3	-62,2	-82,8	-112,3	-156,2	-225,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	161,7	170,7	182,5	199,5	227,4	285,4	502,3	-632,7	-14,0	128,2	5815,3	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,8	237,3	271,3	313,1	367,7	450,4	661,2	-166,8	360,7	495,3	-161,9	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,7	51,3	51,6	49,0	39,6	9,0	-141,1	758,3	315,4	282,8	1065,0	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,6	9,7	13,2	19,3	31,2	60,3	184,0	-514,8	-158,3	-117,3	-2,3	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,1	54,6	59,6	67,7	83,1	126,0	1247,1	-64,0	-10,1	6,5	13,8	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,3	146,9	166,9	191,8	225,2	282,2	1104,7	218,8	304,5	376,2	458,4	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,7	-0,9	-3,5	-8,1	-17,7	-46,3	-834,9	91,9	56,9	48,8	48,6	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-5,9	-9,6	-15,6	-26,7	-56,4	-792,0	61,8	21,0	1,6	-16,5	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,0	12,5	14,7	18,6	26,8	52,5	782,6	-78,9	-49,1	-45,4	-50,8	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,1	14,6	18,1	23,5	33,7	62,4	821,1	-67,9	-32,7	-23,3	-21,2	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,1	22,9	26,4	30,8	36,4	43,5	52,9	65,7	83,6	110,1	152,2	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	113,2	127,4	144,5	165,3	190,7	222,4	262,9	316,0	388,7	493,8	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,6	-4,2	-6,2	-8,8	-12,3	-17,2	-24,3	-34,8	-51,6	-80,4	-4,5
Total	DM	2,57	4,50	7,53	11,93	18,10	27,34	104,90	162,37	51,59	67,38	306,16	—
	DMA	15,05	13,69	17,25	28,57	46,70	76,59	322,40	351,00	132,07	141,40	416,55	—
	PDMA	33,41	34,22	50,56	90,51	162,30	332,17	3787,41	849,27	476,79	466,91	737,77	—
CPI	DM	19,90	16,99	15,16	14,35	13,75	10,34	-21,02	466,15	88,82	83,71	89,65	—
	DMA	20,66	24,85	31,36	45,60	66,35	92,95	151,25	522,86	156,33	163,56	190,56	—
	PDMA	18,66	22,39	40,46	64,74	95,40	132,91	189,22	362,18	287,27	354,98	446,38	—
SPI	DM	-10,14	-4,66	1,93	10,17	21,29	39,81	197,23	-60,41	24,29	55,41	464,93	—
	DMA	10,93	5,51	6,91	16,07	32,29	64,59	447,90	224,96	114,28	125,15	582,28	—
	PDMA	44,23	42,90	57,97	109,41	211,36	478,29	6426,09	1206,46	615,78	549,00	951,46	—
ΔCS	DM	30,04	21,65	13,23	4,18	-7,55	-29,47	-218,25	526,57	64,52	28,30	-375,28	—
	DMA	9,74	19,33	24,46	29,53	34,05	28,36	-296,65	297,90	42,05	38,41	-391,72	—
	PDMA	-25,57	-20,51	-17,51	-44,67	-115,96	-345,38	-6236,87	-844,28	-328,51	-194,02	-505,08	—

Tabela 8.147: Constantes de acoplamento M062X e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	445,9	449,4	453,4	459,1	467,4	479,5	496,4	519,2	548,9	586,4	632,6	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	3,7	4,7	5,7	6,6	7,2	7,4	7,1	6,0	3,7	-0,2	-6,8	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,4	-75,6	-78,2	-81,3	-85,0	-89,5	-95,0	-101,7	-109,8	-119,5	-131,3	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,0	1,5	-0,3	-2,7	-5,7	-9,5	-14,4	-20,5	-28,2	-38,1	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,2	40,2	42,4	45,0	48,0	51,6	55,9	60,9	66,9	74,2	83,1	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,7	-2,1	-4,0	-6,4	-9,5	-13,6	-18,9	-25,9	-35,2	-47,6	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,0	134,2	137,3	142,7	150,6	161,6	176,1	195,1	219,2	250,0	289,5	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1442,3	-1488,8	-1533,3	-1573,0	-1603,7	-1622,0	-1627,6	-1623,0	-1612,8	-1602,7	-1596,7	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-166,8	-163,3	-156,4	-146,7	-135,1	-122,1	-107,7	-92,3	-75,9	-58,8	-41,4	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-89,3	-80,2	-68,9	-56,0	-41,7	-26,4	-10,0	7,5	26,7	47,8	70,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-156,6	-199,7	-246,2	-295,8	-348,4	-404,9	-468,8	-550,1	-685,1	-1305,2	-2162,3	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	86,4	93,7	102,1	112,1	123,7	137,5	153,9	173,6	197,4	226,6	262,9	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,2	-1,3	-2,8	-4,8	-7,3	-10,5	-14,7	-20,1	-27,3	-36,8	-49,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	167,7	174,7	182,9	192,6	204,6	220,1	241,5	273,9	331,7	472,8	1542,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	142,4	159,4	178,9	201,1	226,7	256,7	292,4	336,8	397,0	500,5	1037,2	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	46,7	49,1	51,6	53,9	55,8	56,9	56,2	51,7	36,8	-14,6	-491,4	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	4,3	4,8	5,3	6,0	7,0	8,5	10,9	15,4	24,8	51,4	274,4	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,5	63,3	67,0	71,7	78,0	86,7	99,5	120,7	162,3	284,8	14163,1	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	99,2	109,3	120,9	134,4	150,2	169,0	192,0	221,3	263,2	345,6	6656,1	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	6,3	5,6	4,7	3,5	1,7	-1,0	-5,4	-13,2	-30,1	-83,1	-6358,9	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,0	7,0	6,8	6,4	5,7	4,4	2,2	-1,8	-10,4	-37,0	-3080,4	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,1	9,5	9,9	10,5	11,2	12,3	14,1	17,4	24,8	49,5	3090,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	9,4	10,7	12,0	13,6	15,4	17,7	20,8	25,9	35,5	63,8	3278,1	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,4	29,9	33,0	36,6	41,1	46,4	53,0	61,2	71,5	84,8	102,2	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	84,0	91,7	100,8	111,4	123,8	138,4	155,8	176,6	201,7	232,6	271,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,5	0,7	-0,2	-1,5	-3,0	-5,0	-7,5	-10,8	-15,3	-21,7	-4,5
Total	DM	-16,83	-17,48	-17,60	-16,98	-15,40	-12,56	-8,32	-2,56	4,49	1,83	686,17	—
	DMA	31,84	28,65	25,28	22,30	22,04	25,00	30,91	39,70	59,08	116,85	1624,81	—
	PDMA	91,08	82,39	71,97	60,77	48,15	34,61	35,75	71,06	149,76	374,97	20574,73	—
CPI	DM	-17,96	-24,65	-30,84	-36,19	-40,38	-43,13	-44,65	-46,01	-50,82	-98,71	-167,50	—
	DMA	47,56	45,55	42,27	39,34	43,11	45,40	46,97	49,25	64,69	133,27	226,63	—
	PDMA	106,44	96,76	84,48	71,30	59,76	46,70	38,70	41,11	61,22	116,97	189,03	—
SPI	DM	-15,99	-12,23	-7,90	-2,90	2,92	9,85	18,33	29,31	45,05	75,55	1312,20	—
	DMA	20,31	16,25	12,82	9,81	6,59	10,04	19,13	32,71	54,97	104,81	2650,15	—
	PDMA	79,81	71,85	62,80	53,05	39,63	25,75	33,59	93,03	214,68	564,17	35524,24	—
ΔCS	DM	-1,97	-12,43	-22,94	-33,29	-43,30	-52,98	-62,97	-75,32	-95,87	-174,26	-1479,70	—
	DMA	27,25	29,29	29,45	29,53	36,52	35,36	27,85	16,54	9,72	28,47	-2423,52	—
	PDMA	26,63	24,91	21,68	18,25	20,14	20,95	5,11	-51,92	-153,46	-447,19	-35335,21	—

Tabela 8.148: Constantes de acoplamento OLYP e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	363,4	391,6	420,1	449,1	478,5	508,2	538,4	568,9	599,7	630,9	662,5	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,0	21,8	19,5	17,1	14,6	12,0	9,4	6,6	3,8	0,9	-1,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-69,4	-72,7	-76,1	-79,5	-83,0	-86,5	-90,1	-93,7	-97,3	-101,1	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-17,3	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,5	42,7	44,0	45,3	46,6	47,9	49,3	50,6	52,0	53,4	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,7	-16,7	-17,7	-18,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,8	167,5	176,1	184,5	192,8	201,0	209,0	216,8	224,5	231,9	239,2	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1702,2	-1685,7	-1665,4	-1642,0	-1616,2	-1588,5	-1559,4	-1529,4	-1498,8	-1467,9	-1437,0	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-181,4	-160,8	-140,7	-121,1	-102,0	-83,5	-65,6	-48,2	-31,4	-15,1	0,6	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-90,5	-67,4	-45,0	-23,1	-1,8	18,8	38,9	58,4	77,4	95,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-254,6	-290,9	-327,9	-367,1	-410,6	-461,8	-526,5	-616,5	-760,6	-1056,6	-2253,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,2	121,1	124,1	127,1	130,2	133,3	136,4	139,6	142,9	146,1	149,4	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,4	192,0	197,1	202,6	208,8	215,7	223,5	232,3	242,5	254,4	268,4	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,4	258,1	263,0	268,0	273,2	278,7	284,6	290,9	297,7	305,1	313,5	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,0	52,8	52,4	51,7	50,7	49,3	47,6	45,2	42,1	38,1	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,2	12,9	13,7	14,7	15,9	17,3	18,9	20,9	23,2	26,0	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,8	64,6	68,7	73,2	78,2	83,9	90,5	98,4	108,1	120,9	139,0	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,7	156,5	160,4	164,4	168,6	173,1	177,9	183,2	189,3	196,5	205,7	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-3,1	-4,3	-5,6	-7,2	-9,2	-11,6	-14,8	-19,1	-25,4	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,8	2,2	1,5	0,8	0,0	-1,1	-2,3	-3,9	-6,1	-9,3	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,6	13,1	13,6	14,2	14,9	15,8	17,0	18,5	20,6	23,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,8	20,3	21,0	21,7	22,6	23,6	25,0	26,8	29,3	32,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,9	30,4	33,0	35,6	38,4	41,1	43,9	46,8	49,7	52,7	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,4	121,5	124,6	127,8	131,0	134,2	137,5	140,8	144,1	147,5	150,9	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-4,5
Total	DM	-23,60	-20,55	-17,40	-14,20	-11,05	-8,09	-5,57	-3,89	-4,16	-10,08	-50,34	—
	DMA	30,64	25,39	23,16	21,60	20,51	20,60	24,61	32,04	41,79	57,75	109,44	—
	PDMA	45,59	34,13	28,54	26,49	27,53	31,75	47,97	66,68	88,77	116,77	163,62	—
CPI	DM	-56,35	-51,35	-46,21	-41,04	-36,13	-31,87	-28,79	-28,04	-32,25	-50,34	-150,43	—
	DMA	67,00	54,83	48,57	42,51	36,95	33,80	39,54	52,71	70,67	102,34	216,94	—
	PDMA	85,23	65,22	50,09	36,45	24,66	17,91	35,57	55,56	77,10	103,05	157,42	—
SPI	DM	0,42	2,04	3,73	5,49	7,35	9,35	11,47	13,82	16,44	19,43	23,05	—
	DMA	3,98	3,80	4,53	6,26	8,45	10,92	13,67	16,89	20,61	25,05	30,61	—
	PDMA	16,52	11,33	12,74	19,19	29,64	41,90	57,06	74,83	97,33	126,83	168,17	—
ΔCS	DM	-56,77	-53,39	-49,94	-46,52	-43,47	-41,22	-40,26	-41,86	-48,69	-69,77	-173,48	—
	DMA	63,02	51,03	44,05	36,25	28,49	22,88	25,87	35,82	50,06	77,29	186,32	—
	PDMA	68,70	53,89	37,36	17,26	-4,98	-23,99	-21,49	-19,26	-20,23	-23,78	-10,75	—

Tabela 8.149: Constantes de acoplamento PBE e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	397,8	419,7	441,9	464,3	486,9	509,8	532,8	556,1	579,6	603,3	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,5	20,8	19,1	17,3	15,4	13,5	11,5	9,5	7,4	5,3	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-69,5	-71,8	-74,2	-76,6	-79,0	-81,4	-83,9	-86,4	-88,9	-91,5	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-10,0	-11,1	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,1	45,8	46,6	47,4	48,2	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	142,1	150,4	158,7	166,9	175,1	183,1	191,1	198,9	206,7	214,3	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1776,9	-1748,1	-1715,3	-1679,4	-1640,8	-1600,3	-1558,1	-1514,9	-1470,9	-1426,5	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-155,9	-139,2	-122,7	-106,5	-90,4	-74,6	-59,0	-43,7	-28,6	-13,8	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-57,5	-39,4	-21,7	-4,2	12,9	29,9	46,6	63,0	79,2	95,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-316,3	-354,9	-395,6	-440,5	-493,5	-560,8	-655,5	-809,2	-1129,5	-2453,2	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,7	122,1	123,5	125,0	126,5	128,0	129,6	131,2	132,8	134,4	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19,0	-19,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	191,5	194,6	198,3	202,6	207,6	213,7	221,0	230,2	241,9	257,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,2	254,8	257,6	260,7	264,1	268,0	272,5	277,9	284,6	293,3	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,1	53,7	53,2	52,2	50,9	49,0	46,5	42,9	38,1	31,2	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	11,1	11,9	12,9	14,1	15,6	17,4	19,6	22,5	26,1	30,9	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,0	67,0	70,4	74,4	79,1	85,0	92,8	103,6	120,3	150,7	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,9	156,1	158,5	161,1	164,0	167,5	171,6	177,1	185,2	199,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,1	-12,2	-16,5	-23,4	-36,1	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,7	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,1	-7,0	-11,4	-19,4	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,1	12,5	13,0	13,6	14,5	15,7	17,3	19,7	23,7	31,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	19,5	20,1	20,9	21,9	23,3	25,2	28,0	32,5	41,0	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	27,6	29,4	31,3	33,3	35,2	37,2	39,3	41,3	43,4	45,6	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	121,1	122,7	124,3	126,0	127,7	129,4	131,2	133,0	134,8	136,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-27,66	-25,37	-22,92	-20,36	-17,79	-15,38	-13,33	-12,14	-12,97	-19,75	-64,28	—
	DMA	33,11	29,98	27,58	25,61	24,12	23,20	24,52	28,53	37,29	53,63	111,52	—
	PDMA	46,79	36,70	28,35	24,12	25,30	29,47	42,95	63,19	89,75	128,06	201,20	—
CPI	DM	-66,10	-61,91	-57,36	-52,70	-48,17	-44,18	-41,34	-40,90	-45,77	-65,75	-176,96	—
	DMA	73,14	66,27	60,65	54,88	49,52	44,91	44,97	50,46	66,03	97,54	223,15	—
	PDMA	81,49	66,47	52,05	37,88	26,01	16,82	24,72	40,92	60,00	84,80	141,38	—
SPI	DM	0,53	1,42	2,33	3,36	4,49	5,75	7,21	8,95	11,09	13,99	18,36	—
	DMA	3,76	3,37	3,32	4,15	5,50	7,28	9,52	12,44	16,21	21,43	29,67	—
	PDMA	21,33	14,88	10,98	14,03	24,78	38,74	56,33	79,52	111,56	159,78	245,08	—
ΔCS	DM	-66,63	-63,33	-59,70	-56,06	-52,66	-49,93	-48,55	-49,85	-56,87	-79,74	-195,32	—
	DMA	69,38	62,91	57,33	50,74	44,02	37,63	35,45	38,02	49,81	76,11	193,48	—
	PDMA	60,16	51,59	41,08	23,86	1,23	-21,92	-31,61	-38,60	-51,56	-74,97	-103,69	—

Tabela 8.150: Constantes de acoplamento PW91 e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,2	387,4	410,8	434,5	458,3	482,4	506,7	531,2	556,0	581,0	606,3	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,6	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,2	4,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,7	-71,2	-73,7	-76,2	-78,7	-81,3	-83,9	-86,5	-89,2	-91,9	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,4	-13,5	-14,7	-16,0	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,7	44,5	45,2	46,0	46,8	47,6	48,4	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,7	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,6	145,9	154,0	162,1	170,0	177,9	185,7	193,3	200,8	208,2	215,5	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1815,2	-1790,1	-1760,3	-1726,4	-1689,3	-1649,5	-1607,6	-1564,2	-1519,7	-1474,3	-1428,5	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,6	-160,4	-143,4	-126,4	-109,6	-93,0	-76,5	-60,2	-44,1	-28,2	-12,5	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,8	-25,6	-7,6	10,2	27,8	45,3	62,5	79,6	96,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,5	-328,8	-367,5	-408,1	-453,0	-506,0	-573,5	-668,7	-823,8	-1148,9	-2525,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	121,5	122,9	124,3	125,8	127,3	128,8	130,4	131,9	133,5	135,2	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,2	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,7	198,5	202,8	208,0	214,2	221,8	231,3	243,3	259,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,5	254,8	257,3	259,9	262,8	266,1	269,8	274,3	279,6	286,1	294,6	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,2	46,6	43,0	38,0	31,2	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,0	13,0	14,2	15,7	17,5	19,7	22,5	26,1	30,7	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,3	66,4	69,9	74,0	78,9	85,0	92,9	104,1	121,2	152,0	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,0	155,1	157,3	159,6	162,2	165,1	168,5	172,7	178,2	186,2	200,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,1	-12,1	-16,5	-23,5	-36,2	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-19,2	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,1	13,8	14,7	15,8	17,4	19,8	23,8	31,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,5	25,4	28,1	32,6	40,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,0	29,0	31,0	33,1	35,1	37,3	39,4	41,6	43,8	46,1	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	121,9	123,5	125,1	126,8	128,5	130,2	132,0	133,7	135,5	137,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,11	-26,74	-24,17	-21,49	-18,79	-16,22	-14,05	-12,73	-13,44	-20,25	-66,64	—
	DMA	34,28	31,76	29,27	27,23	25,62	24,53	25,37	29,39	38,33	54,95	114,82	—
	PDMA	48,66	38,61	29,79	25,42	26,81	30,63	42,86	63,37	90,40	129,05	202,77	—
CPI	DM	-70,02	-65,58	-60,79	-55,84	-51,01	-46,69	-43,55	-42,82	-47,46	-67,52	-183,19	—
	DMA	75,69	70,16	64,26	58,18	52,52	47,55	46,49	51,96	67,92	100,01	230,30	—
	PDMA	84,97	70,22	55,52	41,22	29,15	19,30	23,87	40,65	60,47	85,98	145,18	—
SPI	DM	0,89	1,75	2,69	3,70	4,83	6,12	7,58	9,34	11,51	14,42	18,83	—
	DMA	3,91	3,60	3,61	4,53	5,89	7,65	9,87	12,83	16,64	21,90	30,14	—
	PDMA	22,04	15,44	10,93	13,84	25,08	38,94	56,77	80,02	112,35	160,64	245,00	—
ΔCS	DM	-70,90	-67,33	-63,48	-59,54	-55,84	-52,81	-51,13	-52,16	-58,97	-81,94	-202,02	—
	DMA	71,78	66,56	60,66	53,66	46,63	39,89	36,62	39,13	51,28	78,11	200,16	—
	PDMA	62,93	54,78	44,59	27,37	4,07	-19,64	-32,90	-39,37	-51,88	-74,65	-99,82	—

Tabela 8.151: Constantes de acoplamento TPSSh e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	366,0	390,6	415,1	439,7	464,2	488,7	513,1	537,4	561,6	585,8	610,0	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	20,3	18,8	17,3	15,7	14,0	12,3	10,5	8,7	6,8	4,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,2	-72,5	-74,9	-77,3	-79,6	-82,0	-84,3	-86,6	-88,9	-91,1	-93,4	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-5,3	-6,6	-7,8	-9,1	-10,3	-11,5	-12,7	-13,9	-15,1	-16,2	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,3	45,8	46,4	46,9	47,3	47,8	48,3	48,8	49,2	49,7	50,1	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-8,1	-9,3	-10,4	-11,6	-12,7	-13,8	-14,9	-15,9	-17,0	-17,9	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,7	200,5	205,0	209,3	213,4	217,2	220,8	224,1	227,2	230,0	232,6	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1757,5	-1731,7	-1703,3	-1673,0	-1641,1	-1608,0	-1574,1	-1539,7	-1504,9	-1470,0	-1435,2	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-156,7	-142,5	-128,4	-114,3	-100,2	-86,1	-72,1	-58,1	-44,2	-30,3	-16,4	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,8	-47,2	-30,7	-14,3	1,8	17,8	33,8	49,6	65,2	80,8	96,3	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-282,7	-320,1	-359,5	-402,5	-451,3	-510,0	-585,2	-690,4	-857,9	-1192,7	-2403,5	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,0	138,8	139,6	140,4	141,1	141,9	142,6	143,2	143,8	144,4	144,9	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-11,3	-12,4	-13,4	-14,5	-15,5	-16,5	-17,4	-18,4	-19,3	-20,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,5	190,8	194,6	198,9	203,9	209,8	216,7	225,0	234,9	247,0	262,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	280,6	282,3	284,1	286,1	288,3	290,8	293,7	297,1	301,3	306,4	312,9	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,3	57,7	56,9	55,8	54,3	52,4	50,0	46,9	43,0	38,0	31,5	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,0	12,6	13,5	14,5	15,7	17,3	19,1	21,4	24,1	27,5	31,8	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,8	71,5	74,5	78,0	82,1	87,0	93,1	100,9	111,6	127,4	153,5	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	172,7	174,3	176,1	178,0	180,1	182,5	185,3	188,9	193,6	200,5	211,7	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,7	-3,0	-4,5	-6,2	-8,3	-10,9	-14,3	-18,9	-25,6	-36,8	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,4	8,2	6,8	5,4	3,8	2,0	0,0	-2,5	-5,8	-10,3	-17,4	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,5	13,0	13,7	14,5	15,5	16,9	18,6	21,1	24,9	31,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,1	22,5	22,9	23,5	24,2	25,2	26,6	28,4	31,1	35,2	42,2	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,9	34,4	35,8	37,2	38,7	40,1	41,5	42,9	44,2	45,6	46,9	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	137,9	138,9	140,0	141,0	141,9	142,9	143,8	144,7	145,5	146,3	147,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-4,5
Total	DM	-18,53	-16,51	-14,46	-12,44	-10,57	-8,95	-7,84	-7,77	-9,88	-18,07	-59,32	—
	DMA	30,77	29,04	27,76	26,74	26,07	26,10	28,95	34,20	43,80	60,53	112,82	—
	PDMA	53,56	43,69	36,81	33,25	31,38	32,16	49,61	71,53	99,13	136,68	201,85	—
CPI	DM	-55,23	-51,33	-47,44	-43,71	-40,45	-38,00	-37,01	-38,76	-46,20	-68,86	-171,19	—
	DMA	61,15	56,33	52,20	48,22	44,88	42,91	46,92	55,55	73,38	106,41	220,41	—
	PDMA	69,95	56,75	43,87	31,30	21,53	16,47	30,50	47,07	66,05	90,48	142,42	—
SPI	DM	8,39	9,03	9,72	10,49	11,35	12,36	13,55	14,97	16,75	19,18	22,71	—
	DMA	8,49	9,03	9,84	10,99	12,28	13,77	15,77	18,55	22,11	26,89	33,91	—
	PDMA	41,54	34,11	31,64	34,69	38,61	43,67	63,62	89,47	123,38	170,55	245,43	—
ΔCS	DM	-63,61	-60,35	-57,16	-54,20	-51,79	-50,36	-50,56	-53,73	-62,95	-88,04	-193,90	—
	DMA	52,66	47,30	42,36	37,23	32,60	29,14	31,14	36,99	51,27	79,52	186,50	—
	PDMA	28,41	22,64	12,23	-3,39	-17,08	-27,20	-33,12	-42,41	-57,32	-80,06	-103,01	—

Tabela 8.152: Constantes de acoplamento X3LYP e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	397,3	422,2	447,3	472,6	498,2	524,1	550,1	576,4	602,9	629,7	656,7	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,5	19,7	17,7	15,6	13,4	11,1	8,8	6,3	3,8	1,2	-1,4	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-75,0	-77,6	-80,4	-83,1	-85,8	-88,6	-91,5	-94,3	-97,2	-100,1	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	45,3	46,1	46,9	47,8	48,6	49,4	50,3	51,2	52,0	52,9	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,3	-17,3	-18,4	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,3	166,8	175,2	183,5	191,6	199,6	207,5	215,2	222,7	230,0	237,2	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,7	-1787,4	-1757,6	-1724,0	-1687,4	-1648,2	-1607,1	-1564,6	-1521,0	-1476,7	-1432,0	-1.442,80
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-168,0	-150,4	-132,9	-115,6	-98,4	-81,4	-64,6	-47,9	-31,5	-15,3	0,7	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-69,5	-50,4	-31,4	-12,7	5,7	24,0	42,1	60,0	77,8	95,3	112,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,3	-317,2	-354,2	-392,9	-435,5	-485,2	-547,9	-635,3	-775,4	-1061,6	-2173,7	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,8	133,3	134,9	136,5	138,1	139,7	141,4	143,0	144,7	146,4	148,2	123
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,7	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,6	202,6	206,0	210,0	214,5	219,9	226,1	233,6	242,6	253,6	267,3	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	272,4	274,9	277,4	280,1	283,0	286,2	289,8	293,8	298,5	304,0	310,7	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,0	56,9	56,6	56,1	55,2	54,0	52,3	50,1	47,2	43,4	38,4	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,7	19,8	22,4	25,6	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,9	69,8	73,1	76,7	80,8	85,6	91,3	98,4	107,5	119,9	138,1	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,3	168,5	170,8	173,3	175,9	178,8	182,0	185,7	190,2	196,0	204,0	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,6	-1,6	-2,8	-4,1	-5,7	-7,7	-10,2	-13,5	-18,1	-25,0	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,4	4,6	3,7	2,7	1,7	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,1	13,5	13,9	14,6	15,4	16,4	17,9	20,0	23,3	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,2	20,5	21,0	21,5	22,3	23,2	24,5	26,2	28,7	32,4	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,4	31,5	33,7	35,9	38,1	40,4	42,7	45,1	47,5	49,9	52,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	133,1	134,8	136,6	138,4	140,3	142,1	144,0	145,9	147,8	149,7	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-4,5
Total	DM	-22,78	-20,20	-17,44	-14,57	-11,71	-8,94	-6,55	-4,95	-5,17	-10,76	-47,71	—
	DMA	32,82	30,21	28,03	26,12	24,69	24,58	28,69	34,75	43,22	57,77	105,67	—
	PDMA	48,74	39,35	30,03	24,00	22,24	26,91	42,92	61,20	83,38	112,22	160,00	—
CPI	DM	-62,66	-57,86	-52,69	-47,38	-42,18	-37,43	-33,73	-32,18	-35,36	-51,82	-143,35	—
	DMA	67,92	60,88	54,64	48,35	43,04	40,41	47,36	58,45	74,20	103,13	209,07	—
	PDMA	72,69	57,25	42,07	28,32	20,20	20,60	37,82	56,59	77,00	101,81	153,07	—
SPI	DM	6,46	7,41	8,41	9,49	10,63	11,95	13,37	15,03	16,98	19,35	22,43	—
	DMA	7,07	7,72	8,53	9,81	11,23	12,97	15,00	17,36	20,50	24,51	29,84	—
	PDMA	31,18	26,23	21,20	20,83	23,73	31,54	46,67	64,59	88,06	119,85	165,09	—
ΔCS	DM	-69,12	-65,28	-61,10	-56,88	-52,82	-49,38	-47,10	-47,21	-52,34	-71,17	-165,77	—
	DMA	60,84	53,16	46,11	38,53	31,80	27,44	32,36	41,09	53,70	78,61	179,23	—
	PDMA	41,51	31,02	20,87	7,49	-3,53	-10,95	-8,85	-8,00	-11,06	-18,04	-12,02	—

Tabela 8.153: Constantes de acoplamento B1B95 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	403,9	427,5	451,2	475,2	499,3	523,6	548,0	572,6	597,4	622,3	647,4	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,4	21,7	19,9	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	2,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-72,8	-75,3	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-88,2	-90,8	-93,5	-96,2	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	42,7	43,4	44,1	44,9	45,6	46,4	47,2	47,9	48,7	49,5	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	146,7	154,4	161,8	169,2	176,5	183,6	190,6	197,4	204,1	210,7	217,0	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1716,6	-1695,0	-1669,0	-1639,2	-1606,4	-1571,1	-1533,7	-1494,9	-1454,9	-1414,1	-1372,8	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-174,7	-157,8	-141,0	-124,2	-107,5	-91,0	-74,6	-58,3	-42,2	-26,3	-10,5	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,7	-60,1	-41,7	-23,4	-5,3	12,6	30,3	47,9	65,3	82,6	99,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,9	-301,3	-334,9	-368,7	-404,3	-443,7	-490,0	-548,8	-631,2	-765,1	-1048,5	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	122,0	123,3	124,7	126,1	127,5	129,0	130,4	131,9	133,4	134,9	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,0	-13,7	-14,4	-15,0	-15,7	-16,4	-17,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,2	192,9	195,8	199,3	203,2	207,7	213,0	219,2	226,6	235,5	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,5	254,5	256,6	258,8	261,2	263,7	266,5	269,6	273,2	277,3	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,7	55,5	55,2	54,6	53,8	52,6	51,1	49,1	46,4	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,5	10,0	10,6	11,2	12,0	13,0	14,1	15,4	17,0	18,9	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	61,2	63,8	66,5	69,6	73,0	76,8	81,2	86,5	92,8	100,8	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,4	155,3	157,2	159,2	161,3	163,5	165,9	168,5	171,4	174,7	178,7	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,4	4,7	4,0	3,3	2,5	1,6	0,6	-0,5	-1,9	-3,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,8	13,3	13,9	14,7	15,6	16,9	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,0	19,4	19,9	20,4	21,1	22,0	23,2	24,7	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,0	31,0	33,0	35,0	37,1	39,2	41,3	43,5	45,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	122,2	123,7	125,3	126,9	128,5	130,1	131,8	133,4	135,0	136,7	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,7	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,5
Total	DM	-22,50	-20,17	-17,65	-14,97	-12,20	-9,48	-6,91	-4,70	-3,30	-3,76	-9,83	—
	DMA	28,87	24,99	22,44	19,96	17,76	16,13	17,50	21,64	27,15	37,08	54,03	—
	PDMA	52,99	43,05	33,64	24,06	16,68	14,22	22,58	36,76	52,42	70,91	94,02	—
CPI	DM	-54,59	-50,15	-45,32	-40,14	-34,88	-29,81	-25,20	-21,62	-20,13	-23,28	-40,05	—
	DMA	62,81	54,05	48,10	41,92	35,65	30,23	31,45	38,96	49,42	69,77	105,88	—
	PDMA	82,11	66,26	51,53	37,17	22,79	13,15	21,43	38,03	55,87	75,73	100,63	—
SPI	DM	1,03	1,81	2,64	3,49	4,44	5,43	6,51	7,70	9,04	10,55	12,33	—
	DMA	3,97	3,68	3,63	3,85	4,64	5,79	7,27	8,94	10,83	13,10	16,00	—
	PDMA	31,63	26,03	20,51	14,44	12,21	15,01	23,43	35,83	49,88	67,38	89,18	—
ΔCS	DM	-55,62	-51,97	-47,96	-43,63	-39,32	-35,24	-31,71	-29,32	-29,17	-33,84	-52,38	—
	DMA	58,84	50,37	44,47	38,06	31,01	24,44	24,19	30,02	38,59	56,67	89,88	—
	PDMA	50,49	40,23	31,02	22,72	10,57	-1,87	-2,01	2,21	5,99	8,34	11,44	—

Tabela 8.154: Constantes de acoplamento B3LYP e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	393,4	418,4	443,6	469,1	494,8	520,8	547,0	573,4	600,0	626,9	654,0	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	19,9	17,9	15,8	13,6	11,4	9,0	6,5	4,0	1,4	-1,2	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,7	-74,4	-77,1	-79,8	-82,5	-85,3	-88,1	-91,0	-93,8	-96,7	-99,6	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-15,6	-16,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	49,2	50,0	50,9	51,8	52,7	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,2	-17,2	-18,2	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,6	166,1	174,5	182,7	190,9	198,8	206,7	214,3	221,8	229,2	236,3	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,3	-1784,6	-1754,5	-1720,8	-1684,0	-1644,8	-1603,8	-1561,4	-1518,1	-1474,0	-1429,6	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-167,7	-150,2	-132,7	-115,4	-98,2	-81,2	-64,4	-47,8	-31,4	-15,2	0,7	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,2	-51,0	-32,1	-13,3	5,1	23,4	41,5	59,5	77,2	94,8	112,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,0	-316,8	-353,7	-392,3	-434,8	-484,4	-547,0	-634,0	-773,3	-1056,7	-2138,3	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,0	132,6	134,1	135,7	137,4	139,0	140,7	142,4	144,1	145,9	147,6	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,9	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,7	-16,4	-17,2	-17,9	-18,6	-19,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,3	202,3	205,8	209,7	214,3	219,6	225,8	233,3	242,3	253,2	266,8	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	271,1	273,5	276,1	278,9	281,8	285,0	288,6	292,6	297,3	302,7	309,4	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	56,8	56,5	56,0	55,1	53,9	52,3	50,1	47,2	43,5	38,5	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,6	19,7	22,2	25,4	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,6	69,5	72,8	76,4	80,5	85,3	91,1	98,1	107,2	119,6	137,7	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,4	167,7	170,0	172,5	175,1	178,0	181,2	185,0	189,5	195,2	203,3	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,5	-1,6	-2,7	-4,1	-5,7	-7,7	-10,1	-13,4	-18,0	-24,8	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,3	4,5	3,6	2,7	1,6	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,7	13,0	13,4	13,8	14,5	15,3	16,3	17,8	19,9	23,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,0	20,4	20,8	21,4	22,2	23,1	24,4	26,1	28,5	32,3	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,2	31,3	33,5	35,7	37,9	40,2	42,6	44,9	47,3	49,8	52,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,5	132,3	134,1	135,9	137,7	139,6	141,5	143,3	145,2	147,2	149,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,7	-4,5
Total	DM	-23,12	-20,52	-17,73	-14,84	-11,95	-9,18	-6,77	-5,15	-5,35	-10,83	-46,62	—
	DMA	32,77	30,31	28,12	26,20	24,69	24,46	28,24	34,27	42,73	57,19	104,12	—
	PDMA	48,43	39,03	29,50	24,24	22,92	28,16	44,27	62,59	85,31	114,72	163,06	—
CPI	DM	-63,15	-58,30	-53,10	-47,75	-42,50	-37,73	-34,01	-32,45	-35,57	-51,75	-140,53	—
	DMA	68,14	61,39	55,10	48,80	43,26	40,33	46,48	57,54	73,23	101,95	205,64	—
	PDMA	73,06	57,71	42,59	29,01	20,39	19,91	37,11	55,88	76,15	101,00	151,36	—
SPI	DM	6,24	7,19	8,21	9,29	10,45	11,75	13,21	14,87	16,81	19,19	22,25	—
	DMA	6,83	7,52	8,34	9,63	11,07	12,82	14,87	17,20	20,37	24,36	29,67	—
	PDMA	30,37	25,33	19,90	20,74	24,77	34,22	49,52	67,50	92,04	124,78	171,64	—
ΔCS	DM	-69,39	-65,49	-61,31	-57,04	-52,95	-49,48	-47,22	-47,31	-52,39	-70,94	-162,77	—
	DMA	61,31	53,87	46,76	39,17	32,20	27,51	31,62	40,34	52,85	77,59	175,96	—
	PDMA	42,70	32,38	22,70	8,27	-4,38	-14,31	-12,41	-11,62	-15,89	-23,78	-20,27	—

Tabela 8.155: Constantes de acoplamento B3P86 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	357,7	381,4	405,4	429,5	454,0	478,6	503,5	528,5	553,8	579,3	605,0	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	23,1	21,3	19,5	17,5	15,5	13,4	11,3	9,1	6,8	4,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,2	-67,8	-70,3	-72,9	-75,5	-78,1	-80,8	-83,4	-86,1	-88,9	-91,6	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,6	-6,5	-7,6	-8,6	-9,6	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,3	41,1	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,6	47,5	48,3	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,0	-15,9	-16,9	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	138,4	146,6	154,6	162,6	170,5	178,2	185,8	193,3	200,6	207,8	214,8	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1804,0	-1778,3	-1748,1	-1714,4	-1677,8	-1638,8	-1598,0	-1555,9	-1512,8	-1469,1	-1425,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-175,5	-158,4	-141,4	-124,6	-107,9	-91,3	-74,9	-58,7	-42,7	-26,9	-11,3	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-81,4	-62,6	-44,1	-25,8	-7,7	10,1	27,8	45,3	62,7	79,9	96,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-287,8	-324,9	-362,3	-401,4	-444,6	-495,1	-558,7	-646,9	-786,4	-1061,9	-1993,1	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,8	122,3	123,8	125,4	127,0	128,6	130,2	131,8	133,5	135,2	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,4	-16,1	-16,8	-17,5	-18,2	-18,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,8	192,5	195,7	199,3	203,5	208,5	214,4	221,5	230,2	241,0	254,8	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,0	253,4	255,8	258,5	261,4	264,5	268,1	272,2	276,9	282,7	289,8	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,4	53,9	53,0	51,8	50,2	47,9	44,9	40,9	35,4	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,6	14,9	16,4	18,3	20,6	23,5	27,1	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,4	66,4	69,9	73,8	78,5	84,2	91,5	101,2	115,3	138,2	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,0	154,1	156,4	158,8	161,3	164,2	167,5	171,3	176,2	182,8	193,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,2	-5,9	-7,9	-10,6	-14,3	-19,7	-28,7	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,0	3,2	2,3	1,3	0,1	-1,2	-2,9	-5,2	-8,5	-13,8	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,2	21,1	26,1	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,6	18,9	19,3	19,9	20,5	21,4	22,5	24,1	26,3	29,6	35,2	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,0	27,0	29,0	31,1	33,2	35,3	37,5	39,7	41,9	44,2	46,5	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	121,1	122,8	124,5	126,2	128,0	129,8	131,6	133,4	135,3	137,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,6	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-28,90	-26,41	-23,74	-20,98	-18,22	-15,59	-13,30	-11,81	-12,07	-17,22	-47,04	—
	DMA	34,20	31,52	28,90	26,72	24,88	23,70	24,45	28,01	35,82	50,11	92,11	—
	PDMA	49,68	39,95	30,27	24,75	23,91	27,46	38,73	57,67	81,87	114,54	169,45	—
CPI	DM	-69,38	-64,74	-59,74	-54,63	-49,64	-45,14	-41,70	-40,42	-43,74	-59,40	-134,70	—
	DMA	75,31	69,55	63,46	57,19	51,20	46,01	45,01	49,78	63,66	91,44	182,06	—
	PDMA	85,43	70,57	55,98	41,22	28,30	17,94	23,00	39,29	58,50	82,44	127,62	—
SPI	DM	0,78	1,70	2,65	3,70	4,83	6,08	7,52	9,17	11,15	13,71	17,25	—
	DMA	4,05	3,62	3,56	4,37	5,59	7,33	9,37	12,04	15,39	19,81	26,14	—
	PDMA	23,47	17,50	11,42	12,66	20,69	34,44	50,26	71,15	99,00	138,08	200,12	—
ΔCS	DM	-70,16	-66,44	-62,39	-58,33	-54,46	-51,22	-49,22	-49,59	-54,89	-73,11	-151,95	—
	DMA	71,26	65,93	59,90	52,82	45,61	38,68	35,64	37,74	48,27	71,63	155,92	—
	PDMA	61,96	53,07	44,57	28,56	7,61	-16,50	-27,26	-31,85	-40,51	-55,64	-72,50	—

Tabela 8.156: Constantes de acoplamento B971 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	427,3	443,9	461,4	480,0	499,7	520,6	542,8	566,1	590,8	616,7	643,9	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	14,7	13,5	12,2	10,7	9,0	7,3	5,3	3,2	1,0	-1,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,7	-69,8	-72,1	-74,5	-77,0	-79,7	-82,5	-85,5	-88,8	-92,2	-95,7	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,6	38,6	39,6	40,7	41,9	43,1	44,4	45,9	47,3	48,9	50,6	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,9	168,1	174,7	181,6	188,9	196,6	204,6	213,1	221,9	231,1	240,7	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1613,6	-1608,3	-1597,4	-1581,8	-1562,1	-1539,1	-1513,4	-1485,6	-1456,2	-1425,8	-1394,8	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-145,0	-130,5	-115,6	-100,5	-85,1	-69,6	-54,0	-38,4	-22,8	-7,2	8,1	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-55,7	-38,9	-21,9	-4,7	12,4	29,7	47,1	64,5	81,9	99,3	116,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-189,8	-221,6	-254,8	-289,8	-327,7	-370,4	-421,2	-486,9	-582,5	-752,8	-1221,3	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	102,5	105,7	109,1	112,7	116,5	120,6	125,0	129,6	134,4	139,6	145,1	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-13,1	-14,4	-15,8	-17,3	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,1	190,1	194,4	199,4	205,0	211,6	219,4	228,8	240,5	255,4	275,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	200,6	207,3	214,3	221,7	229,5	237,9	247,0	256,9	268,0	280,6	295,5	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,5	53,0	53,2	53,0	52,5	51,2	49,1	45,6	40,1	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,2	6,6	7,1	7,6	8,4	9,3	10,5	12,0	14,0	16,7	20,5	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,4	66,1	69,1	72,5	76,4	80,8	86,2	92,8	101,2	112,9	130,5	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	130,5	135,2	140,1	145,4	151,2	157,4	164,3	172,1	181,3	193,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,9	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,8	-8,5	-12,5	-18,8	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,6	9,8	10,2	10,5	11,0	11,6	12,4	13,6	15,3	18,0	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,4	18,6	20,2	22,5	25,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,6	30,0	32,4	35,1	37,8	40,8	43,9	47,2	50,7	54,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	104,7	108,4	112,3	116,5	120,9	125,5	130,4	135,6	141,2	147,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,2	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,5
Total	DM	-16,72	-14,80	-12,62	-10,18	-7,56	-4,84	-2,12	0,30	1,92	1,09	-10,60	—
	DMA	28,77	24,28	19,58	14,95	12,57	12,04	14,67	20,71	28,61	41,48	67,87	—
	PDMA	58,55	48,97	39,00	28,68	18,78	15,86	22,27	35,75	56,50	83,63	123,52	—
CPI	DM	-30,11	-27,97	-25,32	-22,26	-18,98	-15,71	-12,77	-10,90	-11,52	-18,71	-52,85	—
	DMA	52,75	44,08	34,61	25,28	21,11	21,15	26,43	36,32	49,28	72,31	125,05	—
	PDMA	70,93	57,04	42,92	28,74	16,39	19,60	30,80	45,84	65,35	87,81	120,38	—
SPI	DM	-6,90	-5,14	-3,30	-1,31	0,82	3,13	5,69	8,52	11,77	15,61	20,38	—
	DMA	11,19	9,77	8,55	7,38	6,30	5,37	6,05	9,27	13,45	18,87	25,94	—
	PDMA	49,48	43,05	36,12	28,63	20,53	13,12	16,02	28,36	50,00	80,56	125,83	—
ΔCS	DM	-23,21	-22,83	-22,02	-20,95	-19,80	-18,84	-18,47	-19,42	-23,29	-34,32	-73,23	—
	DMA	41,55	34,32	26,06	17,90	14,81	15,78	20,37	27,05	35,83	53,44	99,11	—
	PDMA	21,46	13,98	6,80	0,11	-4,14	6,48	14,78	17,48	15,35	7,24	-5,45	—

Tabela 8.157: Constantes de acoplamento B972 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,5	463,7	487,2	512,0	538,2	565,8	595,0	625,6	657,8	691,6	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	15,3	13,5	11,5	9,2	6,8	4,2	1,4	-1,6	-4,8	-8,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,8	-69,6	-72,5	-75,6	-78,9	-82,3	-86,0	-90,0	-94,1	-98,5	-103,1	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,2	-2,2	-3,2	-4,3	-5,5	-6,7	-8,0	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,3	37,5	38,9	40,3	41,8	43,4	45,1	47,0	48,9	50,9	53,1	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,7	-12,1	-13,6	-15,2	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	152,4	159,5	167,0	175,0	183,4	192,2	201,4	211,1	221,2	231,6	242,5	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1626,4	-1621,0	-1610,4	-1595,3	-1576,6	-1555,0	-1531,2	-1505,7	-1479,1	-1452,1	-1424,9	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-151,4	-134,7	-117,6	-100,3	-82,9	-65,4	-48,0	-30,7	-13,4	3,5	20,3	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-64,0	-44,6	-25,1	-5,4	14,1	33,8	53,5	73,1	92,7	112,2	131,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-187,3	-217,9	-249,8	-283,7	-320,6	-362,5	-412,9	-478,9	-577,4	-761,7	-1349,0	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	94,6	98,6	102,8	107,2	111,9	116,9	122,2	127,8	133,7	139,9	146,5	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,1	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,7	-11,9	-13,0	-14,3	-15,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	172,7	177,5	182,8	188,8	195,6	203,4	212,5	223,4	236,6	253,1	274,3	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	189,9	197,4	205,4	213,7	222,6	232,0	242,2	253,1	265,2	278,6	294,1	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,1	50,0	50,8	51,4	51,8	51,9	51,5	50,6	48,9	46,1	41,6	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	6,9	7,4	8,1	8,9	9,9	11,2	12,9	15,1	18,0	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	54,6	58,0	61,7	66,0	70,8	76,3	82,9	91,0	101,4	115,7	137,0	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,8	122,9	128,4	134,1	140,3	146,9	154,1	161,9	170,8	181,1	194,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-8,0	-11,9	-18,1	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	5,4	5,1	4,7	4,2	3,7	3,0	2,2	1,1	-0,5	-2,9	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,8	12,8	14,3	16,6	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,8	13,3	13,8	14,4	15,1	15,9	16,8	17,9	19,4	21,4	24,4	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,9	24,5	27,3	30,2	33,3	36,6	40,1	43,8	47,8	52,0	56,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	93,2	97,4	101,8	106,4	111,4	116,6	122,1	127,9	134,1	140,6	147,5	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,7	-6,5	-4,5
Total	DM	-20,73	-18,21	-15,39	-12,33	-9,08	-5,73	-2,43	0,57	2,68	1,90	-13,73	—
	DMA	32,08	26,90	21,54	15,79	12,70	12,57	15,96	22,39	31,22	44,16	75,06	—
	PDMA	62,70	52,15	41,70	30,59	20,22	18,49	25,01	35,91	55,83	82,83	123,23	—
CPI	DM	-33,84	-30,76	-27,15	-23,15	-19,01	-14,88	-11,23	-8,72	-8,94	-16,85	-61,25	—
	DMA	57,20	47,49	37,20	26,11	20,77	21,90	30,90	42,19	56,86	79,50	142,34	—
	PDMA	77,24	60,54	45,08	29,34	15,68	23,10	37,42	54,39	76,06	100,77	138,99	—
SPI	DM	-11,12	-9,01	-6,77	-4,39	-1,80	0,97	4,01	7,37	11,21	15,65	21,11	—
	DMA	13,67	11,79	10,06	8,22	6,77	5,73	5,00	7,87	12,41	18,24	25,72	—
	PDMA	52,04	46,00	39,23	31,51	23,55	15,10	15,92	22,36	41,00	69,67	111,68	—
ΔCS	DM	-22,72	-21,76	-20,38	-18,75	-17,21	-15,86	-15,24	-16,09	-20,14	-32,50	-82,35	—
	DMA	43,53	35,70	27,14	17,89	14,00	16,17	25,90	34,32	44,46	61,26	116,62	—
	PDMA	25,21	14,54	5,84	-2,17	-7,87	8,01	21,50	32,04	35,06	31,09	27,31	—

Tabela 8.158: Constantes de acoplamento B98 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,6	428,1	445,8	464,6	484,6	505,9	528,5	552,5	577,9	604,8	633,1	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,6	15,5	14,2	12,8	11,2	9,5	7,7	5,6	3,4	1,0	-1,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,0	-68,2	-70,5	-73,0	-75,6	-78,4	-81,4	-84,6	-88,1	-91,7	-95,6	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,7	-14,6	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	49,6	51,5	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,9	-16,8	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	172,2	179,0	186,1	193,7	201,7	210,1	218,9	228,1	237,8	247,9	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1622,6	-1617,6	-1607,1	-1591,6	-1572,1	-1549,1	-1523,4	-1495,6	-1466,2	-1435,7	-1404,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,1	-135,5	-120,6	-105,2	-89,6	-73,8	-57,8	-41,8	-25,7	-9,6	6,2	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,5	-44,7	-27,7	-10,4	7,0	24,5	42,2	60,0	77,9	95,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-196,5	-228,9	-262,8	-298,9	-338,2	-383,0	-437,3	-509,0	-617,4	-823,5	-1507,1	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	104,7	108,5	112,6	116,9	121,5	126,5	131,7	137,3	143,2	149,5	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,8	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-15,0	-16,5	-18,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,5	188,8	193,5	198,9	205,0	212,2	220,6	230,9	243,6	260,0	282,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	198,0	205,3	212,9	221,1	229,7	239,0	249,0	260,0	272,3	286,5	303,3	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	51,5	52,3	52,9	53,2	53,2	52,6	51,4	49,2	45,4	39,3	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,6	12,3	14,5	17,5	21,7	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,2	65,2	68,5	72,2	76,4	81,3	87,2	94,5	104,0	117,4	138,3	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	129,2	134,3	139,8	145,7	152,0	158,9	166,6	175,4	185,9	199,6	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,8	-2,1	-3,8	-6,0	-9,0	-13,5	-20,9	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,4	5,0	4,5	3,9	3,2	2,3	1,2	-0,3	-2,5	-6,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	13,9	15,9	19,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,1	13,6	14,2	14,9	15,6	16,5	17,6	18,9	20,8	23,3	27,5	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,9	29,5	32,2	35,1	38,2	41,5	45,0	48,8	52,8	57,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,8	103,7	107,8	112,1	116,8	121,7	127,0	132,5	138,4	144,7	151,4	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,9	-7,9	-4,5
Total	DM	-18,59	-16,60	-14,32	-11,77	-9,03	-6,19	-3,40	-0,94	0,49	-1,33	-20,78	—
	DMA	30,11	25,47	20,62	16,53	14,10	13,23	15,81	21,97	30,74	44,72	80,16	—
	PDMA	60,01	49,94	39,88	29,52	19,69	14,22	21,09	36,95	59,32	89,23	136,80	—
CPI	DM	-33,44	-31,37	-28,78	-25,77	-22,55	-19,35	-16,63	-15,17	-16,77	-27,01	-80,50	—
	DMA	55,27	46,41	36,87	29,03	24,89	24,20	28,30	37,77	52,15	76,92	149,55	—
	PDMA	75,09	60,20	46,11	32,38	19,92	17,01	27,93	44,20	64,71	88,81	128,95	—
SPI	DM	-7,70	-5,77	-3,72	-1,51	0,87	3,46	6,31	9,49	13,15	17,50	23,01	—
	DMA	11,66	10,11	8,69	7,37	6,18	5,19	6,65	10,37	15,03	21,11	29,27	—
	PDMA	48,95	42,42	35,31	27,41	19,52	12,18	16,08	31,62	55,37	89,53	142,56	—
ΔCS	DM	-25,74	-25,60	-25,06	-24,27	-23,42	-22,81	-22,93	-24,67	-29,93	-44,51	-103,51	—
	DMA	43,61	36,30	28,18	21,65	18,71	19,01	21,65	27,40	37,12	55,80	120,29	—
	PDMA	26,14	17,79	10,80	4,97	0,40	4,82	11,86	12,58	9,34	-0,73	-13,62	—

Tabela 8.159: Constantes de acoplamento BHandH e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,1	462,4	484,4	507,2	530,8	555,3	580,6	606,9	634,2	662,5	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	22,9	20,9	18,7	16,3	13,7	11,0	8,0	4,9	1,6	-1,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-72,4	-75,1	-77,8	-80,7	-83,7	-86,9	-90,2	-93,7	-97,3	-101,1	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,4	-5,5	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,3	-13,9	-15,6	-17,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	40,5	41,7	42,9	44,2	45,5	47,0	48,5	50,0	51,7	53,4	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,5	-7,5	-8,7	-9,9	-11,1	-12,5	-13,9	-15,4	-17,0	-18,7	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,5	144,3	153,5	163,0	172,9	183,1	193,7	204,6	215,9	227,4	239,2	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1814,4	-1797,1	-1773,1	-1743,5	-1709,0	-1670,4	-1628,3	-1583,4	-1536,2	-1487,3	-1437,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,4	-169,5	-151,2	-132,8	-114,0	-95,2	-76,1	-57,0	-37,8	-18,6	0,6	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,8	-61,1	-42,3	-23,3	-4,1	15,1	34,6	54,2	73,9	93,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,1	-308,2	-344,0	-380,5	-419,8	-465,0	-521,4	-600,0	-727,9	-1000,8	-2253,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	109,4	113,0	116,8	120,7	124,9	129,4	134,0	138,9	144,0	149,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-18,4	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	179,6	184,2	189,4	195,4	202,4	210,6	220,6	232,8	248,3	268,4	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,4	232,3	238,4	245,0	252,0	259,5	267,8	276,9	287,3	299,2	313,5	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,3	53,0	52,2	50,7	48,2	44,2	38,1	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,4	15,5	18,1	21,5	26,0	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,4	53,8	57,6	61,8	66,7	72,3	78,9	87,3	98,2	113,8	139,0	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,2	140,5	145,0	149,9	155,0	160,6	166,8	173,7	181,8	191,8	205,7	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,2	-0,4	-1,3	-2,4	-3,8	-5,6	-8,0	-11,4	-16,5	-25,4	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,0	4,4	3,8	3,1	2,2	1,1	-0,1	-2,0	-4,7	-9,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	14,1	15,2	16,8	19,3	23,7	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,3	16,7	17,3	17,9	18,7	19,6	20,8	22,4	24,5	27,6	32,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,7	21,3	24,0	26,9	30,0	33,3	36,7	40,4	44,3	48,4	52,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,1	109,7	113,4	117,3	121,5	125,8	130,4	135,2	140,2	145,4	150,9	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-4,5
Total	DM	-30,72	-28,08	-25,06	-21,73	-18,16	-14,54	-11,00	-7,97	-6,45	-9,99	-50,42	—
	DMA	35,40	31,48	28,15	24,57	21,47	20,06	23,20	29,80	38,97	54,51	109,57	—
	PDMA	58,93	48,05	37,29	25,93	16,75	14,25	28,16	48,18	73,40	107,27	168,34	—
CPI	DM	-64,55	-60,76	-56,20	-51,13	-45,72	-40,42	-35,67	-32,63	-33,75	-47,81	-150,75	—
	DMA	72,60	65,33	59,53	53,11	46,46	40,82	43,87	54,35	69,66	98,19	216,99	—
	PDMA	88,54	72,39	56,84	40,65	24,65	13,77	26,71	47,41	70,24	98,18	157,79	—
SPI	DM	-5,91	-4,12	-2,22	-0,17	2,05	4,44	7,10	10,12	13,58	17,75	23,16	—
	DMA	8,11	6,67	5,14	3,63	3,14	4,84	8,05	11,80	16,46	22,48	30,79	—
	PDMA	37,22	30,21	22,94	15,14	10,96	14,59	29,22	48,75	75,72	113,93	176,08	—
ΔCS	DM	-58,63	-56,64	-53,98	-50,96	-47,76	-44,86	-42,77	-42,75	-47,33	-65,56	-173,91	—
	DMA	64,49	58,66	54,39	49,48	43,32	35,98	35,83	42,55	53,20	75,71	186,20	—
	PDMA	51,32	42,18	33,90	25,51	13,69	-0,82	-2,51	-1,33	-5,48	-15,76	-18,30	—

Tabela 8.160: Constantes de acoplamento BMK e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,4	502,8	515,2	528,7	543,5	559,7	577,4	597,0	618,7	642,5	669,0	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,8	14,3	14,6	14,8	14,8	14,6	14,1	13,3	12,0	10,2	7,7	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-72,8	-73,4	-74,1	-74,9	-75,9	-77,0	-78,3	-79,8	-81,4	-83,3	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,8	0,6	-0,5	-1,8	-3,2	-4,7	-6,4	-8,1	-10,0	-12,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,5	36,6	36,7	36,8	37,1	37,4	37,7	38,2	38,7	39,3	40,0	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-0,7	-1,6	-2,5	-3,5	-4,7	-5,9	-7,2	-8,7	-10,3	-12,0	-13,9	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	125,8	125,4	125,4	126,0	127,0	128,5	130,5	133,0	136,1	139,7	144,0	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1529,4	-1527,6	-1517,9	-1500,7	-1476,3	-1445,2	-1408,2	-1365,9	-1319,0	-1268,4	-1214,4	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-143,1	-131,7	-118,2	-102,8	-85,4	-66,1	-44,9	-21,9	2,7	29,1	56,9	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,1	-37,2	-21,4	-3,8	15,4	36,6	59,4	84,1	110,4	138,4	167,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-147,5	-173,9	-201,0	-228,4	-256,0	-284,4	-314,8	-349,2	-392,3	-454,2	-567,5	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	104,7	106,5	108,7	111,2	114,2	117,5	121,3	125,7	130,7	136,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,0	-4,0	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,9	-12,8	-14,9	-17,3	-20,0	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	244,5	249,2	254,4	260,5	267,6	276,3	287,2	301,5	321,1	349,5	394,6	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	177,9	184,0	190,5	197,6	205,4	214,0	223,8	235,3	249,0	266,5	290,8	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	55,3	56,0	56,5	56,6	56,3	55,2	53,0	49,0	41,7	28,3	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,3	5,6	6,0	6,5	7,2	8,2	9,5	11,3	13,9	17,8	24,2	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	89,5	91,0	92,9	95,3	98,2	101,8	106,6	112,8	121,5	134,4	155,3	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	123,6	127,2	131,1	135,5	140,5	146,3	153,0	161,2	171,5	185,9	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	4,5	3,6	2,6	1,5	0,1	-1,4	-3,4	-6,0	-9,7	-15,1	-24,0	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,7	7,2	6,6	5,8	4,9	3,8	2,5	0,7	-1,4	-4,6	-9,6	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,3	9,4	9,6	9,8	10,2	10,7	11,5	12,8	14,9	18,6	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	11,3	11,8	12,3	12,9	13,5	14,3	15,3	16,6	18,4	21,1	25,6	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	31,0	32,1	33,3	34,8	36,5	38,5	40,7	43,3	46,4	49,9	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,4	103,3	105,6	108,2	111,1	114,4	118,2	122,5	127,3	132,8	139,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	0,0	-0,8	-1,5	-2,4	-3,3	-4,3	-5,4	-6,7	-8,1	-9,7	-4,5
Total	DM	-7,90	-6,81	-5,17	-2,95	-0,16	3,23	7,17	11,63	16,57	21,80	26,58	—
	DMA	30,43	27,43	23,83	19,68	15,71	14,30	18,46	23,63	31,37	42,90	59,03	—
	PDMA	73,35	64,38	54,12	42,69	29,93	25,87	29,47	43,38	65,71	100,25	151,22	—
CPI	DM	-15,62	-14,72	-12,72	-9,59	-5,39	-0,17	5,85	12,47	19,19	25,02	26,95	—
	DMA	46,20	40,06	32,65	24,03	15,79	13,68	24,48	36,96	51,10	68,25	91,27	—
	PDMA	76,33	64,46	51,14	36,62	20,90	27,63	40,89	55,30	71,23	94,15	122,23	—
SPI	DM	-2,25	-1,01	0,37	1,93	3,67	5,73	8,13	11,02	14,65	19,43	26,31	—
	DMA	18,86	18,17	17,37	16,49	15,65	14,75	14,04	13,86	16,89	24,30	35,39	—
	PDMA	71,17	64,32	56,31	47,15	36,55	24,58	21,09	34,64	61,66	104,72	172,49	—
ΔCS	DM	-13,37	-13,71	-13,08	-11,52	-9,06	-5,90	-2,29	1,45	4,54	5,58	0,63	—
	DMA	27,34	21,90	15,28	7,54	0,14	-1,07	10,44	23,10	34,21	43,95	55,88	—
	PDMA	5,15	0,14	-5,16	-10,53	-15,65	3,05	19,80	20,66	9,58	-10,57	-50,26	—

Tabela 8.161: Constantes de acoplamento BP86 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	355,3	378,9	402,8	426,9	451,3	475,8	500,7	525,7	551,0	576,5	602,2	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,7	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,8	-67,3	-69,8	-72,4	-75,0	-77,6	-80,2	-82,9	-85,5	-88,3	-91,0	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,5	-8,5	-9,6	-10,6	-11,7	-12,8	-13,9	-15,1	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,0	40,7	41,5	42,2	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,8	-16,8	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	136,9	144,9	152,8	160,7	168,4	176,0	183,5	190,8	198,1	205,1	212,1	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1802,5	-1777,4	-1747,9	-1714,7	-1678,5	-1639,9	-1599,5	-1557,7	-1514,9	-1471,4	-1427,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,9	-160,9	-144,0	-127,2	-110,6	-94,0	-77,7	-61,5	-45,5	-29,7	-14,1	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,6	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,3	60,6	77,8	94,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,1	-327,4	-365,0	-404,4	-447,8	-498,7	-562,6	-651,0	-790,4	-1064,3	-1973,1	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,5	118,9	120,4	121,9	123,4	124,9	126,5	128,1	129,7	131,4	133,0	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,2	-13,9	-14,6	-15,3	-16,1	-16,8	-17,5	-18,1	-18,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,3	189,9	193,0	196,5	200,6	205,4	211,1	218,0	226,4	236,9	250,2	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,4	249,7	252,1	254,7	257,5	260,6	264,1	268,1	272,8	278,4	285,3	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,1	51,9	50,3	48,1	45,2	41,3	35,9	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,4	18,2	20,5	23,3	26,9	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,5	62,2	65,2	68,5	72,4	76,9	82,4	89,4	98,7	112,2	133,8	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	151,8	154,0	156,3	158,8	161,6	164,7	168,5	173,2	179,6	189,3	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,3	-13,9	-19,1	-27,6	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,9	3,1	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,2	-8,4	-13,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,1	21,0	25,7	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	18,9	19,3	19,8	20,4	21,3	22,4	23,9	26,1	29,3	34,7	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	26,2	28,2	30,2	32,3	34,4	36,5	38,7	40,9	43,2	45,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,6	119,2	120,9	122,6	124,3	126,0	127,8	129,6	131,3	133,2	135,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,5
Total	DM	-29,78	-27,35	-24,73	-22,03	-19,32	-16,75	-14,52	-13,07	-13,37	-18,52	-47,57	—
	DMA	34,63	32,02	29,29	26,85	24,91	23,62	23,99	27,49	34,84	49,00	89,79	—
	PDMA	50,39	40,81	31,16	25,19	24,52	27,28	37,11	55,68	79,38	111,37	164,29	—
CPI	DM	-70,17	-65,64	-60,75	-55,73	-50,82	-46,41	-43,04	-41,81	-45,15	-60,72	-133,99	—
	DMA	76,21	70,60	64,61	58,44	52,51	47,32	45,49	50,23	63,15	90,77	178,92	—
	PDMA	87,10	72,50	57,84	43,22	30,20	19,46	21,48	37,63	56,53	80,39	124,77	—
SPI	DM	-0,17	0,73	1,69	2,68	3,79	5,01	6,40	8,01	9,94	12,43	15,80	—
	DMA	4,14	3,73	3,39	3,69	4,67	6,23	8,23	10,81	14,07	18,36	24,43	—
	PDMA	23,47	17,57	11,60	11,96	20,36	33,01	48,58	68,92	96,14	134,08	193,27	—
ΔCS	DM	-70,01	-66,37	-62,44	-58,41	-54,60	-51,42	-49,44	-49,82	-55,09	-73,14	-149,79	—
	DMA	72,07	66,87	61,22	54,74	47,84	41,08	37,26	39,41	49,08	72,41	154,49	—
	PDMA	63,63	54,93	46,24	31,26	9,84	-13,55	-27,10	-31,29	-39,61	-53,69	-68,50	—

Tabela 8.162: Constantes de acoplamento BPW91 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	353,3	377,4	401,9	426,6	451,5	476,7	502,2	527,9	553,8	579,9	606,3	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,2	23,6	21,8	20,0	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,5	-70,1	-72,7	-75,4	-78,1	-80,8	-83,5	-86,3	-89,1	-91,9	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,2	-11,3	-12,5	-13,6	-14,8	-16,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,7	47,5	48,4	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,7	-15,7	-16,7	-17,7	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,6	153,9	162,0	170,1	178,0	185,8	193,4	200,9	208,3	215,5	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,6	-1784,5	-1754,1	-1720,0	-1683,1	-1643,8	-1602,7	-1560,3	-1516,9	-1472,9	-1428,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,0	-160,8	-143,8	-126,8	-110,0	-93,3	-76,8	-60,4	-44,3	-28,3	-12,5	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,5	-45,8	-27,4	-9,1	8,9	26,7	44,5	62,0	79,4	96,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,7	-329,9	-368,6	-409,2	-454,4	-507,7	-575,7	-671,4	-827,4	-1153,6	-2525,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	121,9	123,5	125,1	126,7	128,4	130,0	131,7	133,4	135,2	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,7	193,9	197,7	202,2	207,5	213,8	221,6	231,2	243,3	259,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	253,6	256,2	259,1	262,1	265,6	269,5	274,1	279,5	286,1	294,6	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,1	46,5	42,8	37,9	31,2	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	22,8	26,3	30,7	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,7	65,9	69,5	73,7	78,7	84,9	93,0	104,3	121,5	152,0	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	154,1	156,4	158,9	161,6	164,7	168,3	172,6	178,2	186,4	200,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,4	-16,8	-23,7	-36,2	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,3	2,5	1,5	0,4	-0,8	-2,4	-4,5	-7,4	-11,7	-19,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,3	14,0	14,8	16,0	17,7	20,1	24,0	31,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,7	25,6	28,4	32,8	40,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,5	28,5	30,6	32,7	34,8	37,0	39,2	41,5	43,8	46,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	120,9	122,6	124,4	126,2	128,0	129,8	131,7	133,5	135,4	137,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,86	-27,37	-24,69	-21,90	-19,14	-16,53	-14,32	-12,97	-13,67	-20,49	-66,72	—
	DMA	34,97	32,33	29,75	27,63	25,96	24,84	25,62	29,66	38,39	55,17	114,95	—
	PDMA	48,47	38,38	30,73	28,32	29,87	33,76	45,83	67,21	94,82	134,34	208,80	—
CPI	DM	-71,26	-66,63	-61,65	-56,55	-51,64	-47,28	-44,13	-43,40	-48,11	-68,27	-183,52	—
	DMA	77,15	71,41	65,29	59,15	53,29	48,23	46,89	52,31	67,69	100,16	230,35	—
	PDMA	86,40	71,55	56,65	43,00	30,77	20,63	23,68	40,46	60,38	86,26	145,66	—
SPI	DM	0,51	1,41	2,41	3,51	4,69	6,03	7,54	9,35	11,58	14,55	18,94	—
	DMA	4,03	3,68	3,69	4,51	5,92	7,69	10,02	13,05	16,90	22,17	30,31	—
	PDMA	20,66	14,05	11,71	17,56	29,21	43,39	62,08	86,83	120,07	169,60	255,10	—
ΔCS	DM	-71,77	-68,04	-64,07	-60,06	-56,33	-53,31	-51,67	-52,75	-59,69	-82,82	-202,46	—
	DMA	73,13	67,73	61,60	54,63	47,37	40,53	36,87	39,26	50,79	77,99	200,04	—
	PDMA	65,73	57,51	44,94	25,44	1,56	-22,76	-38,40	-46,36	-59,69	-83,34	-109,44	—

Tabela 8.163: Constantes de acoplamento M05 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	847,0	840,1	833,5	827,3	821,4	815,9	810,8	805,8	801,1	796,4	791,7	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	13,7	11,3	8,5	5,3	1,7	-2,1	-6,2	-10,7	-15,5	-20,5	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-108,9	-108,7	-108,5	-108,3	-108,2	-108,0	-108,0	-108,0	-108,0	-108,1	-108,2	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-18,6	-18,7	-18,7	-18,6	-18,3	-17,9	-17,4	-16,7	-15,9	-15,0	-13,9	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,1	42,3	43,4	44,5	45,6	46,7	47,8	48,8	49,8	50,8	51,7	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-14,4	-15,2	-15,9	-16,4	-16,7	-16,9	-16,8	-16,5	-15,9	-15,2	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,5	166,8	168,2	173,0	180,3	188,9	198,1	207,2	215,9	224,1	231,8	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1357,6	-1376,0	-1386,5	-1388,9	-1383,6	-1372,0	-1355,3	-1334,8	-1311,8	-1287,0	-1261,2	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	2,2	8,2	14,9	22,3	30,5	39,5	49,5	60,5	72,8	86,3	101,3	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	102,9	111,1	119,8	129,1	139,0	149,8	161,4	174,1	187,8	202,7	218,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-218,9	-253,7	-282,8	-307,6	-330,0	-351,6	-374,7	-402,2	-439,1	-494,9	-592,4	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	80,9	87,2	93,5	99,8	106,1	112,4	118,7	125,0	131,1	137,1	142,9	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-20,8	-21,1	-21,2	-21,2	-21,0	-20,8	-20,4	-19,8	-19,2	-18,5	-17,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	182,9	192,0	201,6	211,8	222,6	234,0	246,1	258,8	272,4	286,7	302,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	223,0	232,1	240,9	249,5	257,6	265,4	272,7	279,3	285,2	290,2	294,4	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	35,8	36,1	36,4	36,6	36,7	36,7	36,8	36,7	36,4	35,9	34,9	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	19,6	20,1	20,4	20,6	20,7	20,7	20,6	20,4	20,2	20,1	20,2	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,9	64,1	70,7	77,9	85,7	94,1	103,3	113,2	123,9	135,6	148,4	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	127,7	135,5	143,2	150,8	158,4	165,8	173,1	180,1	187,0	193,6	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-11,4	-12,2	-13,1	-14,1	-15,1	-16,2	-17,3	-18,4	-19,6	-20,9	-22,4	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-16,0	-15,7	-15,1	-14,4	-13,6	-12,6	-11,4	-10,1	-8,8	-7,5	-6,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,5	15,2	15,8	16,3	16,7	17,0	17,2	17,3	17,3	17,3	17,3	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	15,6	17,0	18,2	19,4	20,5	21,4	22,2	22,9	23,4	23,9	24,4	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	15,2	18,5	21,9	25,6	29,4	33,3	37,5	41,9	46,4	51,2	56,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	80,1	86,6	93,0	99,5	106,0	112,6	119,1	125,6	132,0	138,4	144,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-4,5
Total	DM	14,05	14,07	14,81	16,25	18,26	20,70	23,43	26,24	28,87	30,93	31,52	—
	DMA	36,37	33,56	31,55	32,51	34,11	36,27	39,50	44,01	49,73	56,38	64,82	—
	PDMA	104,01	105,92	108,06	112,38	117,17	122,12	127,86	134,25	141,68	150,00	160,17	—
CPI	DM	51,09	46,61	43,76	42,49	42,51	43,48	45,02	46,70	47,95	47,81	44,18	—
	DMA	63,67	59,79	57,05	59,65	63,02	66,95	72,09	79,37	87,95	98,57	113,27	—
	PDMA	80,18	85,65	91,72	100,15	108,83	117,98	127,89	138,98	151,00	164,20	179,38	—
SPI	DM	-13,12	-9,79	-6,43	-2,99	0,48	4,00	7,61	11,24	14,87	18,55	22,23	—
	DMA	16,35	14,32	12,84	12,61	12,91	13,77	15,61	18,08	21,71	25,43	29,29	—
	PDMA	121,48	120,78	120,03	121,35	123,29	125,16	127,84	130,79	134,84	139,59	146,08	—
ΔCS	DM	64,21	56,40	50,19	45,48	42,03	39,48	37,41	35,46	33,07	29,26	21,95	—
	DMA	47,33	45,47	44,21	47,05	50,11	53,18	56,48	61,29	66,23	73,14	83,99	—
	PDMA	-41,29	-35,12	-28,31	-21,20	-14,46	-7,18	0,05	8,19	16,16	24,61	33,29	—

Tabela 8.164: Constantes de acoplamento M06 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	591,8	620,1	652,6	690,1	733,4	782,9	838,6	900,5	967,8	1039,5	1113,9	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,9	17,6	17,9	17,8	17,0	15,4	13,0	9,5	5,0	-0,8	-7,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-86,0	-90,6	-96,1	-102,7	-110,6	-120,0	-131,2	-144,5	-160,2	-178,9	-201,1	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-9,1	-13,3	-18,4	-24,8	-32,8	-42,7	-54,9	-70,2	-89,3	-113,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,2	46,1	49,6	53,7	58,6	64,4	71,6	80,3	91,1	104,7	122,2	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-10,7	-14,6	-19,7	-26,3	-35,0	-46,5	-62,0	-83,1	-112,3	-153,9	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	199,3	214,4	232,5	254,5	281,6	315,1	357,5	411,8	483,2	577,7	701,3	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1437,2	-1476,6	-1508,9	-1533,6	-1552,2	-1567,1	-1579,5	-1588,2	-1591,0	-1586,1	-1573,4	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-67,3	-57,9	-46,0	-31,5	-14,7	3,7	22,9	41,7	58,7	71,6	75,6	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	27,0	39,1	53,4	70,2	89,7	111,5	135,2	160,1	185,6	211,4	237,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-161,1	-211,1	-265,9	-328,2	-406,1	-530,0	-975,7	4267,8	-15,5	-222,3	-320,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,3	114,7	128,4	144,8	164,8	189,3	219,9	258,9	309,9	379,0	477,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-16,6	-21,5	-27,9	-36,3	-47,3	-62,2	-82,8	-112,3	-156,2	-225,1	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	161,7	170,7	182,5	199,5	227,4	285,4	502,3	-632,7	-14,0	128,2	5815,3	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,8	237,3	271,3	313,1	367,7	450,4	661,2	-166,8	360,7	495,3	-161,9	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,7	51,3	51,6	49,0	39,6	9,0	-141,1	758,3	315,4	282,8	1065,0	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,6	9,7	13,2	19,3	31,2	60,3	184,0	-514,8	-158,3	-117,3	-2,3	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	51,1	54,6	59,6	67,7	83,1	126,0	1247,1	-64,0	-10,1	6,5	13,8	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,3	146,9	166,9	191,8	225,2	282,2	1104,7	218,8	304,5	376,2	458,4	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,7	-0,9	-3,5	-8,1	-17,7	-46,3	-834,9	91,9	56,9	48,8	48,6	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-5,9	-9,6	-15,6	-26,7	-56,4	-792,0	61,8	21,0	1,6	-16,5	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,0	12,5	14,7	18,6	26,8	52,5	782,6	-78,9	-49,1	-45,4	-50,8	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,1	14,6	18,1	23,5	33,7	62,4	821,1	-67,9	-32,7	-23,3	-21,2	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,1	22,9	26,4	30,8	36,4	43,5	52,9	65,7	83,6	110,1	152,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,2	113,2	127,4	144,5	165,3	190,7	222,4	262,9	316,0	388,7	493,8	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,6	-4,2	-6,2	-8,8	-12,3	-17,2	-24,3	-34,8	-51,6	-80,4	-4,5
Total	DM	2,49	4,42	7,45	11,86	18,02	27,26	104,82	162,29	51,52	67,30	306,08	—
	DMA	14,82	13,44	17,08	28,64	46,78	76,68	322,49	350,75	131,83	141,17	416,52	—
	PDMA	33,01	33,43	50,33	90,93	163,74	336,89	3882,49	866,80	487,37	477,55	745,84	—
CPI	DM	19,57	16,66	14,84	14,02	13,42	10,01	-21,35	465,83	88,49	83,38	89,33	—
	DMA	20,32	24,41	30,93	45,56	66,31	92,94	151,24	522,45	155,91	163,15	190,55	—
	PDMA	18,51	22,15	40,18	64,58	95,22	132,85	189,21	362,93	286,92	354,55	446,09	—
SPI	DM	-10,03	-4,55	2,04	10,27	21,40	39,91	197,34	-60,31	24,40	55,51	465,04	—
	DMA	10,79	5,39	6,93	16,23	32,47	64,77	448,07	224,84	114,17	125,06	582,24	—
	PDMA	43,63	41,71	57,78	110,26	213,99	486,53	6590,89	1236,30	634,37	567,76	965,66	—
ΔCS	DM	29,61	21,22	12,80	3,74	-7,98	-29,90	-218,69	526,13	64,09	27,87	-375,71	—
	DMA	9,52	19,02	23,99	29,33	33,84	28,17	-296,84	297,61	41,74	38,09	-391,69	—
	PDMA	-25,12	-19,56	-17,60	-45,68	-118,76	-353,68	-6401,68	-873,36	-347,45	-213,21	-519,57	—

Tabela 8.165: Constantes de acoplamento M062X e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	445,9	449,4	453,4	459,1	467,4	479,5	496,4	519,2	548,9	586,4	632,6	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	3,7	4,7	5,7	6,6	7,2	7,4	7,1	6,0	3,7	-0,2	-6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,4	-75,6	-78,2	-81,3	-85,0	-89,5	-95,0	-101,7	-109,8	-119,5	-131,3	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,0	1,5	-0,3	-2,7	-5,7	-9,5	-14,4	-20,5	-28,2	-38,1	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,2	40,2	42,4	45,0	48,0	51,6	55,9	60,9	66,9	74,2	83,1	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	0,2	-0,7	-2,1	-4,0	-6,4	-9,5	-13,6	-18,9	-25,9	-35,2	-47,6	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,0	134,2	137,3	142,7	150,6	161,6	176,1	195,1	219,2	250,0	289,5	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1442,3	-1488,8	-1533,3	-1573,0	-1603,7	-1622,0	-1627,6	-1623,0	-1612,8	-1602,7	-1596,7	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-166,8	-163,3	-156,4	-146,7	-135,1	-122,1	-107,7	-92,3	-75,9	-58,8	-41,4	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-89,3	-80,2	-68,9	-56,0	-41,7	-26,4	-10,0	7,5	26,7	47,8	70,9	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-156,6	-199,7	-246,2	-295,8	-348,4	-404,9	-468,8	-550,1	-685,1	-1305,2	-2162,3	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	86,4	93,7	102,1	112,1	123,7	137,5	153,9	173,6	197,4	226,6	262,9	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-0,2	-1,3	-2,8	-4,8	-7,3	-10,5	-14,7	-20,1	-27,3	-36,8	-49,6	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	167,7	174,7	182,9	192,6	204,6	220,1	241,5	273,9	331,7	472,8	1542,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	142,4	159,4	178,9	201,1	226,7	256,7	292,4	336,8	397,0	500,5	1037,2	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	46,7	49,1	51,6	53,9	55,8	56,9	56,2	51,7	36,8	-14,6	-491,4	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	4,3	4,8	5,3	6,0	7,0	8,5	10,9	15,4	24,8	51,4	274,4	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,5	63,3	67,0	71,7	78,0	86,7	99,5	120,7	162,3	284,8	14163,1	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	99,2	109,3	120,9	134,4	150,2	169,0	192,0	221,3	263,2	345,6	6656,1	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	6,3	5,6	4,7	3,5	1,7	-1,0	-5,4	-13,2	-30,1	-83,1	-6358,9	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,0	7,0	6,8	6,4	5,7	4,4	2,2	-1,8	-10,4	-37,0	-3080,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,1	9,5	9,9	10,5	11,2	12,3	14,1	17,4	24,8	49,5	3090,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	9,4	10,7	12,0	13,6	15,4	17,7	20,8	25,9	35,5	63,8	3278,1	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,4	29,9	33,0	36,6	41,1	46,4	53,0	61,2	71,5	84,8	102,2	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	84,0	91,7	100,8	111,4	123,8	138,4	155,8	176,6	201,7	232,6	271,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	2,2	1,5	0,7	-0,2	-1,5	-3,0	-5,0	-7,5	-10,8	-15,3	-21,7	-4,5
Total	DM	-16,90	-17,56	-17,68	-17,06	-15,48	-12,64	-8,39	-2,63	4,42	1,75	686,10	—
	DMA	31,77	28,58	25,23	22,43	22,16	25,15	31,11	39,91	59,18	116,94	1624,90	—
	PDMA	91,52	82,70	72,13	60,80	47,88	34,02	36,90	73,83	155,16	388,66	21545,49	—
CPI	DM	-18,29	-24,98	-31,16	-36,52	-40,71	-43,45	-44,97	-46,34	-51,15	-99,04	-167,83	—
	DMA	47,60	45,51	42,24	39,66	43,40	45,69	47,26	49,54	64,67	133,25	226,61	—
	PDMA	106,44	96,75	84,47	71,35	59,79	46,76	38,78	41,19	61,25	117,11	189,32	—
SPI	DM	-15,89	-12,12	-7,79	-2,79	3,03	9,96	18,43	29,41	45,16	75,66	1312,31	—
	DMA	20,17	16,17	12,77	9,79	6,59	10,09	19,26	32,85	55,15	104,98	2650,32	—
	PDMA	80,58	72,40	63,08	53,06	39,14	24,69	35,52	97,77	224,04	587,80	37206,67	—
ΔCS	DM	-2,40	-12,86	-23,37	-33,72	-43,74	-53,41	-63,41	-75,75	-96,31	-174,70	-1480,13	—
	DMA	27,43	29,34	29,47	29,87	36,81	35,60	28,00	16,68	9,53	28,27	-2423,71	—
	PDMA	25,86	24,35	21,38	18,29	20,66	22,07	3,26	-56,58	-162,79	-470,69	-37017,35	—

Tabela 8.166: Constantes de acoplamento OLYP e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	363,4	391,6	420,1	449,1	478,5	508,2	538,4	568,9	599,7	630,9	662,5	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,0	21,8	19,5	17,1	14,6	12,0	9,4	6,6	3,8	0,9	-1,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-69,4	-72,7	-76,1	-79,5	-83,0	-86,5	-90,1	-93,7	-97,3	-101,1	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-17,3	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,5	42,7	44,0	45,3	46,6	47,9	49,3	50,6	52,0	53,4	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,7	-16,7	-17,7	-18,7	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,8	167,5	176,1	184,5	192,8	201,0	209,0	216,8	224,5	231,9	239,2	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1702,2	-1685,7	-1665,4	-1642,0	-1616,2	-1588,5	-1559,4	-1529,4	-1498,8	-1467,9	-1437,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-181,4	-160,8	-140,7	-121,1	-102,0	-83,5	-65,6	-48,2	-31,4	-15,1	0,6	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-90,5	-67,4	-45,0	-23,1	-1,8	18,8	38,9	58,4	77,4	95,8	113,8	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-254,6	-290,9	-327,9	-367,1	-410,6	-461,8	-526,5	-616,5	-760,6	-1056,6	-2253,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,2	121,1	124,1	127,1	130,2	133,3	136,4	139,6	142,9	146,1	149,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,4	192,0	197,1	202,6	208,8	215,7	223,5	232,3	242,5	254,4	268,4	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,4	258,1	263,0	268,0	273,2	278,7	284,6	290,9	297,7	305,1	313,5	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,0	52,8	52,4	51,7	50,7	49,3	47,6	45,2	42,1	38,1	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,2	12,9	13,7	14,7	15,9	17,3	18,9	20,9	23,2	26,0	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,8	64,6	68,7	73,2	78,2	83,9	90,5	98,4	108,1	120,9	139,0	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,7	156,5	160,4	164,4	168,6	173,1	177,9	183,2	189,3	196,5	205,7	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-3,1	-4,3	-5,6	-7,2	-9,2	-11,6	-14,8	-19,1	-25,4	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,8	2,2	1,5	0,8	0,0	-1,1	-2,3	-3,9	-6,1	-9,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,2	12,6	13,1	13,6	14,2	14,9	15,8	17,0	18,5	20,6	23,7	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,8	20,3	21,0	21,7	22,6	23,6	25,0	26,8	29,3	32,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,4	27,9	30,4	33,0	35,6	38,4	41,1	43,9	46,8	49,7	52,7	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,4	121,5	124,6	127,8	131,0	134,2	137,5	140,8	144,1	147,5	150,9	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-4,5
Total	DM	-23,67	-20,63	-17,48	-14,27	-11,12	-8,17	-5,64	-3,97	-4,24	-10,16	-50,42	—
	DMA	30,60	25,54	23,38	21,80	20,73	20,79	24,70	32,13	41,88	57,84	109,57	—
	PDMA	45,17	34,07	29,20	27,71	29,03	33,48	50,02	69,11	91,72	120,40	168,34	—
CPI	DM	-56,67	-51,68	-46,54	-41,36	-36,45	-32,20	-29,12	-28,36	-32,58	-50,66	-150,75	—
	DMA	66,95	55,17	48,92	42,82	37,27	34,05	39,52	52,69	70,65	102,32	216,99	—
	PDMA	85,14	65,28	50,15	36,44	24,78	17,97	35,60	55,59	77,15	103,15	157,79	—
SPI	DM	0,53	2,15	3,83	5,59	7,45	9,45	11,57	13,93	16,55	19,54	23,16	—
	DMA	3,95	3,81	4,65	6,39	8,60	11,07	13,84	17,06	20,79	25,22	30,79	—
	PDMA	15,86	11,19	13,84	21,30	32,14	44,85	60,60	79,02	102,40	133,05	176,08	—
ΔCS	DM	-57,20	-53,83	-50,37	-46,96	-43,91	-41,65	-40,69	-42,29	-49,13	-70,20	-173,91	—
	DMA	62,99	51,36	44,27	36,42	28,67	22,99	25,68	35,63	49,87	77,10	186,20	—
	PDMA	69,28	54,10	36,32	15,14	-7,36	-26,87	-25,00	-23,43	-25,25	-29,91	-18,30	—

Tabela 8.167: Constantes de acoplamento PBE e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	397,8	419,7	441,9	464,3	486,9	509,8	532,8	556,1	579,6	603,3	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,5	20,8	19,1	17,3	15,4	13,5	11,5	9,5	7,4	5,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-69,5	-71,8	-74,2	-76,6	-79,0	-81,4	-83,9	-86,4	-88,9	-91,5	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-10,0	-11,1	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,1	45,8	46,6	47,4	48,2	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	142,1	150,4	158,7	166,9	175,1	183,1	191,1	198,9	206,7	214,3	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1776,9	-1748,1	-1715,3	-1679,4	-1640,8	-1600,3	-1558,1	-1514,9	-1470,9	-1426,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-155,9	-139,2	-122,7	-106,5	-90,4	-74,6	-59,0	-43,7	-28,6	-13,8	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-57,5	-39,4	-21,7	-4,2	12,9	29,9	46,6	63,0	79,2	95,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-316,3	-354,9	-395,6	-440,5	-493,5	-560,8	-655,5	-809,2	-1129,5	-2453,2	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,7	122,1	123,5	125,0	126,5	128,0	129,6	131,2	132,8	134,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19,0	-19,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	191,5	194,6	198,3	202,6	207,6	213,7	221,0	230,2	241,9	257,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,2	254,8	257,6	260,7	264,1	268,0	272,5	277,9	284,6	293,3	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,1	53,7	53,2	52,2	50,9	49,0	46,5	42,9	38,1	31,2	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	11,1	11,9	12,9	14,1	15,6	17,4	19,6	22,5	26,1	30,9	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,0	67,0	70,4	74,4	79,1	85,0	92,8	103,6	120,3	150,7	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,9	156,1	158,5	161,1	164,0	167,5	171,6	177,1	185,2	199,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,1	-12,2	-16,5	-23,4	-36,1	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,7	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,1	-7,0	-11,4	-19,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,1	12,5	13,0	13,6	14,5	15,7	17,3	19,7	23,7	31,3	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	19,5	20,1	20,9	21,9	23,3	25,2	28,0	32,5	41,0	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	27,6	29,4	31,3	33,3	35,2	37,2	39,3	41,3	43,4	45,6	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	121,1	122,7	124,3	126,0	127,7	129,4	131,2	133,0	134,8	136,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-27,73	-25,45	-23,00	-20,43	-17,87	-15,45	-13,40	-12,22	-13,04	-19,83	-64,35	—
	DMA	33,07	30,11	27,77	25,84	24,33	23,42	24,77	28,76	37,38	53,72	111,65	—
	PDMA	46,36	36,25	28,81	25,35	26,61	31,12	44,95	65,63	92,77	132,10	207,20	—
CPI	DM	-66,43	-62,24	-57,69	-53,03	-48,50	-44,51	-41,66	-41,23	-46,10	-66,08	-177,29	—
	DMA	73,08	66,62	61,00	55,25	49,83	45,24	45,32	50,77	66,01	97,52	223,20	—
	PDMA	81,38	66,52	52,13	38,16	26,03	16,98	24,90	41,07	60,10	84,96	141,85	—
SPI	DM	0,64	1,53	2,44	3,47	4,59	5,85	7,32	9,05	11,20	14,09	18,47	—
	DMA	3,73	3,34	3,40	4,28	5,63	7,43	9,69	12,61	16,39	21,60	29,84	—
	PDMA	20,67	14,05	11,71	15,96	27,04	41,49	59,66	83,63	116,73	166,67	255,12	—
ΔCS	DM	-67,07	-63,76	-60,13	-56,49	-53,09	-50,36	-48,98	-50,28	-57,30	-80,18	-195,76	—
	DMA	69,35	63,28	57,60	50,97	44,19	37,81	35,62	38,16	49,62	75,92	193,36	—
	PDMA	60,72	52,46	40,42	22,20	-1,00	-24,51	-34,75	-42,56	-56,63	-81,70	-113,27	—

Tabela 8.168: Constantes de acoplamento PW91 e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,2	387,4	410,8	434,5	458,3	482,4	506,7	531,2	556,0	581,0	606,3	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,6	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,2	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,7	-71,2	-73,7	-76,2	-78,7	-81,3	-83,9	-86,5	-89,2	-91,9	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,4	-13,5	-14,7	-16,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,7	44,5	45,2	46,0	46,8	47,6	48,4	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,7	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,7	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,6	145,9	154,0	162,1	170,0	177,9	185,7	193,3	200,8	208,2	215,5	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1815,2	-1790,1	-1760,3	-1726,4	-1689,3	-1649,5	-1607,6	-1564,2	-1519,7	-1474,3	-1428,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,6	-160,4	-143,4	-126,4	-109,6	-93,0	-76,5	-60,2	-44,1	-28,2	-12,5	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,8	-25,6	-7,6	10,2	27,8	45,3	62,5	79,6	96,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,5	-328,8	-367,5	-408,1	-453,0	-506,0	-573,5	-668,7	-823,8	-1148,9	-2525,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	121,5	122,9	124,3	125,8	127,3	128,8	130,4	131,9	133,5	135,2	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,2	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,9	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,7	198,5	202,8	208,0	214,2	221,8	231,3	243,3	259,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,5	254,8	257,3	259,9	262,8	266,1	269,8	274,3	279,6	286,1	294,6	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,2	46,6	43,0	38,0	31,2	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,0	13,0	14,2	15,7	17,5	19,7	22,5	26,1	30,7	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,3	66,4	69,9	74,0	78,9	85,0	92,9	104,1	121,2	152,0	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,0	155,1	157,3	159,6	162,2	165,1	168,5	172,7	178,2	186,2	200,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,1	-12,1	-16,5	-23,5	-36,2	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-19,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,1	13,8	14,7	15,8	17,4	19,8	23,8	31,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,5	25,4	28,1	32,6	40,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,0	29,0	31,0	33,1	35,1	37,3	39,4	41,6	43,8	46,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	121,9	123,5	125,1	126,8	128,5	130,2	132,0	133,7	135,5	137,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,5
Total	DM	-29,19	-26,82	-24,25	-21,57	-18,87	-16,30	-14,13	-12,80	-13,52	-20,32	-66,72	—
	DMA	34,41	31,91	29,43	27,46	25,82	24,75	25,61	29,62	38,43	55,04	114,95	—
	PDMA	48,31	38,20	30,16	26,62	28,10	32,22	44,86	65,78	93,42	133,12	208,80	—
CPI	DM	-70,35	-65,91	-61,12	-56,16	-51,34	-47,02	-43,87	-43,15	-47,79	-67,85	-183,52	—
	DMA	76,04	70,51	64,61	58,55	52,83	47,85	46,84	52,27	67,90	99,99	230,35	—
	PDMA	84,99	70,26	55,59	41,50	29,18	19,34	24,07	40,81	60,57	86,15	145,66	—
SPI	DM	0,99	1,85	2,79	3,81	4,94	6,23	7,69	9,45	11,61	14,53	18,94	—
	DMA	3,89	3,60	3,63	4,66	6,02	7,80	10,05	13,01	16,81	22,07	30,31	—
	PDMA	21,41	14,68	11,51	15,72	27,31	41,66	60,11	84,09	117,50	167,56	255,10	—
ΔCS	DM	-71,34	-67,76	-63,91	-59,97	-56,28	-53,24	-51,56	-52,59	-59,40	-82,37	-202,46	—
	DMA	72,15	66,91	60,98	53,89	46,81	40,05	36,79	39,27	51,09	77,92	200,04	—
	PDMA	63,58	55,58	44,08	25,78	1,87	-22,32	-36,04	-43,28	-56,93	-81,42	-109,44	—

Tabela 8.169: Constantes de acoplamento TPSSh e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	366,0	390,6	415,1	439,7	464,2	488,7	513,1	537,4	561,6	585,8	610,0	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	20,3	18,8	17,3	15,7	14,0	12,3	10,5	8,7	6,8	4,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,2	-72,5	-74,9	-77,3	-79,6	-82,0	-84,3	-86,6	-88,9	-91,1	-93,4	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-5,3	-6,6	-7,8	-9,1	-10,3	-11,5	-12,7	-13,9	-15,1	-16,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,3	45,8	46,4	46,9	47,3	47,8	48,3	48,8	49,2	49,7	50,1	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-8,1	-9,3	-10,4	-11,6	-12,7	-13,8	-14,9	-15,9	-17,0	-17,9	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,7	200,5	205,0	209,3	213,4	217,2	220,8	224,1	227,2	230,0	232,6	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1757,5	-1731,7	-1703,3	-1673,0	-1641,1	-1608,0	-1574,1	-1539,7	-1504,9	-1470,0	-1435,2	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-156,7	-142,5	-128,4	-114,3	-100,2	-86,1	-72,1	-58,1	-44,2	-30,3	-16,4	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,8	-47,2	-30,7	-14,3	1,8	17,8	33,8	49,6	65,2	80,8	96,3	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-282,7	-320,1	-359,5	-402,5	-451,3	-510,0	-585,2	-690,4	-857,9	-1192,7	-2403,5	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,0	138,8	139,6	140,4	141,1	141,9	142,6	143,2	143,8	144,4	144,9	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-11,3	-12,4	-13,4	-14,5	-15,5	-16,5	-17,4	-18,4	-19,3	-20,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,5	190,8	194,6	198,9	203,9	209,8	216,7	225,0	234,9	247,0	262,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	280,6	282,3	284,1	286,1	288,3	290,8	293,7	297,1	301,3	306,4	312,9	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,3	57,7	56,9	55,8	54,3	52,4	50,0	46,9	43,0	38,0	31,5	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,0	12,6	13,5	14,5	15,7	17,3	19,1	21,4	24,1	27,5	31,8	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,8	71,5	74,5	78,0	82,1	87,0	93,1	100,9	111,6	127,4	153,5	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	172,7	174,3	176,1	178,0	180,1	182,5	185,3	188,9	193,6	200,5	211,7	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,7	-3,0	-4,5	-6,2	-8,3	-10,9	-14,3	-18,9	-25,6	-36,8	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,4	8,2	6,8	5,4	3,8	2,0	0,0	-2,5	-5,8	-10,3	-17,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,5	13,0	13,7	14,5	15,5	16,9	18,6	21,1	24,9	31,3	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	22,1	22,5	22,9	23,5	24,2	25,2	26,6	28,4	31,1	35,2	42,2	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,9	34,4	35,8	37,2	38,7	40,1	41,5	42,9	44,2	45,6	46,9	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	137,9	138,9	140,0	141,0	141,9	142,9	143,8	144,7	145,5	146,3	147,1	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-4,5
Total	DM	-18,60	-16,58	-14,54	-12,52	-10,64	-9,02	-7,92	-7,84	-9,96	-18,15	-59,40	—
	DMA	30,77	29,22	27,95	26,93	26,27	26,29	29,15	34,30	43,90	60,62	112,94	—
	PDMA	52,73	42,85	37,04	33,92	32,55	34,32	52,12	74,52	102,76	141,27	208,17	—
CPI	DM	-55,55	-51,65	-47,76	-44,04	-40,77	-38,33	-37,34	-39,09	-46,53	-69,19	-171,52	—
	DMA	61,03	56,60	52,47	48,49	45,15	43,16	47,19	55,53	73,36	106,39	220,46	—
	PDMA	69,75	56,71	43,85	31,31	21,55	16,56	30,62	47,14	66,16	90,65	142,87	—
SPI	DM	8,49	9,13	9,83	10,60	11,45	12,47	13,65	15,07	16,86	19,29	22,82	—
	DMA	8,59	9,13	9,97	11,12	12,41	13,92	15,92	18,73	22,29	27,06	34,09	—
	PDMA	40,25	32,69	32,04	35,84	40,62	47,34	67,89	94,60	129,60	178,40	256,05	—
ΔCS	DM	-64,05	-60,79	-57,59	-54,64	-52,23	-50,79	-50,99	-54,16	-63,39	-88,48	-194,34	—
	DMA	52,44	47,47	42,50	37,37	32,74	29,24	31,27	36,80	51,08	79,33	186,38	—
	PDMA	29,50	24,02	11,81	-4,53	-19,07	-30,78	-37,27	-47,46	-63,44	-87,75	-113,18	—

Tabela 8.170: Constantes de acoplamento X3LYP e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Emp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	397,3	422,2	447,3	472,6	498,2	524,1	550,1	576,4	602,9	629,7	656,7	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,5	19,7	17,7	15,6	13,4	11,1	8,8	6,3	3,8	1,2	-1,4	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,3	-75,0	-77,6	-80,4	-83,1	-85,8	-88,6	-91,5	-94,3	-97,2	-100,1	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	45,3	46,1	46,9	47,8	48,6	49,4	50,3	51,2	52,0	52,9	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,2	-16,3	-17,3	-18,4	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	158,3	166,8	175,2	183,5	191,6	199,6	207,5	215,2	222,7	230,0	237,2	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,7	-1787,4	-1757,6	-1724,0	-1687,4	-1648,2	-1607,1	-1564,6	-1521,0	-1476,7	-1432,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-168,0	-150,4	-132,9	-115,6	-98,4	-81,4	-64,6	-47,9	-31,5	-15,3	0,7	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-69,5	-50,4	-31,4	-12,7	5,7	24,0	42,1	60,0	77,8	95,3	112,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-280,3	-317,2	-354,2	-392,9	-435,5	-485,2	-547,9	-635,3	-775,4	-1061,6	-2173,7	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,8	133,3	134,9	136,5	138,1	139,7	141,4	143,0	144,7	146,4	148,2	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,7	-16,5	-17,3	-18,0	-18,7	-19,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,6	202,6	206,0	210,0	214,5	219,9	226,1	233,6	242,6	253,6	267,3	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	272,4	274,9	277,4	280,1	283,0	286,2	289,8	293,8	298,5	304,0	310,7	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,0	56,9	56,6	56,1	55,2	54,0	52,3	50,1	47,2	43,4	38,4	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,7	11,4	12,3	13,3	14,5	15,9	17,7	19,8	22,4	25,6	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,9	69,8	73,1	76,7	80,8	85,6	91,3	98,4	107,5	119,9	138,1	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,3	168,5	170,8	173,3	175,9	178,8	182,0	185,7	190,2	196,0	204,0	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,6	-1,6	-2,8	-4,1	-5,7	-7,7	-10,2	-13,5	-18,1	-25,0	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,4	4,6	3,7	2,7	1,7	0,4	-1,0	-2,9	-5,5	-9,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,1	13,5	13,9	14,6	15,4	16,4	17,9	20,0	23,3	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,2	20,5	21,0	21,5	22,3	23,2	24,5	26,2	28,7	32,4	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,4	31,5	33,7	35,9	38,1	40,4	42,7	45,1	47,5	49,9	52,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	133,1	134,8	136,6	138,4	140,3	142,1	144,0	145,9	147,8	149,7	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,1	-6,6	-7,2	-7,7	-4,5
Total	DM	-22,86	-20,28	-17,52	-14,65	-11,79	-9,02	-6,63	-5,02	-5,24	-10,83	-47,78	—
	DMA	32,81	30,40	28,23	26,34	24,89	24,77	28,77	34,82	43,31	57,87	105,79	—
	PDMA	48,32	38,95	29,55	24,61	23,10	28,50	44,78	63,44	86,15	115,71	164,65	—
CPI	DM	-62,99	-58,19	-53,02	-47,71	-42,51	-37,75	-34,05	-32,51	-35,69	-52,15	-143,67	—
	DMA	67,83	61,19	54,95	48,69	43,33	40,66	47,35	58,44	74,18	103,11	209,13	—
	PDMA	72,51	57,23	42,08	28,66	20,29	20,67	37,86	56,63	77,05	101,92	153,42	—
SPI	DM	6,57	7,52	8,51	9,60	10,74	12,06	13,48	15,13	17,09	19,46	22,53	—
	DMA	7,13	7,81	8,63	9,95	11,37	13,11	15,15	17,51	20,67	24,69	30,01	—
	PDMA	30,58	25,54	20,36	21,64	25,15	34,23	49,86	68,44	92,83	125,82	172,88	—
ΔCS	DM	-69,56	-65,71	-61,53	-57,31	-53,25	-49,81	-47,53	-47,64	-52,78	-71,61	-166,21	—
	DMA	60,70	53,38	46,31	38,74	31,96	27,55	32,20	40,93	53,51	78,42	179,11	—
	PDMA	41,93	31,69	21,72	7,02	-4,86	-13,56	-12,00	-11,82	-15,77	-23,91	-19,46	—

8.3.2.3 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais híbridos - Geometrias Otimizadas

Tabela 8.171: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	449,1	441,3	499,7	438,6	492,5	520,6	485,9	513,5	542,8	533,4	535,7	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,4	16,9	10,7	14,6	10,2	9,0	10,4	8,6	7,3	6,2	6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,4	-74,2	-77,0	-70,0	-76,8	-79,7	-76,0	-79,5	-82,5	-81,9	-82,4	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-6,2	-5,1	-4,8	-6,4	-6,1	-6,1	-6,1	-7,7	-7,1	-7,4	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,4	41,9	40,0	42,0	43,1	42,4	43,2	44,4	44,8	44,6	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-7,4	-7,4	-7,2	-8,6	-8,3	-8,4	-9,9	-9,3	-9,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	190,7	196,4	188,9	182,7	194,0	196,6	195,7	201,5	204,6	208,5	209,3	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,7	-1547,7	-1562,1	-1459,7	-1478,1	-1539,1	-1449,7	-1459,4	-1513,4	-1429,0	-1438,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-123,8	-129,8	-85,1	-118,1	-91,1	-69,6	-88,3	-75,5	-54,0	-59,4	-59,8	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,9	-39,4	12,4	-28,7	1,5	29,7	5,7	19,0	47,1	39,2	36,7	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-318,8	-257,2	-327,7	-318,6	-262,4	-370,4	-281,7	-298,6	-421,2	-245,8	-340,0	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	129,3	116,5	121,4	116,9	120,6	124,4	121,1	125,0	127,5	125,4	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,0	-9,6	-9,3	-9,5	-10,7	-10,5	-10,6	-11,8	-11,7	-11,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,8	213,8	205,0	207,4	205,1	211,6	213,6	211,5	219,4	220,2	219,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,3	260,2	229,5	239,0	228,6	237,9	243,9	236,9	247,0	249,0	245,9	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,2	53,3	53,2	53,0	53,1	53,1	52,5	52,6	52,6	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	10,3	8,4	9,1	8,2	9,3	9,7	9,1	10,5	10,5	10,3	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,1	80,5	76,4	78,7	78,8	80,8	83,5	83,1	86,2	88,6	88,1	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,8	160,7	145,4	149,6	143,6	151,2	153,5	149,2	157,4	157,6	155,2	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-1,8	-0,8	-0,4	-0,6	-2,1	-1,9	-1,8	-3,7	-3,5	-3,3	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,6	2,4	4,1	4,3	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,2	10,5	10,3	11,0	11,0	11,1	11,5	11,6	12,0	12,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	19,0	15,6	16,6	16,1	16,4	17,3	16,9	17,4	18,2	17,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,9	36,5	35,1	36,3	36,7	37,8	39,4	39,5	40,8	42,5	42,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,1	128,5	116,5	120,7	115,9	120,9	123,9	120,3	125,5	127,0	125,0	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-3,5	-2,8	-2,6	-2,8	-3,5	-3,4	-3,4	-4,2	-4,1	-4,1	-4,5
Total	DM	-12,11	-6,26	-7,48	-7,07	-2,41	-4,76	0,17	0,40	-2,04	7,75	3,28	—
	DMA	20,61	17,13	12,45	13,13	9,48	11,98	6,59	6,23	14,82	8,63	8,39	—
	PDMA	23,65	24,78	18,85	30,24	20,00	15,67	14,43	10,67	21,98	18,75	18,53	—
CPI	DM	-37,47	-23,73	-18,75	-20,65	-6,88	-15,48	-5,95	-3,38	-12,55	9,46	0,03	—
	DMA	39,84	31,56	20,85	24,02	13,34	21,06	8,74	6,98	26,80	11,23	11,65	—
	PDMA	38,44	44,55	16,22	41,15	22,23	19,69	16,58	11,65	31,17	24,75	22,87	—
SPI	DM	6,49	6,55	0,79	2,89	0,87	3,10	4,65	3,17	5,67	6,49	5,67	—
	DMA	6,51	6,55	6,29	5,15	6,65	5,33	5,01	5,68	6,03	6,72	6,01	—
	PDMA	12,80	10,27	20,78	22,23	18,36	12,73	12,86	9,96	15,23	14,34	15,34	—
ΔCS	DM	-43,97	-30,28	-19,55	-23,54	-7,76	-18,58	-10,61	-6,56	-18,21	2,97	-5,65	—
	DMA	33,33	25,01	14,56	18,86	6,69	15,74	3,72	1,30	20,77	4,51	5,64	—
	PDMA	25,64	34,28	-4,57	18,92	3,87	6,96	3,72	1,69	15,93	10,41	7,52	—

Tabela 8.172: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	442,8	447,0	487,2	401,9	491,1	512,0	452,6	515,9	538,2	503,7	542,0	565,8	555,5	569,7	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	17,1	11,5	17,6	10,2	9,2	12,9	8,0	6,8	8,0	5,6	4,2	3,0	3,0	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,5	-74,4	-75,6	-65,7	-76,4	-78,9	-72,4	-79,7	-82,3	-79,0	-83,2	-86,0	-85,6	-86,9	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,2	-4,3	-4,7	-4,1	-5,5	-5,5	-5,3	-6,7	-6,4	-6,5	-8,0	-7,4	-7,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	42,0	40,3	37,6	40,6	41,8	40,3	42,1	43,4	43,0	43,7	45,1	45,7	45,4	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-6,0	-6,3	-6,0	-7,1	-7,1	-7,0	-8,2	-7,9	-8,1	-9,4	-8,9	-9,3	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	184,0	191,6	175,0	158,0	182,2	183,4	173,7	190,5	192,2	189,1	199,2	201,4	204,8	208,4	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1661,2	-1562,9	-1595,3	-1477,0	-1516,3	-1576,6	-1482,9	-1501,6	-1555,0	-1472,3	-1484,0	-1531,2	-1451,5	-1464,1	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,9	-132,8	-100,3	-146,5	-103,3	-82,9	-115,3	-85,8	-65,4	-84,7	-68,3	-48,0	-55,3	-50,8	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,6	-43,3	-5,4	-63,3	-12,0	14,1	-26,3	7,7	33,8	9,3	27,6	53,5	43,6	47,4	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-316,0	-219,7	-283,7	-341,6	-189,4	-320,6	-310,4	-218,4	-362,5	-278,7	-250,3	-412,9	-247,5	-286,6	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	118,8	107,2	112,8	107,2	111,9	116,6	111,9	116,9	120,6	116,9	122,2	124,6	122,2	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-7,8	-7,4	-7,8	-8,7	-8,4	-8,7	-9,7	-9,5	-9,7	-10,7	-10,6	-10,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,5	197,6	188,8	189,7	189,1	195,6	197,1	195,7	203,4	204,9	203,2	212,5	213,3	212,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,3	245,2	213,7	226,1	211,9	222,6	231,8	220,7	232,0	237,7	230,0	242,2	243,9	240,0	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	50,8	51,4	51,7	51,5	51,8	51,9	51,9	51,9	51,9	52,0	51,5	51,7	51,7	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,1	7,4	8,4	7,2	8,1	8,7	7,8	8,9	9,2	8,6	9,9	9,8	9,6	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,1	70,6	66,0	67,6	68,7	70,8	73,1	73,3	76,3	78,9	78,5	82,9	85,2	84,7	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,3	149,4	134,1	139,5	131,7	140,3	144,2	137,7	146,9	149,1	144,1	154,1	154,1	151,1	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-1,6	0,5	1,0	0,7	-0,4	-0,1	-0,2	-1,7	-1,4	-1,4	-3,2	-3,0	-2,8	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	4,7	5,2	3,6	4,2	4,4	3,1	3,7	3,5	2,5	3,0	2,5	1,9	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,8	9,7	9,2	10,3	10,1	9,9	10,7	10,6	10,6	11,1	11,1	11,5	11,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,7	18,3	14,4	15,5	14,9	15,1	16,1	15,6	15,9	16,8	16,4	16,8	17,5	17,3	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,4	30,2	31,6	32,1	33,3	35,0	35,2	36,6	38,4	38,5	40,1	41,9	42,0	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	117,3	106,4	111,4	105,1	111,4	115,3	110,0	116,6	119,3	115,2	122,1	123,4	120,6	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-1,9	-1,6	-1,8	-2,4	-2,2	-2,4	-3,0	-2,8	-2,9	-3,6	-3,5	-3,6	-4,5
Total	DM	-16,29	-8,85	-12,25	-16,00	-5,60	-9,00	-8,98	-2,23	-5,65	-1,36	1,31	-2,35	6,62	4,98	—
	DMA	19,90	17,41	15,77	20,50	16,44	12,58	13,55	11,20	12,67	6,84	8,63	16,09	8,85	9,15	—
	PDMA	24,07	24,71	30,61	48,06	31,68	20,25	31,26	20,88	18,83	15,81	15,91	24,83	20,52	20,30	—
CPI	DM	-40,23	-22,46	-22,92	-35,05	-7,17	-18,78	-21,45	-2,65	-14,65	-6,49	2,02	-11,00	9,17	6,63	—
	DMA	42,68	36,61	26,03	39,81	27,32	20,51	24,35	16,52	22,15	9,16	11,82	31,27	13,97	14,12	—
	PDMA	43,92	47,44	29,28	68,22	36,04	15,50	40,12	20,23	23,36	15,39	19,25	37,80	30,18	31,34	—
SPI	DM	1,27	1,13	-4,42	-2,03	-4,45	-1,83	0,15	-1,92	0,95	2,41	0,79	3,99	4,75	3,77	—
	DMA	3,19	3,33	8,25	6,33	8,46	6,76	5,62	7,31	5,72	5,14	6,30	4,96	5,09	5,51	—
	PDMA	9,51	8,04	31,59	33,28	28,49	23,74	24,77	21,36	15,52	16,11	13,46	15,32	13,43	12,20	—
ΔCS	DM	-41,49	-23,60	-18,50	-33,02	-2,73	-16,96	-21,60	-0,73	-15,60	-8,90	1,22	-14,99	4,43	2,85	—
	DMA	39,50	33,28	17,78	33,48	18,86	13,75	18,73	9,21	16,43	4,02	5,52	26,31	8,88	8,61	—
	PDMA	34,41	39,40	-2,31	34,93	7,55	-8,24	15,35	-1,14	7,84	-0,72	5,79	22,48	16,76	19,14	—

Tabela 8.173: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	431,2	425,7	484,6	417,7	479,5	505,9	465,8	500,8	528,5	514,5	523,5	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	17,6	11,2	15,5	10,4	9,5	11,2	8,7	7,7	6,9	6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-75,6	-67,9	-75,7	-78,4	-74,2	-78,5	-81,4	-80,4	-81,5	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-6,5	-5,1	-5,1	-4,7	-6,4	-6,1	-6,1	-7,9	-7,2	-7,5	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	43,1	41,7	39,6	41,9	43,1	42,3	43,3	44,6	44,8	44,8	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-9,3	-7,6	-7,5	-7,4	-8,8	-8,5	-8,6	-10,2	-9,6	-10,0	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	196,4	202,7	193,7	187,2	199,5	201,7	200,7	207,3	210,1	213,9	215,4	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1666,4	-1560,1	-1572,1	-1468,9	-1489,9	-1549,1	-1459,9	-1470,8	-1523,4	-1439,8	-1449,0	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,1	-133,2	-89,6	-125,3	-93,7	-73,8	-95,5	-77,8	-57,8	-66,4	-61,8	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-34,1	-43,2	7,0	-37,6	-1,5	24,5	-3,0	16,1	42,2	30,6	34,0	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-336,9	-264,6	-338,2	-347,7	-262,5	-383,0	-312,7	-299,3	-437,3	-278,5	-341,9	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,3	128,7	116,9	122,0	117,2	121,5	125,6	121,9	126,5	129,3	126,9	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-9,8	-9,5	-9,8	-11,0	-10,8	-11,0	-12,2	-12,1	-12,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	212,9	212,7	205,0	207,5	205,0	212,2	214,3	211,9	220,6	221,6	220,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,1	259,6	229,7	239,7	228,3	239,0	245,4	237,5	249,0	251,5	247,4	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,8	52,9	53,2	53,4	53,3	53,2	53,3	53,3	52,6	52,7	52,8	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,4	8,4	9,2	8,2	9,4	9,8	9,1	10,6	10,7	10,4	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	77,3	79,7	76,4	78,8	78,9	81,3	84,1	83,6	87,2	89,7	89,1	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,5	160,1	145,7	150,2	143,6	152,0	154,8	149,8	158,9	159,5	156,5	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,1	-0,8	-0,5	-0,6	-2,1	-1,9	-1,9	-3,8	-3,6	-3,4	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	3,9	4,2	2,8	3,2	3,1	2,1	2,3	1,9	1,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	12,4	10,6	10,2	11,1	11,1	11,1	11,6	11,8	12,0	12,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	19,1	15,6	16,7	16,2	16,5	17,5	17,0	17,6	18,4	18,1	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,4	36,0	35,1	36,2	36,7	38,2	39,6	39,8	41,5	43,1	43,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	128,1	116,8	121,4	116,1	121,7	125,2	121,1	127,0	129,0	126,3	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-2,9	-2,6	-2,9	-3,6	-3,4	-3,5	-4,3	-4,2	-4,3	-4,5
Total	DM	-14,21	-7,83	-8,95	-9,60	-3,33	-6,11	-2,27	-0,35	-3,32	5,45	2,70	—
	DMA	22,60	18,29	13,98	15,81	10,78	13,18	9,62	7,23	15,78	7,67	9,19	—
	PDMA	24,94	25,16	19,77	32,50	20,37	14,03	16,84	9,82	20,72	16,74	18,48	—
CPI	DM	-41,99	-26,90	-22,32	-26,86	-9,05	-19,12	-12,31	-5,49	-16,40	3,03	-2,06	—
	DMA	44,95	34,79	24,63	30,59	16,49	24,12	15,56	9,55	28,25	7,95	12,79	—
	PDMA	43,19	47,31	19,77	47,54	24,54	17,08	22,98	11,39	28,15	18,18	21,30	—
SPI	DM	6,16	6,15	0,85	3,05	0,87	3,43	5,10	3,41	6,28	7,23	6,20	—
	DMA	6,21	6,19	6,17	4,97	6,59	5,15	5,26	5,53	6,63	7,47	6,55	—
	PDMA	11,56	8,92	19,78	21,46	17,32	11,79	12,34	8,68	15,27	15,68	16,41	—
ΔCS	DM	-48,15	-33,05	-23,16	-29,92	-9,92	-22,55	-17,41	-8,90	-22,68	-4,20	-8,26	—
	DMA	38,74	28,60	18,46	25,62	9,90	18,96	10,30	4,01	21,63	0,49	6,24	—
	PDMA	31,63	38,40	-0,01	26,08	7,21	5,30	10,64	2,72	12,88	2,50	4,89	—

Tabela 8.174: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	470,4	470,4	499,3	515,6	499,3	523,6	552,4	523,6	548,0	588,5	548,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	16,5	16,1	12,6	14,1	14,0	9,4	12,1	11,8	6,2	9,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,3	-78,4	-80,4	-83,5	-81,4	-83,0	-87,4	-83,9	-85,6	-91,2	-86,5	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,6	-8,2	-7,3	-7,8	-9,2	-8,1	-8,8	-10,3	-8,9	-9,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,6	44,9	46,1	45,5	45,6	47,2	46,2	46,4	48,2	46,9	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,1	-10,4	-9,8	-10,1	-11,3	-10,5	-11,0	-12,1	-11,2	-11,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,8	175,8	176,5	187,5	184,0	183,6	196,8	190,8	190,6	205,6	197,4	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1645,5	-1532,2	-1606,4	-1500,6	-1500,0	-1571,1	-1466,8	-1470,3	-1533,7	-1427,8	-1438,6	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-127,6	-125,7	-107,5	-98,9	-105,8	-91,0	-77,2	-89,3	-74,6	-56,0	-72,9	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,0	-28,2	-5,3	2,1	-6,4	12,6	26,6	11,4	30,3	50,2	29,2	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-361,9	-249,0	-404,3	-221,1	-280,1	-443,7	-199,3	-307,4	-490,0	-179,2	-337,1	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,1	126,1	125,2	125,8	127,5	126,0	127,2	129,0	126,9	128,6	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-12,2	-13,0	-13,1	-13,0	-13,7	-13,7	-13,7	-14,4	-14,4	-14,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,2	195,5	199,3	199,1	199,2	203,2	202,4	202,8	207,7	205,9	207,0	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	253,2	258,8	253,7	255,8	261,2	254,3	258,0	263,7	254,9	260,4	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,7	55,2	55,5	55,4	54,6	55,1	54,9	53,8	54,6	54,2	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,0	11,2	10,5	10,8	12,0	11,1	11,5	13,0	11,7	12,4	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,0	68,9	69,6	72,1	72,1	73,0	74,9	75,1	76,8	77,9	78,5	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,8	155,4	161,3	156,8	157,7	163,5	158,0	159,7	165,9	159,3	161,9	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-0,9	-2,3	-2,0	-2,0	-3,4	-3,0	-3,0	-4,7	-4,0	-4,2	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	2,8	3,3	1,9	1,9	2,5	1,1	1,1	1,6	0,3	0,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,9	12,5	13,4	13,2	12,8	13,8	13,6	13,3	14,2	14,0	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	19,4	19,9	20,0	19,9	20,2	20,4	20,4	20,6	20,9	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,5	33,0	34,7	34,8	35,0	36,6	36,8	37,1	38,7	38,8	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,0	123,0	126,9	124,3	124,9	128,5	125,2	126,4	130,1	126,2	128,0	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-4,0	-4,1	-4,0	-4,5	-4,5	-4,5	-5,0	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-15,42	-6,60	-12,12	0,15	-3,18	-9,40	5,92	-0,27	-6,83	11,75	2,67	—
	DMA	20,39	13,77	17,65	9,65	8,72	16,03	9,02	6,54	17,57	13,75	8,11	—
	PDMA	26,16	22,86	16,34	11,89	12,94	13,69	14,61	12,52	22,00	27,72	21,31	—
CPI	DM	-40,95	-19,76	-34,65	-4,80	-13,11	-29,58	7,96	-7,46	-24,97	20,81	-1,89	—
	DMA	42,97	28,13	35,44	17,51	14,89	30,05	14,71	8,05	31,68	24,41	9,80	—
	PDMA	40,11	37,68	22,81	18,04	19,97	13,00	14,55	8,79	21,49	33,59	16,11	—
SPI	DM	3,31	3,06	4,41	3,79	4,10	5,40	4,43	5,01	6,48	5,11	6,02	—
	DMA	3,83	3,25	4,60	3,89	4,19	5,75	4,85	5,44	7,23	5,94	6,87	—
	PDMA	15,93	11,98	11,60	7,37	7,78	14,19	14,65	15,25	22,37	23,42	25,12	—
ΔCS	DM	-44,26	-22,82	-39,07	-8,59	-17,21	-34,98	3,54	-12,48	-31,45	15,70	-7,91	—
	DMA	39,15	24,88	30,84	13,62	10,70	24,31	9,86	2,61	24,46	18,47	2,93	—
	PDMA	24,18	25,70	11,21	10,67	12,19	-1,20	-0,09	-6,47	-0,88	10,17	-9,00	—

Tabela 8.175: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	530,8	546,7	484,4	472,9	500,8	507,2	509,6	523,4	555,3	584,3	570,9	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	8,0	18,7	14,9	12,8	16,3	11,5	10,4	11,0	4,4	5,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,7	-87,5	-77,8	-78,5	-81,7	-80,7	-83,1	-84,6	-86,9	-92,0	-90,6	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-7,9	-6,8	-5,8	-5,3	-8,0	-6,8	-6,6	-10,8	-9,0	-9,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	47,7	42,9	44,5	45,1	44,2	46,2	46,4	47,0	49,5	49,2	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-9,9	-8,7	-7,6	-7,5	-9,9	-8,7	-8,7	-12,5	-11,0	-11,1	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,1	195,1	163,0	167,4	175,8	172,9	181,3	185,3	193,7	208,9	205,2	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1670,4	-1554,5	-1743,5	-1622,0	-1624,2	-1709,0	-1591,4	-1591,2	-1628,3	-1512,0	-1514,8	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,2	-72,8	-132,8	-116,4	-109,5	-114,0	-94,5	-91,2	-76,1	-51,3	-54,3	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,1	38,8	-23,3	-7,3	1,5	-4,1	15,8	20,0	34,6	61,4	57,6	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,0	-165,5	-380,5	-173,9	-123,8	-419,8	-169,2	-144,3	-521,4	-163,3	-188,0	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,4	116,8	117,4	116,3	120,7	120,7	120,3	129,4	128,1	128,8	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,3	-13,3	-11,0	-11,0	-11,0	-12,1	-12,1	-12,1	-14,5	-14,5	-14,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	201,9	189,4	190,4	190,4	195,4	195,9	195,8	210,6	208,6	209,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	253,3	245,0	243,0	239,4	252,0	248,0	246,1	267,8	259,1	261,1	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,8	53,2	53,5	53,5	53,3	53,8	53,8	52,2	53,4	53,3	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	10,7	9,4	8,9	8,6	10,5	9,8	9,6	13,4	11,9	12,2	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	74,8	61,8	65,7	65,6	66,7	70,0	69,9	78,9	80,2	80,5	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	155,7	149,9	147,1	145,6	155,0	151,3	150,5	166,8	160,4	161,4	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,4	-1,3	-1,2	-1,2	-2,4	-2,2	-2,2	-5,6	-4,8	-4,8	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	1,2	3,8	3,0	2,8	3,1	2,1	2,0	1,1	0,2	0,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	14,4	12,2	13,3	13,4	12,7	13,8	13,9	14,1	15,1	15,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,2	17,9	18,9	18,6	18,7	19,5	19,4	20,8	21,1	21,2	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	36,2	26,9	30,6	30,0	30,0	33,3	33,0	36,7	38,9	39,5	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	122,8	117,3	115,3	114,6	121,5	119,0	118,6	130,4	126,8	127,2	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,4	-3,1	-3,3	-3,2	-3,7	-3,8	-3,8	-4,9	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-14,46	3,84	-21,65	-7,95	-4,58	-18,08	-2,18	-0,50	-10,92	10,11	8,42	—
	DMA	19,97	13,83	24,46	19,43	19,74	21,36	14,61	14,91	23,28	17,78	16,15	—
	PDMA	13,67	19,13	25,99	20,22	18,93	16,41	10,15	11,11	27,48	33,95	32,41	—
CPI	DM	-40,19	3,88	-50,90	-18,85	-10,14	-45,49	-7,71	-3,33	-35,45	15,85	11,34	—
	DMA	40,65	26,85	52,85	41,10	41,14	46,25	30,16	30,91	44,10	32,69	28,32	—
	PDMA	13,62	24,65	40,59	30,91	27,77	24,66	14,95	16,85	26,78	42,36	38,38	—
SPI	DM	4,41	3,81	-0,19	0,03	-0,51	2,02	1,87	1,58	7,07	5,89	6,29	—
	DMA	4,80	4,29	3,65	3,54	4,05	3,10	3,20	3,18	8,01	6,85	7,23	—
	PDMA	13,70	15,08	15,29	12,38	12,45	10,35	6,63	6,90	27,99	27,78	28,04	—
ΔCS	DM	-44,60	0,07	-50,71	-18,88	-9,62	-47,51	-9,58	-4,91	-42,52	9,96	5,05	—
	DMA	35,85	22,55	49,20	37,56	37,09	43,15	26,96	27,73	36,09	25,84	21,08	—
	PDMA	-0,09	9,56	25,30	18,53	15,32	14,31	8,32	9,95	-1,21	14,58	10,34	—

Tabela 8.176: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH (50% E_X^{HF}) e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,8	427,7	419,7	409,3	416,6	441,9	445,9	438,8	464,3	482,0	461,3	486,9	517,7	484,0	532,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,4	20,8	19,9	19,2	19,1	16,9	17,5	17,3	13,8	15,7	15,4	10,9	13,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-73,5	-71,8	-71,5	-72,3	-74,2	-75,4	-74,7	-76,6	-79,6	-77,0	-79,0	-83,4	-79,4	-81,7
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-6,9	-6,7	-6,4	-6,4	-7,8	-7,4	-7,4	-8,9	-8,1	-8,5	-10,0	-9,0	-9,6	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	43,0	42,2	42,3	42,6	42,9	43,6	43,4	43,6	44,8	44,1	44,3	45,9	44,8	43,0
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,8	-9,6	-9,5	-9,4	-10,6	-10,3	-10,3	-11,5	-11,0	-11,3	-12,5	-11,8	-12,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	161,3	150,4	155,5	157,2	158,7	166,9	165,3	166,9	178,0	173,2	175,1	188,6	181,1	195,0
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1732,1	-1627,0	-1748,1	-1634,2	-1639,7	-1715,3	-1612,1	-1613,5	-1679,4	-1581,4	-1583,9	-1640,8	-1543,9	-1551,5	-1441,7
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,0	-130,8	-139,2	-142,2	-139,0	-122,7	-119,9	-122,5	-106,5	-97,7	-106,3	-90,4	-76,6	-90,2	-79,7
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,5	-33,5	-39,4	-46,9	-42,4	-21,7	-21,1	-24,6	-4,2	3,6	-7,0	12,9	27,3	10,2	17,1
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,9	-251,0	-354,9	-261,4	-236,3	-395,6	-241,6	-266,0	-440,5	-222,0	-297,4	-493,5	-202,0	-331,8	-285,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	123,0	122,1	122,5	122,3	123,5	123,5	123,8	125,0	124,5	125,2	126,5	125,5	126,8	122,8
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,8	-13,7	-13,4	-13,3	-13,3	-14,2	-14,2	-14,1	-15,0	-15,0	-15,0	-15,8	-15,8	-15,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	196,6	194,6	195,0	195,0	198,3	198,3	198,4	202,6	202,0	202,4	207,6	206,0	207,1	174,1
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	254,5	254,8	254,0	253,1	257,6	255,0	255,9	260,7	256,1	258,8	264,1	257,5	262,1	244,3
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,7	53,7	53,9	53,9	53,2	53,5	53,4	52,2	52,8	52,6	50,9	52,0	51,4	49,8
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	12,0	11,9	11,7	11,6	12,9	12,4	12,5	14,1	13,3	13,7	15,6	14,3	15,1	9,0
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	71,3	67,0	69,8	69,8	70,4	72,9	72,9	74,4	76,2	76,5	79,1	79,9	80,6	66,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,3	154,6	156,1	153,8	153,5	158,5	155,3	155,7	161,1	156,9	158,1	164,0	158,7	160,8	154,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-2,7	-2,5	-2,2	-2,2	-3,7	-3,3	-3,3	-5,1	-4,5	-4,6	-6,9	-5,9	-6,2	-2,0
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,2	2,8	1,7	1,6	1,8	0,7	0,7	0,7	-0,3	-0,2	-0,5	-1,4	-1,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,4	12,5	13,1	13,2	13,0	13,7	13,6	13,6	14,3	14,2	14,5	15,0	14,9	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,4	19,5	20,2	20,2	20,1	20,7	20,7	20,9	21,2	21,4	21,9	21,9	22,3	18,4
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	29,4	31,7	31,7	31,3	33,5	33,6	33,3	35,3	35,5	35,2	37,1	37,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,0	122,7	121,5	121,2	124,3	122,6	122,9	126,0	123,8	124,5	127,7	124,9	126,2	123,3
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-4,1	-3,9	-3,9	-3,9	-4,3	-4,4	-4,4	-4,9	-4,9	-4,9	-5,4	-5,4	-5,4	-4,5
Total	DM	-21,64	-12,84	-22,92	-15,47	-14,18	-20,35	-10,03	-11,47	-17,79	-4,33	-8,67	-15,37	1,59	-5,82	—
	DMA	26,58	20,30	27,62	22,12	22,59	25,70	18,35	18,12	24,21	14,84	14,90	23,30	12,62	13,58	—
	PDMA	25,71	25,82	28,42	28,28	27,37	24,75	23,88	24,70	25,89	22,66	24,88	30,17	28,54	28,89	—
CPI	DM	-55,15	-34,33	-57,46	-40,05	-36,85	-52,80	-28,18	-31,77	-48,27	-15,74	-26,60	-44,28	-2,89	-21,47	—
	DMA	57,84	43,09	60,74	47,71	48,82	54,96	37,96	37,32	49,60	28,15	27,71	45,01	21,05	22,22	—
	PDMA	44,85	43,41	52,14	54,15	51,55	37,94	33,31	35,27	25,87	16,67	21,11	16,75	14,55	12,48	—
SPI	DM	2,93	2,91	2,41	2,56	2,44	3,44	3,27	3,41	4,57	4,04	4,47	5,83	4,88	5,65	—
	DMA	3,67	3,59	3,33	3,36	3,36	4,24	3,97	4,04	5,59	5,08	5,51	7,39	6,43	7,24	—
	PDMA	11,66	12,93	11,03	9,32	9,64	15,08	16,98	16,95	25,90	27,06	27,64	40,01	38,79	40,92	—
ΔCS	DM	-58,08	-37,24	-59,88	-42,61	-39,29	-56,24	-31,46	-35,19	-52,84	-19,78	-31,07	-50,11	-7,77	-27,13	—
	DMA	54,17	39,50	57,40	44,35	45,46	50,72	34,00	33,28	44,01	23,07	22,20	37,62	14,63	14,98	—
	PDMA	33,19	30,48	41,11	44,83	41,92	22,86	16,33	18,32	-0,02	-10,39	-6,53	-23,26	-24,23	-28,43	—

Tabela 8.177: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	449,1	441,3	499,7	438,6	492,5	520,6	485,9	513,5	542,8	533,4	535,7	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,4	16,9	10,7	14,6	10,2	9,0	10,4	8,6	7,3	6,2	6,8	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,4	-74,2	-77,0	-70,0	-76,8	-79,7	-76,0	-79,5	-82,5	-81,9	-82,4	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-6,2	-5,1	-5,1	-4,8	-6,4	-6,1	-6,1	-7,7	-7,1	-7,4	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,4	41,9	40,0	42,0	43,1	42,4	43,2	44,4	44,8	44,6	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-7,4	-7,4	-7,2	-8,6	-8,3	-8,4	-9,9	-9,3	-9,7	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	190,7	196,4	188,9	182,7	194,0	196,6	195,7	201,5	204,6	208,5	209,3	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,7	-1547,7	-1562,1	-1459,7	-1478,1	-1539,1	-1449,7	-1459,4	-1513,4	-1429,0	-1438,0	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-123,8	-129,8	-85,1	-118,1	-91,1	-69,6	-88,3	-75,5	-54,0	-59,4	-59,8	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,9	-39,4	12,4	-28,7	1,5	29,7	5,7	19,0	47,1	39,2	36,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-318,8	-257,2	-327,7	-318,6	-262,4	-370,4	-281,7	-298,6	-421,2	-245,8	-340,0	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	129,3	116,5	121,4	116,9	120,6	124,4	121,1	125,0	127,5	125,4	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,0	-9,6	-9,3	-9,5	-10,7	-10,5	-10,6	-11,8	-11,7	-11,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,8	213,8	205,0	207,4	205,1	211,6	213,6	211,5	219,4	220,2	219,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,3	260,2	229,5	239,0	228,6	237,9	243,9	236,9	247,0	249,0	245,9	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,2	53,3	53,2	53,0	53,1	53,1	52,5	52,6	52,6	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	10,3	8,4	9,1	8,2	9,3	9,7	9,1	10,5	10,5	10,3	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,1	80,5	76,4	78,7	78,8	80,8	83,5	83,1	86,2	88,6	88,1	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,8	160,7	145,4	149,6	143,6	151,2	153,5	149,2	157,4	157,6	155,2	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-1,8	-0,8	-0,4	-0,6	-2,1	-1,9	-1,8	-3,7	-3,5	-3,3	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,6	2,4	4,1	4,3	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,2	10,5	10,3	11,0	11,0	11,1	11,5	11,6	12,0	12,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	19,0	15,6	16,6	16,1	16,4	17,3	16,9	17,4	18,2	17,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,9	36,5	35,1	36,3	36,7	37,8	39,4	39,5	40,8	42,5	42,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,1	128,5	116,5	120,7	115,9	120,9	123,9	120,3	125,5	127,0	125,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-3,5	-2,8	-2,6	-2,8	-3,5	-3,4	-3,4	-4,2	-4,1	-4,1	-4,5
Total	DM	-12,11	-6,26	-7,48	-7,08	-2,41	-4,77	0,16	0,40	-2,04	7,75	3,28	—
	DMA	20,52	17,10	12,42	13,10	9,54	11,87	6,58	6,13	14,62	8,61	8,27	—
	PDMA	23,67	25,00	19,33	30,56	20,38	15,62	14,83	10,90	21,61	18,42	17,87	—
CPI	DM	-37,37	-23,63	-18,65	-20,55	-6,78	-15,38	-5,85	-3,28	-12,45	9,56	0,13	—
	DMA	39,74	31,59	20,75	23,92	13,45	20,80	8,76	6,72	26,45	11,29	11,49	—
	PDMA	38,34	44,45	16,19	40,99	22,25	19,39	16,55	11,39	30,76	24,48	22,52	—
SPI	DM	6,41	6,47	0,71	2,81	0,79	3,02	4,57	3,09	5,59	6,41	5,59	—
	DMA	6,43	6,47	6,31	5,17	6,67	5,33	4,99	5,69	5,95	6,64	5,91	—
	PDMA	12,90	10,74	21,63	22,91	19,00	12,86	13,57	10,54	14,90	13,98	14,46	—
ΔCS	DM	-43,79	-30,10	-19,37	-23,36	-7,58	-18,40	-10,43	-6,38	-18,03	3,15	-5,47	—
	DMA	33,31	25,12	14,43	18,75	6,78	15,47	3,78	1,02	20,50	4,65	5,58	—
	PDMA	25,44	33,72	-5,44	18,08	3,26	6,53	2,98	0,85	15,86	10,50	8,06	—

Tabela 8.178: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	442,8	447,0	487,2	401,9	491,1	512,0	452,6	515,9	538,2	503,7	542,0	565,8	555,5	569,7	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	17,1	11,5	17,6	10,2	9,2	12,9	8,0	6,8	8,0	5,6	4,2	3,0	3,0	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,5	-74,4	-75,6	-65,7	-76,4	-78,9	-72,4	-79,7	-82,3	-79,0	-83,2	-86,0	-85,6	-86,9	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,2	-4,3	-4,7	-4,1	-5,5	-5,5	-5,3	-6,7	-6,4	-6,5	-8,0	-7,4	-7,8	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	42,0	40,3	37,6	40,6	41,8	40,3	42,1	43,4	43,0	43,7	45,1	45,7	45,4	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-6,0	-6,3	-6,0	-7,1	-7,1	-7,0	-8,2	-7,9	-8,1	-9,4	-8,9	-9,3	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	184,0	191,6	175,0	158,0	182,2	183,4	173,7	190,5	192,2	189,1	199,2	201,4	204,8	208,4	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1661,2	-1562,9	-1595,3	-1477,0	-1516,3	-1576,6	-1482,9	-1501,6	-1555,0	-1472,3	-1484,0	-1531,2	-1451,5	-1464,1	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,9	-132,8	-100,3	-146,5	-103,3	-82,9	-115,3	-85,8	-65,4	-84,7	-68,3	-48,0	-55,3	-50,8	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,6	-43,3	-5,4	-63,3	-12,0	14,1	-26,3	7,7	33,8	9,3	27,6	53,5	43,6	47,4	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-316,0	-219,7	-283,7	-341,6	-189,4	-320,6	-310,4	-218,4	-362,5	-278,7	-250,3	-412,9	-247,5	-286,6	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	118,8	107,2	112,8	107,2	111,9	116,6	111,9	116,9	120,6	116,9	122,2	124,6	122,2	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-7,8	-7,4	-7,8	-8,7	-8,4	-8,7	-9,7	-9,5	-9,7	-10,7	-10,6	-10,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,5	197,6	188,8	189,7	189,1	195,6	197,1	195,7	203,4	204,9	203,2	212,5	213,3	212,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,3	245,2	213,7	226,1	211,9	222,6	231,8	220,7	232,0	237,7	230,0	242,2	243,9	240,0	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	50,8	51,4	51,7	51,5	51,8	51,9	51,9	51,9	51,9	52,0	51,5	51,7	51,7	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,1	7,4	8,4	7,2	8,1	8,7	7,8	8,9	9,2	8,6	9,9	9,8	9,6	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,1	70,6	66,0	67,6	68,7	70,8	73,1	73,3	76,3	78,9	78,5	82,9	85,2	84,7	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,3	149,4	134,1	139,5	131,7	140,3	144,2	137,7	146,9	149,1	144,1	154,1	154,1	151,1	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-1,6	0,5	1,0	0,7	-0,4	-0,1	-0,2	-1,7	-1,4	-1,4	-3,2	-3,0	-2,8	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	4,7	5,2	3,6	4,2	4,4	3,1	3,7	3,5	2,5	3,0	2,5	1,9	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,8	9,7	9,2	10,3	10,1	9,9	10,7	10,6	10,6	11,1	11,1	11,5	11,7	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,7	18,3	14,4	15,5	14,9	15,1	16,1	15,6	15,9	16,8	16,4	16,8	17,5	17,3	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,4	30,2	31,6	32,1	33,3	35,0	35,2	36,6	38,4	38,5	40,1	41,9	42,0	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	117,3	106,4	111,4	105,1	111,4	115,3	110,0	116,6	119,3	115,2	122,1	123,4	120,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-1,9	-1,6	-1,8	-2,4	-2,2	-2,4	-3,0	-2,8	-2,9	-3,6	-3,5	-3,6	-4,5
Total	DM	-16,29	-8,85	-12,25	-16,00	-5,60	-9,00	-8,99	-2,23	-5,66	-1,36	1,31	-2,36	6,62	4,98	—
	DMA	19,86	17,46	15,87	20,48	16,51	12,56	13,52	11,27	12,57	6,90	8,59	15,94	8,77	9,02	—
	PDMA	24,47	24,64	31,09	48,45	32,00	20,72	31,65	21,24	19,24	16,23	16,20	24,59	20,28	19,67	—
CPI	DM	-40,13	-22,36	-22,82	-34,95	-7,07	-18,68	-21,35	-2,55	-14,55	-6,39	2,12	-10,90	9,27	6,73	—
	DMA	42,60	36,75	26,15	39,73	27,44	20,41	24,25	16,64	21,88	9,28	11,68	30,92	13,84	13,82	—
	PDMA	43,83	47,40	29,29	68,07	36,02	15,48	39,97	20,27	23,06	15,43	19,01	37,38	29,89	30,98	—
SPI	DM	1,19	1,05	-4,50	-2,11	-4,53	-1,91	0,07	-2,00	0,87	2,33	0,71	3,91	4,67	3,69	—
	DMA	3,19	3,32	8,33	6,37	8,50	6,80	5,65	7,33	5,75	5,15	6,33	4,96	5,05	5,49	—
	PDMA	10,27	7,95	32,41	34,06	29,05	24,57	25,56	21,95	16,45	16,82	14,15	15,21	13,23	11,37	—
ΔCS	DM	-41,31	-23,42	-18,32	-32,84	-2,55	-16,78	-21,42	-0,55	-15,42	-8,72	1,40	-14,81	4,61	3,03	—
	DMA	39,41	33,43	17,82	33,35	18,94	13,61	18,61	9,30	16,14	4,13	5,36	25,96	8,78	8,32	—
	PDMA	33,56	39,45	-3,13	34,01	6,97	-9,10	14,41	-1,69	6,61	-1,38	4,86	22,18	16,66	19,61	—

Tabela 8.179: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	431,2	425,7	484,6	417,7	479,5	505,9	465,8	500,8	528,5	514,5	523,5	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	17,6	11,2	15,5	10,4	9,5	11,2	8,7	7,7	6,9	6,8	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-75,6	-67,9	-75,7	-78,4	-74,2	-78,5	-81,4	-80,4	-81,5	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-6,5	-5,1	-5,1	-4,7	-6,4	-6,1	-6,1	-7,9	-7,2	-7,5	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	43,1	41,7	39,6	41,9	43,1	42,3	43,3	44,6	44,8	44,8	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-9,3	-7,6	-7,5	-7,4	-8,8	-8,5	-8,6	-10,2	-9,6	-10,0	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	196,4	202,7	193,7	187,2	199,5	201,7	200,7	207,3	210,1	213,9	215,4	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1666,4	-1560,1	-1572,1	-1468,9	-1489,9	-1549,1	-1459,9	-1470,8	-1523,4	-1439,8	-1449,0	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,1	-133,2	-89,6	-125,3	-93,7	-73,8	-95,5	-77,8	-57,8	-66,4	-61,8	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-34,1	-43,2	7,0	-37,6	-1,5	24,5	-3,0	16,1	42,2	30,6	34,0	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-336,9	-264,6	-338,2	-347,7	-262,5	-383,0	-312,7	-299,3	-437,3	-278,5	-341,9	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,3	128,7	116,9	122,0	117,2	121,5	125,6	121,9	126,5	129,3	126,9	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-9,8	-9,5	-9,8	-11,0	-10,8	-11,0	-12,2	-12,1	-12,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	212,9	212,7	205,0	207,5	205,0	212,2	214,3	211,9	220,6	221,6	220,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,1	259,6	229,7	239,7	228,3	239,0	245,4	237,5	249,0	251,5	247,4	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,8	52,9	53,2	53,4	53,3	53,2	53,3	53,3	52,6	52,7	52,8	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,4	8,4	9,2	8,2	9,4	9,8	9,1	10,6	10,7	10,4	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	77,3	79,7	76,4	78,8	78,9	81,3	84,1	83,6	87,2	89,7	89,1	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,5	160,1	145,7	150,2	143,6	152,0	154,8	149,8	158,9	159,5	156,5	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,1	-0,8	-0,5	-0,6	-2,1	-1,9	-1,9	-3,8	-3,6	-3,4	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	3,9	4,2	2,8	3,2	3,1	2,1	2,3	1,9	1,2	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	12,4	10,6	10,2	11,1	11,1	11,1	11,6	11,8	12,0	12,2	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	19,1	15,6	16,7	16,2	16,5	17,5	17,0	17,6	18,4	18,1	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,4	36,0	35,1	36,2	36,7	38,2	39,6	39,8	41,5	43,1	43,1	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	128,1	116,8	121,4	116,1	121,7	125,2	121,1	127,0	129,0	126,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-2,9	-2,6	-2,9	-3,6	-3,4	-3,5	-4,3	-4,2	-4,3	-4,5
Total	DM	-14,22	-7,84	-8,96	-9,61	-3,33	-6,11	-2,27	-0,36	-3,32	5,45	2,70	—
	DMA	22,48	18,24	13,95	15,78	10,80	13,07	9,50	7,13	15,62	7,68	9,02	—
	PDMA	24,84	24,63	20,23	32,80	20,71	13,96	17,17	10,08	20,35	16,06	17,84	—
CPI	DM	-41,89	-26,80	-22,22	-26,76	-8,95	-19,02	-12,21	-5,39	-16,30	3,13	-1,96	—
	DMA	44,78	34,82	24,53	30,49	16,52	23,85	15,37	9,30	27,99	8,11	12,53	—
	PDMA	43,07	47,20	19,72	47,35	24,50	16,79	22,85	11,24	27,79	17,97	20,98	—
SPI	DM	6,08	6,07	0,77	2,97	0,79	3,35	5,02	3,33	6,20	7,15	6,12	—
	DMA	6,12	6,08	6,19	4,99	6,61	5,15	5,19	5,55	6,55	7,37	6,45	—
	PDMA	11,47	8,08	20,60	22,14	17,93	11,88	13,00	9,23	14,89	14,66	15,54	—
ΔCS	DM	-47,97	-32,87	-22,98	-29,74	-9,74	-22,37	-17,23	-8,72	-22,50	-4,02	-8,08	—
	DMA	38,66	28,74	18,33	25,50	9,90	18,70	10,18	3,75	21,44	0,74	6,07	—
	PDMA	31,61	39,13	-0,88	25,21	6,57	4,90	9,85	2,00	12,90	3,31	5,44	—

Tabela 8.180: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	470,4	470,4	499,3	515,6	499,3	523,6	552,4	523,6	548,0	588,5	548,0	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	16,5	16,1	12,6	14,1	14,0	9,4	12,1	11,8	6,2	9,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,3	-78,4	-80,4	-83,5	-81,4	-83,0	-87,4	-83,9	-85,6	-91,2	-86,5	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,6	-8,2	-7,3	-7,8	-9,2	-8,1	-8,8	-10,3	-8,9	-9,8	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,6	44,9	46,1	45,5	45,6	47,2	46,2	46,4	48,2	46,9	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,1	-10,4	-9,8	-10,1	-11,3	-10,5	-11,0	-12,1	-11,2	-11,8	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,8	175,8	176,5	187,5	184,0	183,6	196,8	190,8	190,6	205,6	197,4	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1645,5	-1532,2	-1606,4	-1500,6	-1500,0	-1571,1	-1466,8	-1470,3	-1533,7	-1427,8	-1438,6	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-127,6	-125,7	-107,5	-98,9	-105,8	-91,0	-77,2	-89,3	-74,6	-56,0	-72,9	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,0	-28,2	-5,3	2,1	-6,4	12,6	26,6	11,4	30,3	50,2	29,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-361,9	-249,0	-404,3	-221,1	-280,1	-443,7	-199,3	-307,4	-490,0	-179,2	-337,1	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,1	126,1	125,2	125,8	127,5	126,0	127,2	129,0	126,9	128,6	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-12,2	-13,0	-13,1	-13,0	-13,7	-13,7	-13,7	-14,4	-14,4	-14,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,2	195,5	199,3	199,1	199,2	203,2	202,4	202,8	207,7	205,9	207,0	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	253,2	258,8	253,7	255,8	261,2	254,3	258,0	263,7	254,9	260,4	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,7	55,2	55,5	55,4	54,6	55,1	54,9	53,8	54,6	54,2	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,0	11,2	10,5	10,8	12,0	11,1	11,5	13,0	11,7	12,4	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,0	68,9	69,6	72,1	72,1	73,0	74,9	75,1	76,8	77,9	78,5	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,8	155,4	161,3	156,8	157,7	163,5	158,0	159,7	165,9	159,3	161,9	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-0,9	-2,3	-2,0	-2,0	-3,4	-3,0	-3,0	-4,7	-4,0	-4,2	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	2,8	3,3	1,9	1,9	2,5	1,1	1,1	1,6	0,3	0,3	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,9	12,5	13,4	13,2	12,8	13,8	13,6	13,3	14,2	14,0	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	19,4	19,9	20,0	19,9	20,2	20,4	20,4	20,6	20,9	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,5	33,0	34,7	34,8	35,0	36,6	36,8	37,1	38,7	38,8	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,0	123,0	126,9	124,3	124,9	128,5	125,2	126,4	130,1	126,2	128,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-4,0	-4,1	-4,0	-4,5	-4,5	-4,5	-5,0	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-15,42	-6,60	-12,12	0,15	-3,18	-9,40	5,92	-0,27	-6,83	11,75	2,67	—
	DMA	20,33	13,79	17,56	9,63	8,71	15,93	8,90	6,43	17,41	13,73	7,99	—
	PDMA	26,55	23,10	16,31	11,74	12,79	13,50	13,99	12,05	21,24	27,15	20,71	—
CPI	DM	-40,85	-19,66	-34,55	-4,70	-13,01	-29,48	8,06	-7,36	-24,87	20,91	-1,79	—
	DMA	42,87	28,25	35,34	17,59	14,99	29,94	14,57	7,93	31,44	24,49	9,66	—
	PDMA	40,01	37,66	22,74	17,96	19,88	13,05	14,27	8,86	21,36	33,46	15,98	—
SPI	DM	3,23	2,98	4,33	3,71	4,02	5,32	4,35	4,93	6,40	5,03	5,94	—
	DMA	3,80	3,19	4,52	3,80	4,10	5,65	4,75	5,33	7,12	5,83	6,77	—
	PDMA	16,68	12,43	11,59	7,19	7,59	13,84	13,79	14,39	21,14	22,52	24,17	—
ΔCS	DM	-44,08	-22,64	-38,89	-8,41	-17,03	-34,80	3,72	-12,30	-31,27	15,88	-7,73	—
	DMA	39,07	25,05	30,82	13,79	10,89	24,28	9,83	2,59	24,32	18,66	2,90	—
	PDMA	23,33	25,23	11,15	10,77	12,29	-0,79	0,48	-5,53	0,22	10,95	-8,20	—

Tabela 8.181: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	530,8	546,7	484,4	472,9	500,8	507,2	509,6	523,4	555,3	584,3	570,9	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	8,0	18,7	14,9	12,8	16,3	11,5	10,4	11,0	4,4	5,3	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,7	-87,5	-77,8	-78,5	-81,7	-80,7	-83,1	-84,6	-86,9	-92,0	-90,6	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-7,9	-6,8	-5,8	-5,3	-8,0	-6,8	-6,6	-10,8	-9,0	-9,2	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	47,7	42,9	44,5	45,1	44,2	46,2	46,4	47,0	49,5	49,2	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-9,9	-8,7	-7,6	-7,5	-9,9	-8,7	-8,7	-12,5	-11,0	-11,1	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,1	195,1	163,0	167,4	175,8	172,9	181,3	185,3	193,7	208,9	205,2	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1670,4	-1554,5	-1743,5	-1622,0	-1624,2	-1709,0	-1591,4	-1591,2	-1628,3	-1512,0	-1514,8	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,2	-72,8	-132,8	-116,4	-109,5	-114,0	-94,5	-91,2	-76,1	-51,3	-54,3	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,1	38,8	-23,3	-7,3	1,5	-4,1	15,8	20,0	34,6	61,4	57,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,0	-165,5	-380,5	-173,9	-123,8	-419,8	-169,2	-144,3	-521,4	-163,3	-188,0	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,4	116,8	117,4	116,3	120,7	120,7	120,3	129,4	128,1	128,8	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,3	-13,3	-11,0	-11,0	-11,0	-12,1	-12,1	-12,1	-14,5	-14,5	-14,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	201,9	189,4	190,4	190,4	195,4	195,9	195,8	210,6	208,6	209,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	253,3	245,0	243,0	239,4	252,0	248,0	246,1	267,8	259,1	261,1	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,8	53,2	53,5	53,5	53,3	53,8	53,8	52,2	53,4	53,3	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	10,7	9,4	8,9	8,6	10,5	9,8	9,6	13,4	11,9	12,2	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	74,8	61,8	65,7	65,6	66,7	70,0	69,9	78,9	80,2	80,5	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	155,7	149,9	147,1	145,6	155,0	151,3	150,5	166,8	160,4	161,4	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,4	-1,3	-1,2	-1,2	-2,4	-2,2	-2,2	-5,6	-4,8	-4,8	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	1,2	3,8	3,0	2,8	3,1	2,1	2,0	1,1	0,2	0,3	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	14,4	12,2	13,3	13,4	12,7	13,8	13,9	14,1	15,1	15,1	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,2	17,9	18,9	18,6	18,7	19,5	19,4	20,8	21,1	21,2	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	36,2	26,9	30,6	30,0	30,0	33,3	33,0	36,7	38,9	39,5	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	122,8	117,3	115,3	114,6	121,5	119,0	118,6	130,4	126,8	127,2	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,4	-3,1	-3,3	-3,2	-3,7	-3,8	-3,8	-4,9	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-14,46	3,84	-21,65	-7,96	-4,59	-18,08	-2,19	-0,50	-10,92	10,10	8,42	—
	DMA	19,87	13,75	24,45	19,51	19,82	21,32	14,63	14,92	23,11	17,67	16,04	—
	PDMA	13,44	18,48	26,45	20,63	19,34	16,40	10,06	10,60	26,67	33,29	31,75	—
CPI	DM	-40,09	3,98	-50,80	-18,75	-10,04	-45,39	-7,61	-3,23	-35,35	15,95	11,44	—
	DMA	40,53	26,78	52,76	41,20	41,24	46,15	30,25	30,97	43,85	32,57	28,20	—
	PDMA	13,68	24,37	40,54	30,82	27,72	24,60	14,92	16,70	26,64	42,19	38,22	—
SPI	DM	4,33	3,73	-0,27	-0,05	-0,59	1,94	1,79	1,50	6,99	5,81	6,21	—
	DMA	4,72	4,20	3,69	3,61	4,11	3,10	3,17	3,14	7,90	6,75	7,13	—
	PDMA	13,27	14,16	16,12	13,15	13,20	10,40	6,50	6,12	26,69	26,77	27,00	—
ΔCS	DM	-44,42	0,25	-50,53	-18,70	-9,44	-47,33	-9,40	-4,73	-42,34	10,14	5,23	—
	DMA	35,81	22,58	49,08	37,59	37,12	43,05	27,07	27,83	35,95	25,83	21,07	—
	PDMA	0,40	10,21	24,42	17,67	14,53	14,20	8,41	10,59	-0,05	15,42	11,23	—

Tabela 8.182: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível BHandH 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,8	427,7	419,7	409,3	416,6	441,9	445,9	438,8	464,3	482,0	461,3	486,9	517,7	484	533,2
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,4	20,8	19,9	19,2	19,1	16,9	17,5	17,3	13,8	15,7	15,4	10,9	13,9	15,6
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-73,5	-71,8	-71,5	-72,3	-74,2	-75,4	-74,7	-76,6	-79,6	-77	-79,0	-83,4	-79,4	-81,8
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-6,9	-6,7	-6,4	-6,4	-7,8	-7,4	-7,4	-8,9	-8,1	-8,5	-10,0	-9,0	-9,6	-8,7
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	43,0	42,2	42,3	42,6	42,9	43,6	43,4	43,6	44,8	44,1	44,3	45,9	44,8	43,1
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,8	-9,6	-9,5	-9,4	-10,6	-10,3	-10,3	-11,5	-11,0	-11,3	-12,5	-11,8	-12,2	-10,5
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	161,3	150,4	155,5	157,2	158,7	166,9	165,3	166,9	178,0	173,2	175,1	188,6	181,1	195,5
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1732,1	-1627,0	-1748,1	-1634,2	-1639,7	-1715,3	-1612,1	-1613,5	-1679,4	-1581,4	-1583,9	-1640,8	-1543,9	-1551,5	-1442,8
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,0	-130,8	-139,2	-142,2	-139	-122,7	-119,9	-122,5	-106,5	-97,7	-106,3	-90,4	-76,6	-90,2	-79,5
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,5	-33,5	-39,4	-46,9	-42,4	-21,7	-21,1	-24,6	-4,2	3,6	-7	12,9	27,3	10,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,9	-251,0	-354,9	-261,4	-236,3	-395,6	-241,6	-266	-440,5	-222,0	-297,4	-493,5	-202,0	-331,8	-286,9
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	123,0	122,1	122,5	122,3	123,5	123,5	123,8	125,0	124,5	125,2	126,5	125,5	126,8	123,0
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,8	-13,7	-13,4	-13,3	-13,3	-14,2	-14,2	-14,1	-15,0	-15,0	-15	-15,8	-15,8	-15,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	196,6	194,6	195,0	195	198,3	198,3	198,4	202,6	202,0	202,4	207,6	206,0	207,1	174,4
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	254,5	254,8	254,0	253,1	257,6	255,0	255,9	260,7	256,1	258,8	264,1	257,5	262,1	244,5
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,7	53,7	53,9	53,9	53,2	53,5	53,4	52,2	52,8	52,6	50,9	52,0	51,4	49,7
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	12,0	11,9	11,7	11,6	12,9	12,4	12,5	14,1	13,3	13,7	15,6	14,3	15,1	9,1
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	71,3	67,0	69,8	69,8	70,4	72,9	72,9	74,4	76,2	76,5	79,1	79,9	80,6	67,2
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,3	154,6	156,1	153,8	153,5	158,5	155,3	155,7	161,1	156,9	158,1	164,0	158,7	160,8	154,5
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-2,7	-2,5	-2,2	-2,2	-3,7	-3,3	-3,3	-5,1	-4,5	-4,6	-6,9	-5,9	-6,2	-2,1
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,2	2,8	1,7	1,6	1,8	0,7	0,7	0,7	-0,3	-0,2	-0,5	-1,4	-1,4	2,0
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,4	12,5	13,1	13,2	13,0	13,7	13,6	13,6	14,3	14,2	14,5	15,0	14,9	11,4
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,4	19,5	20,2	20,2	20,1	20,7	20,7	20,9	21,2	21,4	21,9	21,9	22,3	18,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	29,4	31,7	31,7	31,3	33,5	33,6	33,3	35,3	35,5	35,2	37,1	37,4	33,7
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,0	122,7	121,5	121,2	124,3	122,6	122,9	126,0	123,8	124,5	127,7	124,9	126,2	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-4,1	-3,9	-3,9	-3,9	-4,3	-4,4	-4,4	-4,9	-4,9	-4,9	-5,4	-5,4	-5,4	-4,5
Total	DM	-21,64	-12,85	-22,92	-15,47	-14,19	-20,36	-10,04	-11,48	-17,79	-4,33	-8,68	-15,38	1,59	-5,83	—
	DMA	26,52	20,32	27,58	22,16	22,63	25,61	18,35	18,12	24,12	14,82	14,80	23,20	12,57	13,47	—
	PDMA	25,52	25,37	28,35	27,84	26,94	24,12	23,41	24,23	25,30	22,11	24,31	29,47	27,97	28,34	—
CPI	DM	-55,05	-34,23	-57,36	-39,95	-36,75	-52,70	-28,08	-31,67	-48,17	-15,64	-26,50	-44,18	-2,79	-21,37	—
	DMA	57,75	43,23	60,65	47,85	48,95	54,88	38,08	37,44	49,52	28,25	27,61	44,91	21,10	22,12	—
	PDMA	44,78	43,41	52,05	54,12	51,53	37,88	33,29	35,25	26,01	16,60	21,04	16,82	14,53	12,57	—
SPI	DM	2,85	2,83	2,33	2,48	2,36	3,36	3,19	3,33	4,49	3,96	4,39	5,75	4,80	5,57	—
	DMA	3,61	3,51	3,32	3,32	3,32	4,15	3,89	3,96	5,50	4,97	5,41	7,28	6,32	7,13	—
	PDMA	11,40	12,14	10,98	8,57	8,90	14,03	16,17	16,15	24,78	26,16	26,71	38,74	37,83	39,90	—
ΔCS	DM	-41,31	-23,42	-18,32	-32,84	-2,55	-16,78	-21,42	-0,55	-15,42	-8,72	1,40	-14,81	4,61	3,03	—
	DMA	39,41	33,43	17,82	33,35	18,94	13,61	18,61	9,30	16,14	4,13	5,36	25,96	8,78	8,32	—
	PDMA	33,56	39,45	-3,13	34,01	6,97	-9,10	14,41	-1,69	6,61	-1,38	4,86	22,18	16,66	19,61	—

Tabela 8.183: Constantes de acoplamento B971 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	449,1	441,3	499,7	438,6	492,5	520,6	485,9	513,5	542,8	533,4	535,7	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,4	16,9	10,7	14,6	10,2	9,0	10,4	8,6	7,3	6,2	6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,4	-74,2	-77,0	-70,0	-76,8	-79,7	-76,0	-79,5	-82,5	-81,9	-82,4	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-6,2	-5,1	-5,1	-4,8	-6,4	-6,1	-6,1	-7,7	-7,1	-7,4	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,4	41,9	40,0	42,0	43,1	42,4	43,2	44,4	44,8	44,6	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-7,4	-7,4	-7,2	-8,6	-8,3	-8,4	-9,9	-9,3	-9,7	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	190,7	196,4	188,9	182,7	194,0	196,6	195,7	201,5	204,6	208,5	209,3	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,7	-1547,7	-1562,1	-1459,7	-1478,1	-1539,1	-1449,7	-1459,4	-1513,4	-1429,0	-1438,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-123,8	-129,8	-85,1	-118,1	-91,1	-69,6	-88,3	-75,5	-54,0	-59,4	-59,8	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,9	-39,4	12,4	-28,7	1,5	29,7	5,7	19,0	47,1	39,2	36,7	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-318,8	-257,2	-327,7	-318,6	-262,4	-370,4	-281,7	-298,6	-421,2	-245,8	-340,0	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	129,3	116,5	121,4	116,9	120,6	124,4	121,1	125,0	127,5	125,4	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,0	-9,6	-9,3	-9,5	-10,7	-10,5	-10,6	-11,8	-11,7	-11,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,8	213,8	205,0	207,4	205,1	211,6	213,6	211,5	219,4	220,2	219,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,3	260,2	229,5	239,0	228,6	237,9	243,9	236,9	247,0	249,0	245,9	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,2	53,3	53,2	53,0	53,1	53,1	52,5	52,6	52,6	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	10,3	8,4	9,1	8,2	9,3	9,7	9,1	10,5	10,5	10,3	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	78,1	80,5	76,4	78,7	78,8	80,8	83,5	83,1	86,2	88,6	88,1	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,8	160,7	145,4	149,6	143,6	151,2	153,5	149,2	157,4	157,6	155,2	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-1,8	-0,8	-0,4	-0,6	-2,1	-1,9	-1,8	-3,7	-3,5	-3,3	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,6	2,4	4,1	4,3	3,0	3,4	3,3	2,3	2,5	2,1	1,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,2	10,5	10,3	11,0	11,0	11,1	11,5	11,6	12,0	12,1	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	19,0	15,6	16,6	16,1	16,4	17,3	16,9	17,4	18,2	17,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,9	36,5	35,1	36,3	36,7	37,8	39,4	39,5	40,8	42,5	42,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,1	128,5	116,5	120,7	115,9	120,9	123,9	120,3	125,5	127,0	125,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-3,5	-2,8	-2,6	-2,8	-3,5	-3,4	-3,4	-4,2	-4,1	-4,1	-4,5
Total	DM	-12,19	-6,34	-7,56	-7,15	-2,49	-4,84	0,08	0,32	-2,12	7,67	3,20	—
	DMA	20,72	17,11	12,57	13,26	9,52	12,04	6,57	6,28	14,67	8,64	8,37	—
	PDMA	23,94	24,61	18,78	30,23	19,90	15,86	14,25	10,53	22,27	19,05	18,80	—
CPI	DM	-37,70	-23,95	-18,98	-20,88	-7,11	-15,71	-6,18	-3,61	-12,77	9,24	-0,20	—
	DMA	40,05	31,46	21,11	24,28	13,42	21,15	8,69	7,05	26,43	11,22	11,55	—
	PDMA	38,35	44,30	16,39	41,19	22,30	19,60	16,59	11,54	30,80	24,43	22,54	—
SPI	DM	6,52	6,58	0,82	2,91	0,90	3,13	4,68	3,20	5,69	6,52	5,70	—
	DMA	6,55	6,58	6,30	5,18	6,66	5,37	5,01	5,72	6,05	6,75	6,03	—
	PDMA	13,37	10,17	20,53	22,19	18,14	13,12	12,54	9,79	16,02	15,10	16,06	—
ΔCS	DM	-44,22	-30,53	-19,80	-23,80	-8,01	-18,84	-10,86	-6,81	-18,47	2,72	-5,90	—
	DMA	33,50	24,88	14,81	19,10	6,76	15,78	3,68	1,33	20,37	4,47	5,51	—
	PDMA	24,98	34,13	-4,14	19,00	4,17	6,48	4,05	1,76	14,78	9,33	6,48	—

Tabela 8.184: Constantes de acoplamento B972 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,00	21,00	30,00	30,00	21,00	40,00	40,00	21,00	50,00	50,00	21,00	60,00	60,00	21,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	442,8	447,0	487,2	401,9	491,1	512,0	452,6	515,9	538,2	503,7	542,0	565,8	555,5	569,7	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	17,1	11,5	17,6	10,2	9,2	12,9	8,0	6,8	8,0	5,6	4,2	3,0	3,0	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,5	-74,4	-75,6	-65,7	-76,4	-78,9	-72,4	-79,7	-82,3	-79,0	-83,2	-86,0	-85,6	-86,9	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,2	-4,3	-4,7	-4,1	-5,5	-5,5	-5,3	-6,7	-6,4	-6,5	-8,0	-7,4	-7,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	42,0	40,3	37,6	40,6	41,8	40,3	42,1	43,4	43,0	43,7	45,1	45,7	45,4	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-6,0	-6,3	-6,0	-7,1	-7,1	-7,0	-8,2	-7,9	-8,1	-9,4	-8,9	-9,3	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	184,0	191,6	175,0	158,0	182,2	183,4	173,7	190,5	192,2	189,1	199,2	201,4	204,8	208,4	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1661,2	-1562,9	-1595,3	-1477,0	-1516,3	-1576,6	-1482,9	-1501,6	-1555,0	-1472,3	-1484,0	-1531,2	-1451,5	-1464,1	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,9	-132,8	-100,3	-146,5	-103,3	-82,9	-115,3	-85,8	-65,4	-84,7	-68,3	-48,0	-55,3	-50,8	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-36,6	-43,3	-5,4	-63,3	-12,0	14,1	-26,3	7,7	33,8	9,3	27,6	53,5	43,6	47,4	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-316,0	-219,7	-283,7	-341,6	-189,4	-320,6	-310,4	-218,4	-362,5	-278,7	-250,3	-412,9	-247,5	-286,6	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	118,8	107,2	112,8	107,2	111,9	116,6	111,9	116,9	120,6	116,9	122,2	124,6	122,2	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-7,8	-7,4	-7,8	-8,7	-8,4	-8,7	-9,7	-9,5	-9,7	-10,7	-10,6	-10,7	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,5	197,6	188,8	189,7	189,1	195,6	197,1	195,7	203,4	204,9	203,2	212,5	213,3	212,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,3	245,2	213,7	226,1	211,9	222,6	231,8	220,7	232,0	237,7	230,0	242,2	243,9	240,0	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	50,8	51,4	51,7	51,5	51,8	51,9	51,9	51,9	51,9	52,0	51,5	51,7	51,7	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,1	7,4	8,4	7,2	8,1	8,7	7,8	8,9	9,2	8,6	9,9	9,8	9,6	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,1	70,6	66,0	67,6	68,7	70,8	73,1	73,3	76,3	78,9	78,5	82,9	85,2	84,7	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,3	149,4	134,1	139,5	131,7	140,3	144,2	137,7	146,9	149,1	144,1	154,1	154,1	151,1	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-1,6	0,5	1,0	0,7	-0,4	-0,1	-0,2	-1,7	-1,4	-1,4	-3,2	-3,0	-2,8	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	4,7	5,2	3,6	4,2	4,4	3,1	3,7	3,5	2,5	3,0	2,5	1,9	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,8	9,7	9,2	10,3	10,1	9,9	10,7	10,6	10,6	11,1	11,1	11,5	11,7	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,7	18,3	14,4	15,5	14,9	15,1	16,1	15,6	15,9	16,8	16,4	16,8	17,5	17,3	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,4	30,2	31,6	32,1	33,3	35,0	35,2	36,6	38,4	38,5	40,1	41,9	42,0	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	117,3	106,4	111,4	105,1	111,4	115,3	110,0	116,6	119,3	115,2	122,1	123,4	120,6	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-1,9	-1,6	-1,8	-2,4	-2,2	-2,4	-3,0	-2,8	-2,9	-3,6	-3,5	-3,6	-4,5
Total	DM	-16,37	-8,93	-12,33	-16,08	-5,68	-9,08	-9,07	-2,31	-5,73	-1,44	1,23	-2,43	6,54	4,90	—
	DMA	20,02	17,46	15,79	20,62	16,48	12,70	13,67	11,25	12,57	6,89	8,41	15,96	8,63	9,02	—
	PDMA	24,28	24,60	30,59	48,07	31,71	20,22	31,21	20,84	18,49	15,72	15,54	25,01	20,71	20,50	—
CPI	DM	-40,45	-22,69	-23,15	-35,27	-7,40	-19,01	-21,67	-2,87	-14,88	-6,72	1,79	-11,23	8,95	6,40	—
	DMA	42,95	36,69	26,11	40,07	27,40	20,77	24,62	16,60	21,90	9,25	11,26	30,90	13,42	13,75	—
	PDMA	43,92	47,37	29,34	68,15	36,09	15,68	40,17	20,33	23,10	15,49	18,88	37,42	29,76	30,96	—
SPI	DM	1,29	1,16	-4,39	-2,00	-4,42	-1,80	0,18	-1,89	0,97	2,43	0,82	4,01	4,77	3,80	—
	DMA	3,21	3,36	8,22	6,35	8,47	6,77	5,63	7,32	5,73	5,17	6,31	5,00	5,12	5,56	—
	PDMA	9,88	7,90	31,51	33,34	28,50	23,55	24,63	21,21	15,10	15,89	13,09	15,92	14,08	12,84	—
ΔCS	DM	-41,75	-23,85	-18,75	-33,27	-2,98	-17,21	-21,85	-0,98	-15,86	-9,15	0,97	-15,24	4,17	2,60	—
	DMA	39,73	33,33	17,89	33,73	18,93	14,00	18,98	9,28	16,17	4,08	4,95	25,90	8,30	8,19	—
	PDMA	34,04	39,47	-2,17	34,81	7,59	-7,87	15,53	-0,88	8,01	-0,41	5,79	21,50	15,68	18,12	—

Tabela 8.185: Constantes de acoplamento B98 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	21,98	21,98	40,00	40,00	21,98	50,00	50,00	21,98	60,00	60,00	21,98	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	431,2	425,7	484,6	417,7	479,5	505,9	465,8	500,8	528,5	514,5	523,5	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	17,6	11,2	15,5	10,4	9,5	11,2	8,7	7,7	6,9	6,8	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-75,6	-67,9	-75,7	-78,4	-74,2	-78,5	-81,4	-80,4	-81,5	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-6,5	-5,1	-5,1	-4,7	-6,4	-6,1	-6,1	-7,9	-7,2	-7,5	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	43,1	41,7	39,6	41,9	43,1	42,3	43,3	44,6	44,8	44,8	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-9,3	-7,6	-7,5	-7,4	-8,8	-8,5	-8,6	-10,2	-9,6	-10,0	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	196,4	202,7	193,7	187,2	199,5	201,7	200,7	207,3	210,1	213,9	215,4	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1666,4	-1560,1	-1572,1	-1468,9	-1489,9	-1549,1	-1459,9	-1470,8	-1523,4	-1439,8	-1449,0	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,1	-133,2	-89,6	-125,3	-93,7	-73,8	-95,5	-77,8	-57,8	-66,4	-61,8	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-34,1	-43,2	7,0	-37,6	-1,5	24,5	-3,0	16,1	42,2	30,6	34,0	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-336,9	-264,6	-338,2	-347,7	-262,5	-383,0	-312,7	-299,3	-437,3	-278,5	-341,9	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,3	128,7	116,9	122,0	117,2	121,5	125,6	121,9	126,5	129,3	126,9	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-12,5	-9,8	-9,5	-9,8	-11,0	-10,8	-11,0	-12,2	-12,1	-12,2	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	212,9	212,7	205,0	207,5	205,0	212,2	214,3	211,9	220,6	221,6	220,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	261,1	259,6	229,7	239,7	228,3	239,0	245,4	237,5	249,0	251,5	247,4	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,8	52,9	53,2	53,4	53,3	53,2	53,3	53,3	52,6	52,7	52,8	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,4	8,4	9,2	8,2	9,4	9,8	9,1	10,6	10,7	10,4	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	77,3	79,7	76,4	78,8	78,9	81,3	84,1	83,6	87,2	89,7	89,1	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,5	160,1	145,7	150,2	143,6	152,0	154,8	149,8	158,9	159,5	156,5	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,1	-0,8	-0,5	-0,6	-2,1	-1,9	-1,9	-3,8	-3,6	-3,4	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	1,9	3,9	4,2	2,8	3,2	3,1	2,1	2,3	1,9	1,2	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	12,4	10,6	10,2	11,1	11,1	11,1	11,6	11,8	12,0	12,2	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	19,1	15,6	16,7	16,2	16,5	17,5	17,0	17,6	18,4	18,1	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,4	36,0	35,1	36,2	36,7	38,2	39,6	39,8	41,5	43,1	43,1	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	128,1	116,8	121,4	116,1	121,7	125,2	121,1	127,0	129,0	126,3	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,7	-2,9	-2,6	-2,9	-3,6	-3,4	-3,5	-4,3	-4,2	-4,3	-4,5
Total	DM	-14,29	-7,92	-9,03	-9,68	-3,41	-6,19	-2,35	-0,43	-3,40	5,37	2,62	—
	DMA	22,68	18,28	14,10	15,94	10,77	13,23	9,68	7,28	15,81	7,75	9,22	—
	PDMA	25,28	25,42	19,69	32,47	20,24	14,22	16,68	9,70	21,09	17,12	18,82	—
CPI	DM	-42,22	-27,13	-22,55	-27,09	-9,28	-19,35	-12,54	-5,72	-16,63	2,80	-2,29	—
	DMA	45,09	34,73	24,89	30,85	16,45	24,20	15,70	9,61	28,30	8,09	12,84	—
	PDMA	43,14	47,13	19,92	47,56	24,53	17,01	23,03	11,35	27,93	17,94	21,10	—
SPI	DM	6,19	6,17	0,87	3,08	0,89	3,46	5,13	3,44	6,31	7,25	6,23	—
	DMA	6,25	6,23	6,18	5,00	6,60	5,19	5,26	5,57	6,65	7,51	6,57	—
	PDMA	12,19	9,50	19,52	21,41	17,10	12,18	12,02	8,49	16,08	16,52	17,15	—
ΔCS	DM	-48,40	-33,30	-23,42	-30,17	-10,18	-22,81	-17,66	-9,16	-22,93	-4,45	-8,52	—
	DMA	38,84	28,50	18,71	25,85	9,85	19,01	10,44	4,04	21,65	0,58	6,26	—
	PDMA	30,95	37,63	0,40	26,15	7,43	4,82	11,01	2,86	11,86	1,42	3,95	—

Tabela 8.186: Constantes de acoplamento B1B95 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	28,00	28,00	40,00	40,00	28,00	50,00	50,00	28,00	60,00	60,00	28,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	470,4	470,4	499,3	515,6	499,3	523,6	552,4	523,6	548,0	588,5	548,0	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	16,5	16,1	12,6	14,1	14,0	9,4	12,1	11,8	6,2	9,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,3	-78,4	-80,4	-83,5	-81,4	-83,0	-87,4	-83,9	-85,6	-91,2	-86,5	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,6	-8,2	-7,3	-7,8	-9,2	-8,1	-8,8	-10,3	-8,9	-9,8	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,6	44,9	46,1	45,5	45,6	47,2	46,2	46,4	48,2	46,9	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,1	-10,4	-9,8	-10,1	-11,3	-10,5	-11,0	-12,1	-11,2	-11,8	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,8	175,8	176,5	187,5	184,0	183,6	196,8	190,8	190,6	205,6	197,4	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1645,5	-1532,2	-1606,4	-1500,6	-1500,0	-1571,1	-1466,8	-1470,3	-1533,7	-1427,8	-1438,6	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-127,6	-125,7	-107,5	-98,9	-105,8	-91,0	-77,2	-89,3	-74,6	-56,0	-72,9	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,0	-28,2	-5,3	2,1	-6,4	12,6	26,6	11,4	30,3	50,2	29,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-361,9	-249,0	-404,3	-221,1	-280,1	-443,7	-199,3	-307,4	-490,0	-179,2	-337,1	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,1	126,1	125,2	125,8	127,5	126,0	127,2	129,0	126,9	128,6	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-12,2	-13,0	-13,1	-13,0	-13,7	-13,7	-13,7	-14,4	-14,4	-14,4	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,2	195,5	199,3	199,1	199,2	203,2	202,4	202,8	207,7	205,9	207,0	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	253,2	258,8	253,7	255,8	261,2	254,3	258,0	263,7	254,9	260,4	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,7	55,2	55,5	55,4	54,6	55,1	54,9	53,8	54,6	54,2	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,0	11,2	10,5	10,8	12,0	11,1	11,5	13,0	11,7	12,4	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,0	68,9	69,6	72,1	72,1	73,0	74,9	75,1	76,8	77,9	78,5	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,8	155,4	161,3	156,8	157,7	163,5	158,0	159,7	165,9	159,3	161,9	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-0,9	-2,3	-2,0	-2,0	-3,4	-3,0	-3,0	-4,7	-4,0	-4,2	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	2,8	3,3	1,9	1,9	2,5	1,1	1,1	1,6	0,3	0,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,1	12,9	12,5	13,4	13,2	12,8	13,8	13,6	13,3	14,2	14,0	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,6	19,4	19,9	20,0	19,9	20,2	20,4	20,4	20,6	20,9	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,5	33,0	34,7	34,8	35,0	36,6	36,8	37,1	38,7	38,8	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,0	123,0	126,9	124,3	124,9	128,5	125,2	126,4	130,1	126,2	128,0	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-4,0	-4,1	-4,0	-4,5	-4,5	-4,5	-5,0	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-15,50	-6,68	-12,20	0,07	-3,26	-9,48	5,84	-0,35	-6,91	11,67	2,59	—
	DMA	20,47	13,81	17,76	9,67	8,75	16,13	8,82	6,64	17,50	13,67	8,10	—
	PDMA	26,10	22,82	16,68	12,16	13,22	14,22	14,95	13,01	22,58	28,15	21,81	—
CPI	DM	-41,18	-19,99	-34,88	-5,03	-13,34	-29,81	7,74	-7,69	-25,20	20,58	-2,12	—
	DMA	43,18	28,15	35,65	17,48	14,92	30,23	14,17	8,22	31,45	24,15	9,72	—
	PDMA	40,03	37,52	22,79	17,91	19,87	13,15	14,34	8,92	21,43	33,33	15,98	—
SPI	DM	3,33	3,09	4,44	3,81	4,13	5,43	4,45	5,04	6,51	5,14	6,05	—
	DMA	3,81	3,29	4,64	3,93	4,23	5,79	4,89	5,48	7,27	5,98	6,91	—
	PDMA	15,88	12,04	12,21	7,94	8,35	15,01	15,40	16,01	23,43	24,35	26,09	—
ΔCS	DM	-44,52	-23,08	-39,32	-8,84	-17,46	-35,24	3,28	-12,73	-31,71	15,44	-8,16	—
	DMA	39,37	24,87	31,01	13,55	10,68	24,44	9,28	2,74	24,19	18,17	2,80	—
	PDMA	24,14	25,49	10,57	9,97	11,52	-1,87	-1,05	-7,09	-2,01	8,98	-10,11	—

Tabela 8.187: Constantes de acoplamento BHandH com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50,00	50,00	30,00	30,00	50,00	40,00	40,00	50,00	60,00	60,00	50,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	60,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	530,8	546,7	484,4	472,9	500,8	507,2	509,6	523,4	555,3	584,3	570,9	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	8,0	18,7	14,9	12,8	16,3	11,5	10,4	11,0	4,4	5,3	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,7	-87,5	-77,8	-78,5	-81,7	-80,7	-83,1	-84,6	-86,9	-92,0	-90,6	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-7,9	-6,8	-5,8	-5,3	-8,0	-6,8	-6,6	-10,8	-9,0	-9,2	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	47,7	42,9	44,5	45,1	44,2	46,2	46,4	47,0	49,5	49,2	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-9,9	-8,7	-7,6	-7,5	-9,9	-8,7	-8,7	-12,5	-11,0	-11,1	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,1	195,1	163,0	167,4	175,8	172,9	181,3	185,3	193,7	208,9	205,2	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1670,4	-1554,5	-1743,5	-1622,0	-1624,2	-1709,0	-1591,4	-1591,2	-1628,3	-1512,0	-1514,8	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,2	-72,8	-132,8	-116,4	-109,5	-114,0	-94,5	-91,2	-76,1	-51,3	-54,3	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,1	38,8	-23,3	-7,3	1,5	-4,1	15,8	20,0	34,6	61,4	57,6	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,0	-165,5	-380,5	-173,9	-123,8	-419,8	-169,2	-144,3	-521,4	-163,3	-188,0	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,4	116,8	117,4	116,3	120,7	120,7	120,3	129,4	128,1	128,8	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,3	-13,3	-11,0	-11,0	-11,0	-12,1	-12,1	-12,1	-14,5	-14,5	-14,5	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	201,9	189,4	190,4	190,4	195,4	195,9	195,8	210,6	208,6	209,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	253,3	245,0	243,0	239,4	252,0	248,0	246,1	267,8	259,1	261,1	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,8	53,2	53,5	53,5	53,3	53,8	53,8	52,2	53,4	53,3	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	10,7	9,4	8,9	8,6	10,5	9,8	9,6	13,4	11,9	12,2	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	74,8	61,8	65,7	65,6	66,7	70,0	69,9	78,9	80,2	80,5	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	155,7	149,9	147,1	145,6	155,0	151,3	150,5	166,8	160,4	161,4	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,4	-1,3	-1,2	-1,2	-2,4	-2,2	-2,2	-5,6	-4,8	-4,8	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	1,2	3,8	3,0	2,8	3,1	2,1	2,0	1,1	0,2	0,3	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	14,4	12,2	13,3	13,4	12,7	13,8	13,9	14,1	15,1	15,1	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,2	17,9	18,9	18,6	18,7	19,5	19,4	20,8	21,1	21,2	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	36,2	26,9	30,6	30,0	30,0	33,3	33,0	36,7	38,9	39,5	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	122,8	117,3	115,3	114,6	121,5	119,0	118,6	130,4	126,8	127,2	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,4	-3,1	-3,3	-3,2	-3,7	-3,8	-3,8	-4,9	-5,0	-5,0	-4,5
Total	DM	-14,54	3,76	-21,73	-8,03	-4,67	-18,16	-2,27	-0,58	-11,00	10,03	8,34	—
	DMA	20,06	13,68	24,57	19,44	19,75	21,47	14,63	14,92	23,20	17,58	15,95	—
	PDMA	14,25	19,46	25,93	20,07	18,80	16,75	10,47	11,38	28,16	34,44	32,91	—
CPI	DM	-40,42	3,65	-51,13	-19,07	-10,36	-45,72	-7,94	-3,55	-35,67	15,63	11,11	—
	DMA	40,82	26,40	53,11	41,13	41,16	46,46	30,14	30,86	43,87	32,15	27,78	—
	PDMA	13,77	24,29	40,65	30,83	27,73	24,65	14,88	16,66	26,71	42,04	38,08	—
SPI	DM	4,44	3,84	-0,17	0,06	-0,49	2,05	1,89	1,61	7,10	5,92	6,31	—
	DMA	4,84	4,35	3,63	3,54	4,05	3,14	3,25	3,23	8,05	6,89	7,27	—
	PDMA	14,59	15,91	15,14	12,17	12,25	10,96	7,24	7,50	29,22	28,86	29,12	—
ΔCS	DM	-44,86	-0,19	-50,96	-19,13	-9,88	-47,76	-9,83	-5,16	-42,77	9,71	4,80	—
	DMA	35,98	22,05	49,48	37,59	37,12	43,32	26,88	27,63	35,83	25,26	20,51	—
	PDMA	-0,82	8,38	25,51	18,66	15,48	13,69	7,64	9,16	-2,51	13,18	8,95	—

Tabela 8.188: Constantes de acoplamento PBE0 com otimização de geometrias e constantes empíricas no nível PBE0 40% E_X^{HF} e base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	25,00	25,00	20,00	20,00	25,00	30,00	30,00	25,00	40,00	40,00	25,00	50,00	50,00	25,00	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	20,00 Otm.	Exp.	Otm.	30,00 Otm.	Exp.	Otm.	40,00 Otm.	Exp.	Otm.	50,00 Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,8	427,7	419,7	409,3	416,6	441,9	445,9	438,8	464,3	482,0	461,3	486,9	517,7	484	534,8
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,4	20,8	19,9	19,2	19,1	16,9	17,5	17,3	13,8	15,7	15,4	10,9	13,9	15,7
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,0	-73,5	-71,8	-71,5	-72,3	-74,2	-75,4	-74,7	-76,6	-79,6	-77	-79,0	-83,4	-79,4	-82,0
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-6,9	-6,7	-6,4	-6,4	-7,8	-7,4	-7,4	-8,9	-8,1	-8,5	-10,0	-9,0	-9,6	-8,8
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	43,0	42,2	42,3	42,6	42,9	43,6	43,4	43,6	44,8	44,1	44,3	45,9	44,8	43,3
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,8	-9,6	-9,5	-9,4	-10,6	-10,3	-10,3	-11,5	-11,0	-11,3	-12,5	-11,8	-12,2	-10,4
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	154,6	161,3	150,4	155,5	157,2	158,7	166,9	165,3	166,9	178,0	173,2	175,1	188,6	181,1	195,7
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1732,1	-1627,0	-1748,1	-1634,2	-1639,7	-1715,3	-1612,1	-1613,5	-1679,4	-1581,4	-1583,9	-1640,8	-1543,9	-1551,5	-1.443,2
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,0	-130,8	-139,2	-142,2	-139	-122,7	-119,9	-122,5	-106,5	-97,7	-106,3	-90,4	-76,6	-90,2	-79,6
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-30,5	-33,5	-39,4	-46,9	-42,4	-21,7	-21,1	-24,6	-4,2	3,6	-7	12,9	27,3	10,2	17,2
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-374,9	-251,0	-354,9	-261,4	-236,3	-395,6	-241,6	-266	-440,5	-222,0	-297,4	-493,5	-202,0	-331,8	-284,7
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	123,0	122,1	122,5	122,3	123,5	123,5	123,8	125,0	124,5	125,2	126,5	125,5	126,8	122,9
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,8	-13,7	-13,4	-13,3	-13,3	-14,2	-14,2	-14,1	-15,0	-15,0	-15	-15,8	-15,8	-15,8	-12,5
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	196,6	194,6	195,0	195	198,3	198,3	198,4	202,6	202,0	202,4	207,6	206,0	207,1	173,9
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,2	254,5	254,8	254,0	253,1	257,6	255,0	255,9	260,7	256,1	258,8	264,1	257,5	262,1	244,4
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,7	53,7	53,9	53,9	53,2	53,5	53,4	52,2	52,8	52,6	50,9	52,0	51,4	49,9
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,4	12,0	11,9	11,7	11,6	12,9	12,4	12,5	14,1	13,3	13,7	15,6	14,3	15,1	8,9
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	71,3	67,0	69,8	69,8	70,4	72,9	72,9	74,4	76,2	76,5	79,1	79,9	80,6	66,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,3	154,6	156,1	153,8	153,5	158,5	155,3	155,7	161,1	156,9	158,1	164,0	158,7	160,8	154,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-2,7	-2,5	-2,2	-2,2	-3,7	-3,3	-3,3	-5,1	-4,5	-4,6	-6,9	-5,9	-6,2	-1,9
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,2	2,8	1,7	1,6	1,8	0,7	0,7	0,7	-0,3	-0,2	-0,5	-1,4	-1,4	2,1
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,7	13,4	12,5	13,1	13,2	13,0	13,7	13,6	13,6	14,3	14,2	14,5	15,0	14,9	11,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,4	19,5	20,2	20,2	20,1	20,7	20,7	20,9	21,2	21,4	21,9	21,9	22,3	18,3
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	29,4	31,7	31,7	31,3	33,5	33,6	33,3	35,3	35,5	35,2	37,1	37,4	33,6
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,0	122,7	121,5	121,2	124,3	122,6	122,9	126,0	123,8	124,5	127,7	124,9	126,2	123,4
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,1	-4,1	-3,9	-3,9	-3,9	-4,3	-4,4	-4,4	-4,9	-4,9	-4,9	-5,4	-5,4	-5,4	-4,5
Total	DM	-21,72	-12,92	-23,00	-15,55	-14,27	-20,43	-10,12	-11,55	-17,87	-4,41	-8,75	-15,45	1,51	-5,90	—
	DMA	26,73	20,37	27,77	22,19	22,66	25,84	18,39	18,16	24,33	14,88	15,02	23,42	12,62	13,70	—
	PDMA	26,15	26,21	28,81	28,60	27,69	25,35	24,30	25,11	26,61	23,31	25,55	31,12	29,26	29,75	—
CPI	DM	-55,37	-34,55	-57,69	-40,28	-37,08	-53,03	-28,41	-32,00	-48,50	-15,96	-26,83	-44,51	-3,12	-21,70	—
	DMA	58,10	43,17	61,00	47,79	48,90	55,25	37,99	37,35	49,83	28,20	27,94	45,24	21,01	22,45	—
	PDMA	44,87	43,35	52,13	54,05	51,47	38,16	33,16	35,11	26,03	16,78	21,25	16,98	14,49	12,68	—
SPI	DM	2,96	2,94	2,44	2,59	2,47	3,47	3,30	3,44	4,59	4,07	4,50	5,85	4,91	5,68	—
	DMA	3,72	3,65	3,40	3,41	3,41	4,28	4,02	4,09	5,63	5,12	5,55	7,43	6,47	7,28	—
	PDMA	12,43	13,64	11,71	9,94	10,25	15,96	17,80	17,77	27,04	28,09	28,70	41,49	40,09	42,27	—
ΔCS	DM	-58,33	-37,49	-60,13	-42,87	-39,55	-56,49	-31,71	-35,44	-53,09	-20,03	-31,33	-50,36	-8,02	-27,38	—
	DMA	54,38	39,53	57,60	44,38	45,49	50,97	33,97	33,25	44,19	23,08	22,38	37,81	14,54	15,17	—
	PDMA	32,44	29,71	40,42	44,11	41,21	22,20	15,36	17,34	-1,00	-11,32	-7,45	-24,51	-25,60	-29,59	—

8.4 Geração de novos funcionais combinando E_X^{HF} , E_X^{DFT} e E_C^{DFT}

8.4.1 Geometrias Experimentais

8.4.1.1 Troca B

Tabela 8.189: Constantes de acoplamento BB95 com base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	403,9	427,5	451,2	475,2	499,3	523,6	548,0	572,6	597,4	622,3	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,4	21,7	19,9	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-72,8	-75,3	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-88,2	-90,8	-93,5	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,9	42,7	43,4	44,1	44,9	45,6	46,4	47,2	47,9	48,7	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	146,7	154,4	161,8	169,2	176,5	183,6	190,6	197,4	204,1	210,7	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1716,6	-1695,0	-1669,0	-1639,2	-1606,4	-1571,1	-1533,7	-1494,9	-1454,9	-1414,1	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-174,7	-157,8	-141,0	-124,2	-107,5	-91,0	-74,6	-58,3	-42,2	-26,3	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,7	-60,1	-41,7	-23,4	-5,3	12,6	30,3	47,9	65,3	82,6	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,9	-301,3	-334,9	-368,7	-404,3	-443,7	-490,0	-548,8	-631,2	-765,1	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	122,0	123,3	124,7	126,1	127,5	129,0	130,4	131,9	133,4	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,0	-13,7	-14,4	-15,0	-15,7	-16,4	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,2	192,9	195,8	199,3	203,2	207,7	213,0	219,2	226,6	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,6	252,5	254,5	256,6	258,8	261,2	263,7	266,5	269,6	273,2	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,7	55,5	55,2	54,6	53,8	52,6	51,1	49,1	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,5	10,0	10,6	11,2	12,0	13,0	14,1	15,4	17,0	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,9	61,2	63,8	66,5	69,6	73,0	76,8	81,2	86,5	92,8	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,4	155,3	157,2	159,2	161,3	163,5	165,9	168,5	171,4	174,7	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,4	4,7	4,0	3,3	2,5	1,6	0,6	-0,5	-1,9	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,8	13,3	13,9	14,7	15,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,0	19,4	19,9	20,4	21,1	22,0	23,2	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,1	29,0	31,0	33,0	35,0	37,1	39,2	41,3	43,5	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	122,2	123,7	125,3	126,9	128,5	130,1	131,8	133,4	135,0	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,7	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,7
Total	DM	-20,82	-18,49	-15,97	-13,28	-10,52	-7,80	-5,23	-3,02	-1,62	-2,08	-8,15	—
	DMA	27,72	22,53	19,82	17,06	14,84	15,13	18,06	22,59	28,10	37,87	54,82	—
	PDMA	53,39	42,20	32,19	22,08	14,31	11,69	21,91	35,98	51,20	68,97	90,89	—
CPI	DM	-49,40	-44,96	-40,13	-34,95	-29,69	-24,62	-20,01	-16,43	-14,94	-18,09	-34,85	—
	DMA	59,60	48,05	42,09	35,84	29,93	29,24	34,14	42,57	53,03	72,98	109,09	—
	PDMA	84,86	66,46	50,03	33,85	21,92	13,99	27,38	45,90	65,14	86,28	112,26	—
SPI	DM	0,13	0,92	1,75	2,60	3,55	4,53	5,61	6,81	8,15	9,66	11,44	—
	DMA	4,35	3,81	3,48	3,29	3,77	4,79	6,27	7,94	9,83	12,13	15,03	—
	PDMA	30,31	24,41	19,10	13,44	8,73	10,00	17,90	28,71	40,98	56,28	75,22	—
ΔCS	DM	-49,53	-45,88	-41,87	-37,55	-33,24	-29,15	-25,62	-23,23	-23,08	-27,75	-46,29	—
	DMA	55,25	44,24	38,61	32,54	26,15	24,45	27,87	34,63	43,20	60,86	94,06	—
	PDMA	54,55	42,05	30,93	20,41	13,20	3,99	9,48	17,19	24,16	30,00	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,77	-17,89	-15,78	-13,47	-11,05	-8,68	-6,44	-4,60	-3,65	-4,76	-12,16	—
	DMA	26,96	21,95	19,74	17,50	15,84	16,95	19,62	23,87	29,21	39,34	57,56	—
	PDMA	20,04	15,18	11,79	8,62	8,22	10,32	14,84	20,86	27,68	35,94	47,30	—
CPI	DM	-44,97	-41,95	-38,47	-34,60	-30,63	-26,84	-23,54	-21,36	-21,46	-26,66	-46,81	—
	DMA	56,19	45,35	40,63	35,58	30,89	31,92	36,02	43,54	53,30	73,52	111,53	—
	PDMA	30,88	23,04	17,24	11,64	10,58	13,79	19,92	28,55	38,12	49,84	67,02	—
SPI	DM	-0,39	0,62	1,68	2,78	4,01	5,29	6,71	8,28	10,05	12,08	14,49	—
	DMA	4,47	3,95	3,68	3,58	4,27	5,43	7,00	8,73	10,68	13,05	16,05	—
	PDMA	11,70	9,14	7,60	6,29	6,41	7,66	10,94	14,94	19,65	25,25	32,14	—
ΔCS	DM	-44,58	-42,57	-40,15	-37,38	-34,64	-32,13	-30,25	-29,64	-31,51	-38,74	-61,30	—
	DMA	51,72	41,40	36,95	32,00	26,62	26,49	29,02	34,81	42,62	60,47	95,48	—
	PDMA	19,17	13,90	9,64	5,34	4,18	6,13	8,98	13,62	18,47	24,59	34,88	—

Tabela 8.190: Constantes de acoplamento BB971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,4	434,0	456,8	479,7	502,8	526,0	549,3	572,8	596,4	620,1	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	19,9	17,9	15,8	13,7	11,4	9,0	6,6	4,0	1,4	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,1	-73,5	-76,0	-78,4	-80,8	-83,3	-85,7	-88,2	-90,7	-93,2	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,1	-5,1	-6,1	-7,0	-8,0	-9,0	-10,1	-11,1	-12,1	-13,2	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	43,7	44,4	45,1	45,9	46,7	47,4	48,2	49,0	49,8	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,1	-7,9	-8,8	-9,7	-10,6	-11,5	-12,4	-13,3	-14,2	-15,1	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,0	181,6	188,9	196,0	203,0	209,8	216,3	222,7	228,9	234,9	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1762,4	-1738,4	-1709,9	-1677,6	-1642,3	-1604,6	-1564,9	-1523,7	-1481,4	-1438,3	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-163,3	-145,5	-127,7	-110,0	-92,5	-75,2	-58,1	-41,2	-24,5	-8,0	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-66,7	-47,4	-28,2	-9,3	9,3	27,7	46,0	64,0	81,8	99,4	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-265,0	-299,6	-333,7	-368,6	-405,8	-447,8	-498,4	-564,5	-660,7	-826,5	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,8	130,3	131,9	133,4	135,0	136,7	138,3	140,0	141,7	143,3	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,0	-11,7	-12,4	-13,1	-13,9	-14,6	-15,3	-16,0	-16,7	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	208,5	211,8	215,5	219,7	224,5	230,0	236,3	243,7	252,4	262,7	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	262,0	264,3	266,6	269,2	271,9	274,8	278,0	281,5	285,5	290,1	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	54,3	54,1	53,7	53,0	52,1	50,7	49,0	46,8	43,9	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,0	9,5	10,0	10,7	11,5	12,4	13,5	14,8	16,4	18,3	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	71,5	74,5	77,8	81,4	85,5	90,0	95,2	101,4	108,8	118,2	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	161,8	164,0	166,2	168,5	171,0	173,6	176,5	179,7	183,3	187,6	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,8	-4,0	-5,4	-7,0	-9,0	-11,4	-14,6	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	5,0	4,3	3,5	2,8	1,9	0,9	-0,1	-1,4	-3,0	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,4	11,6	11,8	12,1	12,5	12,9	13,5	14,2	15,1	16,3	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,1	18,3	18,6	18,9	19,4	19,9	20,6	21,4	22,5	23,9	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,4	32,6	34,9	37,2	39,5	41,9	44,3	46,8	49,3	51,8	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,7	130,4	132,2	134,0	135,8	137,6	139,5	141,3	143,2	145,1	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-4,7
Total	DM	-17,58	-15,05	-12,32	-9,45	-6,52	-3,66	-1,01	1,18	2,36	1,01	-8,92	—
	DMA	27,95	23,17	21,00	19,55	18,70	21,52	25,83	30,87	37,27	46,81	68,67	—
	PDMA	46,16	35,08	25,07	17,33	14,76	22,56	37,03	52,59	70,15	90,98	118,03	—
CPI	DM	-48,24	-43,55	-38,48	-33,17	-27,84	-22,79	-18,41	-15,33	-14,95	-20,87	-47,66	—
	DMA	58,33	46,26	40,19	35,28	31,42	35,88	43,48	52,33	63,78	81,95	128,26	—
	PDMA	74,03	54,99	38,17	23,18	13,39	23,27	42,20	61,29	81,25	103,32	132,83	—
SPI	DM	4,89	5,85	6,87	7,94	9,12	10,37	11,75	13,29	15,05	17,05	19,49	—
	DMA	5,68	6,23	6,92	8,01	9,37	10,99	12,88	15,13	17,83	21,04	24,97	—
	PDMA	25,73	20,47	15,46	13,04	15,77	22,04	33,24	46,21	62,02	81,93	107,17	—
ΔCS	DM	-53,13	-49,41	-45,35	-41,11	-36,96	-33,16	-30,16	-28,62	-29,99	-37,93	-67,15	—
	DMA	52,65	40,04	33,27	27,28	22,04	24,89	30,60	37,19	45,95	60,91	103,30	—
	PDMA	48,30	34,52	22,72	10,14	-2,38	1,23	8,97	15,09	19,24	21,39	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,57	-14,49	-12,17	-9,67	-7,07	-4,54	-2,23	-0,40	0,31	-1,77	-13,48	—
	DMA	27,80	23,29	21,74	20,97	20,80	23,63	27,59	32,37	38,68	48,48	72,17	—
	PDMA	17,92	13,56	10,77	9,55	11,19	15,63	21,89	28,75	36,64	46,27	60,22	—
CPI	DM	-44,89	-41,67	-38,01	-34,06	-30,05	-26,34	-23,35	-21,76	-23,12	-31,40	-62,61	—
	DMA	55,99	44,65	39,89	36,38	33,99	38,20	44,73	52,66	63,48	81,70	130,91	—
	PDMA	26,97	18,89	13,19	9,30	10,93	17,13	25,75	34,76	44,85	57,39	78,24	—
SPI	DM	5,21	6,42	7,72	9,10	10,61	12,22	14,02	16,03	18,34	21,02	24,32	—
	DMA	6,12	6,85	7,78	9,12	10,65	12,42	14,40	16,77	19,60	22,93	26,98	—
	PDMA	10,96	9,46	8,90	9,74	11,39	14,48	18,92	24,13	30,34	37,71	46,35	—
ΔCS	DM	-50,10	-48,09	-45,73	-43,16	-40,66	-38,56	-37,37	-37,79	-41,46	-52,42	-86,93	—
	DMA	49,87	37,80	32,11	27,26	23,34	25,78	30,33	35,89	43,88	58,77	103,93	—
	PDMA	16,01	9,43	4,29	-0,45	-0,46	2,65	6,83	10,62	14,51	19,68	31,89	—

Tabela 8.191: Constantes de acoplamento BB972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	449,5	473,2	497,0	520,9	544,9	569,1	593,4	617,7	642,2	666,9	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	17,7	15,6	13,4	11,0	8,5	6,0	3,3	0,5	-2,2	-5,2	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-77,0	-79,6	-82,1	-84,7	-87,3	-89,9	-92,5	-95,1	-97,8	-100,5	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,8	-4,8	-5,8	-6,9	-7,9	-8,9	-10,0	-11,0	-12,1	-13,2	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,3	46,1	46,8	47,6	48,4	49,1	49,9	50,7	51,5	52,3	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,3	-7,2	-8,0	-8,9	-9,8	-10,7	-11,6	-12,5	-13,4	-14,3	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	166,5	174,7	182,8	190,8	198,6	206,3	213,9	221,3	228,5	235,6	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1810,1	-1784,5	-1754,3	-1720,3	-1683,2	-1643,5	-1602,0	-1558,9	-1514,9	-1470,1	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-149,1	-131,2	-113,5	-96,0	-78,6	-61,5	-44,7	-28,0	-11,7	4,4	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-50,3	-30,9	-11,8	6,9	25,4	43,7	61,7	79,5	97,1	114,4	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-257,6	-291,6	-325,2	-359,6	-396,4	-438,2	-489,0	-556,6	-658,1	-843,0	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	131,6	133,0	134,4	135,9	137,4	138,9	140,4	141,9	143,4	145,0	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,9	-9,6	-10,3	-11,0	-11,6	-12,3	-13,0	-13,7	-14,3	-15,0	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	206,5	209,9	213,7	217,9	222,8	228,4	234,9	242,5	251,3	261,8	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	263,7	265,8	268,0	270,3	272,8	275,4	278,3	281,5	285,2	289,3	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,7	54,7	54,5	54,1	53,5	52,6	51,4	49,8	47,7	45,0	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,4	8,8	9,2	9,8	10,4	11,2	12,2	13,3	14,6	16,1	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	71,8	74,9	78,3	82,1	86,4	91,3	96,9	103,7	112,1	122,7	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	163,8	165,8	167,9	170,1	172,4	174,9	177,7	180,8	184,3	188,6	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,8	0,0	-0,8	-1,9	-3,1	-4,5	-6,1	-8,1	-10,5	-13,8	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,9	6,3	5,6	5,0	4,2	3,4	2,5	1,5	0,3	-1,0	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,1	11,2	11,4	11,6	11,9	12,2	12,7	13,3	14,1	15,1	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,8	17,9	18,1	18,4	18,7	19,1	19,7	20,4	21,4	22,6	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	33,4	35,5	37,7	39,9	42,2	44,5	46,8	49,2	51,5	54,0	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	130,6	132,2	133,9	135,5	137,2	138,9	140,6	142,3	144,0	145,7	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,7	-2,2	-2,6	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-4,7
Total	DM	-16,53	-13,88	-11,03	-8,06	-5,03	-2,06	0,69	2,92	3,99	2,02	-12,05	—
	DMA	27,77	23,05	20,46	20,34	22,28	26,03	30,20	35,19	41,77	51,82	75,85	—
	PDMA	45,43	35,02	26,29	18,05	19,11	28,55	38,67	53,08	70,39	90,83	118,82	—
CPI	DM	-46,92	-41,92	-36,51	-30,92	-25,30	-19,95	-15,32	-12,12	-11,98	-19,42	-56,05	—
	DMA	57,03	44,94	37,62	36,08	39,06	46,07	53,72	62,70	74,64	94,07	145,55	—
	PDMA	61,12	42,91	28,33	15,69	19,68	38,37	57,37	76,65	96,86	119,55	152,13	—
SPI	DM	5,76	6,67	7,66	8,70	9,83	11,06	12,43	13,95	15,70	17,73	20,21	—
	DMA	6,31	6,99	7,87	8,79	9,97	11,34	12,95	15,02	17,67	20,84	24,75	—
	PDMA	33,93	29,24	24,79	19,79	18,68	21,35	24,96	35,79	50,98	69,78	94,39	—
ΔCS	DM	-52,68	-48,59	-44,17	-39,62	-35,13	-31,01	-27,74	-26,07	-27,68	-37,15	-76,27	—
	DMA	50,72	37,94	29,74	27,29	29,10	34,73	40,77	47,68	56,96	73,23	120,80	—
	PDMA	27,19	13,67	3,54	-4,10	1,00	17,03	32,40	40,85	45,88	49,78	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,18	-13,98	-11,51	-8,90	-6,19	-3,53	-1,10	0,78	1,38	-1,40	-17,79	—
	DMA	28,21	23,78	21,75	22,50	24,62	28,04	31,93	36,70	43,21	53,62	79,77	—
	PDMA	17,94	14,38	12,81	12,05	13,72	18,07	23,10	29,47	37,32	46,98	62,25	—
CPI	DM	-45,08	-41,52	-37,48	-33,20	-28,87	-24,81	-21,52	-19,78	-21,39	-31,30	-73,32	—
	DMA	56,20	44,84	38,70	38,88	41,93	47,81	54,42	62,52	73,89	93,54	148,44	—
	PDMA	23,70	16,60	13,29	11,86	14,72	23,08	31,97	41,31	51,81	65,24	89,61	—
SPI	DM	6,05	7,21	8,46	9,79	11,25	12,84	14,61	16,60	18,89	21,59	24,93	—
	DMA	6,68	7,58	8,71	9,90	11,30	12,84	14,64	16,83	19,62	22,92	26,95	—
	PDMA	13,51	12,67	12,44	12,20	12,96	14,22	16,27	20,35	26,17	32,93	41,20	—
ΔCS	DM	-51,13	-48,73	-45,94	-42,99	-40,12	-37,65	-36,13	-36,38	-40,28	-52,89	-98,25	—
	DMA	49,52	37,26	29,99	28,98	30,63	34,97	39,78	45,69	54,27	70,62	121,49	—
	PDMA	10,19	3,93	0,86	-0,35	1,76	8,85	15,70	20,95	25,64	32,31	48,41	—

Tabela 8.192: Constantes de acoplamento BB98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	399,0	421,7	444,6	467,7	490,9	514,3	537,8	561,4	585,2	609,1	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,5	19,6	17,6	15,6	13,4	11,2	8,8	6,3	3,8	1,2	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,5	-73,0	-75,4	-77,9	-80,4	-82,9	-85,4	-87,9	-90,4	-93,0	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,4	-13,5	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,5	44,2	45,0	45,8	46,6	47,4	48,2	49,0	49,8	50,6	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	180,4	188,0	195,4	202,7	209,7	216,6	223,3	229,7	236,0	242,0	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1778,1	-1753,1	-1723,7	-1690,8	-1654,8	-1616,4	-1576,2	-1534,5	-1491,8	-1448,4	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-163,6	-145,9	-128,3	-110,8	-93,5	-76,4	-59,4	-42,6	-26,1	-9,8	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-67,8	-48,7	-29,8	-11,1	7,3	25,6	43,6	61,5	79,1	96,6	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-273,9	-309,5	-345,0	-381,6	-421,2	-466,7	-522,6	-597,6	-711,3	-920,8	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,2	133,8	135,5	137,2	138,9	140,6	142,3	144,1	145,9	147,7	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,8	-11,5	-12,3	-13,0	-13,8	-14,5	-15,2	-16,0	-16,7	-17,4	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	212,2	215,6	219,4	223,8	228,7	234,4	241,0	248,7	257,9	268,8	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	267,0	269,5	272,1	274,8	277,7	280,8	284,3	288,1	292,4	297,4	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,0	54,9	54,7	54,2	53,5	52,4	51,0	49,1	46,6	43,4	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,2	9,6	10,3	11,0	11,8	12,8	14,0	15,5	17,2	19,2	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	73,9	77,1	80,5	84,3	88,5	93,3	98,9	105,6	113,7	124,2	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,4	167,7	170,1	172,5	175,2	178,0	181,1	184,5	188,6	193,4	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,9	-1,9	-3,0	-4,2	-5,7	-7,5	-9,7	-12,4	-15,9	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,7	5,0	4,3	3,5	2,6	1,7	0,7	-0,4	-1,9	-3,7	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,8	12,0	12,3	12,7	13,2	13,9	14,7	15,7	17,1	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	18,6	18,9	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,4	25,1	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,9	34,2	36,5	38,9	41,4	43,9	46,4	49,0	51,7	54,4	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,9	133,8	135,7	137,6	139,5	141,4	143,4	145,4	147,4	149,4	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-17,89	-15,35	-12,60	-9,74	-6,86	-4,07	-1,55	0,37	0,96	-1,96	-19,10	—
	DMA	29,22	25,15	23,73	22,47	21,55	23,61	28,18	33,63	40,83	52,01	80,95	—
	PDMA	46,34	35,30	26,12	19,74	17,45	25,13	40,09	56,55	75,40	97,92	129,89	—
CPI	DM	-51,09	-46,46	-41,45	-36,24	-31,10	-26,30	-22,36	-20,06	-21,25	-31,15	-75,31	—
	DMA	59,56	49,12	44,41	39,75	35,55	38,03	46,09	55,70	68,71	90,34	152,76	—
	PDMA	73,90	55,56	39,70	25,82	16,63	23,47	42,51	61,85	82,37	105,75	140,82	—
SPI	DM	6,46	7,47	8,55	9,69	10,91	12,23	13,71	15,36	17,25	19,45	22,12	—
	DMA	6,97	7,57	8,56	9,79	11,29	13,03	15,05	17,45	20,39	23,90	28,29	—
	PDMA	26,12	20,45	16,16	15,29	18,06	26,35	38,33	52,66	70,29	92,17	121,88	—
ΔCS	DM	-57,55	-53,94	-49,99	-45,92	-42,01	-38,53	-36,08	-35,42	-38,50	-50,60	-97,43	—
	DMA	52,60	41,55	35,85	29,95	24,27	24,99	31,04	38,25	48,32	66,44	124,47	—
	PDMA	47,78	35,10	23,53	10,53	-1,42	-2,88	4,18	9,19	12,08	13,59	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,87	-14,76	-12,41	-9,90	-7,36	-4,89	-2,70	-1,17	-1,09	-4,92	-24,71	—
	DMA	29,18	25,47	24,77	24,18	23,94	26,06	30,32	35,57	42,76	54,40	86,04	—
	PDMA	17,60	13,62	11,85	11,40	13,67	18,23	24,77	32,12	40,60	51,24	68,62	—
CPI	DM	-47,92	-44,74	-41,11	-37,25	-33,44	-29,99	-27,46	-26,72	-29,79	-42,43	-92,72	—
	DMA	57,24	47,66	44,37	41,11	38,34	40,77	47,84	56,62	69,17	91,21	158,16	—
	PDMA	26,09	18,64	13,80	11,00	13,16	18,75	27,69	37,04	47,87	61,93	89,03	—
SPI	DM	7,01	8,30	9,67	11,13	12,71	14,42	16,34	18,49	20,99	23,94	27,60	—
	DMA	7,59	8,41	9,68	11,16	12,86	14,74	16,85	19,37	22,44	26,08	30,57	—
	PDMA	11,08	9,76	10,36	11,71	14,06	17,82	22,53	28,34	35,00	43,01	52,91	—
ΔCS	DM	-54,93	-53,04	-50,78	-48,38	-46,15	-44,41	-43,80	-45,21	-50,78	-66,37	-120,32	—
	DMA	49,65	39,25	34,69	29,95	25,48	26,03	30,99	37,25	46,73	65,13	127,59	—
	PDMA	15,01	8,88	3,44	-0,71	-0,90	0,93	5,16	8,70	12,87	18,92	36,12	—

Tabela 8.193: Constantes de acoplamento BLYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	397,2	422,6	448,3	474,2	500,4	526,8	553,4	580,3	607,5	634,8	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	21,5	19,6	17,5	15,4	13,2	10,9	8,5	6,0	3,4	0,8	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-72,6	-75,3	-78,1	-80,9	-83,7	-86,5	-89,3	-92,2	-95,1	-98,1	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,6	-6,6	-7,8	-8,9	-10,0	-11,2	-12,4	-13,6	-14,8	-16,0	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	44,8	45,6	46,4	47,3	48,1	49,0	49,8	50,7	51,6	52,5	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,6	-9,6	-10,5	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	159,7	168,2	176,7	185,0	193,2	201,3	209,2	217,0	224,6	232,0	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1815,0	-1789,8	-1760,2	-1726,8	-1690,3	-1651,5	-1610,7	-1568,5	-1525,3	-1481,3	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-168,9	-151,2	-133,7	-116,3	-99,0	-81,9	-65,0	-48,3	-31,8	-15,5	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-69,9	-50,6	-31,5	-12,7	5,9	24,3	42,5	60,6	78,5	96,2	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-281,5	-318,6	-355,8	-394,8	-437,8	-488,0	-551,4	-639,8	-782,1	-1075,1	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	132,6	134,2	135,8	137,4	139,1	140,7	142,4	144,1	145,9	147,6	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,1	-12,9	-13,7	-14,5	-15,2	-16,0	-16,8	-17,5	-18,3	-19,0	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	199,5	202,5	206,0	210,0	214,7	220,1	226,5	234,1	243,3	254,5	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	274,3	276,8	279,4	282,2	285,2	288,5	292,1	296,3	301,1	306,7	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	57,3	57,2	56,9	56,3	55,4	54,1	52,4	50,2	47,2	43,3	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,3	10,9	11,7	12,5	13,6	14,8	16,3	18,0	20,2	22,8	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	67,0	70,0	73,3	77,0	81,1	86,0	91,8	98,9	108,1	120,6	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	167,4	169,6	172,0	174,5	177,2	180,1	183,4	187,2	191,7	197,6	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,1	-0,7	-1,7	-2,9	-4,3	-6,0	-8,0	-10,5	-13,8	-18,4	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,1	5,3	4,5	3,6	2,7	1,6	0,3	-1,1	-3,0	-5,6	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,8	13,0	13,3	13,7	14,2	14,9	15,7	16,8	18,2	20,4	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	20,2	20,5	20,9	21,3	21,9	22,7	23,6	24,9	26,6	29,1	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,5	31,6	33,8	36,0	38,3	40,6	42,9	45,3	47,8	50,2	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	132,2	133,9	135,7	137,6	139,4	141,3	143,2	145,1	147,0	149,0	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-21,12	-18,53	-15,74	-12,86	-9,95	-7,19	-4,80	-3,18	-3,45	-9,26	-48,74	—
	DMA	31,24	27,67	25,60	23,80	22,92	25,55	30,60	36,76	45,43	60,33	110,36	—
	PDMA	47,30	36,95	28,57	23,02	21,38	28,90	45,13	63,06	84,69	112,41	158,62	—
CPI	DM	-58,16	-53,33	-48,15	-42,81	-37,58	-32,84	-29,16	-27,65	-31,00	-48,02	-145,56	—
	DMA	64,58	55,33	49,27	43,45	39,35	43,11	52,24	63,53	79,62	109,29	220,20	—
	PDMA	73,81	55,78	41,67	30,69	22,26	27,35	46,99	67,39	89,42	115,77	169,20	—
SPI	DM	6,04	6,99	8,02	9,11	10,31	11,61	13,07	14,77	16,75	19,16	22,27	—
	DMA	6,79	7,39	8,23	9,40	10,88	12,67	14,74	17,13	20,36	24,43	29,81	—
	PDMA	27,86	23,14	18,96	17,39	20,74	30,04	43,77	59,88	81,23	109,94	150,86	—
ΔCS	DM	-64,20	-60,31	-56,17	-51,92	-47,89	-44,45	-42,24	-42,42	-47,75	-67,18	-167,83	—
	DMA	57,80	47,94	41,04	34,05	28,47	30,44	37,50	46,40	59,26	84,86	190,39	—
	PDMA	45,95	32,65	22,70	13,30	1,52	-2,69	3,23	7,51	8,19	5,83	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-20,46	-18,30	-15,90	-13,37	-10,79	-8,35	-6,29	-5,08	-5,94	-12,96	-57,89	—
	DMA	31,35	28,22	26,79	25,63	25,42	28,29	33,07	39,07	47,87	63,63	118,96	—
	PDMA	17,15	14,01	13,39	14,63	17,33	22,13	29,12	36,96	46,67	59,61	87,08	—
CPI	DM	-55,49	-52,10	-48,31	-44,32	-40,43	-37,05	-34,83	-34,98	-40,45	-60,94	-170,00	—
	DMA	62,55	54,30	49,55	45,02	42,37	46,49	54,71	65,32	81,23	112,10	232,34	—
	PDMA	24,59	17,63	14,83	15,29	18,42	23,89	33,36	43,73	56,03	73,22	120,26	—
SPI	DM	6,48	7,70	9,03	10,45	12,01	13,73	15,67	17,92	20,61	23,95	28,35	—
	DMA	7,35	8,16	9,28	10,71	12,38	14,28	16,42	18,88	22,21	26,35	31,74	—
	PDMA	11,42	11,22	12,28	14,12	16,50	20,78	25,86	31,76	39,46	49,15	61,56	—
ΔCS	DM	-61,97	-59,80	-57,34	-54,77	-52,44	-50,78	-50,50	-52,90	-61,06	-84,89	-198,35	—
	DMA	55,20	46,14	40,27	34,31	29,99	32,21	38,29	46,44	59,02	85,75	200,60	—
	PDMA	13,17	6,41	2,55	1,17	1,92	3,10	7,50	11,97	16,56	24,07	58,70	—

Tabela 8.194: Constantes de acoplamento BP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	355,3	378,9	402,8	426,9	451,3	475,8	500,7	525,7	551,0	576,5	602,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,7	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,8	-67,3	-69,8	-72,4	-75,0	-77,6	-80,2	-82,9	-85,5	-88,3	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,5	-8,5	-9,6	-10,6	-11,7	-12,8	-13,9	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,0	40,7	41,5	42,2	43,0	43,8	44,6	45,4	46,2	47,0	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,4	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,9	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	136,9	144,9	152,8	160,7	168,4	176,0	183,5	190,8	198,1	205,1	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1802,5	-1777,4	-1747,9	-1714,7	-1678,5	-1639,9	-1599,5	-1557,7	-1514,9	-1471,4	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,9	-160,9	-144,0	-127,2	-110,6	-94,0	-77,7	-61,5	-45,5	-29,7	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,6	-46,2	-27,9	-9,8	8,0	25,7	43,3	60,6	77,8	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,1	-327,4	-365,0	-404,4	-447,8	-498,7	-562,6	-651,0	-790,4	-1064,3	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,5	118,9	120,4	121,9	123,4	124,9	126,5	128,1	129,7	131,4	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,5	-13,2	-13,9	-14,6	-15,3	-16,1	-16,8	-17,5	-18,1	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,3	189,9	193,0	196,5	200,6	205,4	211,1	218,0	226,4	236,9	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,4	249,7	252,1	254,7	257,5	260,6	264,1	268,1	272,8	278,4	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,1	51,9	50,3	48,1	45,2	41,3	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,4	18,2	20,5	23,3	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,5	62,2	65,2	68,5	72,4	76,9	82,4	89,4	98,7	112,2	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	151,8	154,0	156,3	158,8	161,6	164,7	168,5	173,2	179,6	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,7	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,3	-13,9	-19,1	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,9	3,1	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,2	-8,4	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	15,0	16,3	18,1	21,0	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,5	18,9	19,3	19,8	20,4	21,3	22,4	23,9	26,1	29,3	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	26,2	28,2	30,2	32,3	34,4	36,5	38,7	40,9	43,2	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,6	119,2	120,9	122,6	124,3	126,0	127,8	129,6	131,3	133,2	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-3,1	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,7
Total													
Total	DM	-28,10	-25,67	-23,05	-20,35	-17,63	-15,07	-12,83	-11,38	-11,69	-16,84	-45,89	—
	DMA	33,03	29,60	26,84	24,22	22,25	20,73	21,63	27,38	35,80	49,96	90,58	—
	PDMA	50,85	40,53	30,46	22,94	22,22	23,42	33,70	51,99	74,53	104,07	152,34	—
CPI													
CPI	DM	-64,98	-60,45	-55,56	-50,54	-45,63	-41,22	-37,85	-36,62	-39,96	-55,53	-128,80	—
	DMA	72,02	64,61	58,62	52,63	46,88	41,76	41,28	51,29	66,76	94,38	182,13	—
	PDMA	89,78	72,91	56,58	42,32	30,26	19,53	25,40	44,36	65,33	90,28	134,69	—
SPI													
SPI	DM	-1,06	-0,16	0,79	1,79	2,89	4,11	5,51	7,12	9,05	11,53	14,91	—
	DMA	4,43	3,93	3,54	3,39	4,19	5,30	7,23	9,84	13,10	17,39	23,45	—
	PDMA	22,31	16,78	11,30	8,73	16,32	26,27	39,78	57,59	81,27	114,19	165,29	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-63,92	-60,29	-56,36	-52,32	-48,52	-45,33	-43,35	-43,74	-49,01	-67,06	-143,71	—
	DMA	67,58	60,68	55,08	49,24	42,70	36,46	34,06	41,45	53,66	77,00	158,67	—
	PDMA	67,47	56,13	45,28	33,59	13,93	-6,74	-14,38	-13,23	-15,94	-23,91	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-27,70	-25,69	-23,46	-21,11	-18,73	-16,48	-14,59	-13,53	-14,37	-20,57	-53,57	—
	DMA	32,86	29,87	27,62	25,49	23,95	22,88	23,61	29,15	37,67	52,56	97,15	—
	PDMA	20,30	16,82	13,91	12,40	12,59	14,12	18,77	26,43	36,02	48,96	73,57	—
CPI													
CPI	DM	-61,65	-58,53	-55,00	-51,30	-47,71	-44,64	-42,70	-43,11	-48,52	-67,36	-149,66	—
	DMA	69,39	63,11	58,36	53,60	49,09	45,24	44,34	53,59	68,88	97,54	192,36	—
	PDMA	33,22	27,14	21,44	17,95	16,75	16,82	20,81	29,92	41,47	57,44	94,96	—
SPI													
SPI	DM	-1,58	-0,43	0,80	2,11	3,56	5,18	7,03	9,22	11,90	15,42	20,35	—
	DMA	4,75	4,29	3,97	3,86	4,61	5,68	7,66	10,35	13,65	17,95	23,91	—
	PDMA	10,36	8,88	8,12	8,14	9,39	12,05	17,20	23,74	31,84	42,44	57,11	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-60,07	-58,10	-55,80	-53,41	-51,27	-49,82	-49,73	-52,33	-60,42	-82,78	-170,01	—
	DMA	64,64	58,82	54,39	49,74	44,48	39,56	36,68	43,24	55,23	79,59	168,45	—
	PDMA	22,86	18,26	13,32	9,81	7,36	4,77	3,60	6,19	9,63	14,99	37,85	—

Tabela 8.195: Constantes de acoplamento BPBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	350,6	374,7	399,1	423,8	448,7	473,9	499,3	525,0	550,9	577,0	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	25,4	23,8	22,0	20,2	18,3	16,3	14,3	12,1	9,9	7,6	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-64,6	-67,1	-69,7	-72,3	-75,0	-77,7	-80,4	-83,1	-85,9	-88,6	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,0	-6,0	-7,1	-8,1	-9,1	-10,2	-11,3	-12,4	-13,6	-14,7	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,0	40,8	41,6	42,4	43,2	44,0	44,8	45,6	46,5	47,3	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,8	-13,8	-14,7	-15,7	-16,6	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,3	144,6	152,9	161,0	169,0	176,9	184,7	192,3	199,8	207,1	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1807,1	-1781,1	-1750,8	-1716,9	-1680,1	-1641,0	-1600,1	-1557,8	-1514,5	-1470,7	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-178,7	-161,7	-144,7	-127,7	-111,0	-94,3	-77,8	-61,5	-45,4	-29,5	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-84,2	-65,4	-46,8	-28,4	-10,2	7,7	25,6	43,2	60,7	78,0	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-292,0	-330,2	-368,9	-409,6	-454,7	-508,0	-575,8	-671,2	-826,0	-1147,2	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	118,2	119,7	121,2	122,8	124,4	126,0	127,7	129,3	131,0	132,7	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-16,9	-17,7	-18,4	-19,1	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	186,6	189,4	192,7	196,4	200,8	206,1	212,3	220,0	229,5	241,5	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	249,9	252,4	255,0	257,8	260,9	264,3	268,2	272,8	278,2	284,8	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,2	46,5	42,9	38,0	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,9	11,6	12,4	13,4	14,7	16,2	18,0	20,2	22,9	26,4	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	59,3	62,1	65,3	68,8	73,0	77,9	84,1	92,2	103,3	120,4	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	151,1	153,3	155,6	158,1	160,8	163,8	167,4	171,7	177,3	185,4	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,3	-16,7	-23,6	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,1	3,3	2,4	1,5	0,3	-0,9	-2,5	-4,6	-7,4	-11,8	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,0	12,3	12,8	13,3	14,0	14,9	16,0	17,7	20,1	24,0	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,8	25,7	28,5	32,9	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,2	26,1	28,1	30,2	32,3	34,4	36,6	38,8	41,0	43,3	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	118,5	120,2	122,0	123,7	125,5	127,3	129,1	131,0	132,8	134,7	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-28,46	-25,98	-23,31	-20,54	-17,79	-15,20	-12,98	-11,64	-12,32	-18,97	-62,67	—
	DMA	33,29	30,04	27,30	24,98	23,12	21,81	22,95	29,29	38,67	55,23	112,44	—
	PDMA	49,16	38,71	28,94	26,87	27,34	29,40	41,16	61,77	87,46	123,54	190,22	—
CPI													
CPI	DM	-66,23	-61,61	-56,67	-51,59	-46,70	-42,37	-39,22	-38,49	-43,11	-62,84	-172,10	—
	DMA	72,88	65,72	59,71	53,79	48,06	42,94	42,49	53,33	70,29	102,27	226,41	—
	PDMA	89,82	72,83	57,12	44,45	32,48	21,19	26,99	46,38	68,15	94,60	151,26	—
SPI													
SPI	DM	-0,76	0,15	1,15	2,23	3,41	4,73	6,25	8,05	10,26	13,20	17,57	—
	DMA	4,25	3,88	3,54	3,85	4,83	6,31	8,63	11,66	15,47	20,73	28,87	—
	PDMA	19,34	13,69	8,28	13,98	23,58	35,42	51,55	73,05	101,62	144,77	218,79	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-65,47	-61,76	-57,83	-53,82	-50,11	-47,10	-45,47	-46,54	-53,37	-76,04	-189,67	—
	DMA	68,63	61,84	56,17	49,94	43,23	36,62	33,86	41,67	54,82	81,54	197,54	—
	PDMA	70,48	59,14	48,84	30,47	8,90	-14,23	-24,56	-26,67	-33,47	-50,16	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-28,02	-25,96	-23,67	-21,25	-18,81	-16,53	-14,63	-13,66	-14,87	-22,65	-71,93	—
	DMA	33,15	30,38	28,17	26,27	24,84	24,00	24,98	31,15	40,68	58,16	121,21	—
	PDMA	19,79	16,75	14,62	14,11	14,93	16,92	22,07	30,67	41,38	56,34	89,72	—
CPI													
CPI	DM	-62,93	-59,73	-56,16	-52,41	-48,85	-45,88	-44,20	-45,16	-51,99	-75,42	-197,33	—
	DMA	70,25	64,25	59,50	54,83	50,35	46,50	45,68	55,84	72,75	106,20	241,03	—
	PDMA	32,67	26,51	21,63	19,96	18,93	18,44	22,62	32,22	44,49	62,06	112,92	—
SPI													
SPI	DM	-1,17	0,02	1,32	2,72	4,29	6,05	8,11	10,58	13,68	17,95	24,54	—
	DMA	4,62	4,32	4,08	4,29	5,22	6,69	9,06	12,16	16,01	21,21	29,05	—
	PDMA	9,88	9,24	9,22	9,61	11,86	15,74	21,64	29,48	38,98	51,93	71,87	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-61,76	-59,75	-57,48	-55,13	-53,14	-51,93	-52,31	-55,74	-65,67	-93,37	-221,87	—
	DMA	65,63	59,93	55,42	50,54	45,13	39,81	36,62	43,68	56,74	84,99	211,98	—
	PDMA	22,79	17,27	12,41	10,35	7,07	2,70	0,99	2,74	5,51	10,13	41,06	—

Tabela 8.196: Constantes de acoplamento BPW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	353,3	377,4	401,9	426,6	451,5	476,7	502,2	527,9	553,8	579,9	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	25,2	23,6	21,8	20,0	18,1	16,1	14,0	11,8	9,6	7,3	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,9	-67,5	-70,1	-72,7	-75,4	-78,1	-80,8	-83,5	-86,3	-89,1	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-6,1	-7,1	-8,1	-9,2	-10,2	-11,3	-12,5	-13,6	-14,8	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,2	41,0	41,8	42,6	43,4	44,2	45,0	45,8	46,7	47,5	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-11,9	-12,9	-13,8	-14,7	-15,7	-16,7	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,6	153,9	162,0	170,1	178,0	185,8	193,4	200,9	208,3	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,6	-1784,5	-1754,1	-1720,0	-1683,1	-1643,8	-1602,7	-1560,3	-1516,9	-1472,9	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,0	-160,8	-143,8	-126,8	-110,0	-93,3	-76,8	-60,4	-44,3	-28,3	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-83,3	-64,5	-45,8	-27,4	-9,1	8,9	26,7	44,5	62,0	79,4	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-291,7	-329,9	-368,6	-409,2	-454,4	-507,7	-575,7	-671,4	-827,4	-1153,6	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	120,4	121,9	123,5	125,1	126,7	128,4	130,0	131,7	133,4	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,0	-14,7	-15,5	-16,2	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	190,7	193,9	197,7	202,2	207,5	213,8	221,6	231,2	243,3	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	253,6	256,2	259,1	262,1	265,6	269,5	274,1	279,5	286,1	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,7	54,6	54,2	53,6	52,6	51,1	49,1	46,5	42,8	37,9	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,4	13,4	14,6	16,1	17,9	20,1	22,8	26,3	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,9	62,7	65,9	69,5	73,7	78,7	84,9	93,0	104,3	121,5	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	154,1	156,4	158,9	161,6	164,7	168,3	172,6	178,2	186,4	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-6,9	-9,2	-12,4	-16,8	-23,7	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	3,3	2,5	1,5	0,4	-0,8	-2,4	-4,5	-7,4	-11,7	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,0	12,3	12,7	13,3	14,0	14,8	16,0	17,7	20,1	24,0	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,4	23,7	25,6	28,4	32,8	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,5	26,5	28,5	30,6	32,7	34,8	37,0	39,2	41,5	43,8	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	120,9	122,6	124,4	126,2	128,0	129,8	131,7	133,5	135,4	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-28,18	-25,69	-23,01	-20,22	-17,46	-14,85	-12,64	-11,28	-11,99	-18,81	-65,03	—
	DMA	33,18	29,88	27,15	24,92	23,10	21,89	23,41	29,92	39,35	56,13	115,74	—
	PDMA	48,78	38,13	28,57	26,47	26,80	29,03	41,67	62,51	88,36	124,48	191,82	—
CPI	DM	-66,07	-61,44	-56,46	-51,35	-46,45	-42,09	-38,94	-38,21	-42,92	-63,08	-178,33	—
	DMA	72,67	65,42	59,39	53,45	47,70	42,62	42,99	54,25	71,30	103,77	233,56	—
	PDMA	88,82	71,78	56,13	43,46	31,54	20,46	27,96	47,80	69,47	96,38	155,08	—
SPI	DM	-0,39	0,52	1,52	2,62	3,80	5,13	6,65	8,46	10,69	13,65	18,05	—
	DMA	4,21	3,83	3,51	4,01	5,07	6,69	9,05	12,07	15,93	21,20	29,34	—
	PDMA	19,42	13,46	8,36	14,02	23,33	35,32	51,73	73,30	102,22	145,09	218,77	—
ΔCS	DM	-65,69	-61,96	-57,98	-53,97	-50,25	-47,22	-45,58	-46,67	-53,60	-76,74	-196,37	—
	DMA	68,46	61,59	55,88	49,44	42,63	35,92	33,94	42,17	55,37	82,57	204,22	—
	PDMA	69,41	58,32	47,77	29,44	8,21	-14,86	-23,77	-25,51	-32,75	-48,71	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-27,75	-25,67	-23,38	-20,92	-18,49	-16,19	-14,30	-13,31	-14,55	-22,53	-74,66	—
	DMA	33,06	30,24	28,04	26,24	24,87	24,15	25,45	31,80	41,40	59,12	124,89	—
	PDMA	19,44	16,36	14,30	13,95	14,83	17,04	22,51	31,14	41,84	57,00	91,32	—
CPI	DM	-62,85	-59,63	-56,03	-52,25	-48,68	-45,69	-44,00	-44,98	-51,91	-75,83	-204,32	—
	DMA	70,11	64,01	59,25	54,55	50,06	46,27	46,12	56,72	73,73	107,71	248,76	—
	PDMA	32,17	25,95	21,21	19,53	18,63	18,44	22,96	32,91	45,08	63,09	116,19	—
SPI	DM	-0,75	0,45	1,74	3,18	4,74	6,51	8,55	11,05	14,18	18,47	25,08	—
	DMA	4,56	4,26	4,03	4,47	5,49	7,14	9,55	12,64	16,52	21,75	29,60	—
	PDMA	9,64	8,98	8,98	9,65	11,91	15,97	22,17	29,78	39,35	52,32	72,19	—
ΔCS	DM	-62,10	-60,08	-57,77	-55,43	-53,42	-52,20	-52,55	-56,03	-66,09	-94,30	-229,40	—
	DMA	65,55	59,75	55,22	50,08	44,57	39,13	36,57	44,08	57,21	85,96	219,16	—
	PDMA	22,54	16,98	12,23	9,88	6,72	2,48	0,79	3,12	5,74	10,77	44,00	—

Tabela 8.197: Constantes de acoplamento BTPSS com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	352,6	377,4	402,5	427,7	453,2	478,9	504,7	530,8	557,0	583,4	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	25,3	23,7	21,9	20,1	18,1	16,1	14,0	11,9	9,6	7,3	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-65,6	-68,3	-71,0	-73,7	-76,5	-79,2	-82,0	-84,8	-87,6	-90,5	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,8	-5,8	-6,9	-8,0	-9,1	-10,2	-11,4	-12,6	-13,8	-15,0	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,5	42,3	43,1	44,0	44,8	45,7	46,5	47,4	48,3	49,2	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,9	-8,9	-9,8	-10,8	-11,8	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-16,9	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	146,1	155,2	164,2	173,1	182,0	190,7	199,3	207,8	216,2	224,5	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1811,4	-1786,1	-1756,4	-1723,0	-1686,7	-1648,0	-1607,5	-1565,6	-1522,7	-1479,1	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-179,7	-162,7	-145,8	-129,1	-112,4	-96,0	-79,7	-63,5	-47,6	-31,9	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-81,6	-62,9	-44,4	-26,1	-8,0	9,8	27,5	45,0	62,3	79,4	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-290,5	-328,7	-367,2	-407,6	-452,4	-505,1	-572,0	-665,9	-817,8	-1132,1	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	126,6	128,3	130,0	131,8	133,6	135,4	137,3	139,1	141,0	143,0	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,5	-15,3	-16,1	-16,9	-17,7	-18,6	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,4	190,4	193,8	197,7	202,4	207,9	214,6	222,7	232,8	245,5	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	265,3	268,0	271,0	274,1	277,6	281,4	285,7	290,7	296,6	303,8	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	56,3	56,1	55,7	55,0	53,9	52,4	50,3	47,5	43,7	38,6	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,3	12,0	12,9	13,9	15,2	16,7	18,5	20,8	23,6	27,2	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,5	63,5	66,7	70,4	74,8	80,0	86,4	94,7	106,2	123,5	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	161,0	163,5	166,1	168,8	171,8	175,2	179,0	183,7	189,6	198,0	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,6	-1,5	-2,7	-4,0	-5,5	-7,4	-9,8	-13,0	-17,6	-24,6	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,8	4,9	4,0	3,0	1,8	0,4	-1,1	-3,2	-6,0	-10,3	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,8	13,1	13,6	14,1	14,8	15,6	16,8	18,4	20,8	24,6	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	21,0	21,4	21,9	22,5	23,3	24,3	25,7	27,5	30,3	34,5	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,1	27,1	29,2	31,2	33,4	35,5	37,7	40,0	42,3	44,6	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	126,7	128,6	130,5	132,5	134,5	136,6	138,6	140,7	142,8	144,9	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-3,5	-4,0	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-6,7	-7,3	-7,9	-8,5	-4,7
Total	DM	-26,03	-23,49	-20,76	-17,94	-15,10	-12,42	-10,11	-8,62	-9,10	-15,41	-57,72	—
	DMA	33,28	30,28	27,97	26,03	24,45	23,58	25,82	32,56	42,00	58,46	113,73	—
	PDMA	51,76	41,22	32,18	27,76	26,64	29,88	43,16	64,10	90,33	126,58	191,26	—
CPI	DM	-65,17	-60,52	-55,52	-50,39	-45,43	-41,00	-37,75	-36,84	-41,16	-60,24	-166,33	—
	DMA	72,01	64,48	58,34	52,35	46,66	42,05	44,17	55,84	72,65	104,16	223,67	—
	PDMA	88,07	70,88	54,61	41,75	30,27	19,84	29,09	49,02	70,66	97,18	152,58	—
SPI	DM	2,67	3,67	4,73	5,85	7,14	8,55	10,17	12,07	14,41	17,46	21,93	—
	DMA	4,87	5,20	5,71	6,73	8,15	10,03	12,35	15,49	19,51	24,94	33,11	—
	PDMA	25,13	19,47	15,73	17,50	23,98	37,25	53,47	75,15	104,75	148,15	219,63	—
ΔCS	DM	-67,85	-64,18	-60,25	-56,24	-52,57	-49,55	-47,92	-48,91	-55,57	-77,70	-188,25	—
	DMA	67,14	59,28	52,63	45,62	38,51	32,03	31,82	40,35	53,14	79,22	190,56	—
	PDMA	62,94	51,41	38,89	24,25	6,29	-17,41	-24,39	-26,13	-34,09	-50,97	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,46	-23,32	-20,94	-18,46	-15,91	-13,51	-11,50	-10,35	-11,33	-18,71	-66,43	—
	DMA	33,19	30,69	28,95	27,54	26,48	26,13	28,17	34,80	44,40	61,77	122,68	—
	PDMA	20,63	17,47	15,40	15,25	16,89	19,62	25,33	34,16	45,17	60,39	93,09	—
CPI	DM	-62,03	-58,78	-55,13	-51,32	-47,67	-44,58	-42,78	-43,52	-50,01	-72,70	-191,09	—
	DMA	69,55	63,14	58,23	53,48	49,03	45,74	47,34	58,42	75,19	108,14	237,91	—
	PDMA	32,47	26,03	20,47	18,53	17,96	18,35	23,66	33,92	46,19	63,96	113,64	—
SPI	DM	2,68	3,96	5,35	6,82	8,52	10,39	12,56	15,17	18,43	22,82	29,46	—
	DMA	5,22	5,73	6,43	7,59	9,13	11,04	13,42	16,63	20,71	26,10	34,05	—
	PDMA	11,52	10,88	11,50	12,73	16,06	20,60	26,61	34,34	44,39	57,65	77,27	—
ΔCS	DM	-64,71	-62,74	-60,48	-58,14	-56,19	-54,97	-55,34	-58,69	-68,44	-95,52	-220,55	—
	DMA	64,33	57,41	51,80	45,89	39,90	34,70	33,92	41,79	54,48	82,04	203,86	—
	PDMA	20,95	15,15	8,97	5,80	1,90	-2,25	-2,95	-0,42	1,80	6,31	36,37	—

Tabela 8.198: Valores de PDMA total obtidos para troca B com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
BB95	53,5	42,0	31,9	23,0	15,8	13,9	22,7	36,8	52,2	70,3	92,6
BB98	47,0	35,9	26,3	21,9	20,1	25,3	40,2	57,2	76,4	99,5	131,6
BB971	46,4	35,2	24,8	18,5	16,1	23,0	37,6	53,3	71,4	92,8	120,6
BB972	46,5	35,8	26,4	18,3	17,3	26,6	36,9	52,1	69,8	90,6	119,3
BLYP	47,7	37,6	29,9	24,6	22,9	28,8	44,7	62,9	84,9	114,2	161,5
BP86	50,8	40,1	30,3	25,6	24,9	26,3	34,8	53,8	75,6	106,2	156,7
BPBE	49,1	38,4	30,8	29,6	30,6	32,6	42,1	62,8	88,9	126,5	196,2
BPW91	48,4	37,9	30,1	29,2	30,0	32,3	42,7	63,6	89,7	127,3	197,9
BTPSS	51,7	41,0	33,3	29,5	30,1	33,2	43,7	65,3	92,0	129,2	197,2

8.4.1.2 Troca B971

Tabela 8.199: Constantes de acoplamento B971B95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,1	438,3	456,6	475,9	496,5	518,3	541,4	565,9	591,7	618,8	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,5	16,5	15,4	14,2	12,9	11,5	9,9	8,2	6,4	4,5	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,1	-69,3	-71,6	-74,0	-76,6	-79,4	-82,4	-85,5	-88,9	-92,4	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,8	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,8	37,8	38,8	39,8	41,0	42,2	43,5	44,8	46,3	47,9	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,1	-5,1	-6,1	-7,2	-8,4	-9,6	-11,0	-12,5	-14,0	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	139,5	145,3	151,5	158,1	165,2	172,7	180,6	189,0	197,9	207,2	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1570,0	-1566,8	-1558,1	-1544,7	-1527,3	-1506,5	-1483,0	-1457,4	-1430,1	-1401,8	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-155,8	-142,3	-128,4	-114,3	-99,8	-85,1	-70,3	-55,4	-40,4	-25,5	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-67,7	-51,6	-35,2	-18,8	-2,2	14,5	31,3	48,3	65,3	82,5	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-193,4	-225,2	-258,1	-292,5	-329,3	-370,2	-418,0	-478,2	-562,9	-705,2	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	95,8	98,7	101,8	105,1	108,7	112,4	116,4	120,6	125,1	129,9	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-6,8	-7,6	-8,6	-9,5	-10,6	-11,7	-12,9	-14,2	-15,6	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	169,5	172,6	175,9	179,7	184,0	189,0	194,9	201,9	210,5	221,4	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	191,7	198,0	204,5	211,4	218,7	226,4	234,7	243,6	253,5	264,5	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,4	52,3	53,1	53,8	54,3	54,5	54,4	53,7	52,5	50,2	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,5	6,8	7,2	7,7	8,4	9,2	10,3	11,6	13,4	15,7	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	52,6	54,8	57,2	59,8	62,8	66,3	70,3	75,2	81,3	89,4	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	123,6	127,9	132,5	137,3	142,6	148,2	154,4	161,3	169,2	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	3,1	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,9	-2,2	-3,8	-6,0	-9,0	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,8	5,4	4,9	4,4	3,7	2,9	1,9	0,6	-1,0	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,4	9,7	9,9	10,2	10,6	11,0	11,6	12,3	13,3	14,7	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,4	13,9	14,4	15,0	15,7	16,5	17,4	18,5	20,0	21,9	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,7	22,6	24,6	26,8	29,1	31,5	34,0	36,7	39,5	42,5	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	94,7	97,9	101,3	104,9	108,7	112,7	117,0	121,5	126,3	131,4	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,0	-1,5	-2,0	-2,6	-3,2	-3,8	-4,5	-5,3	-6,0	-6,9	-4,7
Total	DM	-17,70	-16,02	-14,08	-11,88	-9,47	-6,95	-4,43	-2,12	-0,44	-0,64	-8,15	—
	DMA	29,68	25,08	20,22	15,16	11,93	10,55	12,27	15,42	22,28	34,19	54,82	—
	PDMA	65,30	55,54	45,52	35,07	24,69	14,05	13,79	22,73	39,60	61,06	90,89	—
CPI	DM	-25,81	-23,99	-21,62	-18,83	-15,71	-12,52	-9,58	-7,42	-7,19	-11,97	-34,85	—
	DMA	50,21	41,70	32,53	22,66	17,27	16,45	22,56	30,98	45,14	67,81	109,09	—
	PDMA	83,62	67,81	52,40	37,00	22,73	9,48	20,94	39,26	59,73	82,64	112,26	—
SPI	DM	-11,75	-10,18	-8,55	-6,79	-4,89	-2,87	-0,65	1,77	4,51	7,67	11,44	—
	DMA	14,62	12,89	11,19	9,66	8,01	6,23	4,73	4,00	5,51	9,54	15,03	—
	PDMA	51,87	46,54	40,48	33,66	26,12	17,39	8,55	10,61	24,85	45,23	75,22	—
ΔCS	DM	-14,06	-13,81	-13,07	-12,03	-10,82	-9,65	-8,94	-9,19	-11,70	-19,65	-46,29	—
	DMA	35,59	28,81	21,34	13,00	9,26	10,22	17,84	26,98	39,62	58,27	94,06	—
	PDMA	31,75	21,27	11,92	3,35	-3,40	-7,91	12,38	28,65	34,88	37,41	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,82	-15,58	-14,05	-12,23	-10,16	-7,96	-5,75	-3,76	-2,45	-3,23	-12,16	—
	DMA	29,55	25,09	20,35	15,41	12,54	11,78	13,13	15,90	22,77	35,29	57,56	—
	PDMA	32,70	27,99	23,44	18,78	14,42	10,37	9,37	12,76	20,46	31,26	47,30	—
CPI	DM	-20,12	-19,73	-18,76	-17,33	-15,56	-13,72	-12,17	-11,49	-12,94	-19,92	-46,81	—
	DMA	46,96	39,21	30,76	21,55	17,28	18,04	23,19	30,75	44,62	67,84	111,53	—
	PDMA	36,85	30,19	24,17	18,17	13,53	10,10	12,16	20,99	32,17	45,90	67,02	—
SPI	DM	-14,28	-12,39	-10,42	-8,30	-6,00	-3,53	-0,81	2,18	5,62	9,62	14,49	—
	DMA	16,15	14,22	12,35	10,68	8,89	6,96	5,39	4,48	5,95	10,25	16,05	—
	PDMA	29,51	26,29	22,88	19,24	15,11	10,58	7,22	6,42	11,45	20,00	32,14	—
ΔCS	DM	-5,84	-7,34	-8,34	-9,03	-9,56	-10,19	-11,36	-13,67	-18,56	-29,54	-61,30	—
	DMA	30,81	24,99	18,41	10,87	8,39	11,08	17,80	26,27	38,67	57,59	95,48	—
	PDMA	7,34	3,90	1,29	-1,07	-1,57	-0,48	4,94	14,57	20,72	25,90	34,88	—

Tabela 8.200: Constantes de acoplamento B971B971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	427,3	443,9	461,4	480,0	499,7	520,6	542,8	566,1	590,8	616,7	643,9	500
CO	$^1J_{CO}$	15,8	14,7	13,5	12,2	10,7	9,0	7,3	5,3	3,2	1,0	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,7	-69,8	-72,1	-74,5	-77,0	-79,7	-82,5	-85,5	-88,8	-92,2	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-0,6	-1,6	-2,7	-3,8	-5,1	-6,4	-7,7	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,6	38,6	39,6	40,7	41,9	43,1	44,4	45,9	47,3	48,9	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,4	-4,3	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	161,9	168,1	174,7	181,6	188,9	196,6	204,6	213,1	221,9	231,1	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1613,6	-1608,3	-1597,4	-1581,8	-1562,1	-1539,1	-1513,4	-1485,6	-1456,2	-1425,8	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-145,0	-130,5	-115,6	-100,5	-85,1	-69,6	-54,0	-38,4	-22,8	-7,2	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-55,7	-38,9	-21,9	-4,7	12,4	29,7	47,1	64,5	81,9	99,3	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-189,8	-221,6	-254,8	-289,8	-327,7	-370,4	-421,2	-486,9	-582,5	-752,8	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	102,5	105,7	109,1	112,7	116,5	120,6	125,0	129,6	134,4	139,6	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-13,1	-14,4	-15,8	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	186,1	190,1	194,4	199,4	205,0	211,6	219,4	228,8	240,5	255,4	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	200,6	207,3	214,3	221,7	229,5	237,9	247,0	256,9	268,0	280,6	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,0	51,9	52,5	53,0	53,2	53,0	52,5	51,2	49,1	45,6	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,2	6,6	7,1	7,6	8,4	9,3	10,5	12,0	14,0	16,7	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	63,4	66,1	69,1	72,5	76,4	80,8	86,2	92,8	101,2	112,9	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	126,1	130,5	135,2	140,1	145,4	151,2	157,4	164,3	172,1	181,3	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,5	1,9	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,8	-8,5	-12,5	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,4	2,5	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,3	9,6	9,8	10,2	10,5	11,0	11,6	12,4	13,6	15,3	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,3	13,8	14,3	14,9	15,6	16,4	17,4	18,6	20,2	22,5	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,4	27,6	30,0	32,4	35,1	37,8	40,8	43,9	47,2	50,7	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	101,2	104,7	108,4	112,3	116,5	120,9	125,5	130,4	135,6	141,2	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,6	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,2	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,7
Total													
Total	DM	-15,04	-13,12	-10,93	-8,50	-5,88	-3,16	-0,44	1,98	3,60	2,77	-8,92	—
	DMA	27,95	23,47	18,69	13,67	10,48	12,53	15,65	21,69	29,58	42,27	68,67	—
	PDMA	58,49	48,70	38,43	27,82	17,34	16,15	21,45	35,84	55,59	81,12	118,03	—
CPI													
CPI	DM	-24,92	-22,78	-20,13	-17,07	-13,79	-10,52	-7,58	-5,71	-6,33	-13,52	-47,66	—
	DMA	49,65	41,00	31,53	21,27	15,37	21,59	29,75	39,93	52,89	75,52	128,26	—
	PDMA	73,76	58,48	42,83	26,75	12,12	20,42	34,57	54,31	75,37	99,24	132,83	—
SPI													
SPI	DM	-7,79	-6,03	-4,19	-2,21	-0,07	2,23	4,80	7,63	10,88	14,72	19,49	—
	DMA	12,05	10,62	9,27	8,10	6,90	5,89	5,32	8,32	12,48	17,89	24,97	—
	PDMA	47,29	41,52	35,20	28,61	21,17	13,02	11,83	22,30	41,09	67,83	107,17	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-17,12	-16,75	-15,93	-14,87	-13,72	-12,75	-12,38	-13,34	-17,21	-28,24	-67,15	—
	DMA	37,60	30,38	22,25	13,17	8,47	15,70	24,43	31,61	40,41	57,62	103,30	—
	PDMA	26,47	16,96	7,63	-1,86	-9,04	7,39	22,74	32,00	34,28	31,42	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-14,30	-12,82	-11,03	-8,97	-6,68	-4,27	-1,84	0,28	1,53	0,10	-13,48	—
	DMA	28,15	23,86	19,24	14,38	11,59	13,47	16,23	22,18	30,16	43,50	72,17	—
	PDMA	29,76	25,40	20,92	16,49	12,55	11,37	12,21	18,31	28,05	40,84	60,22	—
CPI													
CPI	DM	-20,34	-19,67	-18,45	-16,81	-14,91	-13,04	-11,55	-11,23	-13,65	-23,30	-62,61	—
	DMA	47,54	39,71	30,99	21,43	16,65	22,28	29,51	38,97	51,49	74,64	130,91	—
	PDMA	34,00	28,39	22,51	16,29	11,60	12,66	16,62	26,74	38,30	52,97	78,24	—
SPI													
SPI	DM	-9,65	-7,55	-5,33	-2,93	-0,35	2,47	5,62	9,13	13,20	18,09	24,32	—
	DMA	13,24	11,67	10,21	8,96	7,70	6,68	6,02	9,27	13,75	19,54	26,98	—
	PDMA	26,49	23,09	19,69	16,65	13,27	10,39	8,82	11,83	20,17	31,51	46,35	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-10,69	-12,12	-13,12	-13,88	-14,56	-15,51	-17,17	-20,36	-26,85	-41,39	-86,93	—
	DMA	34,30	28,04	20,78	12,47	8,95	15,60	23,49	29,70	37,74	55,10	103,93	—
	PDMA	7,51	5,30	2,81	-0,36	-1,67	2,27	7,81	14,91	18,14	21,46	31,89	—

Tabela 8.201: Constantes de acoplamento B971B972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	461,2	479,1	498,1	518,0	539,2	561,4	584,9	609,6	635,7	663,0	691,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,0	10,6	9,2	7,6	5,8	3,9	1,8	-0,4	-2,9	-5,5	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,9	-75,1	-77,6	-80,2	-82,9	-85,8	-88,9	-92,2	-95,6	-99,3	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,4	-1,4	-2,5	-3,7	-4,9	-6,2	-7,6	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,6	40,6	41,7	42,8	44,1	45,3	46,7	48,2	49,7	51,4	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,8	-3,7	-4,6	-5,6	-6,7	-7,9	-9,2	-10,5	-12,0	-13,5	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	156,1	162,7	169,7	177,2	185,2	193,5	202,4	211,7	221,5	231,8	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1655,1	-1649,0	-1637,2	-1620,4	-1599,5	-1575,2	-1548,1	-1519,0	-1488,5	-1457,0	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-130,7	-116,0	-101,0	-85,9	-70,6	-55,4	-40,1	-24,8	-9,6	5,3	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-39,1	-22,1	-5,1	11,9	29,0	46,1	63,2	80,3	97,4	114,5	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-181,2	-212,7	-245,4	-280,0	-317,5	-359,9	-410,6	-476,9	-575,6	-760,2	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,7	107,9	111,3	114,9	118,7	122,7	126,9	131,4	136,2	141,2	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,6	-6,5	-7,4	-8,4	-9,4	-10,5	-11,7	-12,9	-14,2	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,6	188,6	192,9	197,9	203,6	210,3	218,2	227,8	239,6	254,6	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	202,4	209,0	215,9	223,1	230,8	239,0	247,8	257,4	268,0	280,0	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,3	52,1	52,7	53,2	53,4	53,3	52,8	51,6	49,7	46,6	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,0	6,3	6,6	7,1	7,8	8,6	9,6	10,9	12,6	14,9	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,2	66,0	69,1	72,6	76,7	81,4	87,1	94,3	103,7	116,8	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,8	132,1	136,7	141,6	146,9	152,5	158,6	165,4	173,1	182,3	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	3,3	2,6	1,8	0,9	0,0	-1,3	-2,9	-4,9	-7,7	-11,7	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,8	6,5	6,1	5,7	5,1	4,5	3,8	2,8	1,5	-0,2	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,4	9,6	9,9	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	14,2	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,2	13,6	14,1	14,6	15,2	16,0	16,8	17,9	19,3	21,3	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,8	30,0	32,3	34,8	37,4	40,2	43,1	46,1	49,4	52,8	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	102,7	106,2	109,8	113,7	117,7	122,0	126,6	131,4	136,5	141,8	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,1	-0,5	-1,1	-1,6	-2,2	-2,8	-3,4	-4,1	-4,9	-5,7	-6,5	-4,7
Total	DM	-13,85	-11,84	-9,55	-7,01	-4,27	-1,45	1,35	3,84	5,43	4,14	-12,05	—
	DMA	27,24	22,68	17,82	14,14	14,14	16,64	20,13	26,13	33,90	45,96	75,85	—
	PDMA	57,49	47,88	37,71	27,75	26,80	27,80	30,50	40,78	56,69	81,43	118,82	—
CPI	DM	-23,11	-20,72	-17,78	-14,47	-10,88	-7,37	-4,22	-2,19	-2,87	-11,17	-56,05	—
	DMA	48,60	39,74	30,04	22,84	24,01	31,14	39,58	49,83	63,18	84,45	145,55	—
	PDMA	64,26	48,95	33,32	18,08	24,26	36,78	50,60	69,72	90,96	115,08	152,13	—
SPI	DM	-7,07	-5,33	-3,52	-1,54	0,59	2,90	5,43	8,27	11,51	15,37	20,21	—
	DMA	11,57	10,18	8,87	7,77	6,91	6,01	5,87	8,75	12,42	17,73	24,75	—
	PDMA	52,52	47,10	40,93	34,83	28,66	21,22	15,75	19,57	31,55	56,75	94,39	—
ΔCS	DM	-16,04	-15,39	-14,26	-12,93	-11,47	-10,27	-9,65	-10,46	-14,39	-26,55	-76,27	—
	DMA	37,03	29,56	21,17	15,07	17,10	25,13	33,71	41,08	50,76	66,71	120,80	—
	PDMA	11,74	1,86	-7,61	-16,75	-4,40	15,57	34,85	50,15	59,42	58,33	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-13,75	-12,17	-10,27	-8,08	-5,66	-3,13	-0,61	1,59	2,82	0,87	-17,79	—
	DMA	28,00	23,63	18,93	15,56	15,15	17,31	20,58	26,57	34,47	47,11	79,77	—
	PDMA	30,47	26,38	22,01	18,06	16,59	16,26	16,76	21,70	29,08	41,63	62,25	—
CPI	DM	-20,01	-19,08	-17,55	-15,61	-13,37	-11,22	-9,46	-8,94	-11,40	-22,24	-73,32	—
	DMA	48,05	40,00	31,03	24,81	25,01	31,14	38,72	48,28	61,26	82,94	148,44	—
	PDMA	34,62	29,11	23,25	17,82	17,35	19,73	23,53	33,15	45,13	60,25	89,61	—
SPI	DM	-8,94	-6,85	-4,68	-2,29	0,28	3,09	6,19	9,69	13,75	18,65	24,93	—
	DMA	12,57	11,04	9,62	8,45	7,57	6,68	6,62	9,86	13,86	19,55	26,95	—
	PDMA	27,28	24,27	21,06	18,24	16,01	13,60	11,56	12,89	16,74	27,31	41,20	—
ΔCS	DM	-11,07	-12,23	-12,87	-13,32	-13,65	-14,31	-15,65	-18,63	-25,15	-40,89	-98,25	—
	DMA	35,48	28,96	21,41	16,36	17,44	24,46	32,10	38,42	47,40	63,39	121,49	—
	PDMA	7,34	4,84	2,19	-0,42	1,34	6,13	11,97	20,26	28,39	32,94	48,41	—

Tabela 8.202: Constantes de acoplamento B971B98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	417,3	433,7	451,1	469,5	489,2	510,0	532,0	555,3	579,9	605,9	633,1	500
CO	$^1J_{CO}$	15,6	14,5	13,3	11,9	10,4	8,8	7,0	5,1	3,0	0,8	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,4	-69,5	-71,7	-74,1	-76,6	-79,3	-82,2	-85,3	-88,5	-91,9	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-0,7	-1,7	-2,8	-4,0	-5,2	-6,5	-7,9	-9,5	-11,1	-12,8	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,1	39,1	40,2	41,3	42,5	43,8	45,1	46,6	48,1	49,7	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,6	-4,5	-5,5	-6,6	-7,7	-9,0	-10,3	-11,7	-13,3	-15,0	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	168,0	174,3	181,0	188,0	195,4	203,2	211,4	219,9	228,9	238,2	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1628,3	-1622,4	-1610,9	-1594,7	-1574,5	-1550,9	-1524,7	-1496,4	-1466,7	-1435,9	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-145,2	-130,8	-116,1	-101,2	-86,0	-70,6	-55,2	-39,8	-24,3	-9,0	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-56,5	-39,9	-23,1	-6,2	10,7	27,8	44,9	62,1	79,3	96,6	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-195,8	-228,5	-262,7	-299,0	-338,7	-383,9	-438,7	-511,1	-620,5	-827,8	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	105,3	108,6	112,2	115,9	119,9	124,2	128,7	133,4	138,5	143,8	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-6,2	-7,0	-8,0	-9,0	-10,0	-11,2	-12,4	-13,7	-15,1	-16,5	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	189,2	193,2	197,7	202,8	208,6	215,4	223,5	233,2	245,4	261,1	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	204,8	211,6	218,8	226,4	234,5	243,2	252,6	262,8	274,3	287,6	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,6	52,4	53,1	53,5	53,7	53,5	52,9	51,5	49,2	45,4	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,3	6,7	7,2	7,8	8,6	9,5	10,8	12,5	14,6	17,6	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	65,4	68,2	71,4	74,9	78,9	83,6	89,2	96,2	105,4	118,2	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	129,1	133,6	138,4	143,5	149,0	155,0	161,4	168,6	176,9	186,7	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,9	-2,3	-4,0	-6,2	-9,2	-13,6	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,0	5,6	5,2	4,7	4,1	3,3	2,4	1,2	-0,3	-2,6	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,4	9,7	10,0	10,3	10,7	11,2	11,9	12,7	14,0	15,9	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,5	14,0	14,5	15,2	15,9	16,8	17,8	19,1	20,9	23,4	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	26,7	29,0	31,4	34,0	36,7	39,7	42,7	46,0	49,5	53,2	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	103,9	107,5	111,3	115,4	119,7	124,3	129,1	134,2	139,6	145,3	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,7	-1,2	-1,8	-2,4	-3,0	-3,6	-4,4	-5,1	-6,0	-6,9	-7,9	-4,7
Total	DM	-15,26	-13,35	-11,15	-8,73	-6,12	-3,42	-0,82	1,41	2,60	0,48	-19,10	—
	DMA	27,96	23,45	18,72	13,62	11,80	12,88	17,45	23,95	32,51	46,04	80,95	—
	PDMA	57,74	47,89	37,73	26,99	17,49	14,82	22,44	38,55	59,59	87,06	129,89	—
CPI	DM	-27,22	-25,15	-22,55	-19,64	-16,49	-13,41	-10,86	-9,61	-11,46	-22,01	-75,31	—
	DMA	50,85	42,11	32,52	22,15	19,25	23,21	31,81	42,54	56,72	80,83	152,76	—
	PDMA	73,79	58,61	42,96	26,97	13,84	19,27	34,74	54,72	76,17	101,05	140,82	—
SPI	DM	-6,49	-4,69	-2,78	-0,73	1,49	3,90	6,54	9,49	12,91	16,97	22,12	—
	DMA	11,17	9,77	8,61	7,36	6,34	5,30	6,91	10,31	14,76	20,53	28,29	—
	PDMA	45,96	40,02	33,90	27,00	20,16	11,56	13,42	26,70	47,42	76,80	121,88	—
ΔCS	DM	-20,73	-20,45	-19,77	-18,90	-17,98	-17,31	-17,40	-19,10	-24,37	-38,98	-97,43	—
	DMA	39,69	32,34	23,91	14,79	12,91	17,91	24,90	32,22	41,96	60,30	124,47	—
	PDMA	27,83	18,59	9,06	-0,03	-6,31	7,71	21,32	28,02	28,75	24,24	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-14,51	-13,03	-11,22	-9,16	-6,87	-4,47	-2,17	-0,24	0,55	-2,31	-24,71	—
	DMA	28,12	23,80	19,23	14,26	13,01	13,95	18,35	24,81	33,55	47,80	86,04	—
	PDMA	28,67	24,37	19,97	15,30	12,40	10,98	13,62	20,97	31,49	45,21	68,62	—
CPI	DM	-22,79	-22,17	-21,00	-19,48	-17,71	-16,03	-14,94	-15,28	-19,04	-32,37	-92,72	—
	DMA	48,79	40,83	31,96	22,24	20,75	24,25	32,00	42,08	55,96	80,75	158,16	—
	PDMA	33,50	27,87	21,86	15,53	12,36	12,67	18,28	28,79	40,92	56,75	89,03	—
SPI	DM	-8,15	-5,99	-3,69	-1,22	1,46	4,42	7,66	11,32	15,62	20,82	27,60	—
	DMA	12,22	10,70	9,45	8,12	7,06	6,03	7,85	11,52	16,31	22,45	30,57	—
	PDMA	24,95	21,68	18,52	15,11	12,43	9,67	10,02	14,95	24,23	36,33	52,91	—
ΔCS	DM	-14,64	-16,18	-17,31	-18,26	-19,17	-20,45	-22,60	-26,60	-34,66	-53,19	-120,32	—
	DMA	36,57	30,13	22,51	14,12	13,69	18,22	24,15	30,56	39,65	58,30	127,59	—
	PDMA	8,55	6,19	3,34	0,42	-0,07	2,99	8,26	13,84	16,69	20,42	36,12	—

Tabela 8.203: Constantes de acoplamento B971LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	416,9	435,2	454,6	475,3	497,4	521,0	546,1	572,7	601,0	630,9	662,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,5	14,4	13,1	11,7	10,2	8,5	6,7	4,8	2,7	0,4	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,2	-71,5	-74,0	-76,6	-79,5	-82,5	-85,8	-89,2	-92,9	-96,9	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,5	-2,6	-3,8	-5,1	-6,5	-8,0	-9,6	-11,3	-13,2	-15,2	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,1	40,1	41,3	42,5	43,7	45,1	46,5	48,1	49,8	51,5	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,8	-16,7	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,9	158,4	165,4	172,9	180,8	189,2	198,2	207,7	217,6	228,2	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,8	-1651,5	-1640,6	-1624,8	-1605,0	-1581,8	-1555,9	-1527,9	-1498,5	-1468,0	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,0	-135,6	-120,9	-106,0	-90,9	-75,7	-60,4	-45,1	-29,8	-14,5	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-58,7	-41,9	-24,9	-7,8	9,2	26,5	43,8	61,2	78,6	96,2	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-197,3	-231,1	-266,7	-304,8	-346,9	-395,7	-456,0	-538,1	-668,4	-941,2	-1225,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,7	108,0	111,6	115,3	119,3	123,6	128,2	133,0	138,1	143,6	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,2	-8,1	-9,1	-10,1	-11,2	-12,4	-13,7	-15,1	-16,5	-18,1	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	178,7	182,3	186,3	190,8	196,1	202,4	210,0	219,3	231,1	246,8	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,6	215,7	223,2	231,1	239,5	248,6	258,5	269,3	281,6	296,0	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,6	54,4	55,1	55,5	55,6	55,4	54,6	52,9	50,2	45,6	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,9	7,4	7,9	8,7	9,6	10,8	12,3	14,3	17,0	20,7	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,0	61,6	64,5	67,8	71,7	76,2	81,8	89,0	98,8	113,5	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,6	134,1	139,0	144,3	149,9	156,0	162,7	170,2	179,0	190,1	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,8	2,1	1,3	0,3	-0,8	-2,2	-4,0	-6,5	-10,0	-15,5	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,4	6,0	5,5	4,9	4,3	3,4	2,4	1,0	-0,9	-4,0	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,3	10,6	10,9	11,3	11,7	12,4	13,2	14,3	16,0	18,7	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,5	15,1	15,7	16,5	17,3	18,3	19,6	21,2	23,5	26,9	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	26,4	28,7	31,1	33,7	36,4	39,3	42,4	45,6	49,1	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,1	106,7	110,5	114,6	118,9	123,5	128,3	133,5	139,0	144,8	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-3,0	-3,6	-4,4	-5,1	-6,0	-6,9	-7,8	-4,7
Total	DM	-17,88	-15,98	-13,79	-11,37	-8,80	-6,15	-3,62	-1,60	-1,02	-5,35	-48,74	—
	DMA	29,53	24,83	19,69	14,46	11,91	13,24	18,88	26,16	35,82	52,11	110,36	—
	PDMA	58,66	48,48	37,73	26,07	15,27	13,66	24,02	42,34	65,72	98,52	158,62	—
CPI	DM	-32,31	-30,22	-27,62	-24,65	-21,56	-18,59	-16,26	-15,56	-18,98	-35,11	-145,56	—
	DMA	55,05	46,02	36,09	26,15	22,05	26,43	36,48	48,58	65,20	94,98	220,20	—
	PDMA	74,45	58,84	42,85	26,65	12,46	18,39	38,06	58,92	81,69	109,51	169,20	—
SPI	DM	-7,31	-5,53	-3,65	-1,62	0,57	2,98	5,65	8,64	12,16	16,48	22,27	—
	DMA	10,81	9,29	7,66	5,89	4,47	3,57	5,98	9,72	14,27	20,67	29,81	—
	PDMA	47,09	40,89	33,97	25,63	17,33	10,18	13,72	30,18	54,01	90,45	150,86	—
ΔCS	DM	-25,00	-24,68	-23,97	-23,03	-22,13	-21,57	-21,91	-24,20	-31,14	-51,59	-167,83	—
	DMA	44,24	36,72	28,43	20,26	17,58	22,86	30,50	38,86	50,93	74,32	190,39	—
	PDMA	27,37	17,95	8,89	1,02	-4,87	8,21	24,34	28,74	27,69	19,06	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-17,42	-15,94	-14,15	-12,09	-9,85	-7,50	-5,28	-3,58	-3,44	-8,73	-57,89	—
	DMA	29,77	25,24	20,22	15,12	13,06	14,41	20,02	27,33	37,25	54,53	118,96	—
	PDMA	27,78	23,16	18,33	13,05	8,90	9,66	15,72	24,58	36,04	52,19	87,08	—
CPI	DM	-28,17	-27,55	-26,39	-24,84	-23,14	-21,60	-20,77	-21,74	-27,24	-46,74	-170,00	—
	DMA	53,19	44,93	35,71	26,48	23,68	27,92	37,25	48,82	65,36	96,36	232,34	—
	PDMA	32,77	26,79	20,54	14,12	9,84	12,56	22,67	34,01	47,46	66,33	120,26	—
SPI	DM	-9,15	-7,02	-4,74	-2,28	0,38	3,34	6,63	10,38	14,86	20,51	28,35	—
	DMA	11,76	10,09	8,31	6,38	4,88	4,02	6,77	10,80	15,63	22,35	31,74	—
	PDMA	23,95	20,38	16,63	12,23	8,18	7,43	10,37	17,33	27,25	41,31	61,56	—
ΔCS	DM	-19,02	-20,53	-21,65	-22,56	-23,52	-24,94	-27,40	-32,12	-42,10	-67,25	-198,35	—
	DMA	41,43	34,84	27,40	20,10	18,80	23,90	30,48	38,02	49,73	74,01	200,60	—
	PDMA	8,82	6,41	3,91	1,89	1,66	5,13	12,30	16,68	20,21	25,02	58,70	—

Tabela 8.204: Constantes de acoplamento B971P86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	378,0	394,5	412,1	431,0	451,1	472,7	495,6	520,0	545,9	573,3	602,2	500
CO	$^1J_{CO}$	19,0	18,1	17,0	15,9	14,6	13,3	11,8	10,2	8,5	6,7	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-62,3	-64,4	-66,6	-69,0	-71,6	-74,3	-77,2	-80,4	-83,7	-87,2	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,0	-2,0	-3,1	-4,3	-5,5	-6,8	-8,2	-9,8	-11,4	-13,2	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,1	36,0	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,1	-5,0	-5,9	-6,9	-8,0	-9,2	-10,5	-11,9	-13,4	-15,0	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	130,6	136,6	143,1	150,0	157,4	165,2	173,6	182,4	191,8	201,7	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1654,8	-1648,5	-1636,6	-1620,0	-1599,4	-1575,5	-1548,9	-1520,3	-1490,3	-1459,2	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-159,4	-145,7	-131,7	-117,4	-102,9	-88,2	-73,4	-58,6	-43,7	-28,9	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-72,1	-55,9	-39,5	-23,0	-6,4	10,2	26,9	43,8	60,7	77,8	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-206,1	-239,8	-275,5	-313,8	-356,3	-405,6	-466,5	-549,3	-679,0	-940,6	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	92,9	95,8	99,0	102,4	106,0	109,8	113,9	118,3	122,9	127,8	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,3	-8,1	-9,0	-10,0	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,9	-17,3	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	168,2	171,4	175,0	179,0	183,8	189,4	196,1	204,5	215,3	229,8	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	188,3	194,8	201,6	208,7	216,4	224,7	233,7	243,7	255,1	268,5	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,8	51,7	52,4	52,8	53,1	52,9	52,2	50,7	48,0	43,5	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,9	7,3	7,9	8,7	9,6	10,8	12,4	14,4	17,2	21,1	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	52,5	54,9	57,5	60,5	64,0	68,1	73,2	80,0	89,5	104,5	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	116,0	120,1	124,6	129,3	134,4	139,9	146,1	153,1	161,4	172,3	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,3	1,6	0,9	0,0	-1,0	-2,3	-4,1	-6,4	-10,0	-15,9	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,1	4,7	4,2	3,6	2,9	2,1	0,9	-0,5	-2,7	-6,4	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,3	9,6	9,9	10,3	10,9	11,5	12,4	13,7	15,6	18,9	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,3	13,9	14,5	15,2	16,1	17,1	18,4	20,1	22,7	26,7	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	19,7	21,6	23,7	25,9	28,3	30,7	33,3	36,1	39,0	42,1	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	91,9	95,1	98,6	102,2	106,1	110,2	114,6	119,3	124,2	129,4	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,0	-1,4	-2,0	-2,5	-3,1	-3,7	-4,4	-5,1	-5,9	-6,7	-7,6	-4,7
Total													
Total	DM	-24,35	-22,62	-20,61	-18,40	-16,01	-13,60	-11,33	-9,55	-9,18	-13,28	-45,89	—
	DMA	35,43	30,62	25,32	20,93	18,30	15,77	15,85	19,29	26,95	42,24	90,58	—
	PDMA	64,00	53,77	42,77	31,67	20,82	10,70	17,71	32,84	55,41	89,08	152,34	—
CPI													
CPI	DM	-39,82	-37,91	-35,51	-32,75	-29,88	-27,15	-25,09	-24,70	-28,26	-43,58	-128,80	—
	DMA	62,84	53,91	44,05	35,90	32,14	28,46	29,80	38,23	53,05	81,22	182,13	—
	PDMA	88,51	72,54	56,00	40,35	26,82	13,16	20,21	37,80	58,46	84,60	134,69	—
SPI													
SPI	DM	-13,01	-11,41	-9,69	-7,87	-5,84	-3,67	-1,25	1,55	4,82	8,95	14,91	—
	DMA	15,33	13,54	11,58	9,95	8,16	6,45	5,62	5,41	7,81	13,65	23,45	—
	PDMA	46,03	40,01	33,07	25,29	16,42	8,91	15,88	29,21	53,17	92,37	165,29	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-26,80	-26,50	-25,82	-24,89	-24,04	-23,49	-23,84	-26,25	-33,08	-52,53	-143,71	—
	DMA	47,50	40,37	32,47	25,95	23,98	22,01	24,18	32,82	45,24	67,56	158,67	—
	PDMA	42,47	32,53	22,93	15,06	10,40	4,25	4,34	8,59	5,29	-7,78	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-24,07	-22,77	-21,16	-19,30	-17,26	-15,17	-13,20	-11,76	-11,81	-16,77	-53,57	—
	DMA	35,94	31,25	26,03	21,84	19,67	17,60	17,27	20,26	27,93	44,05	97,15	—
	PDMA	33,30	28,45	22,99	17,98	13,66	10,15	10,85	16,24	26,17	41,60	73,57	—
CPI													
CPI	DM	-35,09	-34,61	-33,61	-32,23	-30,73	-29,39	-28,79	-30,05	-35,66	-54,22	-149,66	—
	DMA	60,41	52,21	43,01	35,69	33,21	30,83	31,59	39,17	53,78	83,06	192,36	—
	PDMA	39,29	32,52	25,27	19,06	15,24	11,27	14,30	22,38	33,84	51,19	94,96	—
SPI													
SPI	DM	-15,59	-13,65	-11,58	-9,36	-6,89	-4,22	-1,20	2,32	6,53	12,03	20,35	—
	DMA	17,12	15,13	12,96	11,19	9,26	7,42	6,25	5,72	8,04	14,05	23,91	—
	PDMA	28,69	25,31	21,23	17,14	12,45	9,29	8,19	11,52	20,27	34,22	57,11	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-19,50	-20,96	-22,03	-22,87	-23,84	-25,17	-27,59	-32,37	-42,19	-66,25	-170,01	—
	DMA	43,29	37,08	30,05	24,50	23,95	23,41	25,34	33,45	45,74	69,01	168,45	—
	PDMA	10,61	7,21	4,04	1,91	2,78	1,98	6,11	10,86	13,57	16,97	37,85	—

Tabela 8.205: Constantes de acoplamento B971PBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	373,6	390,4	408,5	427,8	448,4	470,5	494,0	519,0	545,5	573,6	603,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,5	18,6	17,6	16,5	15,2	13,9	12,4	10,8	9,1	7,2	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-62,0	-64,2	-66,5	-68,9	-71,5	-74,3	-77,3	-80,5	-83,9	-87,6	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,3	-2,4	-3,5	-4,7	-6,0	-7,3	-8,8	-10,4	-12,1	-13,9	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	35,1	36,0	37,0	38,1	39,3	40,6	41,9	43,3	44,8	46,4	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-5,3	-6,3	-7,4	-8,5	-9,8	-11,1	-12,5	-14,1	-15,8	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	129,6	135,8	142,5	149,7	157,4	165,6	174,3	183,5	193,2	203,5	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1659,5	-1652,4	-1639,8	-1622,5	-1601,3	-1576,8	-1549,7	-1520,6	-1490,1	-1458,6	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-160,5	-146,7	-132,6	-118,1	-103,5	-88,7	-73,7	-58,7	-43,7	-28,7	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-73,3	-56,9	-40,4	-23,8	-7,1	9,7	26,6	43,6	60,8	77,9	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-205,8	-240,2	-276,6	-315,9	-359,7	-410,7	-474,4	-562,1	-702,7	-1000,3	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	93,2	96,3	99,5	103,0	106,7	110,6	114,8	119,3	124,0	129,1	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,7	-8,6	-9,5	-10,5	-11,6	-12,8	-14,0	-15,3	-16,7	-18,2	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	167,3	170,5	174,2	178,4	183,3	189,2	196,4	205,4	217,3	233,4	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	189,9	196,5	203,5	210,9	218,8	227,3	236,8	247,3	259,5	274,2	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,9	52,5	52,9	53,0	52,6	51,7	49,8	46,5	40,9	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,7	8,4	9,2	10,3	11,6	13,4	15,8	19,0	23,7	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	52,1	54,5	57,2	60,3	63,9	68,3	73,9	81,3	92,2	110,6	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,8	121,1	125,6	130,5	135,7	141,5	147,9	155,3	164,4	177,0	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,5	-3,0	-5,0	-7,7	-11,9	-19,4	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,4	3,9	3,2	2,4	1,5	0,2	-1,5	-4,3	-9,0	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,5	9,8	10,2	10,6	11,2	12,0	13,0	14,5	16,9	21,3	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,6	14,2	14,9	15,7	16,6	17,8	19,2	21,3	24,3	29,5	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	19,5	21,5	23,6	25,8	28,2	30,7	33,3	36,1	39,1	42,2	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	92,4	95,7	99,3	103,0	107,0	111,2	115,7	120,5	125,5	130,9	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	-3,4	-4,0	-4,7	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-24,75	-22,97	-20,90	-18,63	-16,22	-13,76	-11,47	-9,73	-9,57	-14,70	-62,67	—
	DMA	35,79	30,85	25,40	20,95	18,30	15,83	16,08	19,75	28,76	46,24	112,44	—
	PDMA	62,78	52,24	40,97	29,27	18,39	11,84	21,06	38,60	64,47	104,50	190,22	—
CPI													
CPI	DM	-40,90	-38,93	-36,45	-33,65	-30,75	-28,02	-26,06	-25,95	-30,37	-48,84	-172,10	—
	DMA	64,01	54,85	44,78	36,66	32,84	29,16	30,65	39,23	55,39	86,96	226,41	—
	PDMA	89,17	72,89	56,19	39,88	26,04	12,51	21,17	38,91	60,57	88,03	151,26	—
SPI													
SPI	DM	-12,91	-11,27	-9,50	-7,62	-5,57	-3,31	-0,77	2,17	5,69	10,33	17,57	—
	DMA	15,10	13,24	11,19	9,42	7,65	6,05	5,41	5,46	9,23	16,38	28,87	—
	PDMA	43,43	37,09	29,81	21,49	12,78	11,35	20,99	38,37	67,34	116,57	218,79	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-27,99	-27,66	-26,95	-26,03	-25,18	-24,71	-25,30	-28,12	-36,07	-59,16	-189,67	—
	DMA	48,91	41,61	33,59	27,24	25,19	23,11	25,24	33,77	46,16	70,58	197,54	—
	PDMA	45,74	35,80	26,39	18,40	13,26	1,16	0,18	0,55	-6,77	-28,54	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-24,44	-23,09	-21,42	-19,50	-17,42	-15,27	-13,27	-11,85	-12,10	-18,13	-71,93	—
	DMA	36,32	31,49	26,11	21,87	19,69	17,60	17,47	20,68	29,82	48,31	121,21	—
	PDMA	32,68	27,54	21,98	16,52	12,56	9,25	11,77	18,56	29,92	47,74	89,72	—
CPI													
CPI	DM	-36,16	-35,63	-34,56	-33,13	-31,61	-30,29	-29,83	-31,41	-37,99	-60,01	-197,33	—
	DMA	61,58	53,15	43,72	36,45	33,91	31,55	32,55	40,29	56,35	89,37	241,03	—
	PDMA	39,23	32,25	24,88	18,01	13,91	10,23	15,55	23,74	36,09	54,91	112,92	—
SPI													
SPI	DM	-15,43	-13,45	-11,31	-9,02	-6,50	-3,71	-0,52	3,20	7,81	14,09	24,54	—
	DMA	16,89	14,83	12,57	10,65	8,75	6,88	5,88	5,60	9,41	16,72	29,05	—
	PDMA	27,65	23,92	19,75	15,37	11,52	8,50	8,86	14,58	25,17	42,23	71,87	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-20,73	-22,18	-23,25	-24,11	-25,11	-26,58	-29,31	-34,61	-45,80	-74,10	-221,87	—
	DMA	44,69	38,32	31,15	25,80	25,16	24,67	26,67	34,69	46,94	72,65	211,98	—
	PDMA	11,58	8,33	5,13	2,63	2,38	1,73	6,69	9,16	10,92	12,68	41,06	—

Tabela 8.206: Constantes de acoplamento B971PW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	376,0	392,9	411,0	430,4	451,1	473,2	496,8	521,8	548,4	576,5	606,3	500
CO	$^1J_{CO}$	19,4	18,4	17,4	16,3	15,0	13,6	12,1	10,5	8,7	6,9	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-62,4	-64,5	-66,8	-69,3	-71,9	-74,7	-77,7	-80,9	-84,4	-88,0	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,3	-2,4	-3,5	-4,7	-6,0	-7,4	-8,8	-10,4	-12,1	-14,0	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,3	36,2	37,2	38,3	39,5	40,8	42,1	43,5	45,0	46,7	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,4	-5,3	-6,3	-7,4	-8,5	-9,8	-11,1	-12,6	-14,1	-15,8	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	130,5	136,8	143,5	150,7	158,4	166,7	175,4	184,6	194,4	204,7	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1662,6	-1655,4	-1642,7	-1625,3	-1603,9	-1579,3	-1552,1	-1522,9	-1492,3	-1460,7	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-159,8	-145,9	-131,7	-117,2	-102,5	-87,6	-72,7	-57,6	-42,6	-27,5	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-72,4	-56,0	-39,5	-22,8	-6,0	10,8	27,8	44,9	62,0	79,3	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-205,6	-240,1	-276,5	-315,8	-359,5	-410,5	-474,2	-562,1	-703,3	-1004,2	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	93,8	96,8	100,1	103,6	107,3	111,3	115,5	120,0	124,7	129,8	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,7	-8,6	-9,5	-10,6	-11,6	-12,8	-14,0	-15,3	-16,7	-18,2	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	168,3	171,6	175,3	179,6	184,5	190,5	197,7	206,9	218,8	235,2	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	190,9	197,5	204,5	211,9	219,9	228,5	237,9	248,5	260,7	275,5	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,1	51,9	52,5	52,9	53,0	52,7	51,7	49,8	46,5	40,8	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,2	7,7	8,3	9,2	10,2	11,6	13,3	15,7	19,0	23,6	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	52,6	55,0	57,7	60,8	64,5	69,0	74,6	82,1	93,1	111,6	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	117,4	121,7	126,3	131,2	136,5	142,2	148,7	156,2	165,3	177,9	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,5	-3,0	-5,0	-7,7	-12,0	-19,4	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,9	4,4	3,9	3,3	2,5	1,5	0,2	-1,5	-4,2	-8,9	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,5	9,8	10,2	10,6	11,2	11,9	13,0	14,5	16,9	21,2	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,6	14,2	14,9	15,7	16,6	17,8	19,2	21,3	24,3	29,5	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	19,8	21,8	23,9	26,2	28,5	31,1	33,7	36,5	39,5	42,7	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	92,9	96,3	99,8	103,6	107,6	111,8	116,4	121,1	126,2	131,6	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	-3,4	-4,0	-4,7	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-24,51	-22,72	-20,64	-18,35	-15,90	-13,43	-11,12	-9,37	-9,21	-14,44	-65,03	—
	DMA	35,54	30,56	25,15	20,72	18,05	15,62	16,02	20,05	29,34	47,03	115,74	—
	PDMA	62,46	51,71	40,50	28,92	18,04	11,48	21,32	39,12	65,19	105,19	191,82	—
CPI													
CPI	DM	-40,75	-38,75	-36,25	-33,43	-30,47	-27,74	-25,75	-25,65	-30,11	-48,82	-178,33	—
	DMA	63,80	54,60	44,51	36,35	32,49	28,81	30,66	39,85	56,33	88,22	233,56	—
	PDMA	88,35	72,00	55,29	39,01	25,20	11,84	21,99	40,08	61,87	89,65	155,08	—
SPI													
SPI	DM	-12,60	-10,96	-9,19	-7,29	-5,22	-2,93	-0,39	2,57	6,11	10,77	18,05	—
	DMA	14,81	12,93	10,95	9,25	7,46	5,95	5,29	5,53	9,55	16,83	29,34	—
	PDMA	43,48	36,83	29,65	21,52	12,80	11,22	20,82	38,42	67,62	116,58	218,77	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-28,15	-27,79	-27,06	-26,14	-25,25	-24,80	-25,36	-28,21	-36,22	-59,59	-196,37	—
	DMA	48,99	41,67	33,56	27,11	25,03	22,86	25,38	34,32	46,77	71,39	204,22	—
	PDMA	44,87	35,17	25,64	17,49	12,40	0,62	1,17	1,65	-5,74	-26,93	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-24,21	-22,84	-21,16	-19,23	-17,11	-14,93	-12,93	-11,50	-11,76	-17,89	-74,66	—
	DMA	36,07	31,21	25,87	21,64	19,44	17,41	17,35	20,97	30,43	49,14	124,89	—
	PDMA	32,39	27,20	21,71	16,23	12,30	9,16	11,71	18,77	30,39	48,30	91,32	—
CPI													
CPI	DM	-36,08	-35,52	-34,43	-32,99	-31,42	-30,09	-29,61	-31,20	-37,82	-60,13	-204,32	—
	DMA	61,44	52,96	43,51	36,21	33,64	31,27	32,45	40,84	57,26	90,61	248,76	—
	PDMA	38,92	31,87	24,49	17,71	13,72	10,22	15,65	24,15	36,73	55,75	116,19	—
SPI													
SPI	DM	-15,08	-13,09	-10,95	-8,64	-6,11	-3,28	-0,09	3,66	8,29	14,60	25,08	—
	DMA	16,55	14,48	12,29	10,44	8,52	6,75	5,74	5,68	9,78	17,25	29,60	—
	PDMA	27,37	23,62	19,57	15,08	11,21	8,34	8,67	14,64	25,51	42,57	72,19	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-21,00	-22,43	-23,48	-24,35	-25,31	-26,81	-29,52	-34,86	-46,11	-74,73	-229,40	—
	DMA	44,89	38,48	31,22	25,77	25,12	24,52	26,71	35,16	47,48	73,36	219,16	—
	PDMA	11,55	8,25	4,92	2,63	2,50	1,88	6,99	9,51	11,22	13,18	44,00	—

Tabela 8.207: Constantes de acoplamento B971TPSS com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	374,5	392,1	410,9	430,9	452,3	474,9	499,0	524,5	551,5	580,0	610,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,3	18,4	17,4	16,2	15,0	13,6	12,1	10,5	8,7	6,9	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-62,9	-65,1	-67,5	-70,1	-72,8	-75,8	-78,9	-82,2	-85,7	-89,4	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,0	-2,1	-3,2	-4,5	-5,8	-7,3	-8,8	-10,5	-12,2	-14,2	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,3	37,3	38,4	39,6	40,8	42,1	43,5	45,0	46,6	48,3	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-4,9	-5,9	-7,0	-8,2	-9,6	-11,0	-12,5	-14,2	-16,0	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	138,8	145,7	153,1	161,1	169,5	178,6	188,2	198,4	209,2	220,6	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1663,2	-1656,7	-1644,8	-1628,1	-1607,4	-1583,4	-1556,8	-1528,1	-1498,0	-1466,9	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-161,0	-147,4	-133,3	-119,1	-104,6	-90,0	-75,2	-60,5	-45,8	-31,1	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,5	-54,3	-37,8	-21,3	-4,7	11,9	28,6	45,5	62,4	79,3	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-203,8	-238,3	-274,7	-313,9	-357,4	-408,1	-471,2	-557,8	-696,2	-988,0	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	100,1	103,4	106,9	110,7	114,7	119,0	123,6	128,4	133,6	139,1	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,9	-8,9	-10,0	-11,2	-12,4	-13,8	-15,2	-16,8	-18,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	167,9	171,2	175,0	179,3	184,4	190,6	198,1	207,6	220,0	237,1	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	202,2	209,2	216,7	224,7	233,2	242,4	252,5	263,8	276,8	292,6	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,6	53,5	54,1	54,5	54,6	54,2	53,1	51,1	47,6	41,6	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,5	8,0	8,7	9,5	10,6	12,0	13,8	16,2	19,6	24,4	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,1	55,5	58,4	61,6	65,4	69,9	75,7	83,5	94,8	113,6	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,7	129,4	134,3	139,5	145,2	151,5	158,4	166,4	176,1	189,3	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,1	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,3	-5,3	-8,2	-12,6	-20,2	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,8	5,3	4,6	3,8	2,8	1,5	-0,2	-2,9	-7,6	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,1	10,4	10,8	11,3	11,9	12,7	13,7	15,2	17,6	21,8	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	15,1	15,7	16,5	17,3	18,2	19,4	20,9	23,0	26,1	31,2	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,4	22,4	24,5	26,8	29,2	31,7	34,4	37,2	40,3	43,5	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	98,9	102,6	106,4	110,5	114,8	119,4	124,3	129,5	135,0	140,9	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	-3,5	-4,1	-4,9	-5,7	-6,5	-7,5	-8,5	-4,7
Total	DM	-22,68	-20,83	-18,67	-16,31	-13,80	-11,24	-8,83	-6,93	-6,54	-11,31	-57,72	—
	DMA	34,15	29,10	23,57	18,91	16,18	13,73	14,49	21,55	31,86	49,47	113,73	—
	PDMA	63,51	52,59	41,20	29,38	18,37	10,20	19,47	39,60	66,66	107,15	191,26	—
CPI	DM	-39,85	-37,84	-35,30	-32,46	-29,47	-26,73	-24,67	-24,42	-28,60	-46,49	-166,33	—
	DMA	63,26	54,04	43,88	35,35	31,42	27,60	29,05	40,76	57,85	89,05	223,67	—
	PDMA	87,54	71,24	54,47	38,08	24,20	10,07	20,96	40,76	63,06	90,57	152,58	—
SPI	DM	-10,09	-8,35	-6,47	-4,47	-2,30	0,11	2,79	5,90	9,64	14,49	21,93	—
	DMA	12,79	10,82	8,67	6,85	5,01	3,55	3,81	7,46	12,80	20,43	33,11	—
	PDMA	45,88	38,91	31,47	23,00	14,10	10,29	18,37	38,74	69,29	119,31	219,63	—
ΔCS	DM	-29,76	-29,48	-28,83	-28,00	-27,17	-26,84	-27,47	-30,32	-38,24	-60,98	-188,25	—
	DMA	50,47	43,22	35,21	28,50	26,41	24,05	25,25	33,30	45,05	68,62	190,56	—
	PDMA	41,66	32,33	22,99	15,08	10,10	-0,22	2,60	2,02	-6,23	-28,74	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-22,29	-20,84	-19,07	-17,05	-14,83	-12,56	-10,41	-8,80	-8,78	-14,38	-66,43	—
	DMA	34,51	29,57	24,09	19,61	17,34	15,32	15,63	22,67	33,29	51,92	122,68	—
	PDMA	31,29	26,04	20,35	14,72	10,96	8,05	11,30	20,69	33,30	51,53	93,09	—
CPI	DM	-35,28	-34,69	-33,55	-32,08	-30,45	-29,09	-28,50	-29,91	-36,20	-57,57	-191,09	—
	DMA	61,04	52,51	42,99	35,26	32,59	30,05	30,60	41,79	58,90	91,53	237,91	—
	PDMA	39,29	32,16	24,71	17,69	13,49	9,01	13,99	24,50	37,77	56,76	113,64	—
SPI	DM	-12,29	-10,19	-7,92	-5,48	-2,82	0,16	3,51	7,45	12,31	18,85	29,46	—
	DMA	14,11	11,93	9,55	7,58	5,61	3,99	4,11	7,97	13,58	21,45	34,05	—
	PDMA	25,14	21,33	16,99	12,43	9,01	7,32	9,22	17,75	29,87	47,51	77,27	—
ΔCS	DM	-22,99	-24,50	-25,63	-26,60	-27,63	-29,25	-32,01	-37,36	-48,51	-76,42	-220,55	—
	DMA	46,93	40,58	33,44	27,68	26,98	26,06	26,49	33,82	45,32	70,08	203,86	—
	PDMA	14,16	10,83	7,72	5,26	4,48	1,69	4,77	6,75	7,90	9,25	36,37	—

Tabela 8.208: Valores de PDMA total obtidos para troca B971 com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
B971B95	64,8	54,9	44,6	34,4	24,0	13,6	12,8	23,1	40,1	62,0	92,6
B971B98	56,8	47,1	37,1	26,6	16,5	12,7	22,3	39,3	60,5	88,7	132,9
B971B971	57,6	47,9	38,1	27,3	17,4	13,6	20,8	36,1	55,9	81,9	119,3
B971B972	57,5	47,9	38,1	28,0	24,7	25,4	28,8	39,2	55,9	80,8	119,3
B971LYP	58,2	48,1	37,5	26,0	15,1	12,1	23,5	42,2	66,0	99,3	161,6
B971P86	63,4	53,2	42,7	31,4	20,3	11,6	17,8	33,5	56,2	90,4	156,5
B971PBE	62,2	51,9	40,6	28,9	17,9	13,9	21,3	39,4	65,4	106,3	195,8
B971PW91	61,8	51,3	40,3	28,5	17,4	13,5	21,5	39,9	66,1	107,1	197,7
B971TPSS	63,1	52,3	41,1	28,9	17,8	11,4	20,1	40,2	67,8	109,3	197,2

8.4.1.3 Troca B972

Tabela 8.209: Constantes de acoplamento B972B95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	381,5	401,6	423,0	445,7	469,9	495,5	522,7	551,5	581,8	613,8	647,4	500
CO	$^1J_{CO}$	21,6	20,4	19,0	17,5	15,9	14,0	12,0	9,9	7,6	5,1	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-61,3	-63,9	-66,6	-69,6	-72,7	-76,0	-79,6	-83,4	-87,4	-91,6	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,3	-2,3	-3,3	-4,4	-5,6	-6,9	-8,2	-9,7	-11,2	-12,9	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	33,6	34,8	36,0	37,4	38,8	40,3	42,0	43,7	45,5	47,5	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,8	-4,6	-5,5	-6,4	-7,5	-8,6	-9,8	-11,1	-12,6	-14,1	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,6	142,8	149,4	156,4	163,8	171,6	179,9	188,5	197,6	207,1	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1539,8	-1537,8	-1530,9	-1519,7	-1504,8	-1486,9	-1466,6	-1444,6	-1421,3	-1397,2	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-174,4	-159,4	-143,9	-127,9	-111,5	-94,8	-78,0	-61,1	-44,2	-27,3	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-91,0	-72,9	-54,4	-35,6	-16,6	2,5	21,8	41,2	60,7	80,2	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-200,9	-231,8	-263,8	-297,5	-333,7	-374,2	-421,6	-481,6	-566,0	-707,7	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	86,0	89,7	93,6	97,7	102,1	106,8	111,8	117,1	122,7	128,6	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-6,4	-7,2	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,9	-13,1	-14,3	-15,6	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	158,4	162,3	166,5	171,2	176,4	182,4	189,4	197,6	207,6	219,8	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	179,2	186,4	194,0	201,9	210,3	219,3	228,9	239,2	250,5	263,0	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,3	50,4	51,4	52,2	52,9	53,3	53,3	52,9	51,8	49,8	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,6	7,0	7,4	8,0	8,7	9,5	10,6	11,9	13,6	15,9	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	44,8	47,5	50,5	53,8	57,4	61,6	66,4	72,1	79,1	88,2	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	109,6	114,5	119,6	125,0	130,8	136,9	143,6	150,8	158,8	167,9	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,6	2,1	1,5	0,7	0,0	-1,1	-2,4	-4,0	-6,1	-9,1	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,0	4,7	4,4	4,0	3,5	2,9	2,2	1,4	0,2	-1,3	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,1	9,4	9,7	10,1	10,5	11,0	11,6	12,4	13,4	14,8	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,0	13,5	14,1	14,8	15,5	16,4	17,4	18,5	20,0	22,0	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	15,3	17,6	20,0	22,6	25,3	28,2	31,3	34,6	38,1	41,8	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	85,4	89,3	93,4	97,8	102,5	107,4	112,6	118,1	124,0	130,2	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,9	-1,3	-1,8	-2,2	-2,8	-3,3	-3,9	-4,6	-5,3	-6,1	-6,9	-4,7
Total	DM	-22,58	-20,47	-18,07	-15,40	-12,53	-9,54	-6,52	-3,72	-1,55	-1,24	-8,15	—
	DMA	34,38	29,32	23,90	18,02	14,42	11,24	10,90	14,05	21,54	33,75	54,82	—
	PDMA	72,67	62,07	51,01	39,02	27,61	15,97	10,03	21,25	38,50	60,85	90,89	—
CPI	DM	-30,92	-28,55	-25,63	-22,27	-18,63	-14,95	-11,48	-8,87	-8,22	-12,55	-34,85	—
	DMA	55,54	46,53	36,70	26,04	20,75	16,04	18,12	27,22	44,24	67,47	109,09	—
	PDMA	102,44	85,02	66,98	48,33	31,59	16,19	13,67	33,18	55,83	80,77	112,26	—
SPI	DM	-16,47	-14,55	-12,52	-10,36	-8,05	-5,57	-2,88	0,05	3,33	7,05	11,44	—
	DMA	18,86	16,71	14,52	12,13	9,77	7,72	5,61	4,39	4,89	9,03	15,03	—
	PDMA	50,84	45,24	39,29	32,18	24,69	15,80	7,36	12,50	25,79	46,23	75,22	—
ΔCS	DM	-14,44	-14,00	-13,11	-11,91	-10,57	-9,37	-8,60	-8,93	-11,55	-19,60	-46,29	—
	DMA	36,68	29,82	22,18	13,90	10,98	8,32	12,50	22,83	39,34	58,45	94,06	—
	PDMA	51,60	39,78	27,70	16,15	6,90	0,38	6,31	20,68	30,04	34,54	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-21,26	-19,62	-17,67	-15,42	-12,94	-10,32	-7,66	-5,24	-3,49	-3,79	-12,16	—
	DMA	33,92	29,03	23,74	17,96	14,77	12,08	12,03	14,63	22,11	34,87	57,56	—
	PDMA	37,26	32,00	26,51	20,61	15,44	10,94	9,18	11,83	19,60	30,94	47,30	—
CPI	DM	-23,41	-22,61	-21,25	-19,44	-17,33	-15,19	-13,31	-12,38	-13,61	-20,32	-46,81	—
	DMA	50,49	42,39	33,43	23,58	19,67	16,39	19,25	27,32	44,09	67,70	111,53	—
	PDMA	42,02	34,93	27,42	19,43	13,68	9,47	10,50	19,03	30,94	45,38	67,02	—
SPI	DM	-19,60	-17,32	-14,91	-12,32	-9,57	-6,58	-3,32	0,25	4,29	8,93	14,49	—
	DMA	21,17	18,75	16,29	13,63	11,00	8,76	6,47	4,87	5,20	9,62	16,05	—
	PDMA	33,61	29,75	25,81	21,51	16,78	12,06	8,16	6,29	10,87	19,83	32,14	—
ΔCS	DM	-3,81	-5,29	-6,34	-7,12	-7,76	-8,61	-9,99	-12,63	-17,90	-29,25	-61,30	—
	DMA	29,32	23,64	17,14	9,95	8,67	7,63	12,78	22,45	38,89	58,08	95,48	—
	PDMA	8,41	5,17	1,61	-2,08	-3,10	-2,59	2,34	12,75	20,07	25,55	34,88	—

Tabela 8.210: Constantes de acoplamento B972B971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	387,3	406,8	427,6	449,6	473,0	497,8	524,0	551,7	580,9	611,6	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,2	18,8	17,3	15,6	13,8	11,7	9,5	7,1	4,5	1,6	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-61,8	-64,4	-67,1	-70,0	-73,0	-76,3	-79,7	-83,4	-87,3	-91,4	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,4	-2,3	-3,3	-4,4	-5,6	-6,8	-8,1	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	34,4	35,6	36,9	38,2	39,7	41,3	42,9	44,7	46,5	48,5	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-4,7	-5,6	-6,6	-7,7	-8,8	-10,1	-11,4	-12,8	-14,4	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,0	166,5	173,4	180,6	188,1	196,0	204,2	212,8	221,8	231,1	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1584,3	-1580,1	-1570,8	-1557,2	-1539,9	-1519,7	-1497,1	-1472,9	-1447,4	-1421,2	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-165,1	-148,7	-131,9	-114,7	-97,2	-79,5	-61,8	-44,2	-26,5	-9,1	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,2	-61,1	-41,7	-22,1	-2,3	17,5	37,4	57,3	77,2	97,0	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-197,5	-228,5	-260,8	-295,1	-332,4	-374,6	-425,1	-490,5	-585,8	-755,5	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	92,6	96,6	100,8	105,2	110,0	115,0	120,3	126,0	132,0	138,3	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,3	-7,1	-8,0	-8,9	-9,9	-10,9	-12,1	-13,3	-14,5	-15,9	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	174,0	178,8	184,1	190,0	196,7	204,4	213,4	224,2	237,3	253,8	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	188,2	195,8	203,8	212,3	221,3	231,0	241,3	252,6	265,1	279,2	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,0	49,9	50,7	51,3	51,7	51,7	51,3	50,3	48,4	45,2	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,4	6,8	7,3	7,9	8,7	9,6	10,8	12,4	14,3	17,0	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	54,9	58,2	61,9	65,9	70,5	75,8	81,9	89,4	98,9	111,7	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,3	121,5	126,9	132,7	138,9	145,6	152,8	160,8	169,7	180,1	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,4	0,7	-0,1	-1,1	-2,4	-4,0	-6,0	-8,7	-12,7	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,5	4,1	3,7	3,2	2,6	1,8	0,8	-0,4	-2,3	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,0	9,3	9,7	10,0	10,5	11,0	11,7	12,5	13,7	15,4	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,9	13,5	14,1	14,7	15,5	16,4	17,4	18,7	20,3	22,6	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	19,8	22,3	25,1	28,0	31,1	34,4	37,9	41,7	45,7	49,9	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	91,9	96,1	100,6	105,3	110,2	115,5	121,1	127,0	133,3	140,0	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-1,5	-1,9	-2,5	-3,0	-3,7	-4,3	-5,0	-5,8	-6,6	-7,5	-4,7
Total	DM	-20,11	-17,73	-15,04	-12,14	-9,01	-5,78	-2,60	0,34	2,48	2,17	-8,92	—
	DMA	31,94	26,88	21,50	15,80	12,42	10,63	13,78	19,16	27,95	41,86	68,67	—
	PDMA	65,28	54,14	42,43	30,46	19,15	9,34	18,73	33,90	54,57	81,06	118,03	—
CPI	DM	-30,29	-27,55	-24,26	-20,64	-16,76	-12,94	-9,53	-7,20	-7,35	-14,12	-47,66	—
	DMA	55,15	45,73	35,46	24,53	18,80	16,65	25,07	36,16	50,42	75,19	128,26	—
	PDMA	92,82	74,64	55,81	37,23	21,08	10,17	26,92	48,15	71,27	97,38	132,83	—
SPI	DM	-12,64	-10,53	-8,28	-5,91	-3,32	-0,54	2,48	5,87	9,68	14,11	19,49	—
	DMA	14,92	13,05	11,27	9,40	7,75	6,22	5,49	6,69	11,48	17,41	24,97	—
	PDMA	45,09	39,10	32,62	25,51	17,73	8,73	12,72	23,45	42,32	69,10	107,17	—
ΔCS	DM	-17,65	-17,01	-15,98	-14,73	-13,44	-12,40	-12,01	-13,07	-17,03	-28,22	-67,15	—
	DMA	40,23	32,67	24,20	15,13	11,05	10,43	19,58	29,47	38,94	57,78	103,30	—
	PDMA	47,73	35,54	23,19	11,72	3,35	1,44	14,19	24,70	28,94	28,28	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-18,89	-17,00	-14,75	-12,27	-9,53	-6,66	-3,82	-1,23	0,49	-0,47	-13,48	—
	DMA	31,67	26,81	21,63	16,09	13,20	11,90	14,51	19,60	28,50	43,10	72,17	—
	PDMA	33,51	28,10	22,51	16,87	12,58	9,26	10,83	16,70	27,14	40,51	60,22	—
CPI	DM	-23,80	-22,69	-21,02	-18,99	-16,71	-14,48	-12,72	-12,15	-14,30	-23,73	-62,61	—
	DMA	51,14	42,69	33,34	23,27	18,95	18,06	25,34	35,55	49,24	74,51	130,91	—
	PDMA	38,63	31,37	23,59	16,22	11,66	9,52	14,67	24,76	36,93	52,45	78,24	—
SPI	DM	-15,12	-12,62	-9,93	-7,10	-4,00	-0,65	3,02	7,16	11,86	17,42	24,32	—
	DMA	16,68	14,60	12,62	10,56	8,77	7,15	6,18	7,33	12,55	18,95	26,98	—
	PDMA	29,57	25,58	21,68	17,38	13,28	9,07	7,88	10,50	19,61	31,33	46,35	—
ΔCS	DM	-8,68	-10,07	-11,09	-11,89	-12,71	-13,83	-15,74	-19,31	-26,16	-41,15	-86,93	—
	DMA	34,46	28,09	20,72	12,71	10,18	10,91	19,16	28,22	36,69	55,56	103,93	—
	PDMA	9,07	5,79	1,91	-1,16	-1,63	0,45	6,79	14,26	17,31	21,11	31,89	—

Tabela 8.211: Constantes de acoplamento B972B972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	420,6	441,5	463,7	487,2	512,0	538,2	565,8	595,0	625,6	657,8	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	16,9	15,3	13,5	11,5	9,2	6,8	4,2	1,4	-1,6	-4,8	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-66,8	-69,6	-72,5	-75,6	-78,9	-82,3	-86,0	-90,0	-94,1	-98,5	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,2	-2,2	-3,2	-4,3	-5,5	-6,7	-8,0	-9,5	-11,0	-12,6	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	36,3	37,5	38,9	40,3	41,8	43,4	45,1	47,0	48,9	50,9	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,1	-8,2	-9,4	-10,7	-12,1	-13,6	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	152,4	159,5	167,0	175,0	183,4	192,2	201,4	211,1	221,2	231,6	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1626,4	-1621,0	-1610,4	-1595,3	-1576,6	-1555,0	-1531,2	-1505,7	-1479,1	-1452,1	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-151,4	-134,7	-117,6	-100,3	-82,9	-65,4	-48,0	-30,7	-13,4	3,5	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-64,0	-44,6	-25,1	-5,4	14,1	33,8	53,5	73,1	92,7	112,2	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-187,3	-217,9	-249,8	-283,7	-320,6	-362,5	-412,9	-478,9	-577,4	-761,7	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	94,6	98,6	102,8	107,2	111,9	116,9	122,2	127,8	133,7	139,9	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-5,4	-6,1	-6,9	-7,8	-8,7	-9,7	-10,7	-11,9	-13,0	-14,3	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	172,7	177,5	182,8	188,8	195,6	203,4	212,5	223,4	236,6	253,1	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	189,9	197,4	205,4	213,7	222,6	232,0	242,2	253,1	265,2	278,6	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,1	50,0	50,8	51,4	51,8	51,9	51,5	50,6	48,9	46,1	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,1	6,5	6,9	7,4	8,1	8,9	9,9	11,2	12,9	15,1	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	54,6	58,0	61,7	66,0	70,8	76,3	82,9	91,0	101,4	115,7	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	117,8	122,9	128,4	134,1	140,3	146,9	154,1	161,9	170,8	181,1	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,4	-1,7	-3,2	-5,2	-8,0	-11,9	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,6	5,4	5,1	4,7	4,2	3,7	3,0	2,2	1,1	-0,5	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,8	12,8	14,3	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	12,8	13,3	13,8	14,4	15,1	15,9	16,8	17,9	19,4	21,4	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	21,9	24,5	27,3	30,2	33,3	36,6	40,1	43,8	47,8	52,0	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	93,2	97,4	101,8	106,4	111,4	116,6	122,1	127,9	134,1	140,6	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,5	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,7	-6,5	-4,7
Total													
Total	DM	-19,05	-16,53	-13,71	-10,65	-7,40	-4,05	-0,75	2,25	4,37	3,58	-12,05	—
	DMA	31,30	26,09	20,73	14,98	11,64	14,03	17,62	23,42	32,18	45,12	75,85	—
	PDMA	62,60	51,97	41,18	29,79	18,93	19,95	25,17	36,94	55,71	81,27	118,82	—
CPI													
CPI	DM	-28,65	-25,57	-21,95	-17,95	-13,82	-9,69	-6,04	-3,53	-3,75	-11,65	-56,05	—
	DMA	53,99	44,41	34,12	23,03	17,29	24,53	34,22	45,80	60,47	83,11	145,55	—
	PDMA	79,88	62,30	45,12	27,62	11,80	24,58	41,76	63,46	86,79	113,04	152,13	—
SPI													
SPI	DM	-12,01	-9,90	-7,66	-5,29	-2,69	0,08	3,12	6,48	10,31	14,76	20,21	—
	DMA	14,67	12,66	10,91	9,07	7,49	6,33	5,44	7,01	11,43	17,27	24,75	—
	PDMA	49,93	44,39	38,30	31,39	24,15	16,55	13,01	17,49	32,91	57,98	94,39	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-16,63	-15,67	-14,29	-12,67	-11,12	-9,77	-9,16	-10,01	-14,06	-26,41	-76,27	—
	DMA	39,32	31,75	23,20	13,95	9,80	18,19	28,78	38,79	49,04	65,84	120,80	—
	PDMA	29,95	17,91	6,82	-3,77	-12,35	8,03	28,74	45,98	53,88	55,06	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-18,46	-16,42	-14,03	-11,38	-8,50	-5,49	-2,52	0,14	1,85	0,36	-17,79	—
	DMA	31,59	26,58	21,41	15,81	12,95	14,95	18,17	23,83	32,70	46,25	79,77	—
	PDMA	32,57	27,64	22,94	17,98	13,92	13,18	14,52	19,66	28,04	41,20	62,25	—
CPI													
CPI	DM	-23,61	-22,17	-20,14	-17,71	-15,11	-12,54	-10,49	-9,69	-11,89	-22,54	-73,32	—
	DMA	51,49	42,89	33,52	23,29	18,93	25,10	33,79	44,57	58,75	81,70	148,44	—
	PDMA	35,21	28,80	22,90	16,78	12,38	14,50	20,27	31,08	43,67	59,54	89,61	—
SPI													
SPI	DM	-14,50	-12,00	-9,34	-6,51	-3,41	-0,07	3,61	7,70	12,42	17,98	24,93	—
	DMA	16,28	14,03	12,09	10,06	8,35	7,15	6,16	7,87	12,67	18,98	26,95	—
	PDMA	30,55	26,75	22,97	18,90	15,10	12,17	10,11	10,87	16,02	27,09	41,20	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-9,11	-10,17	-10,80	-11,20	-11,70	-12,47	-14,10	-17,39	-24,31	-40,52	-98,25	—
	DMA	35,21	28,86	21,43	13,23	10,58	17,95	27,63	36,70	46,08	62,72	121,49	—
	PDMA	4,66	2,05	-0,07	-2,12	-2,72	2,33	10,16	20,21	27,65	32,45	48,41	—

Tabela 8.212: Constantes de acoplamento B972B98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	377,2	396,6	417,2	439,1	462,4	487,1	513,3	540,9	570,1	600,8	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	18,6	17,1	15,4	13,6	11,5	9,3	6,9	4,3	1,5	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-61,4	-64,0	-66,7	-69,6	-72,6	-75,9	-79,4	-83,1	-87,0	-91,2	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,5	-2,5	-3,5	-4,6	-5,8	-7,0	-8,3	-9,7	-11,3	-12,9	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	34,8	36,1	37,4	38,8	40,3	41,9	43,6	45,4	47,3	49,3	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,1	-5,0	-6,0	-7,0	-8,1	-9,3	-10,5	-11,9	-13,4	-15,0	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	166,1	172,8	179,8	187,1	194,8	202,8	211,1	219,8	228,8	238,2	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1599,1	-1594,3	-1584,3	-1570,1	-1552,3	-1531,5	-1508,5	-1483,7	-1457,9	-1431,3	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-165,0	-148,9	-132,3	-115,2	-98,0	-80,5	-63,0	-45,5	-28,1	-10,8	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,8	-62,0	-42,8	-23,5	-4,0	15,6	35,3	54,9	74,6	94,2	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-203,9	-235,7	-269,1	-304,7	-343,8	-388,6	-443,1	-515,3	-624,4	-831,1	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	95,3	99,4	103,7	108,3	113,2	118,4	124,0	129,8	136,0	142,6	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-7,6	-8,5	-9,4	-10,4	-11,5	-12,7	-13,9	-15,2	-16,6	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	176,9	181,8	187,2	193,3	200,2	208,1	217,4	228,6	242,3	259,5	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	192,2	200,0	208,2	216,9	226,2	236,1	246,8	258,5	271,5	286,2	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,5	50,4	51,2	51,8	52,2	52,2	51,7	50,5	48,4	44,9	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,5	6,9	7,5	8,1	8,9	9,9	11,2	12,8	15,0	17,8	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	56,8	60,2	64,0	68,2	73,0	78,5	84,9	92,9	103,1	117,1	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	124,4	130,1	136,0	142,4	149,3	156,8	165,1	174,5	185,6	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,6	-0,2	-1,3	-2,6	-4,3	-6,5	-9,4	-13,8	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,5	4,1	3,6	3,1	2,4	1,6	0,5	-0,8	-2,9	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,5	9,8	10,2	10,7	11,2	11,9	12,9	14,2	16,1	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,1	13,7	14,3	15,0	15,8	16,7	17,8	19,2	21,0	23,6	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,9	23,5	26,4	29,5	32,7	36,1	39,8	43,7	47,9	52,3	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	94,5	98,8	103,4	108,3	113,4	118,9	124,6	130,8	137,2	144,1	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,6	-2,1	-2,6	-3,2	-3,8	-4,5	-5,3	-6,1	-6,9	-7,9	-4,7
Total	DM	-20,37	-18,00	-15,32	-12,40	-9,29	-6,12	-3,01	-0,26	1,45	-0,14	-19,10	—
	DMA	31,82	26,77	21,33	15,94	13,62	11,85	14,40	21,46	30,92	45,66	80,95	—
	PDMA	64,24	52,96	41,16	29,35	18,48	8,72	19,46	37,00	58,80	86,95	129,89	—
CPI	DM	-32,61	-29,93	-26,74	-23,20	-19,49	-15,89	-12,83	-11,11	-12,54	-22,65	-75,31	—
	DMA	56,26	46,75	36,35	26,16	22,69	20,25	27,14	38,84	54,30	80,55	152,76	—
	PDMA	92,44	74,25	55,43	37,48	22,53	9,24	26,90	48,46	72,08	99,01	140,82	—
SPI	DM	-11,40	-9,26	-6,95	-4,47	-1,81	1,05	4,19	7,70	11,70	16,37	22,12	—
	DMA	13,89	12,13	10,31	8,45	6,97	5,68	5,06	8,71	13,78	20,07	28,29	—
	PDMA	43,56	37,34	30,70	23,38	15,50	8,34	14,00	28,59	49,06	78,11	121,88	—
ΔCS	DM	-21,21	-20,67	-19,79	-18,73	-17,68	-16,94	-17,02	-18,81	-24,24	-39,02	-97,43	—
	DMA	42,37	34,62	26,05	17,72	15,72	14,57	22,08	30,12	40,52	60,47	124,47	—
	PDMA	48,88	36,92	24,74	14,10	7,03	0,89	12,90	19,87	23,02	20,90	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,17	-17,26	-15,01	-12,49	-9,76	-6,93	-4,17	-1,77	-0,52	-2,88	-24,71	—
	DMA	31,50	26,66	21,39	16,20	14,49	13,35	15,28	22,27	31,93	47,45	86,04	—
	PDMA	32,15	26,68	20,94	15,57	11,87	9,13	11,34	19,43	30,65	44,86	68,62	—
CPI	DM	-26,29	-25,22	-23,63	-21,67	-19,54	-17,54	-16,14	-16,21	-19,75	-32,84	-92,72	—
	DMA	52,31	43,72	34,21	24,93	23,06	22,22	27,82	38,73	53,77	80,68	158,16	—
	PDMA	37,82	30,35	22,44	15,57	12,12	9,76	16,05	26,71	39,55	56,11	89,03	—
SPI	DM	-13,68	-11,14	-8,38	-5,43	-2,24	1,22	5,04	9,34	14,28	20,16	27,60	—
	DMA	15,50	13,54	11,52	9,48	7,90	6,53	5,64	9,60	15,12	21,88	30,57	—
	PDMA	27,79	23,86	19,78	15,58	11,68	8,65	7,72	13,83	23,81	36,20	52,91	—
ΔCS	DM	-12,61	-14,08	-15,25	-16,24	-17,30	-18,76	-21,18	-25,55	-34,03	-53,00	-120,32	—
	DMA	36,81	30,18	22,69	15,45	15,16	15,69	22,18	29,13	38,65	58,80	127,59	—
	PDMA	10,02	6,48	2,66	-0,01	0,43	1,11	8,33	12,88	15,75	19,91	36,12	—

Tabela 8.213: Constantes de acoplamento B972LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	375,4	396,7	419,4	443,6	469,5	497,1	526,5	557,6	590,7	625,6	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	20,0	18,6	17,0	15,3	13,4	11,3	9,0	6,6	3,9	1,1	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-63,0	-65,7	-68,7	-71,9	-75,3	-78,9	-82,8	-86,9	-91,4	-96,1	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,4	-3,4	-4,6	-5,8	-7,1	-8,5	-10,0	-11,7	-13,4	-15,3	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,6	36,9	38,3	39,8	41,4	43,1	44,9	46,8	48,9	51,1	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,9	-5,9	-6,9	-8,0	-9,2	-10,4	-11,8	-13,3	-15,0	-16,7	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	147,9	155,0	162,5	170,5	178,9	187,8	197,2	207,0	217,3	228,0	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1626,8	-1622,6	-1613,2	-1599,5	-1582,1	-1561,8	-1539,1	-1514,8	-1489,3	-1463,3	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-169,6	-153,5	-136,9	-119,9	-102,8	-85,5	-68,1	-50,8	-33,5	-16,4	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-82,9	-63,8	-44,5	-25,0	-5,3	14,3	34,2	54,1	74,0	93,9	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-205,6	-238,4	-273,1	-310,5	-352,1	-400,4	-460,4	-542,4	-672,5	-945,1	-1225,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	94,0	98,2	102,6	107,3	112,2	117,5	123,2	129,2	135,5	142,2	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,7	-8,6	-9,5	-10,5	-11,6	-12,7	-14,0	-15,3	-16,7	-18,2	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	167,0	171,4	176,3	181,8	188,1	195,4	204,2	214,8	228,1	245,3	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	195,1	203,2	211,8	220,9	230,6	241,0	252,3	264,7	278,6	294,5	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,4	52,3	53,2	53,8	54,1	53,9	53,3	51,9	49,3	45,1	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,2	7,7	8,3	9,1	10,0	11,2	12,8	14,8	17,4	21,0	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	50,6	53,8	57,3	61,3	65,9	71,2	77,6	85,7	96,5	112,4	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	118,9	124,3	130,1	136,2	142,8	149,9	157,7	166,5	176,5	188,9	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,3	1,6	0,9	0,0	-1,1	-2,5	-4,3	-6,8	-10,3	-15,7	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,0	4,7	4,3	3,8	3,2	2,5	1,5	0,2	-1,5	-4,4	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,0	10,3	10,7	11,2	11,7	12,4	13,3	14,5	16,2	18,9	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,1	14,8	15,5	16,3	17,2	18,3	19,6	21,3	23,6	27,0	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	18,4	20,9	23,7	26,6	29,6	32,9	36,4	40,1	44,0	48,2	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	93,1	97,4	102,1	107,0	112,2	117,7	123,6	129,8	136,5	143,5	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,0	-1,5	-2,0	-2,6	-3,2	-3,8	-4,5	-5,2	-6,0	-6,9	-7,8	-4,7
Total	DM	-23,19	-20,79	-18,09	-15,16	-12,08	-8,92	-5,87	-3,33	-2,22	-6,02	-48,74	—
	DMA	34,17	28,66	22,76	17,53	14,27	11,48	15,71	23,58	34,19	51,36	110,36	—
	PDMA	65,21	53,59	41,38	29,08	17,31	8,31	21,33	40,98	65,27	98,58	158,62	—
CPI	DM	-37,93	-35,18	-31,96	-28,39	-24,69	-21,16	-18,30	-17,15	-20,11	-35,83	-145,56	—
	DMA	60,69	50,87	40,11	30,54	25,76	21,47	31,34	44,74	62,73	93,86	220,20	—
	PDMA	93,08	74,47	55,13	37,13	21,20	9,88	29,78	52,81	77,79	107,46	169,20	—
SPI	DM	-12,38	-10,24	-7,92	-5,46	-2,83	0,05	3,24	6,81	10,91	15,85	22,27	—
	DMA	14,71	12,37	10,04	7,99	5,84	4,15	4,25	8,07	13,27	20,19	29,81	—
	PDMA	44,78	38,28	31,30	23,18	14,46	7,16	15,13	32,31	56,09	92,07	150,86	—
ΔCS	DM	-25,55	-24,94	-24,04	-22,93	-21,86	-21,22	-21,54	-23,96	-31,02	-51,67	-167,83	—
	DMA	45,98	38,50	30,07	22,54	19,92	17,33	27,08	36,66	49,46	73,67	190,39	—
	PDMA	48,30	36,19	23,83	13,95	6,74	2,72	14,64	20,49	21,69	15,39	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-22,28	-20,36	-18,10	-15,57	-12,87	-10,06	-7,36	-5,18	-4,56	-9,36	-57,89	—
	DMA	34,04	28,70	22,91	17,91	15,15	12,93	16,81	24,68	35,58	53,76	118,96	—
	PDMA	31,73	25,95	19,78	14,10	9,63	8,63	13,59	23,06	35,19	51,81	87,08	—
CPI	DM	-31,93	-30,82	-29,21	-27,23	-25,13	-23,21	-22,05	-22,78	-28,02	-47,30	-170,00	—
	DMA	56,97	48,08	38,17	29,59	26,31	23,55	32,55	45,30	63,10	95,36	232,34	—
	PDMA	37,12	29,38	20,98	14,18	9,78	10,40	19,96	32,02	46,23	65,61	120,26	—
SPI	DM	-14,85	-12,31	-9,55	-6,60	-3,43	0,05	3,95	8,35	13,48	19,82	28,35	—
	DMA	16,41	13,78	11,18	8,92	6,57	4,76	4,70	8,82	14,41	21,76	31,74	—
	PDMA	27,58	23,32	18,85	14,04	9,51	7,27	8,70	16,16	26,70	41,20	61,56	—
ΔCS	DM	-17,08	-18,51	-19,66	-20,63	-21,70	-23,26	-26,00	-31,13	-41,50	-67,12	-198,35	—
	DMA	40,56	34,30	26,99	20,67	19,74	18,79	27,85	36,48	48,69	73,60	200,60	—
	PDMA	9,54	6,06	2,12	0,14	0,28	3,13	11,26	15,86	19,54	24,41	58,70	—

Tabela 8.214: Constantes de acoplamento B972P86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	339,4	358,7	379,3	401,5	425,2	450,5	477,4	506,0	536,3	568,4	602,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,0	21,8	20,5	19,1	17,5	15,8	13,9	11,8	9,6	7,3	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-56,6	-59,1	-61,8	-64,6	-67,7	-71,0	-74,5	-78,3	-82,2	-86,5	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,8	-2,7	-3,8	-4,9	-6,0	-7,3	-8,6	-10,1	-11,6	-13,3	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	31,9	33,1	34,3	35,6	37,1	38,6	40,2	41,9	43,8	45,7	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,5	-5,4	-6,3	-7,3	-8,3	-9,5	-10,7	-12,0	-13,5	-15,1	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	127,3	133,8	140,7	148,0	155,8	164,0	172,7	181,9	191,5	201,6	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1623,0	-1618,3	-1608,5	-1594,3	-1576,4	-1555,5	-1532,3	-1507,4	-1481,3	-1454,6	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,3	-162,9	-147,1	-131,0	-114,5	-97,8	-81,0	-64,2	-47,4	-30,7	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-95,6	-77,3	-58,7	-39,9	-20,8	-1,7	17,5	36,8	56,1	75,5	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-215,1	-247,9	-282,7	-320,3	-362,3	-411,1	-471,8	-554,3	-683,7	-944,7	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	83,1	86,8	90,8	95,0	99,5	104,2	109,3	114,7	120,5	126,5	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,7	-8,5	-9,3	-10,3	-11,3	-12,3	-13,5	-14,7	-16,0	-17,4	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	157,1	161,0	165,4	170,3	176,0	182,6	190,5	200,1	212,3	228,2	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	175,8	183,2	191,0	199,2	208,1	217,6	227,9	239,3	252,2	267,1	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	48,8	49,8	50,7	51,3	51,7	51,6	49,8	47,3	43,1	35,9	50,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,7	8,3	9,1	10,0	11,3	12,9	14,9	17,7	21,5	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	44,6	47,5	50,7	54,3	58,4	63,2	69,2	76,8	87,2	103,4	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,2	111,1	116,3	121,8	127,8	134,3	141,5	149,5	159,0	171,1	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,9	1,3	0,6	-0,1	-1,2	-2,5	-4,2	-6,6	-10,2	-16,0	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,9	3,6	3,1	2,6	2,0	1,2	0,1	-1,2	-3,3	-6,8	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,1	9,4	9,8	10,3	10,9	11,6	12,5	13,8	15,8	19,1	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,9	13,6	14,3	15,1	16,0	17,1	18,5	20,3	22,9	26,9	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	14,2	16,6	19,0	21,7	24,4	27,4	30,6	33,9	37,5	41,4	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	82,7	86,6	90,8	95,2	99,9	104,9	110,2	115,9	121,9	128,2	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,7	-2,2	-2,7	-3,2	-3,8	-4,5	-5,2	-5,9	-6,7	-7,6	-4,7
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-29,22	-27,05	-24,61	-21,93	-19,09	-16,22	-13,47	-11,22	-10,33	-13,92	-45,89	—
	DMA	40,03	34,75	29,02	24,37	20,94	17,92	16,10	18,38	25,77	41,55	90,58	—
	PDMA	71,35	60,36	48,48	36,63	25,46	16,21	17,23	32,62	55,15	89,15	152,34	—
CPI													
	DM	-44,93	-42,46	-39,55	-36,27	-32,85	-29,63	-27,10	-26,25	-29,39	-44,30	-128,80	—
	DMA	67,85	58,43	48,09	40,53	35,86	31,39	29,21	35,33	50,72	80,21	182,13	—
	PDMA	107,33	89,72	71,41	53,84	36,97	20,36	14,26	32,86	54,57	82,73	134,69	—
SPI													
	DM	-17,71	-15,74	-13,65	-11,42	-9,01	-6,38	-3,47	-0,19	3,65	8,37	14,91	—
	DMA	19,63	17,38	15,04	12,53	9,99	8,03	6,48	5,95	7,48	13,21	23,45	—
	PDMA	44,97	38,84	31,65	24,01	17,01	13,16	19,40	32,44	55,58	93,85	165,29	—
ΔCS													
	DM	-27,22	-26,72	-25,89	-24,85	-23,84	-23,25	-23,63	-26,07	-33,04	-52,67	-143,71	—
	DMA	48,23	41,05	33,05	28,00	25,87	23,36	22,73	29,38	43,24	67,00	158,67	—
	PDMA	62,37	50,88	39,76	29,83	19,96	7,20	-5,14	0,41	-1,01	-11,12	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-28,48	-26,78	-24,78	-22,52	-20,07	-17,55	-15,16	-13,29	-12,88	-17,37	-53,57	—
	DMA	40,19	35,05	29,44	25,05	22,05	19,47	17,91	19,49	26,77	43,36	97,15	—
	PDMA	37,79	32,32	26,49	20,76	15,66	11,22	11,33	16,33	25,72	41,40	73,57	—
CPI													
	DM	-38,36	-37,48	-36,13	-34,41	-32,55	-30,92	-30,06	-31,06	-36,44	-54,78	-149,66	—
	DMA	63,58	55,04	45,53	39,09	35,87	32,86	31,88	36,68	51,68	82,18	192,36	—
	PDMA	44,33	37,16	29,42	22,63	16,80	11,26	14,02	21,61	32,63	50,67	94,96	—
SPI													
	DM	-20,88	-18,55	-16,05	-13,38	-10,46	-7,27	-3,69	0,38	5,25	11,40	20,35	—
	DMA	22,19	19,67	17,06	14,25	11,42	9,18	7,17	6,27	7,60	13,49	23,91	—
	PDMA	32,75	28,61	24,23	19,33	14,78	11,19	9,26	12,27	20,40	34,27	57,11	—
ΔCS													
	DM	-17,48	-18,93	-20,08	-21,03	-22,09	-23,65	-26,37	-31,44	-41,69	-66,18	-170,01	—
	DMA	41,39	35,37	28,47	24,84	24,45	23,68	24,71	30,41	44,08	68,69	168,45	—
	PDMA	11,58	8,55	5,19	3,30	2,02	0,08	4,76	9,34	12,22	16,41	37,85	—

Tabela 8.215: Constantes de acoplamento B972PBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	334,6	354,3	375,4	398,0	422,2	448,0	475,6	504,8	535,8	568,7	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	23,5	22,3	21,1	19,6	18,1	16,4	14,5	12,4	10,2	7,8	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-56,3	-58,8	-61,6	-64,5	-67,6	-71,0	-74,6	-78,4	-82,5	-86,8	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,1	-3,1	-4,1	-5,3	-6,5	-7,8	-9,2	-10,7	-12,3	-14,1	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	31,9	33,1	34,3	35,7	37,2	38,7	40,4	42,1	44,0	46,0	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,9	-5,7	-6,7	-7,7	-8,8	-10,0	-11,3	-12,7	-14,2	-15,9	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	126,6	133,3	140,5	148,0	156,1	164,6	173,6	183,1	193,0	203,4	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1627,5	-1622,1	-1611,6	-1596,8	-1578,3	-1556,9	-1533,1	-1507,7	-1481,2	-1453,9	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-179,4	-164,0	-148,1	-131,7	-115,1	-98,3	-81,3	-64,4	-47,4	-30,5	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-96,8	-78,4	-59,6	-40,7	-21,5	-2,2	17,1	36,6	56,1	75,7	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-215,0	-248,6	-284,2	-322,8	-365,9	-416,5	-480,0	-567,5	-707,9	-1005,1	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	83,4	87,2	91,2	95,5	100,1	105,0	110,2	115,7	121,6	127,8	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,1	-8,9	-9,8	-10,8	-11,9	-13,0	-14,2	-15,5	-16,8	-18,3	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	156,1	160,1	164,6	169,7	175,5	182,4	190,7	201,0	214,2	231,9	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	177,2	184,8	192,8	201,3	210,4	220,2	230,9	242,9	256,6	272,9	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,0	50,0	50,8	51,4	51,6	51,4	50,6	48,8	45,7	40,3	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,5	8,1	8,8	9,6	10,7	12,1	13,9	16,3	19,5	24,1	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	44,2	47,1	50,4	54,1	58,3	63,4	69,8	78,1	90,0	109,5	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	106,9	111,9	117,2	122,9	129,1	135,8	143,2	151,8	162,1	175,8	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,6	1,0	0,3	-0,6	-1,7	-3,2	-5,1	-7,9	-12,1	-19,6	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,7	3,3	2,8	2,2	1,5	0,6	-0,6	-2,3	-4,9	-9,4	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,2	9,6	10,1	10,6	11,2	12,1	13,2	14,7	17,2	21,5	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,3	13,9	14,7	15,5	16,6	17,8	19,4	21,5	24,6	29,8	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	14,1	16,4	18,9	21,6	24,4	27,4	30,5	33,9	37,6	41,4	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	83,1	87,1	91,4	95,9	100,7	105,8	111,3	117,0	123,2	129,7	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,5	-1,9	-2,4	-3,0	-3,5	-4,1	-4,8	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-4,7
Total	DM	-29,64	-27,42	-24,92	-22,20	-19,31	-16,40	-13,63	-11,42	-10,74	-15,37	-62,67	—
	DMA	40,38	34,98	29,13	24,51	21,03	18,09	16,37	18,89	27,60	45,60	112,44	—
	PDMA	70,24	58,97	46,90	34,71	24,95	18,58	20,82	38,63	64,25	104,83	190,22	—
CPI	DM	-46,03	-43,51	-40,50	-37,19	-33,73	-30,54	-28,11	-27,57	-31,57	-49,60	-172,10	—
	DMA	68,99	59,36	48,79	41,41	36,69	32,28	30,07	36,34	53,12	86,02	226,41	—
	PDMA	107,89	90,14	71,73	53,95	36,85	21,46	15,16	34,06	56,64	86,37	151,26	—
SPI	DM	-17,63	-15,63	-13,49	-11,21	-8,74	-6,03	-3,01	0,43	4,54	9,74	17,57	—
	DMA	19,40	17,11	14,71	12,12	9,55	7,68	6,31	6,09	8,89	15,97	28,87	—
	PDMA	42,62	36,11	28,70	20,61	16,23	16,46	24,97	41,98	69,83	118,38	218,79	—
ΔCS	DM	-28,40	-27,88	-27,01	-25,98	-24,99	-24,51	-25,10	-28,00	-36,11	-59,34	-189,67	—
	DMA	49,59	42,26	34,08	29,29	27,14	24,60	23,76	30,24	44,23	70,05	197,54	—
	PDMA	65,27	54,03	43,02	33,34	20,62	5,00	-9,81	-7,92	-13,19	-32,01	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-28,88	-27,13	-25,06	-22,75	-20,24	-17,68	-15,25	-13,41	-13,19	-18,75	-71,93	—
	DMA	40,55	35,30	29,55	25,20	22,13	19,59	18,17	19,97	28,68	47,66	121,21	—
	PDMA	37,10	31,54	25,56	19,65	14,85	11,35	12,56	18,75	29,54	47,64	89,72	—
CPI	DM	-39,45	-38,52	-37,09	-35,34	-33,45	-31,87	-31,13	-32,49	-38,84	-60,63	-197,33	—
	DMA	64,71	55,96	46,21	39,98	36,71	33,79	32,87	37,81	54,32	88,55	241,03	—
	PDMA	44,15	36,89	29,16	22,21	16,20	12,14	15,28	23,07	34,91	54,54	112,92	—
SPI	DM	-20,75	-18,37	-15,81	-13,07	-10,08	-6,76	-3,04	1,27	6,54	13,46	24,54	—
	DMA	21,97	19,40	16,73	13,84	10,91	8,67	6,85	6,25	8,95	16,20	29,05	—
	PDMA	31,68	27,42	22,79	17,67	13,80	10,75	10,46	15,43	25,40	42,33	71,87	—
ΔCS	DM	-18,70	-20,15	-21,28	-22,27	-23,37	-25,11	-28,09	-33,76	-45,38	-74,09	-221,87	—
	DMA	42,74	36,56	29,48	26,14	25,80	25,12	26,02	31,56	45,37	72,35	211,98	—
	PDMA	12,47	9,47	6,37	4,54	2,39	1,39	4,82	7,64	9,50	12,21	41,06	—

Tabela 8.216: Constantes de acoplamento B972PW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	337,0	356,7	377,9	400,6	424,8	450,7	478,3	507,6	538,7	571,5	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,3	22,2	20,9	19,5	17,9	16,1	14,2	12,1	9,9	7,5	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-56,6	-59,2	-61,9	-64,8	-68,0	-71,4	-75,0	-78,8	-82,9	-87,3	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,1	-3,1	-4,2	-5,3	-6,5	-7,8	-9,2	-10,7	-12,4	-14,1	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	32,0	33,2	34,5	35,9	37,3	38,9	40,6	42,3	44,2	46,2	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,9	-5,8	-6,7	-7,7	-8,8	-10,0	-11,3	-12,7	-14,2	-15,9	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	127,5	134,2	141,4	149,0	157,1	165,6	174,7	184,2	194,1	204,6	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1630,6	-1625,1	-1614,5	-1599,5	-1580,9	-1559,4	-1535,5	-1510,0	-1483,3	-1456,0	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-178,7	-163,2	-147,2	-130,8	-114,2	-97,3	-80,3	-63,2	-46,2	-29,3	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-96,0	-77,5	-58,7	-39,7	-20,4	-1,1	18,3	37,8	57,4	77,0	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-214,8	-248,4	-284,0	-322,6	-365,7	-416,3	-479,8	-567,4	-708,5	-1009,1	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	83,9	87,7	91,8	96,1	100,7	105,6	110,8	116,4	122,3	128,5	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,1	-8,9	-9,9	-10,8	-11,9	-13,0	-14,2	-15,5	-16,8	-18,3	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	157,1	161,1	165,6	170,8	176,7	183,6	192,0	202,4	215,8	233,6	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	178,2	185,7	193,8	202,3	211,4	221,3	232,1	244,1	257,9	274,2	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,1	50,1	50,8	51,4	51,6	51,4	50,6	48,8	45,7	40,3	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,5	8,0	8,7	9,6	10,7	12,1	13,9	16,3	19,5	24,0	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	44,6	47,5	50,8	54,6	58,9	64,0	70,4	78,8	90,8	110,5	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	107,5	112,5	117,9	123,6	129,8	136,5	144,0	152,6	163,0	176,8	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,7	1,0	0,3	-0,6	-1,7	-3,2	-5,1	-7,9	-12,2	-19,6	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,7	3,3	2,8	2,2	1,5	0,6	-0,5	-2,3	-4,9	-9,4	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,2	9,6	10,1	10,6	11,2	12,1	13,2	14,7	17,2	21,5	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,3	13,9	14,7	15,5	16,5	17,8	19,3	21,4	24,5	29,7	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	14,4	16,7	19,2	21,9	24,7	27,7	30,9	34,4	38,0	41,9	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	83,6	87,6	91,9	96,4	101,3	106,4	111,9	117,7	123,8	130,4	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-1,9	-2,4	-3,0	-3,5	-4,1	-4,8	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-4,7
Total	DM	-29,41	-27,20	-24,67	-21,92	-19,02	-16,08	-13,29	-11,05	-10,38	-15,12	-65,03	—
	DMA	40,13	34,73	28,85	24,19	20,79	17,84	16,30	19,05	28,13	46,38	115,74	—
	PDMA	69,92	58,48	46,34	34,17	24,43	18,13	20,92	38,94	65,12	105,61	191,82	—
CPI	DM	-45,89	-43,35	-40,31	-36,94	-33,48	-30,26	-27,81	-27,25	-31,28	-49,62	-178,33	—
	DMA	68,80	59,14	48,53	41,08	36,34	31,94	30,10	36,88	54,05	87,25	233,56	—
	PDMA	107,10	89,23	70,71	53,03	35,82	20,68	15,98	35,01	58,07	87,79	155,08	—
SPI	DM	-17,33	-15,35	-13,20	-10,90	-8,41	-5,69	-2,64	0,82	4,95	10,19	18,05	—
	DMA	19,11	16,83	14,41	11,81	9,39	7,50	6,19	5,97	9,13	16,41	29,34	—
	PDMA	42,64	35,92	28,47	20,34	16,07	16,27	24,55	41,83	70,29	118,69	218,77	—
ΔCS	DM	-28,56	-28,01	-27,11	-26,04	-25,07	-24,58	-25,17	-28,07	-36,23	-59,80	-196,37	—
	DMA	49,69	42,31	34,11	29,28	26,95	24,44	23,91	30,92	44,91	70,84	204,22	—
	PDMA	64,46	53,30	42,24	32,69	19,75	4,41	-8,57	-6,82	-12,22	-30,89	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-28,66	-26,91	-24,82	-22,47	-19,96	-17,37	-14,93	-13,05	-12,84	-18,53	-74,66	—
	DMA	40,30	35,04	29,27	24,89	21,90	19,36	18,05	20,10	29,22	48,48	124,89	—
	PDMA	36,79	31,24	25,18	19,32	14,57	11,17	12,51	18,76	29,96	48,14	91,32	—
CPI	DM	-39,38	-38,44	-36,97	-35,16	-33,29	-31,68	-30,92	-32,25	-38,65	-60,78	-204,32	—
	DMA	64,58	55,80	46,01	39,72	36,43	33,52	32,78	38,29	55,21	89,78	248,76	—
	PDMA	43,81	36,48	28,64	21,87	15,80	12,01	15,38	23,31	35,62	55,24	116,19	—
SPI	DM	-20,42	-18,05	-15,48	-12,71	-9,70	-6,37	-2,62	1,72	7,02	13,98	25,08	—
	DMA	21,63	19,08	16,38	13,48	10,72	8,46	6,72	6,11	9,23	16,72	29,60	—
	PDMA	31,38	27,21	22,52	17,37	13,62	10,52	10,31	15,25	25,62	42,69	72,19	—
ΔCS	DM	-18,96	-20,39	-21,49	-22,45	-23,59	-25,31	-28,30	-33,97	-45,67	-74,76	-229,40	—
	DMA	42,95	36,72	29,63	26,24	25,71	25,06	26,06	32,18	45,98	73,06	219,16	—
	PDMA	12,43	9,28	6,12	4,50	2,18	1,49	5,07	8,05	10,00	12,55	44,00	—

Tabela 8.217: Constantes de acoplamento B972TPSS com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	334,5	355,1	377,1	400,5	425,4	452,0	480,2	510,0	541,6	574,9	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	23,4	22,2	21,0	19,5	17,9	16,2	14,3	12,2	9,9	7,5	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-57,0	-59,6	-62,5	-65,6	-68,8	-72,3	-76,0	-80,0	-84,2	-88,6	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,9	-2,9	-4,0	-5,2	-6,4	-7,8	-9,2	-10,8	-12,5	-14,3	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	33,0	34,2	35,6	37,0	38,6	40,2	41,9	43,8	45,8	47,9	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,4	-5,3	-6,3	-7,4	-8,6	-9,9	-11,2	-12,7	-14,3	-16,1	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,7	144,0	151,7	160,0	168,8	178,1	187,9	198,2	209,1	220,6	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1631,9	-1627,0	-1617,0	-1602,6	-1584,6	-1563,6	-1540,2	-1515,2	-1489,1	-1462,2	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-180,1	-164,8	-148,9	-132,7	-116,3	-99,6	-82,9	-66,1	-49,4	-32,9	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-94,2	-75,8	-57,1	-38,3	-19,2	0,0	19,1	38,4	57,7	77,0	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-213,0	-246,5	-282,1	-320,6	-363,6	-413,9	-476,7	-563,1	-701,4	-992,7	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	89,8	93,9	98,3	102,9	107,8	113,1	118,7	124,7	131,0	137,7	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,3	-11,5	-12,7	-14,0	-15,4	-16,9	-18,5	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	156,5	160,6	165,2	170,5	176,5	183,7	192,4	203,1	217,0	235,6	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	189,0	197,1	205,6	214,7	224,4	234,9	246,4	259,2	273,9	291,2	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,5	51,5	52,3	52,8	53,0	52,8	51,9	50,0	46,7	41,1	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,8	8,4	9,1	10,0	11,1	12,5	14,4	16,8	20,1	24,8	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	45,0	48,0	51,4	55,2	59,7	65,0	71,6	80,2	92,5	112,5	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	114,5	119,8	125,6	131,7	138,3	145,5	153,5	162,7	173,6	188,1	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,7	1,0	0,2	-0,7	-1,9	-3,5	-5,5	-8,4	-12,9	-20,5	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,0	4,6	4,1	3,5	2,8	1,8	0,6	-1,0	-3,6	-8,0	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,8	10,2	10,7	11,2	11,9	12,8	13,9	15,5	17,9	22,1	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,7	15,4	16,2	17,1	18,1	19,4	21,0	23,2	26,3	31,5	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	14,9	17,3	19,8	22,5	25,3	28,4	31,6	35,1	38,8	42,7	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	89,3	93,6	98,2	103,0	108,2	113,8	119,6	125,9	132,5	139,6	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,5	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,3	-5,0	-5,7	-6,6	-7,5	-8,5	-4,7
Total	DM	-27,70	-25,39	-22,79	-19,97	-16,99	-13,94	-11,03	-8,63	-7,75	-11,98	-57,72	—
	DMA	38,78	33,35	27,37	22,48	18,90	15,85	14,27	19,19	30,35	48,80	113,73	—
	PDMA	70,57	59,14	46,79	34,38	22,04	15,05	19,32	38,28	66,57	107,59	191,26	—
CPI	DM	-45,07	-42,48	-39,40	-36,03	-32,52	-29,23	-26,70	-26,02	-29,79	-47,25	-166,33	—
	DMA	68,38	58,66	47,98	40,10	35,28	30,74	28,48	37,27	55,57	88,07	223,67	—
	PDMA	106,35	88,47	69,90	51,91	34,66	19,07	14,92	34,91	59,21	88,72	152,58	—
SPI	DM	-14,97	-12,86	-10,61	-8,20	-5,60	-2,73	0,47	4,12	8,41	13,89	21,93	—
	DMA	17,07	14,78	12,26	9,56	6,89	4,93	3,85	5,93	11,85	20,01	33,11	—
	PDMA	44,34	37,63	29,84	21,52	12,78	12,10	22,54	40,75	71,97	121,43	219,63	—
ΔCS	DM	-30,11	-29,62	-28,79	-27,83	-26,92	-26,50	-27,17	-30,14	-38,20	-61,14	-188,25	—
	DMA	51,31	43,88	35,72	30,54	28,39	25,81	24,63	31,34	43,72	68,07	190,56	—
	PDMA	62,02	50,83	40,06	30,39	21,88	6,97	-7,63	-5,83	-12,76	-32,71	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-26,87	-25,00	-22,82	-20,39	-17,76	-15,03	-12,43	-10,37	-9,90	-15,00	-66,43	—
	DMA	38,80	33,50	27,62	22,97	19,84	17,19	15,75	20,27	31,74	51,24	122,68	—
	PDMA	35,60	30,03	23,88	18,06	13,15	9,72	11,82	19,38	32,70	51,39	93,09	—
CPI	DM	-38,66	-37,65	-36,13	-34,30	-32,35	-30,65	-29,78	-30,96	-37,04	-58,18	-191,09	—
	DMA	64,30	55,45	45,57	38,78	35,39	32,31	30,92	38,66	56,86	90,68	237,91	—
	PDMA	44,19	36,78	28,82	21,57	15,32	10,97	13,68	22,81	36,66	56,26	113,64	—
SPI	DM	-17,79	-15,28	-12,58	-9,68	-6,54	-3,02	0,91	5,47	10,97	18,21	29,46	—
	DMA	19,18	16,62	13,81	10,81	7,88	5,56	4,08	6,13	12,42	20,90	34,05	—
	PDMA	28,99	24,83	20,07	15,37	11,48	8,76	10,39	16,75	29,66	47,65	77,27	—
ΔCS	DM	-20,87	-22,37	-23,55	-24,62	-25,81	-27,63	-30,69	-36,43	-48,01	-76,39	-220,55	—
	DMA	45,12	38,83	31,76	27,97	27,51	26,75	26,84	32,53	44,44	69,78	203,86	—
	PDMA	15,20	11,95	8,75	6,20	3,85	2,21	3,28	6,06	7,00	8,61	36,37	—

Tabela 8.218: Valores de PDMA total obtidos para troca B972 com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
B972B95	70,6	60,0	49,1	37,3	25,9	15,3	10,7	22,4	39,5	62,0	92,6
B972B98	62,1	51,0	39,5	27,6	16,6	8,7	20,3	38,3	60,5	88,9	132,9
B972B971	63,2	52,2	40,7	28,7	17,5	8,9	19,5	35,4	56,2	82,7	120,6
B972B972	61,5	50,9	40,1	28,9	18,4	18,7	24,6	37,0	55,8	81,6	120,0
B972LYP	63,7	52,2	40,3	27,8	16,8	9,6	21,9	41,3	66,1	99,9	161,6
B972P86	69,3	58,6	46,9	34,9	24,8	17,4	18,0	33,7	56,4	90,9	156,5
B972PBE	68,3	57,1	45,1	33,7	24,1	20,2	21,9	39,8	65,9	107,1	195,8
B972PW91	67,9	56,6	44,6	33,1	23,6	19,4	22,1	40,2	66,3	108,0	197,7
B972TPSS	68,5	57,2	45,0	32,7	20,3	16,5	20,5	39,7	68,1	110,1	197,2

8.4.1.4 Troca B98

Tabela 8.219: Constantes de acoplamento B98B95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	415,3	432,6	451,1	470,7	491,7	514,0	537,7	562,9	589,5	617,7	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	17,4	16,3	15,1	13,7	12,2	10,5	8,7	6,7	4,6	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-65,8	-68,0	-70,3	-72,9	-75,6	-78,5	-81,6	-84,9	-88,4	-92,2	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,5	-1,5	-2,6	-3,7	-5,0	-6,3	-7,8	-9,3	-11,0	-12,7	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	35,8	36,8	37,8	39,0	40,2	41,5	42,9	44,4	46,0	47,7	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,1	-4,0	-4,9	-5,9	-7,0	-8,2	-9,5	-10,9	-12,4	-14,0	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,2	143,0	149,3	156,0	163,2	170,9	179,1	187,8	197,0	206,8	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1564,6	-1562,3	-1554,5	-1541,8	-1525,0	-1504,8	-1481,8	-1456,6	-1429,7	-1401,6	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-160,4	-146,8	-132,7	-118,2	-103,3	-88,2	-72,8	-57,4	-41,8	-26,1	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-72,5	-56,2	-39,6	-22,8	-5,8	11,3	28,7	46,3	63,9	81,7	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-194,4	-225,9	-258,6	-292,7	-329,3	-369,8	-417,3	-477,0	-561,1	-702,8	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	91,8	95,0	98,4	102,0	105,9	110,0	114,4	119,0	124,0	129,3	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-6,5	-7,4	-8,3	-9,3	-10,4	-11,5	-12,8	-14,1	-15,5	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	165,5	168,8	172,4	176,5	181,1	186,3	192,6	200,0	209,1	220,5	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	185,3	191,9	198,9	206,3	214,1	222,4	231,3	241,0	251,6	263,5	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,4	51,4	52,3	53,1	53,7	54,1	54,1	53,6	52,4	50,2	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,3	6,6	7,0	7,6	8,2	9,1	10,1	11,5	13,3	15,6	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	49,9	52,2	54,7	57,5	60,7	64,4	68,6	73,8	80,2	88,7	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	115,0	119,4	124,0	128,9	134,2	139,8	145,9	152,5	159,9	168,4	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	3,0	2,4	1,8	1,1	0,2	-0,8	-2,1	-3,7	-5,9	-8,9	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,6	5,2	4,8	4,3	3,6	2,9	1,9	0,6	-1,0	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,3	9,5	9,8	10,1	10,5	10,9	11,5	12,2	13,2	14,7	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,0	13,5	14,1	14,7	15,4	16,2	17,2	18,4	19,8	21,8	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,8	20,8	22,9	25,2	27,6	30,2	32,9	35,8	38,9	42,2	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	90,8	94,2	97,9	101,8	105,9	110,3	115,0	119,9	125,2	130,8	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,0	-1,5	-2,0	-2,5	-3,1	-3,8	-4,5	-5,2	-6,0	-6,9	-4,7
Total													
CPI	DM	-19,26	-17,54	-15,51	-13,19	-10,66	-8,00	-5,30	-2,78	-0,90	-0,83	-8,15	—
	DMA	31,28	26,66	21,58	16,28	12,98	11,14	12,15	15,11	21,67	33,77	54,82	—
	PDMA	68,00	58,06	47,58	37,16	26,71	15,79	13,26	21,52	38,35	60,26	90,89	—
CPI													
SPI	DM	-26,86	-25,07	-22,69	-19,83	-16,65	-13,35	-10,25	-7,90	-7,47	-11,98	-34,85	—
	DMA	51,54	43,09	33,80	23,88	18,45	16,71	21,65	29,97	44,36	67,29	109,09	—
	PDMA	88,34	72,32	55,87	40,13	25,61	11,92	18,74	37,07	58,21	81,73	112,26	—
SPI													
ΔCS	DM	-13,69	-12,02	-10,24	-8,32	-6,27	-4,07	-1,67	0,97	3,93	7,35	11,44	—
	DMA	16,43	14,61	12,63	10,71	8,97	7,06	5,19	4,21	5,03	9,19	15,03	—
	PDMA	53,08	47,60	41,50	34,98	27,52	18,62	9,24	10,12	23,78	44,51	75,22	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
CPI	DM	-18,36	-17,09	-15,47	-13,53	-11,35	-9,00	-6,63	-4,43	-2,91	-3,41	-12,16	—
	DMA	31,17	26,69	21,72	16,50	13,57	12,31	13,10	15,64	22,15	34,85	57,56	—
	PDMA	34,92	30,06	24,87	19,98	15,67	11,42	9,34	12,14	19,62	30,77	47,30	—
CPI													
SPI	DM	-20,80	-20,46	-19,50	-18,03	-16,23	-14,31	-12,65	-11,82	-13,11	-19,85	-46,81	—
	DMA	47,94	40,28	31,72	22,49	18,21	18,01	22,45	29,84	43,91	67,35	111,53	—
	PDMA	38,84	32,09	25,05	18,94	14,30	10,64	11,48	19,91	31,43	45,44	67,02	—
SPI													
ΔCS	DM	-16,48	-14,49	-12,36	-10,06	-7,59	-4,92	-1,99	1,25	4,93	9,23	14,49	—
	DMA	18,27	16,23	14,02	11,89	9,99	7,92	5,92	4,72	5,41	9,85	16,05	—
	PDMA	31,90	28,50	24,73	20,78	16,73	12,01	7,70	6,17	10,53	19,49	32,14	—
ΔCS													
CPI	DM	-4,32	-5,97	-7,14	-7,97	-8,64	-9,39	-10,66	-13,07	-18,04	-29,08	-61,30	—
	DMA	29,67	24,05	17,70	10,60	8,22	10,09	16,53	25,12	38,50	57,50	95,48	—
	PDMA	6,94	3,59	0,33	-1,84	-2,43	-1,37	3,78	13,75	20,90	25,95	34,88	—

Tabela 8.220: Constantes de acoplamento B98B971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	421,4	438,1	455,9	474,8	495,0	516,4	539,1	563,2	588,7	615,6	643,9	500
CO	$^1J_{CO}$	16,8	15,7	14,4	13,0	11,5	9,8	7,9	5,8	3,6	1,2	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-66,4	-68,5	-70,8	-73,3	-75,9	-78,8	-81,7	-84,9	-88,3	-91,9	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-0,5	-1,5	-2,6	-3,7	-4,9	-6,2	-7,6	-9,1	-10,7	-12,4	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	36,5	37,6	38,7	39,8	41,1	42,4	43,9	45,4	47,0	48,8	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,2	-4,1	-5,0	-6,1	-7,2	-8,4	-9,7	-11,1	-12,6	-14,3	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	159,8	166,1	172,7	179,7	187,2	195,0	203,3	212,0	221,1	230,7	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1607,9	-1603,6	-1593,6	-1578,8	-1559,8	-1537,4	-1512,1	-1484,7	-1455,7	-1425,6	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-150,0	-135,3	-120,1	-104,6	-88,8	-72,8	-56,6	-40,4	-24,1	-7,9	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-60,8	-43,8	-26,5	-9,0	8,6	26,4	44,4	62,4	80,5	98,6	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-190,5	-222,1	-255,0	-289,8	-327,4	-369,7	-420,1	-485,2	-580,0	-749,5	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	98,3	101,8	105,5	109,4	113,6	118,1	122,8	127,9	133,3	139,0	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-5,6	-6,4	-7,3	-8,3	-9,3	-10,5	-11,6	-12,9	-14,3	-15,8	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	181,5	185,7	190,3	195,6	201,5	208,5	216,6	226,5	238,7	254,4	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	194,0	201,1	208,5	216,4	224,8	233,8	243,5	254,2	266,0	279,5	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,1	51,0	51,7	52,3	52,7	52,7	52,2	51,1	49,1	45,7	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,0	6,4	6,9	7,5	8,2	9,1	10,3	11,9	13,9	16,7	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,2	63,1	66,3	69,9	73,9	78,6	84,2	91,1	99,9	112,1	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	121,5	126,2	131,2	136,5	142,1	148,3	154,9	162,3	170,7	180,5	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,5	1,8	1,1	0,2	-0,7	-2,0	-3,6	-5,6	-8,4	-12,4	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,7	5,4	5,0	4,5	4,0	3,3	2,4	1,4	0,0	-2,0	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,2	9,4	9,7	10,0	10,4	10,9	11,5	12,3	13,5	15,2	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	12,9	13,4	14,0	14,6	15,3	16,2	17,2	18,4	20,1	22,4	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	23,3	25,6	28,1	30,7	33,5	36,5	39,6	43,0	46,5	50,4	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	97,2	100,9	104,9	109,1	113,6	118,4	123,4	128,8	134,5	140,6	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,6	-1,1	-1,6	-2,2	-2,8	-3,4	-4,1	-4,9	-5,7	-6,6	-7,5	-4,7
Total	DM	-16,68	-14,70	-12,41	-9,88	-7,11	-4,22	-1,34	1,30	3,17	2,62	-8,92	—
	DMA	29,26	24,73	19,79	14,62	11,25	12,24	15,13	20,70	28,81	41,80	68,67	—
	PDMA	60,80	50,78	40,41	29,43	19,01	15,40	19,86	34,00	54,26	80,33	118,03	—
CPI	DM	-25,97	-23,85	-21,16	-18,08	-14,68	-11,29	-8,19	-6,14	-6,49	-13,42	-47,66	—
	DMA	50,94	42,26	32,82	22,55	16,41	20,36	28,39	38,79	51,98	74,91	128,26	—
	PDMA	78,12	62,24	46,42	30,16	15,19	18,13	31,64	51,99	73,66	98,32	132,83	—
SPI	DM	-9,86	-7,99	-5,99	-3,86	-1,55	0,96	3,68	6,76	10,25	14,37	19,49	—
	DMA	13,37	11,87	10,24	8,81	7,47	6,28	5,41	7,43	11,82	17,52	24,97	—
	PDMA	48,10	42,37	36,01	28,89	21,82	13,40	11,23	20,81	40,04	67,14	107,17	—
ΔCS	DM	-16,11	-15,86	-15,18	-14,22	-13,13	-12,25	-11,87	-12,90	-16,74	-27,79	-67,15	—
	DMA	37,57	30,40	22,58	13,75	8,94	14,08	22,98	31,36	40,16	57,39	103,30	—
	PDMA	30,02	19,87	10,41	1,26	-6,63	4,73	20,41	31,18	33,63	31,18	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-15,92	-14,37	-12,49	-10,33	-7,90	-5,33	-2,75	-0,41	1,09	-0,06	-13,48	—
	DMA	29,42	25,08	20,30	15,28	12,30	13,28	15,77	21,16	29,36	43,00	72,17	—
	PDMA	31,46	26,89	22,21	17,44	13,34	11,49	11,57	17,20	27,14	40,33	60,22	—
CPI	DM	-20,99	-20,35	-19,13	-17,49	-15,51	-13,56	-11,95	-11,49	-13,69	-23,12	-62,61	—
	DMA	48,45	40,61	31,95	22,41	17,41	21,26	28,29	37,93	50,63	74,04	130,91	—
	PDMA	35,40	29,26	23,39	17,17	12,44	12,34	15,20	25,59	37,36	52,41	78,24	—
SPI	DM	-12,02	-9,78	-7,38	-4,82	-2,05	1,00	4,33	8,12	12,46	17,68	24,32	—
	DMA	14,78	13,13	11,34	9,79	8,36	7,14	6,15	8,25	13,00	19,12	26,98	—
	PDMA	28,43	25,06	21,30	17,65	14,04	10,83	8,77	10,75	19,27	31,04	46,35	—
ΔCS	DM	-8,97	-10,57	-11,75	-12,67	-13,46	-14,56	-16,28	-19,61	-26,15	-40,80	-86,93	—
	DMA	33,67	27,48	20,61	12,62	9,05	14,12	22,14	29,68	37,63	54,92	103,93	—
	PDMA	6,98	4,20	2,09	-0,48	-1,60	1,51	6,43	14,84	18,09	21,38	31,89	—

Tabela 8.221: Constantes de acoplamento B98B972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	454,7	472,9	492,1	512,4	534,0	556,8	580,9	606,5	633,4	661,7	691,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,1	11,8	10,3	8,6	6,7	4,7	2,5	0,0	-2,5	-5,3	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,4	-73,7	-76,3	-78,9	-81,8	-84,8	-88,1	-91,5	-95,2	-99,0	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,3	-1,3	-2,4	-3,6	-4,8	-6,1	-7,6	-9,1	-10,7	-12,5	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,5	39,6	40,7	41,9	43,3	44,7	46,1	47,7	49,4	51,2	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-3,5	-4,5	-5,5	-6,6	-7,7	-9,0	-10,4	-11,9	-13,5	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,2	159,8	167,0	174,7	182,8	191,5	200,6	210,3	220,5	231,3	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1649,2	-1644,2	-1633,2	-1617,3	-1597,0	-1573,3	-1546,8	-1518,1	-1487,9	-1456,7	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,9	-120,9	-105,6	-90,1	-74,4	-58,6	-42,7	-26,8	-11,0	4,7	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-44,4	-27,2	-9,7	7,6	25,2	42,9	60,5	78,3	96,0	113,8	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-181,6	-212,7	-245,3	-279,6	-316,8	-358,8	-409,0	-474,6	-572,5	-756,1	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	100,5	103,9	107,6	111,5	115,7	120,1	124,8	129,7	135,0	140,6	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-5,4	-6,3	-7,2	-8,2	-9,2	-10,3	-11,5	-12,8	-14,2	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	180,1	184,3	188,9	194,2	200,2	207,2	215,5	225,5	237,9	253,6	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	195,8	202,8	210,1	217,9	226,1	234,9	244,4	254,7	266,1	279,0	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,3	51,2	52,0	52,5	52,9	53,9	54,5	55,5	56,5	57,5	58,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	5,8	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,8	12,5	14,8	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,1	63,0	66,2	69,9	74,2	79,1	85,1	92,5	102,3	115,9	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,1	127,8	132,7	138,0	143,6	149,6	156,2	163,5	171,7	181,5	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	3,2	2,5	1,8	1,0	0,0	-1,2	-2,8	-4,8	-7,6	-11,6	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,5	6,2	5,9	5,5	5,0	4,4	3,7	2,7	1,5	-0,2	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,1	9,3	9,5	9,8	10,1	10,5	11,0	11,7	12,7	14,2	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	12,8	13,3	13,8	14,3	15,0	15,7	16,6	17,7	19,2	21,2	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,6	27,9	30,4	33,0	35,8	38,7	41,9	45,2	48,7	52,4	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	98,6	102,3	106,3	110,4	114,8	119,5	124,5	129,8	135,3	141,2	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,1	-0,5	-1,0	-1,6	-2,1	-2,7	-3,4	-4,1	-4,8	-5,6	-6,5	-4,7
Total	DM	-15,54	-13,45	-11,06	-8,41	-5,53	-2,53	0,44	3,16	5,00	4,00	-12,05	—
	DMA	28,60	24,01	18,98	14,69	13,81	16,16	19,27	25,11	33,09	45,42	75,85	—
	PDMA	59,52	49,77	39,59	29,29	25,52	26,79	28,91	39,08	55,29	80,57	118,82	—
CPI	DM	-24,25	-21,85	-18,89	-15,52	-11,85	-8,15	-4,86	-2,60	-3,03	-11,03	-56,05	—
	DMA	50,00	41,17	31,44	23,21	22,63	29,49	38,14	48,60	62,17	83,70	145,55	—
	PDMA	68,35	52,81	36,79	21,15	21,16	33,91	48,06	67,46	89,23	114,23	152,13	—
SPI	DM	-9,15	-7,29	-5,31	-3,19	-0,89	1,59	4,33	7,39	10,88	15,02	20,21	—
	DMA	12,90	11,43	9,85	8,45	7,35	6,39	5,43	7,88	11,76	17,35	24,75	—
	PDMA	53,06	47,54	41,65	35,25	28,71	21,57	14,88	18,26	30,41	55,89	94,39	—
ΔCS	DM	-15,10	-14,55	-13,58	-12,32	-10,95	-9,73	-9,20	-9,99	-13,91	-26,05	-76,27	—
	DMA	37,10	29,75	21,59	14,76	15,28	23,10	32,71	40,72	50,41	66,35	120,80	—
	PDMA	15,29	5,27	-4,86	-14,10	-7,55	12,34	33,18	49,20	58,82	58,33	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-15,41	-13,75	-11,77	-9,47	-6,91	-4,22	-1,52	0,91	2,39	0,73	-17,79	—
	DMA	29,32	24,93	20,04	16,00	14,95	16,91	19,72	25,51	33,62	46,54	79,77	—
	PDMA	31,99	27,78	23,18	18,75	16,44	16,05	16,13	20,73	28,09	41,05	62,25	—
CPI	DM	-20,74	-19,81	-18,31	-16,33	-14,05	-11,75	-9,90	-9,19	-11,43	-22,01	-73,32	—
	DMA	49,06	41,07	32,11	24,79	23,87	29,65	37,40	47,13	60,29	82,19	148,44	—
	PDMA	35,58	29,96	24,00	18,34	16,48	18,70	22,53	32,01	44,15	59,79	89,61	—
SPI	DM	-11,32	-9,09	-6,73	-4,19	-1,42	1,58	4,92	8,68	13,02	18,23	24,93	—
	DMA	14,13	12,51	10,76	9,24	8,08	7,12	6,12	8,88	13,11	19,12	26,95	—
	PDMA	29,22	26,11	22,56	19,07	16,40	14,02	11,20	12,04	15,74	26,65	41,20	—
ΔCS	DM	-9,42	-10,72	-11,58	-12,14	-12,63	-13,33	-14,82	-17,87	-24,45	-40,24	-98,25	—
	DMA	34,93	28,56	21,35	15,55	15,79	22,53	31,28	38,25	47,18	63,07	121,49	—
	PDMA	6,36	3,85	1,44	-0,74	0,08	4,68	11,33	19,97	28,41	33,14	48,41	—

Tabela 8.222: Constantes de acoplamento B98B98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	411,6	428,1	445,8	464,6	484,6	505,9	528,5	552,5	577,9	604,8	633,1	500
CO	$^1J_{CO}$	16,6	15,5	14,2	12,8	11,2	9,5	7,7	5,6	3,4	1,0	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-66,0	-68,2	-70,5	-73,0	-75,6	-78,4	-81,4	-84,6	-88,1	-91,7	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-11,0	-12,7	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,0	38,1	39,2	40,4	41,7	43,1	44,6	46,1	47,8	49,6	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,5	-4,4	-5,4	-6,4	-7,6	-8,8	-10,2	-11,6	-13,2	-14,9	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	165,9	172,2	179,0	186,1	193,7	201,7	210,1	218,9	228,1	237,8	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1622,6	-1617,6	-1607,1	-1591,6	-1572,1	-1549,1	-1523,4	-1495,6	-1466,2	-1435,7	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-150,1	-135,5	-120,6	-105,2	-89,6	-73,8	-57,8	-41,8	-25,7	-9,6	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-61,5	-44,7	-27,7	-10,4	7,0	24,5	42,2	60,0	77,9	95,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-196,5	-228,9	-262,8	-298,9	-338,2	-383,0	-437,3	-509,0	-617,4	-823,5	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	101,1	104,7	108,5	112,6	116,9	121,5	126,5	131,7	137,3	143,2	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-5,9	-6,8	-7,7	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-15,0	-16,5	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	184,5	188,8	193,5	198,9	205,0	212,2	220,6	230,9	243,6	260,0	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	198,0	205,3	212,9	221,1	229,7	239,0	249,0	260,0	272,3	286,5	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,6	51,5	52,3	52,9	53,2	53,2	52,6	51,4	49,2	45,4	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,1	6,5	7,0	7,6	8,4	9,4	10,6	12,3	14,5	17,5	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	62,2	65,2	68,5	72,2	76,4	81,3	87,2	94,5	104,0	117,4	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	124,4	129,2	134,3	139,8	145,7	152,0	158,9	166,6	175,4	185,9	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,8	-2,1	-3,8	-6,0	-9,0	-13,5	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,7	5,4	5,0	4,5	3,9	3,2	2,3	1,2	-0,3	-2,5	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,3	9,5	9,8	10,2	10,6	11,1	11,8	12,7	13,9	15,9	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,1	13,6	14,2	14,9	15,6	16,5	17,6	18,9	20,8	23,3	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,5	26,9	29,5	32,2	35,1	38,2	41,5	45,0	48,8	52,8	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	99,8	103,7	107,8	112,1	116,8	121,7	127,0	132,5	138,4	144,7	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,7	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,9	-7,9	-4,7
Total	DM	-16,91	-14,92	-12,64	-10,09	-7,35	-4,51	-1,72	0,74	2,17	0,35	-19,10	—
	DMA	29,25	24,65	19,73	14,55	12,38	12,58	16,22	22,92	31,70	45,52	80,95	—
	PDMA	59,87	49,92	39,57	28,67	18,65	14,08	20,27	36,64	57,99	86,02	129,89	—
CPI	DM	-28,25	-26,18	-23,59	-20,58	-17,35	-14,15	-11,44	-9,98	-11,58	-21,82	-75,31	—
	DMA	52,06	43,33	33,79	23,36	20,03	21,97	30,45	41,38	55,76	80,13	152,76	—
	PDMA	77,65	62,08	46,46	30,24	16,50	16,91	31,97	52,38	74,45	99,96	140,82	—
SPI	DM	-8,59	-6,67	-4,61	-2,40	-0,02	2,57	5,41	8,60	12,26	16,61	22,12	—
	DMA	12,51	10,96	9,41	8,09	6,78	5,70	5,79	9,39	14,06	20,14	28,29	—
	PDMA	46,84	41,00	34,51	27,52	20,23	12,01	11,68	25,10	45,92	75,81	121,88	—
ΔCS	DM	-19,65	-19,52	-18,98	-18,18	-17,33	-16,72	-16,85	-18,58	-23,84	-38,42	-97,43	—
	DMA	39,55	32,37	24,38	15,27	13,25	16,27	24,67	32,00	41,70	59,99	124,47	—
	PDMA	30,81	21,08	11,96	2,72	-3,73	4,91	20,29	27,28	28,53	24,15	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,15	-14,59	-12,70	-10,51	-8,10	-5,56	-3,06	-0,92	0,12	-2,43	-24,71	—
	DMA	29,37	24,96	20,18	15,14	13,51	13,76	17,10	23,75	32,70	47,25	86,04	—
	PDMA	30,21	25,66	21,09	16,36	12,84	10,92	12,49	19,77	30,45	44,64	68,62	—
CPI	DM	-23,42	-22,83	-21,68	-20,10	-18,29	-16,52	-15,30	-15,48	-19,03	-32,08	-92,72	—
	DMA	49,62	41,69	32,90	23,16	21,23	23,22	30,78	41,02	55,05	80,06	158,16	—
	PDMA	34,41	28,49	22,64	16,33	12,82	12,27	17,03	27,62	39,96	56,09	89,03	—
SPI	DM	-10,55	-8,25	-5,79	-3,13	-0,27	2,87	6,35	10,28	14,85	20,38	27,60	—
	DMA	13,80	12,08	10,39	8,98	7,58	6,48	6,57	10,47	15,52	22,02	30,57	—
	PDMA	26,97	23,48	19,89	16,39	12,86	9,88	9,00	13,74	23,14	35,84	52,91	—
ΔCS	DM	-12,87	-14,58	-15,89	-16,97	-18,02	-19,39	-21,65	-25,76	-33,88	-52,46	-120,32	—
	DMA	35,82	29,61	22,51	14,18	13,65	16,74	24,21	30,55	39,53	58,04	127,59	—
	PDMA	7,44	5,01	2,75	-0,06	-0,04	2,39	8,04	13,88	16,82	20,25	36,12	—

Tabela 8.223: Constantes de acoplamento B98LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	411,1	429,5	449,1	470,1	492,6	516,6	542,3	569,6	598,8	629,7	662,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,5	15,4	14,1	12,6	11,0	9,3	7,4	5,3	3,0	0,6	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,8	-70,1	-72,7	-75,4	-78,4	-81,5	-84,9	-88,6	-92,5	-96,6	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,4	-2,5	-3,7	-5,0	-6,4	-7,9	-9,5	-11,2	-13,1	-15,1	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,0	39,1	40,3	41,5	42,9	44,4	45,9	47,6	49,4	51,4	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,4	-8,6	-10,0	-11,4	-13,0	-14,7	-16,6	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	149,1	155,6	162,7	170,3	178,5	187,2	196,4	206,2	216,6	227,6	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1650,6	-1646,3	-1636,3	-1621,5	-1602,4	-1579,8	-1554,5	-1527,0	-1497,9	-1467,8	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,8	-140,2	-125,3	-110,0	-94,5	-78,8	-63,0	-47,1	-31,1	-15,2	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-63,8	-46,7	-29,4	-12,0	5,5	23,3	41,1	59,1	77,2	95,4	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-197,8	-231,2	-266,5	-304,3	-346,1	-394,4	-454,0	-535,3	-664,2	-934,7	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	100,3	103,9	107,7	111,8	116,2	120,9	125,9	131,2	136,9	143,0	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-7,8	-8,8	-9,9	-11,0	-12,2	-13,5	-14,9	-16,4	-18,0	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	174,4	178,1	182,4	187,2	192,8	199,4	207,3	217,0	229,4	245,8	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	201,5	209,0	217,0	225,4	234,4	244,1	254,7	266,3	279,5	294,8	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,5	53,5	54,3	54,8	55,1	55,0	54,3	52,8	50,2	45,7	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,7	7,1	7,7	8,5	9,4	10,6	12,1	14,1	16,8	20,6	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	55,9	58,7	61,8	65,3	69,3	74,0	79,8	87,2	97,4	112,5	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,7	129,5	134,8	140,3	146,3	152,8	160,0	168,1	177,5	189,2	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,8	2,1	1,3	0,4	-0,7	-2,1	-3,9	-6,3	-9,8	-15,3	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,7	5,3	4,7	4,1	3,3	2,3	0,9	-0,9	-3,9	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,1	10,4	10,7	11,1	11,6	12,2	13,1	14,2	15,9	18,6	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,1	14,7	15,4	16,1	17,0	18,0	19,3	21,0	23,3	26,7	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	22,1	24,3	26,8	29,3	32,1	35,0	38,1	41,4	44,9	48,7	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	98,9	102,7	106,8	111,2	115,9	120,8	126,1	131,8	137,7	144,1	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,2	-1,7	-2,3	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,9	-6,8	-7,8	-4,7
Total	DM	-19,54	-17,57	-15,28	-12,78	-10,05	-7,25	-4,53	-2,30	-1,42	-5,41	-48,74	—
	DMA	30,91	26,16	20,97	15,65	12,81	12,75	17,54	25,05	34,94	51,43	110,36	—
	PDMA	61,02	50,62	39,83	28,17	16,95	12,08	21,65	40,45	64,06	97,09	158,62	—
CPI	DM	-33,33	-31,23	-28,62	-25,64	-22,44	-19,32	-16,83	-15,94	-19,04	-34,75	-145,56	—
	DMA	56,31	47,32	37,42	27,40	23,18	24,90	34,95	47,28	64,11	94,00	220,20	—
	PDMA	78,51	62,57	46,38	29,97	15,41	14,97	34,99	56,45	79,97	108,32	169,20	—
SPI	DM	-9,43	-7,56	-5,51	-3,35	-0,97	1,61	4,48	7,71	11,49	16,11	22,27	—
	DMA	12,29	10,64	8,91	7,03	5,21	3,85	4,77	8,75	13,55	20,21	29,81	—
	PDMA	48,20	41,86	35,03	26,85	18,07	9,96	11,86	28,71	52,40	88,85	150,86	—
ΔCS	DM	-23,89	-23,67	-23,11	-22,29	-21,47	-20,92	-21,31	-23,64	-30,53	-50,85	-167,83	—
	DMA	44,02	36,68	28,51	20,37	17,98	21,05	30,18	38,54	50,56	73,79	190,39	—
	PDMA	30,31	20,72	11,35	3,13	-2,66	5,00	23,13	27,74	27,57	19,47	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,06	-17,53	-15,64	-13,50	-11,10	-8,61	-6,20	-4,28	-3,85	-8,78	-57,89	—
	DMA	31,13	26,54	21,48	16,29	13,92	14,00	18,63	26,17	36,33	53,81	118,96	—
	PDMA	29,54	24,76	19,78	14,41	9,92	8,82	14,19	23,23	34,94	51,36	87,08	—
CPI	DM	-28,78	-28,18	-27,04	-25,50	-23,73	-22,08	-21,12	-21,94	-27,16	-46,26	-170,00	—
	DMA	54,06	45,88	36,72	27,44	24,55	26,56	35,84	47,60	64,30	95,36	232,34	—
	PDMA	33,83	27,69	21,42	14,97	10,62	10,93	21,09	32,69	46,50	65,55	120,26	—
SPI	DM	-11,58	-9,33	-6,87	-4,26	-1,38	1,75	5,28	9,30	14,08	20,05	28,35	—
	DMA	13,48	11,67	9,76	7,71	5,74	4,34	5,39	9,68	14,82	21,85	31,74	—
	PDMA	26,24	22,50	18,53	13,98	9,38	7,19	8,88	15,95	26,04	40,44	61,56	—
ΔCS	DM	-17,20	-18,85	-20,17	-21,24	-22,35	-23,83	-26,40	-31,24	-41,24	-66,31	-198,35	—
	DMA	40,58	34,21	26,96	19,73	18,81	22,22	30,45	37,92	49,48	73,51	200,60	—
	PDMA	7,59	5,19	2,89	0,99	1,23	3,74	12,21	16,75	20,46	25,11	58,70	—

Tabela 8.224: Constantes de acoplamento B98P86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	373,1	389,6	407,4	426,4	446,9	468,9	492,3	517,3	544,0	572,2	602,2	500
CO	$^1J_{CO}$	19,9	18,9	17,9	16,7	15,4	13,9	12,4	10,7	8,8	6,9	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-61,1	-63,2	-65,5	-68,0	-70,6	-73,4	-76,5	-79,8	-83,3	-87,0	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,0	-2,0	-3,0	-4,2	-5,4	-6,7	-8,1	-9,7	-11,3	-13,1	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	34,1	35,0	36,1	37,2	38,5	39,8	41,2	42,7	44,3	46,0	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-3,9	-4,8	-5,7	-6,7	-7,8	-9,0	-10,3	-11,7	-13,3	-14,9	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	128,2	134,2	140,8	147,8	155,3	163,4	172,0	181,2	190,9	201,2	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1648,1	-1642,9	-1632,1	-1616,4	-1596,6	-1573,4	-1547,5	-1519,4	-1489,7	-1458,9	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-163,9	-150,1	-135,8	-121,2	-106,3	-91,2	-75,9	-60,5	-45,0	-29,5	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-76,9	-60,5	-43,8	-27,0	-10,0	7,1	24,4	41,8	59,4	77,1	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-206,8	-240,2	-275,5	-313,5	-355,6	-404,5	-464,8	-546,7	-675,0	-934,7	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	88,9	92,1	95,6	99,2	103,2	107,4	111,9	116,7	121,8	127,2	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,0	-7,8	-8,8	-9,7	-10,8	-11,9	-13,1	-14,4	-15,8	-17,2	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	164,2	167,6	171,3	175,7	180,6	186,5	193,6	202,4	213,7	228,8	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	181,9	188,7	195,9	203,6	211,8	220,6	230,2	240,9	253,1	267,4	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,8	50,8	51,6	52,2	52,6	52,5	52,0	50,6	48,0	43,6	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,7	7,1	7,7	8,5	9,4	10,6	12,2	14,3	17,1	21,0	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	49,7	52,2	55,0	58,1	61,7	66,0	71,4	78,3	88,1	103,6	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	111,6	116,0	120,7	125,7	131,2	137,1	143,7	151,1	159,9	171,4	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,2	1,6	0,9	0,1	-0,8	-2,1	-3,9	-6,2	-9,7	-15,6	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,8	4,4	4,0	3,5	2,8	2,0	0,9	-0,5	-2,7	-6,3	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,1	9,4	9,8	10,2	10,7	11,4	12,3	13,5	15,5	18,8	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	12,9	13,5	14,2	14,9	15,8	16,8	18,2	19,9	22,5	26,6	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	17,7	19,8	22,0	24,3	26,8	29,4	32,2	35,2	38,4	41,8	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	88,1	91,5	95,2	99,2	103,4	107,9	112,6	117,7	123,1	128,9	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-0,9	-1,4	-1,9	-2,4	-3,0	-3,6	-4,3	-5,0	-5,8	-6,7	-7,6	-4,7
Total	DM	-25,83	-24,06	-21,96	-19,65	-17,15	-14,60	-12,15	-10,18	-9,54	-13,32	-45,89	—
	DMA	36,98	32,13	26,78	22,03	19,28	16,58	15,97	19,05	26,29	41,62	90,58	—
	PDMA	66,56	56,23	45,33	34,04	23,02	12,80	16,61	31,39	53,83	87,66	152,34	—
CPI	DM	-40,66	-38,81	-36,37	-33,62	-30,65	-27,82	-25,61	-25,00	-28,28	-43,24	-128,80	—
	DMA	63,97	55,14	45,34	37,05	33,14	29,35	29,54	37,44	52,03	80,33	182,13	—
	PDMA	93,08	76,93	60,34	43,85	29,64	15,68	18,04	35,86	56,84	83,51	134,69	—
SPI	DM	-14,96	-13,24	-11,39	-9,40	-7,25	-4,90	-2,28	0,69	4,21	8,61	14,91	—
	DMA	17,19	15,25	13,17	11,01	9,13	7,22	6,03	5,56	7,42	13,24	23,45	—
	PDMA	47,11	41,05	34,31	26,84	18,17	10,70	15,56	28,10	51,63	90,71	165,29	—
Δ CS	DM	-25,70	-25,57	-24,98	-24,22	-23,40	-22,92	-23,33	-25,69	-32,49	-51,85	-143,71	—
	DMA	46,79	39,88	32,17	26,04	24,01	22,13	23,51	31,88	44,61	67,09	158,67	—
	PDMA	45,96	35,88	26,03	17,01	11,47	4,98	2,49	7,76	5,20	-7,20	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,52	-24,18	-22,49	-20,54	-18,39	-16,16	-14,02	-12,38	-12,18	-16,81	-53,57	—
	DMA	37,50	32,77	27,50	22,92	20,62	18,37	17,52	20,08	27,26	43,40	97,15	—
	PDMA	35,54	30,47	25,00	19,51	14,94	11,07	10,68	15,54	25,31	40,93	73,57	—
CPI	DM	-35,54	-35,14	-34,13	-32,78	-31,21	-29,81	-29,11	-30,18	-35,55	-53,77	-149,66	—
	DMA	61,18	53,10	43,99	36,56	33,95	31,49	31,55	38,50	52,79	82,15	192,36	—
	PDMA	41,12	34,29	27,18	20,23	15,94	11,98	13,58	21,58	32,92	50,46	94,96	—
SPI	DM	-17,81	-15,75	-13,53	-11,13	-8,52	-5,65	-2,41	1,31	5,80	11,62	20,35	—
	DMA	19,28	17,13	14,81	12,42	10,37	8,28	6,73	5,91	7,62	13,60	23,91	—
	PDMA	31,26	27,52	23,33	18,94	14,17	10,38	8,46	10,88	19,46	33,60	57,11	—
Δ CS	DM	-17,73	-19,39	-20,60	-21,65	-22,69	-24,16	-26,70	-31,49	-41,35	-65,39	-170,01	—
	DMA	41,90	35,97	29,18	24,14	23,58	23,21	24,82	32,59	45,17	68,55	168,45	—
	PDMA	9,86	6,77	3,85	1,29	1,77	1,60	5,12	10,70	13,46	16,86	37,85	—

Tabela 8.225: Constantes de acoplamento B98PBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	368,6	385,5	403,7	423,2	444,2	466,6	490,7	516,3	543,6	572,6	603,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,4	19,5	18,4	17,3	16,0	14,5	12,9	11,2	9,4	7,4	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-60,8	-63,0	-65,3	-67,8	-70,5	-73,5	-76,6	-79,9	-83,5	-87,4	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,3	-2,3	-3,4	-4,6	-5,8	-7,2	-8,7	-10,3	-12,0	-13,9	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	34,1	35,1	36,1	37,3	38,6	39,9	41,3	42,9	44,5	46,3	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,2	-5,1	-6,1	-7,2	-8,3	-9,6	-10,9	-12,4	-14,0	-15,7	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	127,2	133,4	140,2	147,5	155,4	163,8	172,7	182,2	192,3	203,0	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1652,7	-1646,8	-1635,3	-1619,0	-1598,6	-1574,8	-1548,3	-1519,7	-1489,5	-1458,3	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-165,0	-151,1	-136,7	-122,0	-106,9	-91,7	-76,2	-60,7	-45,0	-29,4	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-78,0	-61,5	-44,8	-27,8	-10,7	6,5	24,0	41,6	59,4	77,2	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-206,5	-240,6	-276,7	-315,6	-358,9	-409,4	-472,5	-559,2	-698,2	-993,3	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	89,2	92,5	96,0	99,8	103,8	108,2	112,8	117,7	122,9	128,5	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,3	-11,4	-12,5	-13,8	-15,1	-16,6	-18,2	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	163,2	166,7	170,5	175,0	180,1	186,3	193,8	203,2	215,5	232,4	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	183,4	190,4	197,8	205,6	214,1	223,2	233,2	244,5	257,5	273,1	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,1	51,0	51,8	52,3	52,5	52,3	51,5	49,7	46,5	41,0	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,0	7,5	8,2	9,0	10,0	11,4	13,2	15,6	18,9	23,6	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	49,3	51,8	54,6	57,9	61,6	66,2	71,9	79,5	90,7	109,5	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,3	116,8	121,7	126,8	132,4	138,6	145,4	153,3	162,9	176,0	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,3	0,6	-0,3	-1,4	-2,8	-4,7	-7,4	-11,6	-19,1	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	4,2	3,7	3,1	2,3	1,4	0,1	-1,5	-4,2	-8,9	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	9,3	9,6	10,0	10,5	11,1	11,8	12,9	14,4	16,8	21,1	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	13,2	13,8	14,5	15,3	16,3	17,5	19,0	21,0	24,1	29,3	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	17,6	19,7	21,9	24,2	26,7	29,4	32,2	35,2	38,5	41,9	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	88,5	92,1	95,9	99,9	104,2	108,8	113,7	118,9	124,4	130,3	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,6	-2,2	-2,7	-3,3	-4,0	-4,7	-5,4	-6,2	-7,1	-8,1	-4,7
Total	DM	-26,23	-24,40	-22,28	-19,91	-17,37	-14,77	-12,31	-10,36	-9,92	-14,73	-62,67	—
	DMA	37,33	32,38	26,90	22,11	19,27	16,60	16,18	19,48	28,04	45,57	112,44	—
	PDMA	65,52	55,03	43,69	31,88	20,26	13,01	19,80	36,99	62,67	102,99	190,22	—
CPI	DM	-41,74	-39,80	-37,35	-34,51	-31,49	-28,71	-26,59	-26,26	-30,35	-48,40	-172,10	—
	DMA	65,14	56,09	46,07	37,93	33,84	30,02	30,37	38,43	54,32	85,98	226,41	—
	PDMA	93,68	77,45	60,55	43,94	28,97	14,72	19,01	37,12	58,87	87,03	151,26	—
SPI	DM	-14,87	-13,11	-11,23	-9,20	-7,01	-4,55	-1,84	1,30	5,07	9,95	17,57	—
	DMA	16,95	14,99	12,84	10,51	8,59	6,77	5,77	5,59	8,77	15,93	28,87	—
	PDMA	44,87	38,58	31,32	23,03	13,86	11,75	20,38	36,90	65,46	114,70	218,79	—
ΔCS	DM	-26,87	-26,69	-26,12	-25,31	-24,48	-24,16	-24,75	-27,56	-35,42	-58,35	-189,67	—
	DMA	48,19	41,10	33,23	27,42	25,24	23,25	24,60	32,83	45,54	70,06	197,54	—
	PDMA	48,82	38,87	29,23	20,91	15,11	2,97	-1,37	0,22	-6,59	-27,67	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,90	-24,50	-22,77	-20,77	-18,56	-16,27	-14,11	-12,49	-12,46	-18,15	-71,93	—
	DMA	37,87	33,03	27,62	23,00	20,63	18,34	17,70	20,49	29,09	47,59	121,21	—
	PDMA	34,79	29,74	23,97	18,31	13,64	9,81	11,45	17,86	29,02	46,97	89,72	—
CPI	DM	-36,61	-36,13	-35,10	-33,68	-32,07	-30,73	-30,15	-31,55	-37,83	-59,46	-197,33	—
	DMA	62,35	54,05	44,70	37,44	34,65	32,17	32,51	39,61	55,31	88,36	241,03	—
	PDMA	41,05	34,20	26,74	19,80	14,74	10,52	14,91	23,09	35,15	54,27	112,92	—
SPI	DM	-17,67	-15,55	-13,29	-10,84	-8,16	-5,15	-1,78	2,18	7,05	13,63	24,54	—
	DMA	19,04	16,86	14,48	11,90	9,84	7,71	6,32	5,78	8,92	16,23	29,05	—
	PDMA	29,97	26,31	21,84	17,17	12,79	9,27	8,79	13,84	24,30	41,36	71,87	—
ΔCS	DM	-18,94	-20,58	-21,81	-22,84	-23,91	-25,58	-28,37	-33,73	-44,88	-73,09	-221,87	—
	DMA	43,31	37,19	30,22	25,54	24,81	24,46	26,19	33,83	46,39	72,13	211,98	—
	PDMA	11,08	7,89	4,90	2,63	1,94	1,26	6,12	9,25	10,85	12,90	41,06	—

Tabela 8.226: Constantes de acoplamento B98PW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	371,0	388,0	406,2	425,8	446,8	469,3	493,4	519,1	546,4	575,5	606,3	500
CO	$^1J_{CO}$	20,3	19,3	18,2	17,0	15,7	14,3	12,7	10,9	9,1	7,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-61,1	-63,3	-65,6	-68,2	-70,9	-73,8	-77,0	-80,3	-83,9	-87,8	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-1,3	-2,3	-3,4	-4,6	-5,9	-7,2	-8,7	-10,3	-12,1	-13,9	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	34,2	35,2	36,3	37,5	38,8	40,1	41,5	43,1	44,7	46,5	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,2	-5,1	-6,1	-7,2	-8,3	-9,6	-11,0	-12,4	-14,0	-15,8	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	128,0	134,3	141,2	148,5	156,4	164,8	173,8	183,3	193,4	204,2	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1655,9	-1649,9	-1638,2	-1621,8	-1601,3	-1577,3	-1550,7	-1522,0	-1491,7	-1460,4	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-164,3	-150,3	-135,9	-121,1	-106,0	-90,6	-75,1	-59,5	-43,9	-28,2	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-77,2	-60,6	-43,8	-26,8	-9,6	7,7	25,2	42,9	60,6	78,6	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-206,3	-240,4	-276,5	-315,4	-358,8	-409,3	-472,3	-559,1	-698,8	-997,1	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	89,7	93,1	96,6	100,4	104,4	108,8	113,4	118,3	123,6	129,2	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,3	-11,4	-12,5	-13,8	-15,2	-16,6	-18,2	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	164,2	167,7	171,6	176,1	181,3	187,5	195,1	204,6	217,1	234,1	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	184,3	191,3	198,8	206,7	215,1	224,3	234,4	245,7	258,7	274,4	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,1	51,0	51,8	52,3	52,6	52,3	51,5	49,7	46,5	40,9	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,9	7,5	8,1	8,9	10,0	11,4	13,1	15,5	18,8	23,5	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	49,7	52,3	55,1	58,4	62,2	66,8	72,6	80,3	91,5	110,5	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	113,0	117,5	122,3	127,5	133,2	139,3	146,2	154,1	163,8	177,0	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	2,0	1,3	0,6	-0,2	-1,4	-2,8	-4,7	-7,5	-11,7	-19,1	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,6	4,2	3,7	3,1	2,4	1,4	0,2	-1,5	-4,1	-8,8	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,3	9,6	10,0	10,5	11,1	11,8	12,8	14,3	16,7	21,1	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,2	13,8	14,5	15,3	16,3	17,5	19,0	21,0	24,0	29,3	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	17,9	20,0	22,2	24,6	27,1	29,8	32,6	35,7	38,9	42,4	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	89,0	92,6	96,4	100,5	104,8	109,4	114,3	119,5	125,1	131,0	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,2	-1,6	-2,2	-2,7	-3,3	-4,0	-4,7	-5,4	-6,2	-7,1	-8,1	-4,7
Total	DM	-26,02	-24,16	-22,02	-19,62	-17,07	-14,45	-11,97	-10,01	-9,58	-14,47	-65,03	—
	DMA	37,10	32,11	26,62	21,86	19,04	16,35	16,12	19,70	28,55	46,35	115,74	—
	PDMA	65,11	54,51	43,18	31,52	19,93	12,50	19,88	37,59	63,27	103,72	191,82	—
CPI	DM	-41,61	-39,64	-37,14	-34,29	-31,27	-28,41	-26,28	-25,93	-30,10	-48,39	-178,33	—
	DMA	64,97	55,87	45,81	37,58	33,53	29,66	30,41	38,98	55,23	87,23	233,56	—
	PDMA	92,96	76,59	59,60	42,90	28,08	13,82	19,88	38,12	60,23	88,65	155,08	—
SPI	DM	-14,59	-12,81	-10,93	-8,87	-6,65	-4,21	-1,47	1,67	5,47	10,41	18,05	—
	DMA	16,67	14,69	12,54	10,33	8,42	6,58	5,65	5,56	8,99	16,38	29,34	—
	PDMA	44,69	38,33	31,13	23,17	13,95	11,54	19,87	37,20	65,50	114,77	218,77	—
ΔCS	DM	-27,02	-26,83	-26,21	-25,42	-24,63	-24,20	-24,81	-27,59	-35,57	-58,80	-196,37	—
	DMA	48,31	41,19	33,27	27,25	25,11	23,08	24,76	33,42	46,24	70,85	204,22	—
	PDMA	48,26	38,26	28,47	19,73	14,13	2,28	0,00	0,92	-5,27	-26,12	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,70	-24,27	-22,52	-20,50	-18,27	-15,96	-13,78	-12,14	-12,13	-17,91	-74,66	—
	DMA	37,64	32,77	27,34	22,77	20,41	18,10	17,59	20,67	29,61	48,43	124,89	—
	PDMA	34,56	29,42	23,68	18,01	13,40	9,59	11,38	17,98	29,36	47,57	91,32	—
CPI	DM	-36,55	-36,04	-34,97	-33,54	-31,94	-30,52	-29,93	-31,31	-37,67	-59,59	-204,32	—
	DMA	62,25	53,90	44,51	37,16	34,42	31,90	32,43	40,09	56,19	89,59	248,76	—
	PDMA	40,79	33,85	26,36	19,32	14,49	10,34	15,07	23,33	35,85	55,12	116,19	—
SPI	DM	-17,35	-15,21	-12,95	-10,46	-7,75	-4,75	-1,36	2,61	7,52	14,15	25,08	—
	DMA	18,72	16,52	14,13	11,69	9,63	7,49	6,18	5,73	9,16	16,76	29,60	—
	PDMA	29,77	26,01	21,62	17,01	12,56	9,02	8,54	13,87	24,36	41,77	72,19	—
ΔCS	DM	-19,20	-20,83	-22,02	-23,08	-24,19	-25,77	-28,57	-33,92	-45,19	-73,74	-229,40	—
	DMA	43,53	37,38	30,38	25,47	24,79	24,41	26,25	34,36	47,03	72,83	219,16	—
	PDMA	11,01	7,84	4,74	2,31	1,93	1,32	6,53	9,47	11,49	13,34	44,00	—

Tabela 8.227: Constantes de acoplamento B98TPSS com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	369,2	387,0	405,9	426,2	447,8	470,9	495,5	521,7	549,5	578,9	610,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,2	19,3	18,2	17,0	15,7	14,3	12,7	10,9	9,1	7,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-61,6	-63,9	-66,3	-69,0	-71,8	-74,9	-78,1	-81,6	-85,3	-89,2	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-0,9	-2,0	-3,1	-4,4	-5,7	-7,2	-8,7	-10,4	-12,2	-14,1	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	35,2	36,3	37,5	38,7	40,0	41,4	42,9	44,6	46,3	48,1	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,7	-4,7	-5,7	-6,8	-8,1	-9,4	-10,8	-12,4	-14,1	-15,9	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	136,3	143,3	150,7	158,8	167,4	176,6	186,5	197,0	208,2	220,0	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,6	-1651,3	-1640,4	-1624,6	-1604,7	-1581,4	-1555,4	-1527,2	-1497,4	-1466,6	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-165,6	-151,8	-137,5	-122,9	-108,0	-92,9	-77,7	-62,4	-47,1	-31,7	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,4	-58,9	-42,2	-25,4	-8,3	8,7	26,0	43,5	61,0	78,6	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-204,5	-238,6	-274,7	-313,6	-356,7	-406,9	-469,3	-555,0	-691,9	-981,2	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	95,8	99,4	103,2	107,3	111,7	116,4	121,4	126,7	132,4	138,5	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-7,6	-8,6	-9,7	-10,9	-12,2	-13,6	-15,0	-16,6	-18,3	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	163,7	167,2	171,2	175,8	181,2	187,6	195,4	205,3	218,2	236,0	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	195,3	202,8	210,7	219,2	228,2	238,0	248,8	260,8	274,7	291,4	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,6	52,6	53,3	53,9	54,1	53,8	52,9	51,0	47,6	41,7	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,3	7,8	8,4	9,3	10,4	11,7	13,6	16,0	19,4	24,3	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,2	52,8	55,7	59,1	63,0	67,7	73,7	81,7	93,2	112,5	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,0	124,9	130,1	135,7	141,8	148,4	155,8	164,2	174,5	188,3	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	2,0	1,4	0,5	-0,3	-1,5	-3,1	-5,1	-7,9	-12,3	-19,9	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,0	5,6	5,1	4,5	3,7	2,7	1,5	-0,2	-2,9	-7,5	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,9	10,3	10,7	11,1	11,7	12,5	13,6	15,1	17,5	21,7	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,7	15,3	16,1	16,9	17,9	19,1	20,6	22,7	25,8	31,0	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,4	20,5	22,8	25,1	27,7	30,4	33,3	36,4	39,7	43,2	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	94,8	98,7	102,8	107,2	111,8	116,8	122,1	127,8	133,8	140,2	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,6	-2,2	-2,7	-3,4	-4,1	-4,8	-5,6	-6,5	-7,4	-8,5	-4,7
Total	DM	-24,25	-22,32	-20,11	-17,64	-15,00	-12,31	-9,70	-7,59	-6,94	-11,36	-57,72	—
	DMA	35,78	30,71	25,12	20,11	17,20	14,40	14,16	20,47	30,98	48,78	113,73	—
	PDMA	66,16	55,56	43,82	32,02	20,34	10,83	17,87	37,41	64,91	105,61	191,26	—
CPI	DM	-40,75	-38,75	-36,23	-33,35	-30,30	-27,43	-25,21	-24,75	-28,62	-46,09	-166,33	—
	DMA	64,50	55,33	45,23	36,61	32,46	28,52	28,81	39,55	56,78	88,07	223,67	—
	PDMA	92,35	75,82	58,85	41,99	27,01	12,61	18,76	38,54	61,43	89,49	152,58	—
SPI	DM	-12,15	-10,27	-8,29	-6,11	-3,78	-1,23	1,67	4,99	8,96	14,11	21,93	—
	DMA	14,72	12,65	10,37	8,01	6,01	4,05	3,42	6,47	12,05	19,96	33,11	—
	PDMA	46,96	40,69	32,80	24,71	15,46	9,52	17,22	36,57	67,46	117,43	219,63	—
Δ CS	DM	-28,61	-28,48	-27,94	-27,24	-26,52	-26,20	-26,88	-29,74	-37,58	-60,20	-188,25	—
	DMA	49,78	42,67	34,86	28,60	26,46	24,46	25,39	33,07	44,73	68,11	190,56	—
	PDMA	45,39	35,13	26,04	17,28	11,55	3,10	1,55	1,97	-6,03	-27,95	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-23,83	-22,32	-20,49	-18,37	-16,04	-13,63	-11,29	-9,47	-9,19	-14,42	-66,43	—
	DMA	36,17	31,19	25,66	20,79	18,33	15,96	15,38	21,55	32,36	51,19	122,68	—
	PDMA	33,62	28,26	22,41	16,52	11,96	8,39	10,61	19,33	32,28	50,72	93,09	—
CPI	DM	-35,79	-35,23	-34,13	-32,65	-31,00	-29,54	-28,83	-30,07	-36,08	-57,06	-191,09	—
	DMA	61,91	53,47	44,03	36,23	33,38	30,74	30,59	40,65	57,86	90,52	237,91	—
	PDMA	41,32	34,14	26,60	19,26	14,17	9,68	13,31	23,39	36,91	56,04	113,64	—
SPI	DM	-14,64	-12,39	-10,00	-7,38	-4,54	-1,39	2,20	6,38	11,50	18,38	29,46	—
	DMA	16,36	14,05	11,52	8,91	6,75	4,59	3,68	6,85	12,75	20,93	34,05	—
	PDMA	27,70	23,74	19,19	14,42	10,27	7,40	8,54	16,21	28,72	46,64	77,27	—
Δ CS	DM	-21,15	-22,84	-24,13	-25,27	-26,46	-28,15	-31,03	-36,45	-47,58	-75,44	-220,55	—
	DMA	45,55	39,42	32,51	27,32	26,63	26,15	26,91	33,80	45,11	69,59	203,86	—
	PDMA	13,61	10,40	7,41	4,84	3,91	2,28	4,77	7,19	8,19	9,40	36,37	—

Tabela 8.228: Valores de PDMA total obtidos para troca B98 com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
B98B95	66,9	57,1	46,8	36,1	25,7	15,0	12,3	22,2	39,0	61,3	92,6
B98B98	59,6	49,2	39,2	28,4	18,4	11,1	20,2	37,0	58,4	87,2	131,6
B98B971	59,9	49,5	39,4	28,6	18,0	13,3	19,7	34,7	55,0	81,6	120,6
B98B972	59,4	49,7	39,6	29,3	23,5	24,4	27,2	37,7	54,6	80,0	119,3
B98LYP	60,8	50,3	39,3	27,8	16,9	10,7	21,7	40,3	64,4	98,3	161,5
B98P86	66,1	55,7	44,9	33,7	22,3	12,8	16,6	33,0	54,5	89,5	156,7
B98PBE	65,0	54,5	43,1	31,5	20,2	14,5	19,9	38,0	63,6	104,9	196,2
B98PW91	64,7	54,0	42,6	30,9	19,5	14,0	20,2	38,4	64,1	105,7	197,9
B98TPSS	65,4	54,7	43,3	31,2	19,4	11,7	18,5	38,0	66,1	107,9	197,2

8.4.1.5 Troca O

Tabela 8.229: Constantes de acoplamento OB95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	371,4	397,6	424,1	450,9	478,1	505,6	533,4	561,5	589,9	618,5	647,4	500
CO	$^1J_{CO}$	25,5	23,6	21,6	19,5	17,3	15,0	12,6	10,1	7,6	5,0	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-64,2	-67,2	-70,3	-73,4	-76,5	-79,7	-82,9	-86,2	-89,5	-92,8	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,8	-6,6	-7,5	-8,3	-9,1	-10,0	-10,9	-11,8	-12,7	-13,7	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,7	38,8	40,0	41,1	42,3	43,4	44,6	45,8	47,0	48,3	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,5	-9,3	-10,0	-10,8	-11,6	-12,4	-13,2	-14,0	-14,9	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	146,1	153,7	161,2	168,6	175,9	183,1	190,1	197,1	203,9	210,5	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1604,8	-1592,1	-1575,7	-1556,0	-1533,8	-1509,6	-1483,8	-1456,9	-1429,3	-1401,1	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-186,5	-167,1	-147,9	-129,1	-110,7	-92,8	-75,3	-58,4	-41,9	-26,0	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-98,9	-76,8	-55,1	-33,9	-13,2	6,9	26,5	45,6	64,1	82,1	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-241,8	-275,5	-308,9	-343,2	-379,7	-420,5	-468,6	-529,8	-615,4	-754,2	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	107,2	109,9	112,5	115,2	117,9	120,6	123,4	126,2	129,1	132,0	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,9	-11,5	-12,1	-12,7	-13,3	-13,9	-14,5	-15,1	-15,8	-16,4	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	175,5	179,3	183,3	187,7	192,5	197,8	203,7	210,2	217,6	225,9	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	230,7	234,6	238,7	242,8	247,1	251,5	256,1	260,9	266,0	271,4	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,9	52,2	52,4	52,4	52,3	52,0	51,5	50,8	49,7	48,3	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,0	10,4	10,8	11,3	12,0	12,7	13,6	14,6	15,8	17,2	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	52,7	55,8	59,0	62,5	66,2	70,3	74,8	79,9	85,7	92,5	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	139,5	142,8	146,1	149,5	153,0	156,6	160,4	164,4	168,7	173,4	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,6	-1,4	-2,2	-3,2	-4,2	-5,5	-6,9	-8,6	-10,7	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,8	3,3	2,8	2,3	1,8	1,2	0,5	-0,2	-1,1	-2,2	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,9	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	13,9	14,7	15,7	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,5	17,8	18,1	18,5	19,0	19,6	20,3	21,0	22,0	23,2	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	21,3	23,6	25,8	28,1	30,5	32,9	35,4	37,9	40,4	43,0	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	107,9	110,6	113,4	116,2	119,0	121,9	124,8	127,7	130,7	133,7	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,8	-3,2	-3,6	-4,0	-4,4	-4,8	-5,2	-5,6	-6,0	-6,4	-6,9	-4,7
Total	DM	-21,50	-18,80	-15,98	-13,05	-10,10	-7,24	-4,58	-2,37	-1,02	-1,64	-8,15	—
	DMA	29,00	23,41	18,37	15,23	12,26	10,55	13,37	18,86	26,46	37,54	54,82	—
	PDMA	55,34	43,64	32,03	22,27	17,34	15,11	22,85	36,77	52,18	69,70	90,89	—
CPI	DM	-42,73	-38,27	-33,52	-28,61	-23,74	-19,19	-15,24	-12,46	-11,93	-16,29	-34,85	—
	DMA	58,55	46,80	36,39	30,48	24,65	20,37	25,47	35,85	50,42	72,71	109,09	—
	PDMA	99,02	78,31	58,57	43,11	28,62	16,51	23,66	43,48	63,78	85,81	112,26	—
SPI	DM	-5,93	-4,53	-3,12	-1,65	-0,10	1,52	3,23	5,04	6,99	9,10	11,44	—
	DMA	7,34	6,26	5,16	4,05	3,18	3,35	4,49	6,40	8,89	11,75	15,03	—
	PDMA	23,30	18,21	12,56	6,99	9,07	14,09	22,27	31,85	43,68	57,88	75,22	—
ΔCS	DM	-36,80	-33,75	-30,40	-26,96	-23,64	-20,71	-18,47	-17,50	-18,91	-25,39	-46,29	—
	DMA	51,21	40,54	31,23	26,44	21,47	17,03	20,99	29,45	41,52	60,96	94,06	—
	PDMA	75,72	60,10	46,01	36,12	19,56	2,43	1,39	11,63	20,09	27,93	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,52	-17,39	-15,08	-12,64	-10,13	-7,71	-5,47	-3,70	-2,87	-4,22	-12,16	—
	DMA	27,67	22,35	17,66	15,08	12,58	11,45	14,40	19,68	27,36	38,97	57,56	—
	PDMA	22,36	17,57	13,13	10,64	9,03	9,39	13,48	19,82	27,10	35,80	47,30	—
CPI	DM	-35,61	-32,92	-29,86	-26,58	-23,29	-20,30	-17,91	-16,77	-18,03	-24,63	-46,81	—
	DMA	53,01	42,30	33,02	28,64	24,29	21,60	26,87	36,37	50,55	73,27	111,53	—
	PDMA	32,99	24,94	17,69	14,82	12,69	12,76	18,35	27,43	37,42	49,66	67,02	—
SPI	DM	-7,14	-5,44	-3,72	-1,92	-0,02	1,98	4,11	6,35	8,80	11,48	14,49	—
	DMA	8,17	7,01	5,84	4,65	3,57	3,64	4,80	6,85	9,52	12,58	16,05	—
	PDMA	14,18	11,90	9,61	7,42	6,22	6,80	9,74	13,96	19,16	25,13	32,14	—
ΔCS	DM	-28,47	-27,48	-26,14	-24,66	-23,27	-22,28	-22,02	-23,12	-26,83	-36,11	-61,30	—
	DMA	44,84	35,29	27,18	23,99	20,72	17,96	22,07	29,52	41,03	60,69	95,48	—
	PDMA	18,82	13,04	8,08	7,40	6,46	5,96	8,62	13,47	18,26	24,52	34,88	—

Tabela 8.230: Constantes de acoplamento OB971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,5	402,0	427,8	453,9	480,3	506,9	533,9	561,0	588,4	616,1	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,0	19,8	17,5	15,1	12,5	9,9	7,2	4,4	1,5	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,7	-67,7	-70,7	-73,7	-76,7	-79,8	-82,9	-86,1	-89,3	-92,5	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,7	-6,5	-7,3	-8,1	-8,9	-9,8	-10,7	-11,5	-12,4	-13,3	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,6	39,7	40,9	42,0	43,2	44,4	45,6	46,8	48,1	49,3	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,7	-9,4	-10,2	-11,0	-11,8	-12,6	-13,4	-14,3	-15,2	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	172,8	180,3	187,6	194,9	201,9	208,8	215,5	222,1	228,4	234,6	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1652,4	-1636,9	-1617,6	-1595,3	-1570,4	-1543,5	-1515,2	-1485,8	-1455,8	-1425,4	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-175,4	-154,8	-134,5	-114,7	-95,5	-76,8	-58,7	-41,1	-24,1	-7,7	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-87,1	-64,0	-41,5	-19,6	1,6	22,3	42,3	61,8	80,7	99,0	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-240,8	-274,7	-308,6	-343,8	-381,9	-425,1	-477,3	-545,4	-644,3	-814,5	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	115,4	118,2	121,1	123,9	126,8	129,8	132,8	135,8	138,8	141,9	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,0	-11,7	-12,3	-12,9	-13,5	-14,2	-14,8	-15,4	-16,1	-16,7	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,4	201,2	206,4	212,1	218,3	225,1	232,8	241,4	251,1	262,2	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,7	247,0	251,4	255,9	260,7	265,6	270,8	276,3	282,2	288,5	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	50,7	50,6	50,3	49,9	49,2	48,2	46,9	45,2	43,0	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,9	10,4	10,9	11,6	12,3	13,2	14,2	15,4	16,9	18,5	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	69,3	73,3	77,7	82,5	87,7	93,6	100,4	108,4	118,1	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	148,2	151,7	155,3	159,0	162,9	166,9	171,2	175,8	180,8	186,5	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-2,9	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,8	-12,1	-15,0	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,8	2,3	1,8	1,2	0,5	-0,2	-1,0	-2,1	-3,4	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,9	11,2	11,5	11,9	12,4	12,9	13,5	14,3	15,2	16,4	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,4	17,7	18,1	18,5	19,1	19,7	20,5	21,4	22,5	24,0	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,5	29,0	31,6	34,3	37,0	39,7	42,6	45,4	48,4	51,4	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	116,0	119,0	122,0	125,0	128,0	131,1	134,2	137,4	140,5	143,7	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-4,7
Total													
Total	DM	-18,43	-15,51	-12,43	-9,28	-6,13	-3,13	-0,36	1,88	3,00	1,50	-8,92	—
	DMA	27,22	21,53	16,87	15,12	14,29	15,70	21,14	27,32	34,83	46,46	68,67	—
	PDMA	46,19	33,74	23,62	19,39	18,04	23,74	38,34	54,19	71,90	92,04	118,03	—
CPI													
CPI	DM	-42,08	-37,29	-32,22	-27,09	-22,11	-17,53	-13,74	-11,39	-11,92	-19,00	-47,66	—
	DMA	57,74	45,56	34,67	29,76	25,31	25,42	34,75	45,50	58,92	81,53	128,26	—
	PDMA	88,63	66,97	46,22	31,08	18,29	18,33	38,37	58,64	79,70	102,73	132,83	—
SPI													
SPI	DM	-1,09	0,46	2,09	3,79	5,58	7,43	9,45	11,61	13,93	16,53	19,49	—
	DMA	4,84	3,90	3,81	4,37	6,21	8,58	11,16	13,99	17,16	20,75	24,97	—
	PDMA	15,07	9,37	7,05	10,82	17,86	27,71	38,32	50,93	66,18	84,21	107,17	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-40,99	-37,75	-34,30	-30,88	-27,69	-24,96	-23,19	-23,00	-25,85	-35,53	-67,15	—
	DMA	52,90	41,66	30,87	25,39	19,10	16,84	23,59	31,51	41,76	60,78	103,30	—
	PDMA	73,56	57,60	39,17	20,26	0,42	-9,38	0,05	7,71	13,52	18,52	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-16,50	-14,14	-11,57	-8,90	-6,19	-3,60	-1,24	0,55	1,14	-1,16	-13,48	—
	DMA	26,23	20,86	16,59	15,50	15,40	17,18	22,37	28,39	35,90	48,07	72,17	—
	PDMA	18,38	13,57	9,42	8,23	9,54	14,08	20,74	28,05	36,35	46,10	60,22	—
CPI													
CPI	DM	-36,08	-33,12	-29,79	-26,34	-22,98	-20,01	-17,84	-17,21	-19,68	-29,30	-62,61	—
	DMA	53,30	42,22	32,49	29,28	26,50	27,23	35,50	45,37	58,24	81,28	130,91	—
	PDMA	29,43	21,00	13,17	11,12	11,18	15,30	24,01	33,31	43,87	57,00	78,24	—
SPI													
SPI	DM	-1,44	0,46	2,45	4,52	6,73	9,02	11,52	14,22	17,16	20,48	24,32	—
	DMA	5,41	4,43	4,35	4,89	6,87	9,45	12,26	15,32	18,72	22,53	26,98	—
	PDMA	9,88	7,86	6,53	6,01	8,28	13,13	18,23	24,01	30,56	37,72	46,35	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-34,64	-33,58	-32,24	-30,86	-29,71	-29,03	-29,36	-31,43	-36,84	-49,78	-86,93	—
	DMA	47,89	37,79	28,14	24,39	19,63	17,78	23,24	30,05	39,52	58,75	103,93	—
	PDMA	19,55	13,14	6,64	5,12	2,90	2,17	5,78	9,30	13,31	19,28	31,89	—

Tabela 8.231: Constantes de acoplamento OB972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	414,7	441,2	468,1	495,2	522,5	550,1	578,0	606,1	634,4	662,9	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	20,4	18,0	15,5	12,8	10,0	7,1	4,2	1,1	-1,9	-5,1	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,5	-73,6	-76,8	-79,9	-83,2	-86,4	-89,7	-93,0	-96,3	-99,7	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,6	-6,4	-7,2	-8,0	-8,9	-9,8	-10,6	-11,5	-12,5	-13,4	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,8	42,0	43,2	44,4	45,6	46,8	48,0	49,3	50,5	51,8	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,3	-8,0	-8,8	-9,5	-10,3	-11,1	-11,9	-12,7	-13,5	-14,4	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	164,6	173,0	181,3	189,5	197,5	205,4	213,1	220,7	228,2	235,4	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1697,9	-1680,5	-1659,3	-1635,0	-1608,4	-1579,9	-1550,1	-1519,3	-1488,0	-1456,5	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-160,8	-140,1	-120,0	-100,4	-81,4	-63,0	-45,1	-27,9	-11,2	4,7	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-70,1	-47,1	-24,7	-3,0	18,0	38,4	58,2	77,4	96,0	114,1	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-231,2	-264,7	-298,2	-332,9	-370,6	-413,6	-466,0	-535,6	-639,6	-828,6	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	117,6	120,3	123,1	125,9	128,8	131,6	134,6	137,5	140,5	143,5	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,7	-10,3	-10,9	-11,5	-12,1	-12,7	-13,3	-13,8	-14,4	-15,0	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	194,7	199,7	205,0	210,8	217,1	224,2	231,9	240,6	250,4	261,5	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	243,9	248,1	252,4	256,8	261,4	266,1	271,0	276,2	281,8	287,7	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,7	50,8	50,7	50,5	50,1	49,5	48,7	47,5	46,0	44,1	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,3	9,7	10,1	10,7	11,3	12,0	12,9	13,9	15,0	16,4	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	65,6	69,6	73,8	78,4	83,5	89,2	95,6	103,1	112,0	122,9	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	149,7	153,1	156,7	160,4	164,2	168,1	172,3	176,9	181,8	187,4	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,4	-1,2	-2,1	-3,2	-4,3	-5,6	-7,2	-9,0	-11,3	-14,2	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,5	4,1	3,6	3,1	2,6	2,0	1,3	0,5	-0,3	-1,4	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,5	10,7	11,0	11,4	11,7	12,2	12,7	13,4	14,2	15,2	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,0	17,2	17,6	18,0	18,4	19,0	19,6	20,4	21,4	22,7	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,0	31,5	34,1	36,7	39,4	42,1	44,8	47,7	50,5	53,5	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	117,3	120,2	123,1	126,0	129,0	132,0	135,0	138,1	141,2	144,3	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,5	-2,8	-3,2	-3,6	-4,0	-4,4	-4,8	-5,2	-5,7	-6,1	-6,5	-4,7
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-17,33	-14,25	-11,03	-7,75	-4,50	-1,37	1,47	3,75	4,78	2,64	-12,05	—
	DMA	26,33	20,56	15,20	13,22	14,87	19,83	25,30	31,55	39,23	50,39	75,85	—
	PDMA	43,99	31,74	20,13	14,33	13,66	25,39	39,53	55,12	72,15	92,00	118,82	—
CPI													
	DM	-40,35	-35,19	-29,80	-24,34	-19,10	-14,26	-10,25	-7,85	-8,62	-17,25	-56,05	—
	DMA	56,15	43,63	30,98	24,83	26,23	35,12	44,65	55,59	69,51	91,05	145,55	—
	PDMA	74,56	52,78	32,24	18,22	13,02	33,48	53,68	74,21	95,41	118,89	152,13	—
SPI													
	DM	-0,46	1,11	2,73	4,42	6,20	8,08	10,07	12,25	14,60	17,23	20,21	—
	DMA	4,46	3,64	3,63	4,70	6,53	8,63	11,11	13,91	17,03	20,57	24,75	—
	PDMA	21,57	16,32	11,25	11,48	14,12	19,45	29,15	41,12	55,10	72,27	94,39	—
ΔCS													
	DM	-39,89	-36,30	-32,53	-28,76	-25,30	-22,34	-20,32	-20,09	-23,22	-34,47	-76,27	—
	DMA	51,69	39,99	27,35	20,13	19,69	26,49	33,55	41,68	52,48	70,47	120,80	—
	PDMA	52,99	36,46	20,98	6,74	-1,10	14,03	24,53	33,09	40,31	46,62	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,08	-13,54	-10,82	-7,97	-5,15	-2,42	0,03	1,89	2,38	-0,65	-17,79	—
	DMA	25,88	20,41	15,39	14,09	16,58	21,25	26,47	32,58	40,33	51,98	79,77	—
	PDMA	17,28	12,31	8,25	8,02	10,56	15,55	21,58	28,86	37,05	46,90	62,25	—
CPI													
	DM	-35,87	-32,50	-28,81	-24,97	-21,31	-18,03	-15,60	-14,87	-17,58	-28,88	-73,32	—
	DMA	53,25	41,78	30,11	25,51	28,55	36,29	44,80	54,91	68,36	90,24	148,44	—
	PDMA	25,28	16,66	8,99	8,04	12,33	21,23	30,25	40,03	50,95	64,72	89,61	—
SPI													
	DM	-0,85	1,05	3,02	5,10	7,28	9,59	12,06	14,78	17,73	21,07	24,93	—
	DMA	4,82	3,97	4,07	5,30	7,37	9,68	12,37	15,41	18,76	22,55	26,95	—
	PDMA	11,12	8,97	7,67	8,00	9,20	11,18	14,91	20,27	26,35	33,19	41,20	—
ΔCS													
	DM	-35,02	-33,55	-31,83	-30,07	-28,59	-27,62	-27,66	-29,65	-35,31	-49,95	-98,25	—
	DMA	48,43	37,81	26,04	20,21	21,18	26,61	32,43	39,50	49,60	67,69	121,49	—
	PDMA	14,16	7,69	1,32	0,04	3,13	10,05	15,34	19,76	24,60	31,52	48,41	—

Tabela 8.232: Constantes de acoplamento OB98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,1	389,7	415,6	441,8	468,4	495,2	522,3	549,6	577,2	605,1	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,0	21,9	19,7	17,3	14,9	12,3	9,7	7,0	4,2	1,4	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-64,1	-67,1	-70,1	-73,2	-76,2	-79,4	-82,5	-85,7	-89,0	-92,2	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,7	-7,5	-8,3	-9,2	-10,1	-10,9	-11,8	-12,7	-13,7	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,1	40,3	41,4	42,6	43,8	45,1	46,3	47,6	48,9	50,2	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,1	-9,9	-10,7	-11,5	-12,3	-13,2	-14,0	-14,9	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	179,5	187,1	194,6	201,9	209,0	215,9	222,7	229,2	235,6	241,8	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1668,2	-1651,8	-1631,7	-1608,5	-1582,9	-1555,4	-1526,6	-1496,7	-1466,2	-1435,4	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-176,0	-155,5	-135,4	-115,8	-96,6	-78,1	-60,1	-42,6	-25,8	-9,4	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-88,5	-65,7	-43,3	-21,6	-0,5	19,9	39,8	59,2	77,9	96,1	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-249,4	-284,3	-319,5	-356,4	-396,8	-443,4	-500,7	-577,5	-693,7	-907,1	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	121,7	124,7	127,6	130,6	133,7	136,8	139,9	143,1	146,3	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,6	-12,3	-12,9	-13,6	-14,2	-14,9	-15,5	-16,2	-16,8	-17,5	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,0	205,0	210,3	216,1	222,6	229,7	237,6	246,6	256,7	268,4	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,8	252,3	256,9	261,6	266,6	271,7	277,2	282,9	289,2	295,9	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,0	51,1	51,0	50,7	50,2	49,4	48,3	46,9	44,9	42,5	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,7	11,3	12,0	12,8	13,7	14,8	16,2	17,7	19,5	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,0	71,9	76,1	80,6	85,6	91,2	97,5	104,8	113,5	124,3	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	155,5	159,3	163,1	167,2	171,4	175,9	180,8	186,2	192,3	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-2,2	-3,1	-4,2	-5,5	-6,9	-8,6	-10,6	-13,1	-16,4	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,2	2,7	2,2	1,6	0,9	0,2	-0,5	-1,5	-2,7	-4,2	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,0	11,4	11,8	12,2	12,7	13,2	13,9	14,8	15,9	17,3	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,7	18,1	18,5	19,0	19,6	20,3	21,1	22,2	23,5	25,2	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,0	30,6	33,3	36,0	38,9	41,7	44,7	47,7	50,8	53,9	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	122,4	125,4	128,6	131,7	134,9	138,1	141,4	144,7	148,0	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-7,4	-7,9	-4,7
Total	DM	-18,77	-15,81	-12,71	-9,58	-6,46	-3,52	-0,88	1,11	1,66	-1,38	-19,10	—
	DMA	27,17	21,90	18,86	17,89	17,38	18,20	23,49	30,10	38,38	51,07	80,95	—
	PDMA	44,80	32,75	24,89	22,38	22,37	27,00	42,04	58,80	77,35	99,40	129,89	—
CPI	DM	-44,97	-40,19	-35,18	-30,16	-25,32	-21,02	-17,65	-16,05	-18,13	-29,08	-75,31	—
	DMA	59,03	46,70	38,85	34,16	29,90	28,47	37,28	48,78	63,73	88,43	152,76	—
	PDMA	88,47	67,03	48,58	33,98	21,66	18,82	38,65	59,26	80,71	104,95	140,82	—
SPI	DM	0,44	2,07	3,77	5,51	7,37	9,32	11,42	13,69	16,17	18,93	22,12	—
	DMA	3,81	3,71	4,20	5,95	8,20	10,67	13,38	16,40	19,79	23,67	28,29	—
	PDMA	12,78	7,61	7,52	13,88	22,89	32,99	44,53	58,47	74,89	95,34	121,88	—
ΔCS	DM	-45,41	-42,26	-38,96	-35,68	-32,69	-30,34	-29,07	-29,75	-34,30	-48,02	-97,43	—
	DMA	55,21	42,99	34,65	28,21	21,70	17,81	23,90	32,38	43,94	64,76	124,47	—
	PDMA	75,69	59,42	41,06	20,10	-1,23	-14,17	-5,88	0,79	5,83	9,61	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,81	-14,39	-11,80	-9,13	-6,43	-3,90	-1,68	-0,15	-0,17	-4,20	-24,71	—
	DMA	26,13	21,22	18,75	18,52	18,78	20,07	25,09	31,58	39,97	53,31	86,04	—
	PDMA	16,95	12,51	9,78	10,11	12,53	16,98	23,82	31,62	40,38	51,21	68,62	—
CPI	DM	-39,12	-36,14	-32,87	-29,52	-26,30	-23,61	-21,89	-22,08	-26,23	-40,10	-92,72	—
	DMA	54,58	43,30	36,91	33,92	31,34	30,83	38,53	49,24	63,81	89,16	158,16	—
	PDMA	28,32	19,93	14,57	12,98	13,49	17,44	25,98	35,72	46,85	61,38	89,03	—
SPI	DM	0,35	2,35	4,42	6,55	8,85	11,26	13,87	16,72	19,87	23,42	27,60	—
	DMA	4,25	4,24	4,78	6,68	9,12	11,80	14,75	18,00	21,62	25,73	30,57	—
	PDMA	8,21	6,80	6,09	7,90	11,80	16,62	22,15	28,47	35,39	43,39	52,91	—
ΔCS	DM	-39,47	-38,49	-37,29	-36,07	-35,15	-34,87	-35,76	-38,80	-46,10	-63,52	-120,32	—
	DMA	50,33	39,06	32,13	27,24	22,22	19,03	23,78	31,24	42,19	63,43	127,59	—
	PDMA	20,11	13,13	8,48	5,07	1,69	0,81	3,83	7,25	11,46	17,98	36,12	—

Tabela 8.233: Constantes de acoplamento OLYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	363,4	391,6	420,1	449,1	478,5	508,2	538,4	568,9	599,7	630,9	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	24,0	21,8	19,5	17,1	14,6	12,0	9,4	6,6	3,8	0,9	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-66,1	-69,4	-72,7	-76,1	-79,5	-83,0	-86,5	-90,1	-93,7	-97,3	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-7,4	-8,3	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,2	41,5	42,7	44,0	45,3	46,6	47,9	49,3	50,6	52,0	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,6	-10,4	-11,3	-12,1	-13,0	-13,9	-14,8	-15,7	-16,7	-17,7	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	158,8	167,5	176,1	184,5	192,8	201,0	209,0	216,8	224,5	231,9	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1702,2	-1685,7	-1665,4	-1642,0	-1616,2	-1588,5	-1559,4	-1529,4	-1498,8	-1467,9	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-181,4	-160,8	-140,7	-121,1	-102,0	-83,5	-65,6	-48,2	-31,4	-15,1	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-90,5	-67,4	-45,0	-23,1	-1,8	18,8	38,9	58,4	77,4	95,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-254,6	-290,9	-327,9	-367,1	-410,6	-461,8	-526,5	-616,5	-760,6	-1056,6	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	118,2	121,1	124,1	127,1	130,2	133,3	136,4	139,6	142,9	146,1	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,9	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,4	192,0	197,1	202,6	208,8	215,7	223,5	232,3	242,5	254,4	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	253,4	258,1	263,0	268,0	273,2	278,7	284,6	290,9	297,7	305,1	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,0	53,0	52,8	52,4	51,7	50,7	49,3	47,6	45,2	42,1	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,6	12,2	12,9	13,7	14,7	15,9	17,3	18,9	20,9	23,2	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,8	64,6	68,7	73,2	78,2	83,9	90,5	98,4	108,1	120,9	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	152,7	156,5	160,4	164,4	168,6	173,1	177,9	183,2	189,3	196,5	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,1	-2,0	-3,1	-4,3	-5,6	-7,2	-9,2	-11,6	-14,8	-19,1	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,4	2,8	2,2	1,5	0,8	0,0	-1,1	-2,3	-3,9	-6,1	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,2	12,6	13,1	13,6	14,2	14,9	15,8	17,0	18,5	20,6	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	19,4	19,8	20,3	21,0	21,7	22,6	23,6	25,0	26,8	29,3	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,4	27,9	30,4	33,0	35,6	38,4	41,1	43,9	46,8	49,7	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	118,4	121,5	124,6	127,8	131,0	134,2	137,5	140,8	144,1	147,5	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-21,99	-18,95	-15,80	-12,59	-9,44	-6,49	-3,96	-2,28	-2,56	-8,48	-48,74	—
	DMA	29,34	23,77	20,66	18,92	18,17	19,40	25,67	33,10	42,85	58,80	110,36	—
	PDMA	45,94	35,45	28,59	26,03	26,01	30,63	47,52	65,93	87,40	114,22	158,62	—
CPI	DM	-51,48	-46,49	-41,35	-36,17	-31,26	-27,01	-23,93	-23,17	-27,39	-45,47	-145,56	—
	DMA	63,75	51,16	43,35	37,15	32,57	32,12	43,13	56,30	74,26	105,93	220,20	—
	PDMA	88,13	69,78	53,74	38,43	26,58	22,30	43,33	64,85	87,83	114,95	169,20	—
SPI	DM	-0,37	1,25	2,94	4,70	6,56	8,56	10,68	13,03	15,65	18,65	22,27	—
	DMA	4,10	3,68	4,02	5,54	7,60	10,07	12,87	16,09	19,81	24,25	29,81	—
	PDMA	15,00	10,27	10,16	16,94	25,59	36,74	50,59	66,72	87,07	113,69	150,86	—
ΔCS	DM	-51,12	-47,74	-44,29	-40,87	-37,82	-35,57	-34,61	-36,21	-43,04	-64,12	-167,83	—
	DMA	59,65	47,48	39,33	31,61	24,97	22,05	30,26	40,21	54,45	81,68	190,39	—
	PDMA	73,13	59,51	43,58	21,48	1,00	-14,44	-7,26	-1,87	0,76	1,26	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-20,38	-17,87	-15,21	-12,46	-9,74	-7,19	-5,07	-3,87	-4,80	-12,01	-57,89	—
	DMA	28,47	23,25	20,71	19,61	19,60	21,45	27,53	34,93	44,92	61,87	118,96	—
	PDMA	16,91	14,51	13,48	13,43	15,90	20,48	28,05	36,59	46,52	59,56	87,08	—
CPI	DM	-46,08	-42,90	-39,48	-35,98	-32,71	-30,09	-28,71	-29,83	-36,37	-58,10	-170,00	—
	DMA	59,58	48,04	41,68	37,06	34,15	34,95	45,05	57,59	75,45	108,44	232,34	—
	PDMA	26,61	21,82	19,11	16,87	18,04	22,00	31,73	42,40	55,02	72,57	120,26	—
SPI	DM	-0,61	1,38	3,45	5,63	7,93	10,42	13,11	16,10	19,49	23,45	28,35	—
	DMA	4,55	4,18	4,58	6,18	8,41	11,07	14,06	17,50	21,43	26,05	31,74	—
	PDMA	9,46	8,89	9,14	10,78	14,25	19,31	25,21	32,11	39,99	49,56	61,56	—
ΔCS	DM	-45,47	-44,28	-42,93	-41,61	-40,64	-40,51	-41,82	-45,93	-55,86	-81,55	-198,35	—
	DMA	55,03	43,86	37,10	30,88	25,74	23,88	30,99	40,09	54,02	82,39	200,60	—
	PDMA	17,15	12,93	9,97	6,09	3,80	2,68	6,52	10,29	15,03	23,02	58,70	—

Tabela 8.234: Constantes de acoplamento OP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	324,5	350,5	377,0	403,8	431,1	458,7	486,7	515,1	543,8	572,9	602,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	27,3	25,5	23,5	21,4	19,2	16,9	14,6	12,2	9,7	7,3	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-58,9	-61,9	-65,0	-68,1	-71,2	-74,4	-77,6	-80,9	-84,2	-87,6	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,0	-7,8	-8,7	-9,5	-10,4	-11,3	-12,2	-13,1	-14,1	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	35,8	36,9	38,1	39,2	40,4	41,6	42,8	44,0	45,3	46,5	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-9,3	-10,1	-10,9	-11,6	-12,4	-13,3	-14,1	-15,0	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,9	144,0	152,0	159,9	167,8	175,5	183,1	190,5	197,9	205,0	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1693,8	-1677,1	-1656,7	-1633,2	-1607,2	-1579,4	-1550,3	-1520,2	-1489,5	-1458,5	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-191,2	-171,2	-151,7	-132,7	-114,1	-96,1	-78,6	-61,6	-45,2	-29,4	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-104,7	-82,2	-60,2	-38,8	-18,0	2,2	21,8	40,9	59,4	77,4	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-263,2	-299,7	-337,0	-376,6	-420,7	-472,5	-537,7	-627,7	-769,0	-1046,3	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,1	106,8	109,6	112,4	115,2	118,1	121,0	123,9	126,9	129,9	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,9	-13,6	-14,2	-14,9	-15,5	-16,2	-16,8	-17,5	-18,2	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	174,9	179,1	183,6	188,6	194,2	200,5	207,6	215,8	225,3	236,6	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	227,9	232,3	236,8	241,5	246,3	251,5	257,1	263,0	269,6	276,9	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	50,7	50,6	50,3	49,7	48,8	47,5	45,7	43,3	40,2	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,4	12,0	12,7	13,6	14,6	15,9	17,3	19,1	21,2	23,7	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,2	56,6	60,4	64,6	69,2	74,6	80,9	88,6	98,5	112,4	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,1	139,5	143,1	146,9	150,8	155,1	159,7	164,9	171,0	178,6	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,9	-2,9	-4,0	-5,3	-6,9	-8,8	-11,3	-14,7	-19,7	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,7	1,1	0,3	-0,4	-1,3	-2,5	-4,0	-6,0	-8,9	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,6	12,1	12,6	13,3	14,1	15,2	16,5	18,4	21,2	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,8	18,2	18,8	19,5	20,3	21,2	22,5	24,1	26,3	29,5	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,3	22,5	24,9	27,3	29,7	32,2	34,7	37,3	40,0	42,7	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	104,9	107,7	110,6	113,5	116,5	119,4	122,5	125,5	128,7	131,8	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,7	-4,1	-4,5	-4,9	-5,3	-5,7	-6,2	-6,7	-7,1	-7,6	-4,7
Total	DM	-28,85	-26,01	-23,05	-20,05	-17,10	-14,34	-12,00	-10,50	-10,79	-16,08	-45,89	—
	DMA	34,78	28,90	25,82	22,90	20,26	18,51	18,85	23,91	33,29	48,47	90,58	—
	PDMA	53,48	43,18	36,58	33,14	30,71	30,46	36,99	54,54	76,76	105,66	152,34	—
CPI	DM	-58,55	-53,85	-48,98	-44,15	-39,52	-35,56	-32,79	-32,26	-36,44	-53,05	-128,80	—
	DMA	71,55	59,07	53,11	47,33	41,74	36,78	35,55	44,25	61,56	91,12	182,13	—
	PDMA	105,04	83,94	67,34	52,64	38,15	24,48	23,12	41,70	63,66	89,32	134,69	—
SPI	DM	-7,07	-5,59	-4,03	-2,38	-0,65	1,22	3,25	5,47	8,01	11,03	14,91	—
	DMA	7,83	6,77	5,81	4,99	4,51	5,11	6,61	9,00	12,56	17,19	23,45	—
	PDMA	15,66	13,30	14,02	18,84	25,25	34,84	47,17	63,95	86,38	117,64	165,29	—
ΔCS	DM	-51,48	-48,26	-44,96	-41,77	-38,86	-36,78	-36,04	-37,73	-44,45	-64,08	-143,71	—
	DMA	63,72	52,31	47,30	42,33	37,23	31,67	28,95	35,25	49,00	73,92	158,67	—
	PDMA	89,38	70,65	53,32	33,80	12,91	-10,37	-24,06	-22,25	-22,72	-28,31	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-27,46	-25,17	-22,71	-20,17	-17,65	-15,30	-13,37	-12,33	-13,23	-19,65	-53,57	—
	DMA	34,06	28,39	25,85	23,40	21,22	20,02	20,53	25,24	34,81	50,84	97,15	—
	PDMA	23,40	18,60	16,38	15,18	14,79	15,76	19,18	26,11	35,94	48,84	73,57	—
CPI	DM	-52,43	-49,52	-46,36	-43,18	-40,17	-37,84	-36,75	-38,08	-44,52	-64,59	-149,66	—
	DMA	66,73	55,26	50,90	46,68	42,61	39,18	38,43	46,08	63,28	93,99	192,36	—
	PDMA	35,75	27,54	23,95	22,03	19,97	18,39	20,89	28,61	40,43	56,66	94,96	—
SPI	DM	-8,25	-6,45	-4,52	-2,47	-0,32	2,03	4,61	7,48	10,83	14,92	20,35	—
	DMA	8,93	7,72	6,58	5,48	4,77	5,28	6,76	9,22	12,91	17,65	23,91	—
	PDMA	13,90	11,73	10,56	9,92	10,81	13,74	17,86	24,19	32,48	42,83	57,11	—
ΔCS	DM	-44,18	-43,07	-41,84	-40,71	-39,85	-39,87	-41,36	-45,56	-55,35	-79,51	-170,01	—
	DMA	57,80	47,54	44,32	41,20	37,84	33,90	31,67	36,86	50,37	76,34	168,45	—
	PDMA	21,84	15,80	13,38	12,12	9,16	4,65	3,03	4,42	7,94	13,83	37,85	—

Tabela 8.235: Constantes de acoplamento OPBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	319,8	346,3	373,3	400,7	428,5	456,8	485,3	514,3	543,6	573,3	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	27,9	26,0	24,0	21,9	19,8	17,5	15,1	12,7	10,3	7,8	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-58,7	-61,7	-64,9	-68,0	-71,2	-74,5	-77,8	-81,1	-84,5	-88,0	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,7	-7,5	-8,4	-9,2	-10,1	-11,0	-12,0	-12,9	-13,9	-14,9	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,9	37,0	38,2	39,4	40,6	41,8	43,0	44,3	45,6	46,8	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,1	-9,9	-10,7	-11,5	-12,3	-13,1	-14,0	-14,9	-15,8	-16,7	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,0	144,4	152,6	160,7	168,8	176,7	184,5	192,2	199,7	207,1	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1698,4	-1681,0	-1659,8	-1635,6	-1609,0	-1580,7	-1550,9	-1520,3	-1489,2	-1457,8	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-192,2	-172,1	-152,4	-133,2	-114,5	-96,3	-78,7	-61,6	-45,1	-29,2	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-105,7	-83,0	-60,9	-39,3	-18,3	1,9	21,7	40,9	59,6	77,6	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-264,9	-302,2	-340,5	-381,4	-427,1	-481,2	-550,2	-647,0	-803,3	-1127,2	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	104,8	107,6	110,4	113,3	116,2	119,1	122,1	125,1	128,2	131,3	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-13,0	-13,6	-14,3	-15,0	-15,7	-16,3	-17,0	-17,7	-18,4	-19,1	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	174,4	178,7	183,5	188,7	194,7	201,4	209,1	218,1	228,7	241,4	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	230,4	235,0	239,7	244,6	249,8	255,3	261,3	267,9	275,2	283,5	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,6	50,5	50,3	49,8	48,9	47,8	46,1	43,9	40,8	36,7	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	12,1	12,8	13,7	14,7	15,9	17,3	19,0	21,1	23,7	26,9	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	53,1	56,6	60,6	65,0	69,9	75,7	82,7	91,5	103,4	120,9	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	137,4	141,0	144,7	148,7	152,8	157,3	162,3	168,1	175,1	184,5	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,6	-2,5	-3,6	-4,8	-6,3	-8,1	-10,4	-13,4	-17,7	-24,3	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	1,8	1,1	0,4	-0,3	-1,3	-2,4	-3,9	-5,7	-8,3	-12,3	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,6	12,0	12,6	13,2	14,0	15,0	16,3	18,0	20,5	24,3	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,4	18,9	19,5	20,3	21,2	22,4	23,9	25,9	28,8	33,2	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	20,2	22,5	24,9	27,3	29,7	32,2	34,8	37,4	40,1	42,8	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	105,7	108,6	111,6	114,6	117,6	120,7	123,8	126,9	130,1	133,3	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,6	-4,0	-4,4	-4,8	-5,2	-5,7	-6,2	-6,6	-7,1	-7,6	-8,1	-4,7
Total	DM	-29,18	-26,29	-23,27	-20,20	-17,22	-14,44	-12,12	-10,69	-11,34	-18,10	-62,67	—
	DMA	34,92	29,13	26,19	23,27	20,91	19,44	20,05	25,74	36,16	53,73	112,44	—
	PDMA	53,11	43,97	40,24	37,05	36,15	36,94	44,80	64,41	90,21	125,50	190,22	—
CPI	DM	-59,73	-54,96	-50,04	-45,13	-40,52	-36,64	-34,08	-34,03	-39,45	-60,19	-172,10	—
	DMA	72,38	60,15	54,27	48,42	42,85	37,95	36,77	46,23	64,97	98,85	226,41	—
	PDMA	105,05	84,82	69,59	54,61	40,28	26,62	24,58	43,79	66,43	93,70	151,26	—
SPI	DM	-6,79	-5,26	-3,63	-1,92	-0,13	1,84	3,99	6,43	9,27	12,76	17,57	—
	DMA	7,44	6,39	5,59	4,83	4,82	5,87	7,79	10,72	15,03	20,64	28,87	—
	PDMA	15,01	14,02	18,71	24,17	33,12	44,50	59,63	79,53	107,66	148,83	218,79	—
ΔCS	DM	-52,94	-49,70	-46,40	-43,21	-40,39	-38,48	-38,07	-40,45	-48,71	-72,95	-189,67	—
	DMA	64,94	53,75	48,68	43,59	38,03	32,08	28,99	35,51	49,95	78,21	197,54	—
	PDMA	90,04	70,80	50,88	30,44	7,17	-17,88	-35,06	-35,74	-41,23	-55,13	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-27,76	-25,40	-22,87	-20,26	-17,69	-15,30	-13,37	-12,38	-13,63	-21,60	-71,93	—
	DMA	34,17	28,62	26,17	23,73	21,86	20,95	21,76	27,15	37,81	56,43	121,21	—
	PDMA	22,65	18,85	17,72	16,88	17,34	18,75	22,49	30,26	41,30	56,46	89,72	—
CPI	DM	-53,63	-50,66	-47,45	-44,21	-41,24	-38,99	-38,16	-40,02	-47,85	-72,47	-197,33	—
	DMA	67,55	56,36	52,11	47,83	43,80	40,43	39,78	48,26	67,01	102,47	241,03	—
	PDMA	35,09	27,97	25,95	23,87	22,11	20,55	22,57	30,91	43,34	61,34	112,92	—
SPI	DM	-7,85	-5,97	-3,95	-1,83	0,43	2,92	5,69	8,88	12,68	17,53	24,54	—
	DMA	8,48	7,28	6,22	5,18	4,98	5,97	7,89	10,91	15,35	21,01	29,05	—
	PDMA	13,09	11,84	11,39	11,50	13,67	17,36	22,43	29,76	39,73	52,70	71,87	—
ΔCS	DM	-45,78	-44,69	-43,50	-42,38	-41,67	-41,91	-43,85	-48,90	-60,53	-90,00	-221,87	—
	DMA	59,07	49,08	45,89	42,65	38,82	34,46	31,89	37,35	51,66	81,46	211,98	—
	PDMA	22,00	16,13	14,56	12,37	8,44	3,19	0,14	1,15	3,61	8,64	41,06	—

Tabela 8.236: Constantes de acoplamento OPW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	322,3	348,9	375,9	403,4	431,2	459,5	488,1	517,1	546,5	576,2	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	27,7	25,8	23,8	21,7	19,5	17,2	14,8	12,4	9,9	7,4	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-59,0	-62,1	-65,2	-68,4	-71,6	-74,9	-78,2	-81,5	-84,9	-88,4	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-7,6	-8,4	-9,3	-10,2	-11,1	-12,0	-13,0	-13,9	-14,9	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,0	37,2	38,4	39,6	40,8	42,0	43,2	44,5	45,8	47,1	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-9,9	-10,7	-11,5	-12,3	-13,2	-14,0	-14,9	-15,8	-16,7	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,0	145,4	153,7	161,8	169,9	177,8	185,6	193,3	200,9	208,3	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1701,6	-1684,0	-1662,7	-1638,4	-1611,7	-1583,2	-1553,3	-1522,6	-1491,4	-1459,9	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-191,4	-171,2	-151,5	-132,2	-113,5	-95,3	-77,6	-60,5	-44,0	-28,0	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-104,8	-82,0	-59,8	-38,2	-17,2	3,1	22,9	42,2	60,8	79,0	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-264,6	-301,9	-340,2	-381,1	-426,8	-481,0	-550,1	-647,2	-804,7	-1133,4	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,5	108,2	111,1	113,9	116,8	119,8	122,8	125,8	128,9	132,0	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,0	-13,7	-14,3	-15,0	-15,7	-16,4	-17,1	-17,8	-18,5	-19,2	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	179,9	184,7	190,0	196,0	202,8	210,6	219,6	230,3	243,2	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	231,6	236,1	240,8	245,8	251,0	256,6	262,6	269,1	276,5	284,8	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	50,6	50,3	49,8	48,9	47,7	46,1	43,8	40,8	36,7	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	12,0	12,8	13,6	14,6	15,8	17,3	19,0	21,1	23,6	26,7	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,6	57,2	61,2	65,6	70,6	76,4	83,5	92,4	104,3	122,0	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	138,2	141,8	145,5	149,5	153,7	158,2	163,2	169,0	176,1	185,5	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,5	-3,6	-4,8	-6,3	-8,1	-10,4	-13,5	-17,8	-24,5	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,8	1,1	0,4	-0,3	-1,3	-2,4	-3,8	-5,7	-8,3	-12,2	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	12,0	12,6	13,2	14,0	15,0	16,3	18,0	20,4	24,3	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	18,9	19,5	20,3	21,2	22,4	23,9	25,9	28,7	33,1	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	20,5	22,9	25,2	27,6	30,1	32,6	35,2	37,9	40,5	43,3	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,3	109,2	112,2	115,2	118,2	121,3	124,4	127,6	130,8	134,1	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-4,0	-4,4	-4,8	-5,3	-5,7	-6,2	-6,6	-7,1	-7,6	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-28,92	-26,00	-22,96	-19,88	-16,89	-14,10	-11,75	-10,33	-11,02	-17,93	-65,03	—
	DMA	34,67	28,90	25,93	23,00	20,77	19,38	20,20	26,36	36,83	54,62	115,74	—
	PDMA	52,53	43,52	39,64	36,50	35,75	36,60	45,14	65,42	91,09	126,52	191,82	—
CPI													
CPI	DM	-59,56	-54,75	-49,78	-44,86	-40,25	-36,36	-33,77	-33,74	-39,25	-60,38	-178,33	—
	DMA	72,16	59,83	53,93	48,05	42,45	37,55	36,81	47,12	65,97	100,31	233,56	—
	PDMA	104,10	83,96	68,55	53,67	39,29	25,66	25,41	45,20	67,75	95,32	155,08	—
SPI													
SPI	DM	-6,45	-4,91	-3,29	-1,57	0,24	2,23	4,40	6,83	9,67	13,21	18,05	—
	DMA	7,18	6,21	5,39	4,63	4,87	6,05	8,03	11,14	15,46	21,11	29,34	—
	PDMA	14,71	13,86	18,44	23,90	33,16	44,62	59,61	80,24	108,20	149,40	218,77	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-53,12	-49,85	-46,50	-43,30	-40,49	-38,59	-38,17	-40,57	-48,92	-73,59	-196,37	—
	DMA	64,98	53,61	48,53	43,41	37,59	31,49	28,78	35,98	50,51	79,20	204,22	—
	PDMA	89,38	70,09	50,11	29,77	6,13	-18,96	-34,20	-35,04	-40,45	-54,08	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-27,50	-25,11	-22,57	-19,95	-17,37	-14,97	-13,01	-12,03	-13,32	-21,46	-74,66	—
	DMA	33,93	28,39	25,92	23,47	21,75	20,93	21,88	27,79	38,51	57,37	124,89	—
	PDMA	22,26	18,63	17,36	16,57	17,21	18,71	22,72	30,84	41,76	57,03	91,32	—
CPI													
CPI	DM	-53,54	-50,53	-47,28	-44,03	-41,06	-38,81	-37,94	-39,83	-47,75	-72,82	-204,32	—
	DMA	67,40	56,11	51,84	47,53	43,48	40,11	39,70	49,11	67,99	103,94	248,76	—
	PDMA	34,64	27,68	25,54	23,57	21,75	20,29	22,69	31,59	43,99	62,19	116,19	—
SPI													
SPI	DM	-7,46	-5,56	-3,55	-1,42	0,85	3,37	6,16	9,35	13,16	18,05	25,08	—
	DMA	8,18	7,07	5,98	4,96	5,04	6,18	8,18	11,38	15,84	21,55	29,60	—
	PDMA	12,74	11,66	11,07	11,19	13,72	17,49	22,74	30,25	40,04	53,06	72,19	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-46,08	-44,97	-43,73	-42,61	-41,91	-42,18	-44,10	-49,18	-60,91	-90,87	-229,40	—
	DMA	59,22	49,04	45,86	42,57	38,44	33,93	31,52	37,73	52,15	82,39	219,16	—
	PDMA	21,90	16,02	14,46	12,38	8,03	2,80	-0,06	1,34	3,95	9,13	44,00	—

Tabela 8.237: Constantes de acoplamento OTPSS com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	320,7	348,0	375,7	403,8	432,3	461,1	490,2	519,7	549,5	579,6	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	27,8	25,9	23,9	21,8	19,6	17,3	14,9	12,5	10,0	7,4	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-59,5	-62,7	-66,0	-69,3	-72,6	-75,9	-79,3	-82,8	-86,3	-89,8	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,6	-7,5	-8,4	-9,3	-10,2	-11,2	-12,1	-13,1	-14,1	-15,2	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,2	38,4	39,6	40,9	42,1	43,4	44,7	46,0	47,4	48,7	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,9	-9,7	-10,6	-11,4	-12,3	-13,2	-14,1	-15,0	-16,0	-16,9	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	148,0	156,9	165,7	174,4	183,0	191,6	200,0	208,3	216,6	224,7	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1702,5	-1685,7	-1665,1	-1641,4	-1615,4	-1587,5	-1558,2	-1528,0	-1497,3	-1466,2	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-193,0	-173,1	-153,6	-134,5	-116,0	-98,0	-80,6	-63,7	-47,4	-31,6	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-102,8	-80,3	-58,3	-37,0	-16,2	3,9	23,5	42,6	61,0	78,9	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-263,6	-300,9	-339,0	-379,7	-425,0	-478,6	-546,7	-642,0	-795,5	-1112,5	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	112,8	115,8	118,8	121,9	125,0	128,2	131,5	134,8	138,1	141,5	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,6	-13,3	-14,1	-14,8	-15,6	-16,3	-17,1	-17,9	-18,6	-19,4	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	175,4	179,8	184,8	190,3	196,5	203,5	211,6	221,0	232,1	245,5	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	245,0	249,9	255,0	260,4	266,0	272,0	278,5	285,6	293,5	302,4	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,9	51,8	51,6	51,0	50,1	48,9	47,1	44,7	41,6	37,3	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	12,6	13,3	14,1	15,2	16,4	17,9	19,7	21,8	24,4	27,7	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	54,4	58,1	62,1	66,7	71,8	77,8	85,1	94,2	106,3	124,0	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	146,9	150,8	154,8	159,1	163,6	168,4	173,8	180,0	187,4	197,1	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,8	-2,8	-3,9	-5,2	-6,8	-8,7	-11,1	-14,2	-18,6	-25,3	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,1	2,5	1,7	0,9	0,0	-1,2	-2,6	-4,5	-7,0	-10,9	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,3	12,8	13,3	14,0	14,8	15,8	17,0	18,7	21,2	24,9	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	20,2	20,7	21,4	22,1	23,1	24,2	25,7	27,7	30,5	34,8	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	21,2	23,5	25,9	28,3	30,8	33,4	36,0	38,6	41,3	44,1	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	113,5	116,6	119,8	123,0	126,3	129,7	133,1	136,5	140,0	143,5	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-7,4	-7,9	-8,5	-4,7
Total	DM	-26,80	-23,86	-20,78	-17,65	-14,58	-11,71	-9,26	-7,71	-8,17	-14,56	-57,72	—
	DMA	32,97	27,22	24,60	22,24	20,57	20,12	22,05	29,03	39,50	56,96	113,73	—
	PDMA	51,77	41,23	37,20	34,95	34,57	36,54	46,46	67,40	93,22	128,59	191,26	—
CPI	DM	-58,55	-53,78	-48,82	-43,87	-39,24	-35,27	-32,60	-32,40	-37,55	-57,62	-166,33	—
	DMA	71,34	58,76	52,84	46,91	41,27	36,91	37,31	48,75	67,38	100,76	223,67	—
	PDMA	102,75	82,00	66,89	52,14	37,94	24,83	25,89	46,37	68,95	96,18	152,58	—
SPI	DM	-3,52	-1,91	-0,22	1,59	3,50	5,57	7,85	10,40	13,38	17,01	21,93	—
	DMA	4,84	4,09	3,90	4,15	5,39	7,81	10,87	14,57	19,05	24,84	33,11	—
	PDMA	14,39	11,33	15,43	22,35	32,11	45,13	61,55	82,82	111,01	152,35	219,63	—
ΔCS	DM	-55,03	-51,87	-48,60	-45,46	-42,74	-40,85	-40,45	-42,80	-50,93	-74,63	-188,25	—
	DMA	66,50	54,68	48,94	42,76	35,88	29,10	26,44	34,17	48,34	75,92	190,56	—
	PDMA	88,36	70,66	51,46	29,79	5,83	-20,31	-35,67	-36,45	-42,06	-56,17	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-27,50	-25,11	-22,57	-19,95	-17,37	-14,97	-13,01	-12,03	-13,32	-21,46	-74,66	—
	DMA	33,93	28,39	25,92	23,47	21,75	20,93	21,88	27,79	38,51	57,37	124,89	—
	PDMA	22,26	18,63	17,36	16,57	17,21	18,71	22,72	30,84	41,76	57,03	91,32	—
CPI	DM	-53,54	-50,53	-47,28	-44,03	-41,06	-38,81	-37,94	-39,83	-47,75	-72,82	-204,32	—
	DMA	67,40	56,11	51,84	47,53	43,48	40,11	39,70	49,11	67,99	103,94	248,76	—
	PDMA	34,64	27,68	25,54	23,57	21,75	20,29	22,69	31,59	43,99	62,19	116,19	—
SPI	DM	-7,46	-5,56	-3,55	-1,42	0,85	3,37	6,16	9,35	13,16	18,05	25,08	—
	DMA	8,18	7,07	5,98	4,96	5,04	6,18	8,18	11,38	15,84	21,55	29,60	—
	PDMA	12,74	11,66	11,07	11,19	13,72	17,49	22,74	30,25	40,04	53,06	72,19	—
ΔCS	DM	-46,08	-44,97	-43,73	-42,61	-41,91	-42,18	-44,10	-49,18	-60,91	-90,87	-229,40	—
	DMA	59,22	49,04	45,86	42,57	38,44	33,93	31,52	37,73	52,15	82,39	219,16	—
	PDMA	21,90	16,02	14,46	12,38	8,03	2,80	-0,06	1,34	3,95	9,13	44,00	—

Tabela 8.238: Valores de PDMA total obtidos para troca O com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
OB95	53,3	41,9	31,1	22,6	18,9	17,2	24,3	38,1	53,8	71,2	92,6
OB98	43,9	33,2	27,7	25,5	25,9	28,1	43,0	59,9	78,7	101,0	131,6
OB971	43,7	32,0	24,6	21,2	20,4	25,6	40,1	56,0	73,6	93,9	120,6
OB972	42,9	30,8	20,3	15,3	13,4	25,6	39,6	55,0	72,0	91,9	119,3
OLYP	53,3	41,1	28,6	18,7	14,5	18,0	34,4	53,4	76,9	107,9	161,5
OP86	52,9	43,1	37,9	34,8	33,2	33,7	38,9	56,1	78,3	108,1	156,7
OPBE	52,7	45,7	41,5	39,3	39,0	40,4	46,5	66,3	92,2	128,6	196,2
OPW91	51,5	44,6	40,5	38,1	37,8	39,3	46,8	67,1	93,0	129,5	197,7
OTPSS	49,9	41,9	38,4	37,0	37,3	39,6	48,1	69,2	95,4	131,7	197,2

8.4.1.6 Troca PBE

Tabela 8.239: Constantes de acoplamento PBEB95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	428,0	449,3	470,7	492,3	514,0	535,9	557,9	580,1	602,4	624,8	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,8	20,2	18,5	16,7	14,9	12,9	10,9	8,9	6,8	4,6	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,8	-75,1	-77,3	-79,6	-81,9	-84,2	-86,6	-88,9	-91,3	-93,7	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-4,8	-5,9	-6,9	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,3	-13,5	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,6	43,3	44,0	44,6	45,3	46,0	46,7	47,4	48,1	48,8	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-7,3	-8,2	-9,1	-10,0	-10,9	-11,9	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,1	151,8	159,5	167,0	174,5	181,8	189,1	196,3	203,3	210,2	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1709,3	-1689,8	-1665,4	-1637,0	-1605,1	-1570,5	-1533,6	-1495,0	-1455,2	-1414,3	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-168,5	-151,9	-135,4	-119,1	-102,9	-87,0	-71,2	-55,7	-40,4	-25,3	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-70,1	-52,0	-34,1	-16,5	0,7	17,8	34,7	51,3	67,6	83,7	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-255,7	-290,3	-324,1	-358,2	-394,0	-433,5	-480,0	-539,0	-622,0	-757,6	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	122,9	124,1	125,4	126,7	128,0	129,3	130,7	132,0	133,5	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,6	-10,3	-11,1	-11,8	-12,6	-13,3	-14,0	-14,8	-15,5	-16,3	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,9	192,2	194,7	197,6	200,9	204,6	208,9	214,0	219,9	227,0	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,3	252,2	254,2	256,3	258,5	260,9	263,5	266,3	269,4	273,1	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,1	55,3	55,3	55,2	54,9	54,4	53,7	52,6	51,1	49,1	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,8	9,2	9,6	10,2	10,9	11,7	12,7	13,8	15,2	16,9	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,9	63,1	65,5	68,1	71,0	74,1	77,8	82,0	87,0	93,1	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,1	155,8	157,7	159,6	161,6	163,7	166,0	168,6	171,4	174,7	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	0,3	-0,4	-1,3	-2,3	-3,4	-4,7	-6,2	-8,1	-10,4	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,3	5,7	5,0	4,3	3,5	2,7	1,8	0,8	-0,3	-1,7	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,3	11,5	11,7	12,0	12,3	12,7	13,1	13,7	14,5	15,5	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,0	18,2	18,4	18,7	19,1	19,6	20,1	20,9	21,8	23,1	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,7	28,5	30,3	32,1	34,0	35,9	37,8	39,7	41,7	43,7	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	123,0	124,4	125,9	127,4	128,9	130,4	132,0	133,5	135,1	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,6	-3,0	-3,5	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,7
Total	DM	-18,51	-16,41	-14,09	-11,62	-9,05	-6,52	-4,14	-2,11	-0,93	-1,62	-8,15	—
	DMA	26,20	21,15	17,90	15,49	14,74	15,32	18,43	22,80	28,14	37,77	54,82	—
	PDMA	51,37	40,45	30,00	20,26	12,81	11,98	22,60	36,32	51,36	68,89	90,89	—
CPI	DM	-44,65	-40,68	-36,24	-31,52	-26,66	-21,96	-17,73	-14,50	-13,43	-17,09	-34,85	—
	DMA	56,29	45,01	37,76	32,06	29,48	29,40	34,85	42,94	53,06	72,71	109,09	—
	PDMA	78,49	60,62	44,03	28,47	17,93	14,00	30,45	48,22	66,66	87,06	112,26	—
SPI	DM	0,66	1,39	2,15	2,98	3,86	4,80	5,83	6,97	8,24	9,73	11,44	—
	DMA	4,14	3,66	3,34	3,34	3,93	5,00	6,39	8,04	9,87	12,15	15,03	—
	PDMA	31,49	25,66	19,70	14,25	9,05	10,50	16,84	27,59	40,13	55,58	75,22	—
ΔCS	DM	-45,31	-42,08	-38,39	-34,50	-30,52	-26,76	-23,55	-21,47	-21,67	-26,82	-46,29	—
	DMA	52,15	41,35	34,42	28,72	25,56	24,40	28,47	34,90	43,20	60,56	94,06	—
	PDMA	47,00	34,96	24,33	14,22	8,88	3,50	13,61	20,63	26,53	31,48	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-17,55	-15,90	-14,00	-11,90	-9,67	-7,47	-5,41	-3,73	-2,97	-4,30	-12,16	—
	DMA	25,60	20,73	17,90	16,01	15,98	17,14	19,86	23,97	29,17	39,19	57,56	—
	PDMA	19,68	14,99	10,95	8,00	7,88	10,16	14,72	20,82	27,57	35,91	47,30	—
CPI	DM	-40,61	-38,05	-34,95	-31,52	-27,90	-24,44	-21,47	-19,58	-20,03	-25,67	-46,81	—
	DMA	53,41	42,81	36,63	32,12	31,00	32,06	36,37	43,60	53,11	73,11	111,53	—
	PDMA	29,60	22,02	15,70	10,32	10,19	13,53	20,36	28,84	38,26	49,96	67,02	—
SPI	DM	0,19	1,14	2,12	3,20	4,35	5,58	6,94	8,45	10,15	12,15	14,49	—
	DMA	4,21	3,75	3,49	3,62	4,43	5,66	7,15	8,87	10,75	13,10	16,05	—
	PDMA	12,06	9,58	7,29	6,22	6,11	7,57	10,38	14,64	19,34	25,11	32,14	—
ΔCS	DM	-40,80	-39,19	-37,07	-34,72	-32,25	-30,02	-28,41	-28,03	-30,18	-37,82	-61,30	—
	DMA	49,20	39,06	33,14	28,50	26,57	26,40	29,22	34,73	42,36	60,01	95,48	—
	PDMA	17,55	12,44	8,41	4,09	4,08	5,96	9,98	14,20	18,92	24,86	34,88	—

Tabela 8.240: Constantes de acoplamento PBE971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	434,8	455,2	475,8	496,4	517,1	538,0	559,0	580,0	601,2	622,5	643,9	500
CO	$^1J_{CO}$	20,0	18,3	16,4	14,4	12,4	10,3	8,1	5,8	3,5	1,1	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-73,5	-75,7	-77,9	-80,1	-82,3	-84,5	-86,7	-88,9	-91,2	-93,5	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,8	-4,8	-5,8	-6,8	-7,8	-8,8	-9,9	-11,0	-12,0	-13,1	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,6	44,2	44,9	45,6	46,3	47,0	47,7	48,4	49,1	49,9	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,6	-7,5	-8,4	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,0	-15,0	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	171,0	178,6	186,2	193,5	200,8	207,8	214,7	221,5	228,0	234,4	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1755,1	-1733,1	-1706,3	-1675,4	-1641,1	-1604,0	-1564,8	-1523,9	-1481,7	-1438,5	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-156,6	-139,1	-121,8	-104,6	-87,7	-71,1	-54,7	-38,5	-22,7	-7,1	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-57,6	-38,9	-20,4	-2,2	15,5	33,1	50,4	67,4	84,1	100,6	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-253,7	-288,4	-322,7	-357,7	-395,1	-437,2	-487,8	-553,9	-650,4	-817,6	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	129,7	131,1	132,5	134,0	135,5	137,0	138,6	140,2	141,8	143,4	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,6	-10,4	-11,1	-11,9	-12,7	-13,5	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	210,9	214,1	217,7	221,7	226,3	231,6	237,6	244,7	253,1	263,0	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	261,5	263,8	266,2	268,7	271,4	274,4	277,6	281,2	285,2	289,9	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,0	54,0	53,8	53,4	52,8	51,9	50,7	49,0	46,8	43,9	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,7	9,1	9,7	10,3	11,1	12,1	13,2	14,5	16,1	18,1	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	73,7	76,6	79,7	83,2	87,0	91,3	96,3	102,2	109,3	118,4	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	162,3	164,3	166,5	168,7	171,1	173,7	176,5	179,6	183,2	187,6	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,7	-1,7	-2,7	-3,9	-5,3	-6,9	-8,9	-11,3	-14,5	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,9	5,3	4,6	3,8	3,0	2,2	1,2	0,0	-1,2	-2,9	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,2	11,4	11,7	11,9	12,3	12,7	13,3	14,0	14,9	16,2	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,8	18,0	18,2	18,6	19,0	19,6	20,2	21,1	22,3	23,8	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,0	34,1	36,2	38,3	40,5	42,7	45,0	47,3	49,6	52,0	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	129,5	131,1	132,8	134,5	136,2	137,9	139,7	141,5	143,3	145,1	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,3	-2,8	-3,3	-3,8	-4,3	-4,8	-5,3	-5,8	-6,4	-7,0	-7,5	-4,7
Total													
	DM	-15,28	-12,97	-10,44	-7,79	-5,07	-2,38	0,09	2,09	3,07	1,50	-8,92	—
	DMA	26,80	22,24	19,42	18,07	18,56	22,00	26,15	31,02	37,23	46,63	68,67	—
	PDMA	44,38	33,73	23,46	16,09	13,41	23,21	37,33	52,97	70,03	90,78	118,03	—
CPI													
	DM	-43,49	-39,28	-34,63	-29,74	-24,82	-20,13	-16,09	-13,37	-13,36	-19,75	-47,66	—
	DMA	55,04	43,54	35,81	31,26	30,76	36,82	44,11	52,61	63,67	81,53	128,26	—
	PDMA	67,30	48,89	31,98	18,65	9,89	26,96	45,15	63,65	82,62	103,90	132,83	—
SPI													
	DM	5,41	6,33	7,29	8,31	9,41	10,63	11,96	13,43	15,12	17,09	19,49	—
	DMA	6,09	6,62	7,40	8,40	9,61	11,13	12,97	15,19	17,84	21,03	24,97	—
	PDMA	27,58	22,61	17,21	14,22	16,00	20,46	31,58	45,14	60,79	81,15	107,17	—
Δ CS													
	DM	-48,90	-45,61	-41,92	-38,04	-34,23	-30,75	-28,05	-26,81	-28,48	-36,83	-67,15	—
	DMA	48,94	36,92	28,41	22,86	21,15	25,68	31,14	37,42	45,83	60,49	103,30	—
	PDMA	39,72	26,28	14,77	4,43	-6,11	6,50	13,57	18,52	21,82	22,75	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
	DM	-14,37	-12,52	-10,40	-8,11	-5,72	-3,35	-1,19	0,47	1,00	-1,27	-13,48	—
	DMA	26,88	22,59	20,28	19,60	20,87	23,95	27,77	32,41	38,54	48,23	72,17	—
	PDMA	17,97	13,76	10,64	9,83	10,97	15,55	21,70	28,57	36,39	46,06	60,22	—
CPI													
	DM	-40,58	-37,82	-34,55	-30,99	-27,35	-23,95	-21,24	-19,95	-21,61	-30,28	-62,61	—
	DMA	53,28	42,50	35,85	32,67	33,79	38,69	44,98	52,63	63,13	81,12	130,91	—
	PDMA	25,63	17,85	11,58	9,05	10,54	17,59	26,07	35,08	44,81	57,22	78,24	—
SPI													
	DM	5,78	6,94	8,18	9,49	10,92	12,49	14,23	16,18	18,40	21,05	24,32	—
	DMA	6,57	7,28	8,31	9,55	10,92	12,62	14,54	16,85	19,63	22,94	26,98	—
	PDMA	12,09	10,61	9,92	10,43	11,31	13,98	18,34	23,55	29,91	37,47	46,35	—
Δ CS													
	DM	-46,36	-44,76	-42,73	-40,48	-38,27	-36,44	-35,47	-36,13	-40,01	-51,33	-86,93	—
	DMA	46,71	35,22	27,54	23,12	22,87	26,07	30,44	35,78	43,50	58,18	103,93	—
	PDMA	13,54	7,24	1,66	-1,39	-0,77	3,62	7,73	11,53	14,90	19,76	31,89	—

Tabela 8.241: Constantes de acoplamento PBEB972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	473,0	494,5	516,0	537,6	559,3	581,1	603,0	625,0	647,1	669,3	691,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	13,8	11,7	9,4	7,1	4,7	2,3	-0,2	-2,8	-5,5	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-79,4	-81,8	-84,1	-86,4	-88,7	-91,1	-93,5	-95,9	-98,3	-100,7	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,5	-5,6	-6,6	-7,6	-8,7	-9,8	-10,9	-12,0	-13,2	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,0	46,6	47,3	48,0	48,7	49,4	50,1	50,9	51,6	52,3	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,7	-7,6	-8,5	-9,5	-10,4	-11,3	-12,3	-13,3	-14,2	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	163,2	171,5	179,8	188,0	196,2	204,2	212,1	219,9	227,6	235,1	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,9	-1778,6	-1750,2	-1717,7	-1681,7	-1642,9	-1601,9	-1559,1	-1515,2	-1470,3	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-142,1	-124,6	-107,4	-90,4	-73,7	-57,3	-41,2	-25,3	-9,8	5,4	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-41,0	-22,3	-3,9	14,1	31,8	49,1	66,2	83,0	99,5	115,7	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-246,8	-281,0	-314,8	-349,3	-386,2	-428,1	-478,8	-546,3	-647,8	-833,4	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,4	133,7	135,0	136,4	137,8	139,2	140,6	142,0	143,5	145,0	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,0	-9,7	-10,5	-11,2	-12,0	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	208,9	212,2	215,8	220,0	224,7	230,0	236,3	243,5	252,0	262,1	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	263,1	265,2	267,5	269,8	272,3	275,0	277,9	281,2	284,9	289,1	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	54,4	54,2	53,9	53,3	52,5	51,3	49,7	47,7	45,1	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,1	8,5	8,9	9,5	10,1	10,9	11,9	13,0	14,4	16,0	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,1	77,0	80,3	83,9	87,9	92,6	98,0	104,5	112,5	122,9	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,2	166,1	168,1	170,3	172,5	175,0	177,7	180,7	184,2	188,5	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,0	-0,8	-1,8	-3,0	-4,4	-6,0	-7,9	-10,4	-13,7	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,1	6,5	5,8	5,2	4,4	3,6	2,7	1,7	0,5	-0,9	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,9	11,1	11,2	11,4	11,7	12,1	12,5	13,1	13,9	15,0	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,4	17,6	17,8	18,1	18,4	18,9	19,4	20,2	21,2	22,5	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,0	37,0	39,0	41,1	43,2	45,3	47,5	49,7	51,9	54,1	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	132,8	134,4	135,9	137,5	139,1	140,8	142,4	144,1	145,8	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-2,1	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-4,7
Total	DM	-14,22	-11,81	-9,18	-6,41	-3,58	-0,82	1,75	3,82	4,70	2,54	-12,05	—
	DMA	26,67	22,39	20,45	20,33	23,02	26,61	30,56	35,35	41,76	51,63	75,85	—
	PDMA	44,04	34,53	25,96	17,81	21,61	30,52	40,03	53,24	70,43	90,71	118,82	—
CPI	DM	-42,13	-37,64	-32,70	-27,52	-22,29	-17,35	-13,06	-10,19	-10,39	-18,22	-56,05	—
	DMA	53,80	42,64	36,92	35,45	40,36	47,08	54,37	63,01	74,57	93,64	145,55	—
	PDMA	55,07	39,00	24,82	12,49	24,45	42,29	60,42	79,02	98,44	120,27	152,13	—
SPI	DM	6,25	7,13	8,06	9,07	10,13	11,31	12,62	14,09	15,77	17,77	20,21	—
	DMA	6,77	7,54	8,38	9,25	10,29	11,59	13,10	15,07	17,69	20,82	24,75	—
	PDMA	35,95	31,26	26,79	21,71	19,53	21,89	25,08	34,33	49,89	69,03	94,39	—
ΔCS	DM	-48,38	-44,76	-40,76	-36,59	-32,42	-28,67	-25,68	-24,28	-26,16	-35,98	-76,27	—
	DMA	47,03	35,10	28,54	26,20	30,07	35,49	41,27	47,94	56,88	72,82	120,80	—
	PDMA	19,12	7,75	-1,97	-9,21	4,91	20,40	35,35	44,68	48,56	51,25	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-13,99	-12,02	-9,78	-7,36	-4,85	-2,37	-0,10	1,62	2,07	-0,87	-17,79	—
	DMA	27,36	23,40	22,08	22,79	25,17	28,45	32,15	36,74	43,10	53,35	79,77	—
	PDMA	18,50	15,94	14,35	13,30	14,51	18,54	23,13	29,38	37,23	46,83	62,25	—
CPI	DM	-40,74	-37,67	-34,08	-30,18	-26,20	-22,50	-19,49	-18,01	-19,88	-30,11	-73,32	—
	DMA	53,58	43,17	38,72	38,90	42,72	48,38	54,69	62,51	73,58	92,93	148,44	—
	PDMA	23,24	18,04	14,70	13,14	15,69	23,79	32,33	41,59	51,95	65,17	89,61	—
SPI	DM	6,59	7,72	8,91	10,20	11,58	13,11	14,81	16,72	18,95	21,62	24,93	—
	DMA	7,19	8,19	9,28	10,40	11,67	13,12	14,81	16,92	19,66	22,91	26,95	—
	PDMA	14,85	14,33	14,08	13,42	13,59	14,50	16,06	19,98	25,90	32,73	41,20	—
ΔCS	DM	-47,33	-45,39	-42,99	-40,38	-37,78	-35,61	-34,30	-34,73	-38,83	-51,73	-98,25	—
	DMA	46,39	34,98	29,44	28,50	31,05	35,26	39,88	45,59	53,92	70,02	121,49	—
	PDMA	8,40	3,71	0,62	-0,28	2,10	9,29	16,27	21,61	26,05	32,44	48,41	—

Tabela 8.242: Constantes de acoplamento PBEB98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	422,8	443,3	463,9	484,6	505,5	526,5	547,6	568,8	590,1	611,5	633,1	500
CO	$^1J_{CO}$	19,8	18,0	16,2	14,2	12,2	10,1	7,9	5,6	3,3	0,9	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-73,0	-75,2	-77,4	-79,6	-81,8	-84,1	-86,3	-88,6	-90,9	-93,2	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,9	-4,9	-5,9	-6,9	-8,0	-9,0	-10,1	-11,2	-12,3	-13,5	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	44,1	44,8	45,5	46,2	47,0	47,7	48,4	49,2	49,9	50,7	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,9	-7,8	-8,8	-9,7	-10,7	-11,6	-12,6	-13,6	-14,7	-15,7	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	177,2	185,0	192,6	200,1	207,5	214,6	221,6	228,5	235,1	241,6	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1770,6	-1747,7	-1720,1	-1688,4	-1653,5	-1615,8	-1576,1	-1534,7	-1492,1	-1448,6	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-157,0	-139,7	-122,5	-105,5	-88,8	-72,3	-56,0	-40,0	-24,3	-8,8	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-58,9	-40,4	-22,1	-4,1	13,5	30,9	48,0	64,9	81,4	97,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-262,0	-297,8	-333,3	-370,1	-409,7	-455,1	-510,8	-585,7	-699,3	-909,6	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	133,1	134,6	136,2	137,7	139,3	141,0	142,6	144,3	146,0	147,8	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,1	-10,9	-11,7	-12,5	-13,3	-14,1	-14,9	-15,7	-16,5	-17,3	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	214,5	217,9	221,6	225,8	230,5	236,0	242,3	249,8	258,6	269,1	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	266,6	269,1	271,6	274,3	277,2	280,4	283,8	287,7	292,1	297,3	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,6	54,6	54,4	53,9	53,3	52,3	50,9	49,1	46,7	43,5	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,8	9,3	9,9	10,6	11,4	12,4	13,7	15,1	16,9	19,1	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	76,1	79,1	82,4	86,0	90,0	94,6	100,0	106,3	114,2	124,4	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	165,9	168,1	170,4	172,8	175,3	178,1	181,1	184,5	188,5	193,3	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,2	-5,6	-7,4	-9,5	-12,2	-15,8	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,9	5,3	4,5	3,8	2,9	2,0	1,0	-0,2	-1,7	-3,6	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,4	11,6	11,8	12,1	12,5	13,0	13,6	14,4	15,5	17,0	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,0	18,3	18,6	19,0	19,4	20,0	20,8	21,8	23,1	24,9	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	33,5	35,7	37,9	40,1	42,4	44,7	47,1	49,5	52,0	54,5	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	132,8	134,5	136,3	138,1	139,9	141,8	143,6	145,5	147,5	149,4	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-5,0	-5,5	-6,1	-6,7	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-15,57	-13,23	-10,70	-8,05	-5,37	-2,75	-0,41	1,33	1,74	-1,37	-19,10	—
	DMA	28,11	23,60	21,97	20,90	20,63	24,06	28,44	33,72	40,72	51,75	80,95	—
	PDMA	44,54	34,01	24,47	18,10	15,93	25,74	40,37	56,48	75,10	97,73	129,89	—
CPI	DM	-46,30	-42,12	-37,53	-32,74	-27,97	-23,55	-19,94	-17,97	-19,52	-29,80	-75,31	—
	DMA	56,37	44,74	39,62	35,59	33,06	38,89	46,59	55,86	68,46	89,76	152,76	—
	PDMA	67,45	49,19	33,62	20,87	12,17	27,17	45,39	64,11	83,78	106,39	140,82	—
SPI	DM	6,97	7,96	8,97	10,05	11,21	12,50	13,91	15,49	17,33	19,48	22,12	—
	DMA	7,39	8,11	9,03	10,12	11,51	13,18	15,13	17,48	20,38	23,88	28,29	—
	PDMA	27,73	22,87	17,76	16,07	18,69	24,69	36,69	50,89	68,74	91,39	121,88	—
ΔCS	DM	-53,27	-50,08	-46,50	-42,79	-39,18	-36,05	-33,84	-33,47	-36,84	-49,28	-97,43	—
	DMA	48,99	36,63	30,59	25,47	21,55	25,71	31,46	38,38	48,08	65,88	124,47	—
	PDMA	39,72	26,31	15,86	4,80	-6,53	2,48	8,70	13,22	15,04	15,00	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-14,64	-12,74	-10,60	-8,31	-5,95	-3,65	-1,63	-0,24	-0,32	-4,31	-24,71	—
	DMA	28,30	24,07	23,10	22,70	23,15	26,35	30,44	35,53	42,55	54,07	86,04	—
	PDMA	17,77	13,82	11,66	11,18	13,18	18,12	24,55	31,79	40,34	51,05	68,62	—
CPI	DM	-43,54	-40,79	-37,57	-34,10	-30,62	-27,49	-25,23	-24,76	-28,11	-41,06	-92,72	—
	DMA	54,62	43,67	39,87	37,24	36,22	41,19	47,95	56,46	68,67	90,46	158,16	—
	PDMA	24,93	17,17	12,24	10,22	12,38	19,29	27,93	37,25	47,89	61,83	89,03	—
SPI	DM	7,58	8,83	10,14	11,52	13,02	14,69	16,53	18,62	21,05	23,96	27,60	—
	DMA	8,06	9,00	10,20	11,52	13,10	14,94	16,98	19,43	22,45	26,07	30,57	—
	PDMA	12,27	11,23	11,21	11,92	13,79	17,23	21,96	27,60	34,53	42,76	52,91	—
ΔCS	DM	-51,12	-49,62	-47,71	-45,62	-43,64	-42,18	-41,76	-43,38	-49,16	-65,02	-120,32	—
	DMA	46,56	34,67	29,67	25,72	23,12	26,25	30,97	37,03	46,22	64,39	127,59	—
	PDMA	12,66	5,94	1,03	-1,70	-1,41	2,06	5,96	9,65	13,36	19,07	36,12	—

Tabela 8.243: Constantes de acoplamento PBELYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	423,5	446,4	469,5	492,9	516,4	540,2	564,2	588,4	612,8	637,5	662,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,8	17,9	16,0	14,0	12,0	9,8	7,6	5,3	2,9	0,5	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,3	-77,8	-80,3	-82,8	-85,3	-87,8	-90,4	-93,0	-95,7	-98,4	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,2	-6,3	-7,4	-8,6	-9,7	-10,9	-12,2	-13,4	-14,7	-16,0	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	46,3	47,0	47,8	48,6	49,3	50,1	50,9	51,8	52,6	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,1	-9,0	-10,0	-11,1	-12,1	-13,1	-14,2	-15,3	-16,4	-17,5	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,1	165,8	174,3	182,8	191,2	199,5	207,7	215,8	223,7	231,5	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1806,9	-1784,0	-1756,1	-1724,1	-1688,8	-1650,7	-1610,5	-1568,6	-1525,5	-1481,5	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-162,4	-145,1	-128,0	-111,0	-94,3	-77,9	-61,7	-45,7	-30,0	-14,5	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,0	-42,3	-23,8	-5,7	12,1	29,6	46,9	64,0	80,8	97,4	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-268,4	-305,6	-342,9	-381,9	-424,8	-474,8	-537,8	-625,6	-767,0	-1059,2	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,7	135,1	136,6	138,1	139,6	141,2	142,7	144,4	146,0	147,7	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-12,2	-13,0	-13,9	-14,7	-15,5	-16,4	-17,2	-18,1	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,8	204,8	208,2	212,0	216,5	221,7	227,9	235,2	244,0	254,9	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	273,9	276,4	279,0	281,8	284,8	288,1	291,8	295,9	300,8	306,5	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	56,8	56,5	56,0	55,1	54,0	52,3	50,1	47,2	43,3	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,9	10,5	11,2	12,0	13,1	14,3	15,8	17,6	19,8	22,6	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,2	72,0	75,2	78,7	82,6	87,3	92,8	99,7	108,5	120,7	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,0	170,2	172,4	174,8	177,4	180,3	183,4	187,1	191,6	197,5	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,1	-0,7	-1,7	-2,9	-4,3	-5,9	-7,9	-10,4	-13,7	-18,3	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,4	5,7	4,8	4,0	3,0	1,9	0,6	-0,8	-2,8	-5,4	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,1	13,5	14,0	14,6	15,4	16,5	18,0	20,2	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	20,1	20,4	20,9	21,5	22,2	23,2	24,5	26,3	28,9	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,1	33,1	35,1	37,2	39,3	41,5	43,6	45,9	48,1	50,4	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	133,1	134,8	136,4	138,2	139,9	141,7	143,5	145,3	147,1	149,0	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,6	-6,1	-6,7	-7,2	-7,8	-4,7
Total													
Total	DM	-18,60	-16,24	-13,69	-11,01	-8,32	-5,75	-3,55	-2,10	-2,55	-8,49	-48,74	—
	DMA	29,96	25,64	23,72	22,39	22,72	25,97	30,85	36,78	45,22	59,90	110,36	—
	PDMA	45,11	34,79	25,59	21,37	19,90	29,30	45,36	62,90	84,46	111,86	158,62	—
CPI													
CPI	DM	-52,94	-48,60	-43,87	-38,96	-34,15	-29,79	-26,47	-25,28	-28,93	-46,23	-145,56	—
	DMA	61,23	50,13	44,51	39,69	38,55	43,92	52,69	63,54	79,13	108,32	220,20	—
	PDMA	67,58	49,21	34,21	25,57	17,98	30,82	49,88	69,47	90,68	116,28	169,20	—
SPI													
SPI	DM	6,57	7,49	8,45	9,49	10,61	11,89	13,27	14,91	16,80	19,19	22,27	—
	DMA	7,03	7,68	8,47	9,71	11,12	12,81	14,83	17,16	20,35	24,39	29,81	—
	PDMA	28,64	24,22	19,26	18,29	21,31	28,19	42,05	58,08	79,90	108,62	150,86	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-59,51	-56,09	-52,32	-48,46	-44,76	-41,68	-39,74	-40,19	-45,73	-65,41	-167,83	—
	DMA	54,20	42,45	36,04	29,98	27,43	31,11	37,86	46,38	58,78	83,93	190,39	—
	PDMA	38,93	24,99	14,95	7,29	-3,32	2,62	7,83	11,40	10,78	7,65	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-18,01	-16,09	-13,93	-11,60	-9,23	-6,96	-5,08	-4,02	-5,03	-12,15	-57,89	—
	DMA	30,27	26,27	24,99	24,32	25,45	28,55	33,17	38,97	47,54	63,10	118,96	—
	PDMA	16,69	13,22	11,68	14,04	16,89	21,80	28,86	36,55	46,29	59,21	87,08	—
CPI													
CPI	DM	-50,63	-47,73	-44,38	-40,79	-37,27	-34,23	-32,31	-32,71	-38,40	-59,09	-170,00	—
	DMA	59,75	49,41	45,08	41,59	42,11	46,85	54,77	64,99	80,46	110,91	232,34	—
	PDMA	23,67	15,93	11,77	14,33	17,85	24,16	33,60	43,75	55,88	72,97	120,26	—
SPI													
SPI	DM	7,08	8,25	9,50	10,86	12,34	14,02	15,86	18,05	20,65	23,95	28,35	—
	DMA	7,60	8,47	9,53	11,03	12,63	14,48	16,55	18,95	22,22	26,32	31,74	—
	PDMA	11,32	11,13	11,62	13,81	16,15	19,98	25,21	31,00	38,91	48,62	61,56	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-57,71	-55,98	-53,88	-51,65	-49,61	-48,25	-48,17	-50,76	-59,05	-83,04	-198,35	—
	DMA	52,15	40,94	35,55	30,56	29,48	32,37	38,22	46,04	58,24	84,59	200,60	—
	PDMA	12,34	4,80	0,15	0,52	1,69	4,19	8,39	12,75	16,96	24,35	58,70	—

Tabela 8.244: Constantes de acoplamento PBEP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	380,3	401,5	423,0	444,7	466,5	488,6	510,9	533,4	556,2	579,1	602,2	500
CO	$^1J_{CO}$	23,5	21,9	20,2	18,5	16,7	14,8	12,9	10,9	8,9	6,8	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,4	-69,6	-71,9	-74,2	-76,5	-78,9	-81,3	-83,6	-86,1	-88,5	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	-8,3	-9,4	-10,4	-11,6	-12,7	-13,9	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,7	41,3	42,0	42,7	43,4	44,1	44,8	45,6	46,3	47,1	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,3	-8,2	-9,1	-10,0	-10,9	-11,8	-12,8	-13,7	-14,7	-15,7	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	134,4	142,5	150,5	158,5	166,4	174,3	182,0	189,7	197,3	204,7	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1796,2	-1773,0	-1744,9	-1712,9	-1677,6	-1639,7	-1599,7	-1558,0	-1515,2	-1471,6	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-171,9	-155,2	-138,6	-122,3	-106,1	-90,1	-74,4	-59,0	-43,7	-28,8	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-74,9	-56,7	-38,8	-21,2	-3,8	13,2	30,0	46,6	62,9	79,0	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-276,5	-313,8	-351,5	-390,9	-434,3	-484,9	-548,5	-636,4	-775,3	-1049,3	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	118,5	119,8	121,2	122,5	123,9	125,4	126,8	128,3	129,9	131,4	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,1	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-14,9	-15,7	-16,5	-17,3	-18,0	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	189,3	191,9	194,9	198,3	202,3	206,9	212,4	219,0	227,1	237,3	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	247,2	249,5	251,9	254,5	257,3	260,4	263,8	267,8	272,5	278,2	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,1	54,1	53,9	53,5	52,8	51,7	50,2	48,1	45,2	41,3	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,8	10,4	11,1	12,0	13,0	14,3	15,9	17,8	20,1	23,1	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	61,5	64,0	66,9	70,1	73,8	78,1	83,4	90,1	99,1	112,2	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	150,4	152,4	154,5	156,7	159,1	161,8	164,9	168,5	173,1	179,4	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,0	-0,9	-1,8	-2,9	-4,2	-5,7	-7,7	-10,2	-13,7	-18,9	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,9	4,2	3,4	2,5	1,5	0,4	-0,9	-2,6	-4,9	-8,2	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,4	11,7	12,0	12,5	13,0	13,7	14,7	16,0	17,8	20,7	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,1	18,4	18,8	19,4	20,0	20,9	22,0	23,5	25,7	29,0	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,8	27,6	29,5	31,3	33,3	35,2	37,2	39,2	41,3	43,3	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	118,5	120,0	121,6	123,2	124,8	126,4	128,1	129,8	131,5	133,2	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,6	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,0	-7,6	-4,7
Total	DM	-25,72	-23,51	-21,10	-18,58	-16,06	-13,66	-11,61	-10,32	-10,78	-16,12	-45,89	—
	DMA	31,62	27,35	24,73	22,41	20,62	19,44	21,93	27,37	35,58	49,53	90,58	—
	PDMA	48,76	37,93	27,64	19,80	18,61	20,63	34,08	51,92	73,92	103,29	152,34	—
CPI	DM	-60,04	-55,95	-51,47	-46,84	-42,31	-38,25	-35,22	-34,27	-37,91	-53,82	-128,80	—
	DMA	68,98	59,58	54,04	48,40	43,11	38,61	41,85	51,24	66,27	93,47	182,13	—
	PDMA	83,83	66,42	50,52	35,61	24,20	15,33	28,28	46,47	66,58	90,79	134,69	—
SPI	DM	-0,55	0,28	1,18	2,14	3,19	4,37	5,70	7,25	9,12	11,53	14,91	—
	DMA	4,22	3,71	3,23	3,35	4,12	5,38	7,33	9,87	13,08	17,30	23,45	—
	PDMA	23,04	17,03	10,85	8,21	14,51	24,52	38,34	55,91	79,31	112,46	165,29	—
ΔCS	DM	-59,48	-56,23	-52,65	-48,98	-45,50	-42,61	-40,92	-41,52	-47,03	-65,34	-143,71	—
	DMA	64,76	55,88	50,80	45,05	38,99	33,23	34,53	41,36	53,19	76,17	158,67	—
	PDMA	60,79	49,39	39,66	27,40	9,69	-9,19	-10,07	-9,44	-12,73	-21,67	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,38	-23,60	-21,58	-19,42	-17,23	-15,14	-13,41	-12,49	-13,46	-19,83	-53,57	—
	DMA	31,62	27,65	25,54	23,73	22,37	21,67	23,77	29,02	37,34	52,03	97,15	—
	PDMA	19,80	15,78	12,48	10,61	10,82	13,23	18,53	26,14	35,60	48,48	73,57	—
CPI	DM	-57,05	-54,37	-51,24	-47,90	-44,66	-41,89	-40,24	-40,86	-46,49	-65,60	-149,66	—
	DMA	66,89	58,37	54,06	49,62	45,54	42,29	44,54	53,20	68,11	96,42	192,36	—
	PDMA	32,28	25,26	19,70	15,04	14,08	15,66	21,10	30,05	41,30	57,20	94,96	—
SPI	DM	-1,02	0,06	1,23	2,49	3,88	5,44	7,23	9,34	11,95	15,38	20,35	—
	DMA	4,48	4,02	3,60	3,82	4,55	5,81	7,80	10,42	13,67	17,88	23,91	—
	PDMA	10,20	8,49	6,92	7,20	8,30	11,36	16,55	23,13	31,21	41,76	57,11	—
ΔCS	DM	-56,03	-54,43	-52,47	-50,39	-48,54	-47,33	-47,47	-50,20	-58,44	-80,98	-170,01	—
	DMA	62,41	54,35	50,46	45,80	40,99	36,48	36,74	42,78	54,44	78,54	168,45	—
	PDMA	22,08	16,77	12,78	7,84	5,78	4,30	4,55	6,92	10,09	15,44	37,85	—

Tabela 8.245: Constantes de acoplamento PBEPBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	376,0	397,8	419,7	441,9	464,3	486,9	509,8	532,8	556,1	579,6	603,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,1	22,5	20,8	19,1	17,3	15,4	13,5	11,5	9,5	7,4	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,2	-69,5	-71,8	-74,2	-76,6	-79,0	-81,4	-83,9	-86,4	-88,9	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,7	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-10,0	-11,1	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,6	44,3	45,1	45,8	46,6	47,4	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,5	-12,5	-13,5	-14,5	-15,5	-16,6	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	133,7	142,1	150,4	158,7	166,9	175,1	183,1	191,1	198,9	206,7	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1801,0	-1776,9	-1748,1	-1715,3	-1679,4	-1640,8	-1600,3	-1558,1	-1514,9	-1470,9	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-172,8	-155,9	-139,2	-122,7	-106,5	-90,4	-74,6	-59,0	-43,7	-28,6	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-75,8	-57,5	-39,4	-21,7	-4,2	12,9	29,9	46,6	63,0	79,2	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-278,0	-316,3	-354,9	-395,6	-440,5	-493,5	-560,8	-655,5	-809,2	-1129,5	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	120,7	122,1	123,5	125,0	126,5	128,0	129,6	131,2	132,8	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19,0	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	191,5	194,6	198,3	202,6	207,6	213,7	221,0	230,2	241,9	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,8	252,2	254,8	257,6	260,7	264,1	268,0	272,5	277,9	284,6	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	54,1	53,7	53,2	52,2	50,9	49,0	46,5	42,9	38,1	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	11,1	11,9	12,9	14,1	15,6	17,4	19,6	22,5	26,1	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,3	64,0	67,0	70,4	74,4	79,1	85,0	92,8	103,6	120,3	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	153,9	156,1	158,5	161,1	164,0	167,5	171,6	177,1	185,2	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,1	-12,2	-16,5	-23,4	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,7	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,1	-7,0	-11,4	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,7	12,1	12,5	13,0	13,6	14,5	15,7	17,3	19,7	23,7	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,7	19,0	19,5	20,1	20,9	21,9	23,3	25,2	28,0	32,5	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,7	27,6	29,4	31,3	33,3	35,2	37,2	39,3	41,3	43,4	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	121,1	122,7	124,3	126,0	127,7	129,4	131,2	133,0	134,8	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-26,05	-23,77	-21,32	-18,75	-16,19	-13,77	-11,72	-10,54	-11,36	-18,15	-62,67	—
	DMA	31,85	27,68	25,11	23,12	21,47	20,50	23,18	29,22	38,35	54,68	112,44	—
	PDMA	46,79	35,93	26,02	23,07	23,41	26,51	41,16	61,13	86,55	122,43	190,22	—
CPI	DM	-61,24	-57,05	-52,50	-47,84	-43,31	-39,32	-36,47	-36,04	-40,91	-60,89	-172,10	—
	DMA	69,87	60,63	55,01	49,49	44,20	39,70	42,91	53,18	69,62	101,13	226,41	—
	PDMA	83,81	66,37	50,34	37,51	26,29	16,91	29,77	48,48	69,25	95,09	151,26	—
SPI	DM	-0,25	0,63	1,55	2,57	3,70	4,96	6,43	8,16	10,31	13,20	17,57	—
	DMA	3,96	3,51	3,19	3,79	4,79	6,43	8,72	11,64	15,41	20,63	28,87	—
	PDMA	19,65	13,60	8,19	12,49	21,30	33,55	49,51	70,42	99,24	142,49	218,79	—
ΔCS	DM	-60,98	-57,68	-54,05	-50,41	-47,01	-44,28	-42,90	-44,20	-51,22	-74,09	-189,67	—
	DMA	65,91	57,11	51,82	45,70	39,41	33,27	34,19	41,54	54,20	80,50	197,54	—
	PDMA	64,16	52,77	42,15	25,03	4,99	-16,64	-19,74	-21,94	-29,99	-47,40	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,68	-23,82	-21,75	-19,53	-17,28	-15,16	-13,42	-12,58	-13,91	-21,80	-71,93	—
	DMA	31,87	28,03	26,00	24,47	23,24	22,77	25,08	30,95	40,24	57,52	121,21	—
	PDMA	18,98	15,14	12,52	12,15	12,99	15,91	21,76	30,10	40,81	55,85	89,72	—
CPI	DM	-58,28	-55,50	-52,31	-48,95	-45,72	-43,04	-41,61	-42,80	-49,80	-73,40	-197,33	—
	DMA	67,78	59,44	55,07	50,77	46,70	43,46	45,71	55,34	71,78	104,82	241,03	—
	PDMA	31,66	24,68	19,11	16,80	16,12	17,20	22,82	32,26	44,18	61,80	112,92	—
SPI	DM	-0,61	0,55	1,75	3,11	4,60	6,28	8,27	10,66	13,69	17,90	24,54	—
	DMA	4,25	3,87	3,63	4,23	5,20	6,85	9,21	12,18	15,98	21,13	29,05	—
	PDMA	9,22	7,81	7,45	8,57	10,57	14,92	20,94	28,43	38,21	51,28	71,87	—
ΔCS	DM	-57,67	-56,05	-54,06	-52,06	-50,32	-49,32	-49,88	-53,46	-63,49	-91,30	-221,87	—
	DMA	63,53	55,57	51,44	46,54	41,50	36,61	36,50	43,16	55,80	83,69	211,98	—
	PDMA	22,44	16,87	11,65	8,23	5,55	2,28	1,88	3,82	5,97	10,51	41,06	—

Tabela 8.246: Constantes de acoplamento PBEPW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	378,7	400,4	422,4	444,7	467,1	489,7	512,6	535,7	559,0	582,5	606,3	500
CO	$^1J_{CO}$	23,9	22,3	20,6	18,8	17,0	15,1	13,1	11,1	9,1	7,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,6	-69,9	-72,2	-74,6	-77,0	-79,4	-81,8	-84,3	-86,8	-89,3	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,7	-5,7	-6,8	-7,8	-8,9	-10,0	-11,2	-12,3	-13,5	-14,7	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,0	41,7	42,4	43,1	43,8	44,6	45,3	46,1	46,8	47,6	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,7	-9,7	-10,6	-11,6	-12,5	-13,5	-14,5	-15,6	-16,6	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	134,7	143,1	151,5	159,8	168,0	176,1	184,2	192,2	200,1	207,8	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1804,4	-1780,2	-1751,3	-1718,4	-1682,3	-1643,6	-1602,9	-1560,6	-1517,2	-1473,1	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-172,0	-155,1	-138,3	-121,8	-105,4	-89,3	-73,5	-57,8	-42,5	-27,4	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-74,9	-56,5	-38,4	-20,6	-3,1	14,1	31,1	47,8	64,3	80,5	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-277,8	-316,0	-354,6	-395,3	-440,2	-493,2	-560,7	-655,7	-810,5	-1135,6	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	120,0	121,3	122,7	124,2	125,7	127,2	128,7	130,3	131,9	133,5	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,6	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,2	-19,0	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	189,9	192,7	195,9	199,6	203,9	209,0	215,2	222,6	231,9	243,6	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	251,0	253,4	256,0	258,8	261,9	265,3	269,2	273,8	279,2	285,9	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,2	54,1	53,8	53,2	52,2	50,9	49,0	46,4	42,9	38,0	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,4	11,0	11,9	12,9	14,1	15,5	17,3	19,6	22,4	26,0	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	61,9	64,6	67,6	71,1	75,1	79,9	85,8	93,6	104,5	121,4	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	152,6	154,7	157,0	159,3	162,0	164,9	168,4	172,6	178,1	186,1	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,5	-1,4	-2,5	-3,7	-5,1	-6,9	-9,2	-12,2	-16,6	-23,5	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,5	3,7	2,8	1,9	0,8	-0,4	-2,0	-4,1	-6,9	-11,3	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,7	12,0	12,5	13,0	13,6	14,5	15,6	17,3	19,7	23,6	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,6	19,0	19,5	20,1	20,9	21,9	23,2	25,1	27,9	32,5	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	26,1	27,9	29,8	31,7	33,7	35,7	37,7	39,7	41,8	43,9	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	120,1	121,7	123,3	125,0	126,7	128,4	130,1	131,9	133,7	135,5	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,9	-3,4	-3,8	-4,3	-4,8	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total	DM	-25,77	-23,50	-21,01	-18,43	-15,84	-13,41	-11,38	-10,17	-11,02	-17,98	-65,03	—
	DMA	31,73	27,53	25,01	23,05	21,47	20,60	23,71	29,86	39,03	55,55	115,74	—
	PDMA	46,35	35,36	25,62	22,46	22,81	26,20	41,83	61,89	87,35	123,25	191,82	—
CPI	DM	-61,07	-56,86	-52,30	-47,60	-43,05	-39,03	-36,20	-35,75	-40,70	-61,11	-178,33	—
	DMA	69,64	60,34	54,68	49,13	43,81	39,39	43,60	54,11	70,65	102,56	233,56	—
	PDMA	82,91	65,40	49,32	36,40	25,26	16,15	31,06	49,79	70,74	96,62	155,08	—
SPI	DM	0,11	0,97	1,93	2,97	4,11	5,37	6,83	8,58	10,75	13,64	18,05	—
	DMA	3,93	3,47	3,25	3,93	5,08	6,83	9,12	12,07	15,85	21,08	29,34	—
	PDMA	19,53	13,34	8,25	12,23	21,02	33,56	49,72	70,76	99,53	142,78	218,77	—
ΔCS	DM	-61,19	-57,84	-54,23	-50,57	-47,15	-44,40	-43,03	-44,33	-51,45	-74,75	-196,37	—
	DMA	65,71	56,87	51,43	45,20	38,73	32,56	34,48	42,04	54,79	81,48	204,22	—
	PDMA	63,38	52,06	41,07	24,18	4,23	-17,41	-18,65	-20,97	-28,79	-46,16	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-25,40	-23,56	-21,45	-19,21	-16,94	-14,81	-13,08	-12,22	-13,58	-21,67	-74,66	—
	DMA	31,78	27,90	25,93	24,43	23,30	22,94	25,62	31,62	40,97	58,44	124,89	—
	PDMA	18,73	14,79	12,36	11,96	12,82	16,10	22,17	30,60	41,33	56,41	91,32	—
CPI	DM	-58,19	-55,40	-52,19	-48,80	-45,54	-42,84	-41,43	-42,60	-49,70	-73,77	-204,32	—
	DMA	67,61	59,22	54,81	50,48	46,38	43,24	46,35	56,24	72,78	106,27	248,76	—
	PDMA	31,27	24,27	18,65	16,31	15,71	17,17	23,44	32,90	44,95	62,61	116,19	—
SPI	DM	-0,18	0,94	2,20	3,55	5,06	6,75	8,73	11,15	14,20	18,41	25,08	—
	DMA	4,22	3,82	3,71	4,40	5,54	7,32	9,67	12,68	16,49	21,65	29,60	—
	PDMA	9,09	7,50	7,52	8,61	10,59	15,27	21,19	28,84	38,56	51,64	72,19	—
ΔCS	DM	-58,01	-56,34	-54,39	-52,35	-50,60	-49,59	-50,16	-53,75	-63,90	-92,18	-229,40	—
	DMA	63,39	55,40	51,10	46,08	40,84	35,92	36,68	43,56	56,29	84,62	219,16	—
	PDMA	22,18	16,77	11,13	7,71	5,13	1,90	2,25	4,07	6,39	10,98	44,00	—

Tabela 8.247: Constantes de acoplamento PBETPSS com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	378,3	400,7	423,3	446,0	468,9	492,0	515,3	538,7	562,3	586,0	610,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,9	22,3	20,6	18,8	17,0	15,1	13,2	11,2	9,1	7,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,3	-70,7	-73,2	-75,6	-78,1	-80,6	-83,1	-85,6	-88,2	-90,8	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-5,5	-6,6	-7,7	-8,9	-10,0	-11,2	-12,4	-13,7	-14,9	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,2	43,0	43,7	44,5	45,3	46,0	46,8	47,6	48,4	49,3	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,4	-9,4	-10,4	-11,4	-12,4	-13,5	-14,6	-15,7	-16,8	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	143,2	152,4	161,5	170,6	179,7	188,7	197,6	206,5	215,3	224,0	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1805,1	-1781,6	-1753,5	-1721,3	-1685,8	-1647,8	-1607,6	-1565,9	-1523,0	-1479,3	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-173,6	-156,9	-140,4	-124,1	-107,9	-92,0	-76,4	-61,0	-45,9	-31,0	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-73,1	-54,9	-37,0	-19,3	-2,0	15,0	31,7	48,3	64,5	80,5	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-276,8	-314,9	-353,5	-393,9	-438,5	-490,9	-557,3	-650,5	-801,4	-1114,8	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,7	129,2	130,8	132,5	134,1	135,9	137,6	139,4	141,2	143,0	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,2	-12,1	-13,0	-13,9	-14,7	-15,6	-16,5	-17,5	-18,4	-19,3	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,7	192,6	195,9	199,7	204,2	209,6	216,0	223,8	233,5	245,9	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	265,0	267,8	270,7	273,8	277,3	281,1	285,4	290,3	296,3	303,6	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,7	55,6	55,3	54,6	53,6	52,2	50,2	47,5	43,8	38,7	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	11,5	12,3	13,3	14,6	16,1	18,0	20,3	23,2	26,9	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,6	65,4	68,5	72,1	76,2	81,2	87,3	95,3	106,5	123,5	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	161,7	164,1	166,6	169,2	172,1	175,4	179,1	183,6	189,5	197,8	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-1,6	-2,7	-4,0	-5,5	-7,4	-9,7	-12,9	-17,3	-24,3	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,2	4,3	3,3	2,2	0,9	-0,7	-2,8	-5,6	-9,9	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,5	12,8	13,3	13,8	14,4	15,3	16,4	18,0	20,4	24,3	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,5	20,9	21,4	22,0	22,8	23,8	25,1	27,0	29,8	34,2	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,7	28,6	30,5	32,4	34,4	36,4	38,4	40,5	42,6	44,8	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,6	129,4	131,3	133,1	135,0	137,0	138,9	140,9	142,9	145,0	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,5	-6,1	-6,7	-7,3	-7,9	-8,5	-4,7
Total	DM	-23,62	-21,29	-18,78	-16,15	-13,50	-10,98	-8,85	-7,54	-8,16	-14,60	-57,72	—
	DMA	31,98	28,12	26,02	24,32	22,86	22,13	25,98	32,51	41,69	57,92	113,73	—
	PDMA	49,42	38,48	29,33	24,83	22,70	26,68	42,97	63,73	89,30	125,26	191,26	—
CPI	DM	-60,18	-55,95	-51,40	-46,66	-42,05	-37,98	-35,04	-34,42	-39,02	-58,34	-166,33	—
	DMA	68,93	59,36	53,67	48,14	42,89	38,47	44,49	55,71	72,04	103,03	223,67	—
	PDMA	82,05	64,32	48,14	34,87	24,23	15,32	31,75	50,99	71,88	97,44	152,58	—
SPI	DM	3,19	4,13	5,15	6,22	7,44	8,82	10,35	12,17	14,47	17,48	21,93	—
	DMA	4,89	5,21	5,75	6,86	8,17	10,15	12,41	15,49	19,44	24,84	33,11	—
	PDMA	25,48	19,52	15,54	17,48	21,58	35,01	51,19	73,07	102,08	145,65	219,63	—
ΔCS	DM	-63,37	-60,07	-56,55	-52,88	-49,49	-46,80	-45,39	-46,59	-53,48	-75,82	-188,25	—
	DMA	64,03	54,16	47,93	41,28	34,72	28,32	32,08	40,22	52,60	78,19	190,56	—
	PDMA	56,56	44,79	32,61	17,39	2,65	-19,70	-19,44	-22,08	-30,20	-48,21	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-23,12	-21,19	-19,04	-16,74	-14,38	-12,13	-10,28	-9,29	-10,39	-17,87	-66,43	—
	DMA	32,08	28,59	27,06	25,89	24,97	24,74	28,20	34,62	43,99	61,14	122,68	—
	PDMA	19,88	16,30	13,76	13,34	14,93	18,46	24,84	33,72	44,68	59,87	93,09	—
CPI	DM	-57,39	-54,55	-51,34	-47,90	-44,56	-41,78	-40,21	-41,19	-47,87	-70,72	-191,09	—
	DMA	67,01	58,31	53,84	49,52	45,48	42,32	47,27	57,95	74,29	106,78	237,91	—
	PDMA	31,52	24,15	18,29	15,49	15,32	16,85	23,79	33,89	46,07	63,52	113,64	—
SPI	DM	3,25	4,48	5,81	7,22	8,83	10,67	12,74	15,25	18,45	22,79	29,46	—
	DMA	5,22	5,72	6,45	7,72	9,18	11,22	13,52	16,68	20,68	26,04	34,05	—
	PDMA	10,93	10,27	10,27	11,69	14,63	19,69	25,64	33,60	43,60	57,07	77,27	—
ΔCS	DM	-60,64	-59,03	-57,15	-55,12	-53,39	-52,45	-52,95	-56,44	-66,32	-93,51	-220,55	—
	DMA	61,79	52,59	47,39	41,80	36,30	31,10	33,75	41,27	53,61	80,74	203,86	—
	PDMA	20,59	13,89	8,01	3,80	0,69	-2,84	-1,84	0,29	2,47	6,46	36,37	—

Tabela 8.248: Valores de PDMA total obtidos para troca PBE com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
PBEB95	51,9	40,9	30,3	21,1	14,0	12,4	22,9	36,8	51,9	69,9	92,6
PBEB98	45,7	35,2	25,0	20,1	18,5	25,7	40,1	57,3	75,7	99,1	131,6
PBEB971	44,9	34,1	23,6	16,7	14,6	23,3	37,6	53,3	71,2	92,3	120,6
PBEB972	44,9	35,3	26,2	18,3	19,4	28,4	37,9	52,2	69,5	90,4	119,3
PBELYP	46,1	35,5	27,2	23,0	21,5	28,8	44,8	62,6	84,2	113,4	161,5
PBEP86	49,1	37,8	27,5	21,9	21,4	23,7	34,6	53,2	74,8	105,4	156,7
PBEPBE	47,1	35,5	27,0	25,6	26,5	29,3	41,7	62,4	87,7	125,0	196,2
PBEPW91	46,5	34,9	26,8	25,2	26,0	29,1	42,3	63,1	88,5	126,0	197,9
PBETPSS	49,8	38,6	30,2	26,8	26,1	29,8	43,2	64,2	90,8	128,0	197,2

8.4.1.7 Troca PW91

Tabela 8.249: Constantes de acoplamento PW91B95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	414,1	436,7	459,5	482,5	505,6	528,8	552,2	575,8	599,5	623,4	647,4	500
CO	$^1J_{CO}$	23,0	21,3	19,5	17,7	15,7	13,7	11,6	9,4	7,1	4,8	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-71,5	-73,9	-76,3	-78,7	-81,2	-83,6	-86,1	-88,6	-91,1	-93,6	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,9	-4,9	-5,9	-7,0	-8,0	-9,1	-10,2	-11,3	-12,4	-13,5	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	42,4	43,1	43,8	44,5	45,2	45,9	46,6	47,3	48,0	48,8	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,6	-7,5	-8,4	-9,3	-10,2	-11,1	-12,0	-12,9	-13,9	-14,8	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	147,1	154,6	162,0	169,3	176,5	183,6	190,5	197,4	204,1	210,6	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1720,0	-1699,6	-1674,3	-1644,9	-1612,0	-1576,3	-1538,3	-1498,6	-1457,5	-1415,5	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-174,3	-157,4	-140,6	-123,8	-107,2	-90,7	-74,3	-58,1	-42,0	-26,2	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-76,3	-57,9	-39,7	-21,6	-3,7	13,9	31,4	48,7	65,9	82,8	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-266,5	-301,0	-334,7	-368,5	-404,0	-443,2	-489,3	-547,8	-629,9	-763,7	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	121,8	123,0	124,3	125,5	126,8	128,1	129,4	130,7	132,1	133,5	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,8	-10,5	-11,3	-12,0	-12,7	-13,4	-14,2	-14,9	-15,6	-16,3	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	188,8	191,1	193,7	196,6	199,9	203,7	208,2	213,3	219,4	226,7	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	251,9	253,7	255,5	257,5	259,5	261,7	264,1	266,8	269,8	273,2	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,4	55,6	55,6	55,5	55,2	54,6	53,8	52,7	51,1	49,1	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,8	9,2	9,7	10,3	11,0	11,8	12,8	13,9	15,3	16,9	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	59,6	61,9	64,4	67,1	70,0	73,3	77,1	81,4	86,6	92,9	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	154,5	156,3	158,1	159,9	161,9	164,0	166,2	168,7	171,5	174,8	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,1	0,3	-0,4	-1,2	-2,2	-3,4	-4,7	-6,2	-8,1	-10,4	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,3	5,6	4,9	4,2	3,5	2,7	1,7	0,7	-0,4	-1,8	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,5	11,7	11,9	12,1	12,4	12,8	13,2	13,8	14,6	15,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,3	18,4	18,6	18,9	19,3	19,7	20,3	21,0	21,9	23,1	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,7	27,6	29,5	31,4	33,4	35,4	37,4	39,4	41,5	43,6	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	121,7	123,1	124,6	126,0	127,5	129,0	130,5	132,0	133,6	135,1	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,2	-2,6	-3,0	-3,5	-4,0	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-4,7
Total	DM	-20,16	-17,97	-15,54	-12,94	-10,26	-7,60	-5,08	-2,92	-1,53	-2,01	-8,15	—
	DMA	27,25	22,15	19,55	16,97	15,30	15,60	18,52	22,92	28,32	37,83	54,82	—
	PDMA	53,57	42,21	32,06	22,18	14,28	11,71	21,89	35,83	51,20	68,82	90,89	—
CPI	DM	-48,49	-44,31	-39,64	-34,61	-29,47	-24,45	-19,89	-16,33	-14,83	-17,98	-34,85	—
	DMA	58,60	47,24	41,45	35,43	30,75	30,07	35,05	43,25	53,46	72,87	109,09	—
	PDMA	83,48	65,16	48,89	32,82	20,93	13,26	28,15	46,54	65,71	86,46	112,26	—
SPI	DM	0,62	1,35	2,13	2,95	3,83	4,77	5,79	6,92	8,22	9,70	11,44	—
	DMA	4,26	3,75	3,49	3,44	3,97	4,98	6,39	8,01	9,87	12,14	15,03	—
	PDMA	31,63	25,38	19,72	14,38	9,40	10,57	17,30	27,98	40,56	55,88	75,22	—
ΔCS	DM	-49,11	-45,66	-41,77	-37,56	-33,30	-29,22	-25,68	-23,25	-23,05	-27,68	-46,29	—
	DMA	54,34	43,48	37,96	31,99	26,77	25,09	28,67	35,24	43,59	60,73	94,06	—
	PDMA	51,85	39,78	29,17	18,44	11,53	2,69	10,84	18,56	25,14	30,59	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,14	-17,40	-15,39	-13,17	-10,85	-8,51	-6,33	-4,53	-3,58	-4,70	-12,16	—
	DMA	26,51	21,61	19,53	17,46	16,42	17,52	20,09	24,21	29,43	39,30	57,56	—
	PDMA	20,19	15,45	11,85	8,70	8,09	10,35	14,69	20,83	27,70	35,90	47,30	—
CPI	DM	-44,21	-41,45	-38,13	-34,41	-30,55	-26,79	-23,52	-21,33	-21,40	-26,56	-46,81	—
	DMA	55,33	44,67	40,13	35,31	31,95	32,97	36,92	44,21	53,72	73,38	111,53	—
	PDMA	30,96	23,07	17,31	11,70	10,55	13,86	20,03	28,72	38,34	49,91	67,02	—
SPI	DM	0,14	1,10	2,11	3,16	4,31	5,55	6,90	8,40	10,13	12,12	14,49	—
	DMA	4,34	3,87	3,68	3,73	4,48	5,64	7,15	8,83	10,75	13,08	16,05	—
	PDMA	11,90	9,59	7,64	6,39	6,19	7,66	10,59	14,76	19,51	25,12	32,14	—
ΔCS	DM	-44,35	-42,55	-40,24	-37,57	-34,86	-32,34	-30,42	-29,73	-31,53	-38,68	-61,30	—
	DMA	50,99	40,80	36,45	31,58	27,47	27,33	29,77	35,38	42,97	60,30	95,48	—
	PDMA	19,06	13,48	9,66	5,31	4,36	6,20	9,44	13,97	18,84	24,79	34,88	—

Tabela 8.250: Constantes de acoplamento PW91B971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,3	443,1	464,9	486,9	508,9	531,1	553,5	575,9	598,4	621,1	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,2	19,4	17,5	15,4	13,3	11,1	8,8	6,3	3,9	1,3	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,4	-74,6	-76,9	-79,2	-81,5	-83,9	-86,2	-88,6	-90,9	-93,3	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-4,9	-5,9	-6,9	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,2	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,4	44,1	44,8	45,5	46,2	46,9	47,6	48,4	49,1	49,9	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-7,6	-8,5	-9,4	-10,4	-11,3	-12,2	-13,2	-14,1	-15,1	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	174,1	181,5	188,8	195,9	202,9	209,6	216,2	222,6	228,8	234,8	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1766,5	-1743,5	-1715,7	-1683,7	-1648,3	-1610,1	-1569,7	-1527,6	-1484,1	-1439,8	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-162,8	-145,0	-127,3	-109,6	-92,2	-74,9	-57,8	-41,0	-24,4	-7,9	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-64,2	-45,1	-26,2	-7,6	10,8	29,0	47,0	64,8	82,3	99,7	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-264,5	-299,2	-333,4	-368,3	-405,4	-447,2	-497,5	-563,2	-659,0	-824,6	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,8	131,2	132,7	134,1	135,6	137,1	138,7	140,2	141,8	143,4	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,8	-10,6	-11,3	-12,1	-12,9	-13,6	-14,4	-15,1	-15,9	-16,6	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	209,4	212,7	216,3	220,5	225,1	230,5	236,7	243,9	252,5	262,7	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	263,1	265,2	267,5	269,9	272,4	275,2	278,3	281,7	285,6	290,1	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,3	54,2	54,1	53,7	53,0	52,1	50,8	49,1	46,9	43,9	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,7	9,2	9,8	10,4	11,2	12,2	13,3	14,6	16,2	18,2	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,2	75,2	78,4	82,0	85,9	90,3	95,4	101,5	108,9	118,2	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,8	164,8	166,9	169,1	171,5	174,0	176,7	179,8	183,4	187,7	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,1	-0,7	-1,6	-2,7	-3,9	-5,2	-6,9	-8,9	-11,3	-14,5	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,2	4,5	3,8	3,0	2,1	1,1	0,0	-1,3	-3,0	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,4	11,6	11,8	12,1	12,4	12,9	13,4	14,1	15,0	16,2	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,0	18,2	18,5	18,8	19,2	19,7	20,4	21,3	22,4	23,9	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,0	33,1	35,3	37,6	39,8	42,2	44,5	47,0	49,4	51,9	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,6	131,3	133,0	134,6	136,4	138,1	139,8	141,6	143,4	145,2	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,3	-2,8	-3,3	-3,8	-4,3	-4,8	-5,3	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-4,7
Total	DM	-16,99	-14,58	-11,93	-9,15	-6,32	-3,49	-0,87	1,28	2,44	1,08	-8,92	—
	DMA	27,81	23,11	21,00	19,60	19,23	22,05	26,24	31,17	37,42	46,74	68,67	—
	PDMA	46,60	35,41	25,42	17,59	14,57	22,09	36,52	52,36	69,82	90,84	118,03	—
CPI	DM	-47,45	-42,97	-38,07	-32,90	-27,68	-22,68	-18,28	-15,23	-14,82	-20,73	-47,66	—
	DMA	57,41	45,61	39,69	34,97	32,41	36,99	44,37	52,99	64,13	81,78	128,26	—
	PDMA	72,42	53,60	37,09	22,43	12,63	24,15	42,68	61,87	81,57	103,55	132,83	—
SPI	DM	5,34	6,25	7,23	8,26	9,35	10,58	11,89	13,39	15,10	17,08	19,49	—
	DMA	6,10	6,61	7,30	8,33	9,57	11,10	12,95	15,16	17,83	21,04	24,97	—
	PDMA	27,67	22,07	16,87	14,03	15,99	20,58	32,01	45,38	61,21	81,51	107,17	—
ΔCS	DM	-52,79	-49,22	-45,31	-41,16	-37,04	-33,26	-30,18	-28,61	-29,92	-37,81	-67,15	—
	DMA	51,31	39,00	32,39	26,65	22,84	25,89	31,43	37,83	46,29	60,74	103,30	—
	PDMA	44,75	31,53	20,22	8,40	-3,36	3,57	10,68	16,49	20,36	22,04	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,03	-14,07	-11,83	-9,42	-6,92	-4,43	-2,13	-0,33	0,38	-1,70	-13,48	—
	DMA	27,73	23,31	21,82	21,10	21,46	24,19	28,03	32,68	38,83	48,40	72,17	—
	PDMA	18,39	14,05	11,19	9,95	11,21	15,46	21,59	28,63	36,49	46,19	60,22	—
CPI	DM	-44,27	-41,26	-37,76	-33,93	-30,03	-26,35	-23,31	-21,73	-23,03	-31,27	-62,61	—
	DMA	55,23	44,16	39,54	36,21	35,23	39,29	45,61	53,31	63,81	81,49	130,91	—
	PDMA	26,86	18,89	13,33	9,61	11,09	17,23	25,62	34,86	44,86	57,44	78,24	—
SPI	DM	5,69	6,85	8,12	9,44	10,85	12,44	14,16	16,12	18,38	21,05	24,32	—
	DMA	6,57	7,27	8,19	9,47	10,87	12,58	14,50	16,82	19,62	22,94	26,98	—
	PDMA	11,87	10,32	9,54	10,21	11,30	14,10	18,49	23,84	30,06	37,54	46,35	—
ΔCS	DM	-49,96	-48,11	-45,88	-43,37	-40,88	-38,79	-37,47	-37,85	-41,41	-52,32	-86,93	—
	DMA	48,66	36,89	31,35	26,74	24,36	26,71	31,11	36,49	44,19	58,55	103,93	—
	PDMA	14,99	8,58	3,79	-0,61	-0,21	3,13	7,13	11,02	14,80	19,90	31,89	—

Tabela 8.251: Constantes de acoplamento PW91B972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	459,2	482,0	504,9	527,9	550,9	574,1	597,4	620,8	644,2	667,8	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	17,1	15,1	12,9	10,6	8,1	5,6	3,0	0,3	-2,4	-5,3	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-78,2	-80,6	-83,1	-85,5	-88,0	-90,5	-93,0	-95,5	-98,0	-100,6	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,6	-4,6	-5,6	-6,7	-7,7	-8,8	-9,9	-11,0	-12,1	-13,2	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,8	46,5	47,2	47,9	48,6	49,4	50,1	50,8	51,6	52,3	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,0	-6,9	-7,8	-8,7	-9,6	-10,5	-11,4	-12,4	-13,3	-14,3	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	166,0	174,1	182,2	190,2	198,1	205,8	213,5	221,0	228,3	235,5	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1813,5	-1789,2	-1759,9	-1726,2	-1689,1	-1649,1	-1606,9	-1562,9	-1517,7	-1471,6	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-148,5	-130,7	-113,0	-95,5	-78,3	-61,2	-44,4	-27,8	-11,5	4,5	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-47,8	-28,7	-9,8	8,6	26,9	45,0	62,8	80,3	97,6	114,7	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-257,4	-291,5	-325,2	-359,5	-396,2	-437,8	-488,3	-555,5	-656,5	-840,9	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	132,6	133,9	135,2	136,6	137,9	139,3	140,7	142,1	143,6	145,1	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,4	-9,2	-9,9	-10,6	-11,4	-12,1	-12,8	-13,5	-14,2	-14,9	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	207,4	210,7	214,4	218,6	223,4	228,9	235,3	242,7	251,4	261,8	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	264,7	266,7	268,8	271,0	273,3	275,8	278,6	281,7	285,2	289,3	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,7	54,7	54,5	54,1	53,5	52,6	51,4	49,9	47,8	45,1	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,1	8,5	9,0	9,5	10,2	11,0	12,0	13,1	14,4	16,1	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	72,6	75,6	78,9	82,6	86,8	91,5	97,1	103,8	112,0	122,6	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	164,7	166,6	168,6	170,7	172,9	175,3	177,9	180,9	184,4	188,6	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,9	0,1	-0,7	-1,8	-2,9	-4,3	-5,9	-7,9	-10,4	-13,7	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	7,1	6,5	5,8	5,1	4,4	3,6	2,7	1,7	0,4	-1,0	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,1	11,2	11,4	11,6	11,8	12,2	12,6	13,2	14,0	15,1	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,7	17,8	18,0	18,3	18,6	19,0	19,6	20,3	21,3	22,6	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	34,0	36,1	38,2	40,4	42,6	44,8	47,1	49,4	51,7	54,0	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	131,5	133,1	134,6	136,2	137,7	139,3	140,9	142,5	144,2	145,8	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,6	-2,1	-2,6	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-4,7
Total	DM	-15,95	-13,43	-10,69	-7,79	-4,85	-1,93	0,79	3,00	4,06	2,09	-12,05	—
	DMA	27,64	23,09	20,98	20,99	22,95	26,60	30,63	35,48	41,93	51,85	75,85	—
	PDMA	45,75	35,78	27,07	18,67	19,71	29,02	38,87	52,53	70,08	90,73	118,82	—
CPI	DM	-46,16	-41,40	-36,19	-30,71	-25,20	-19,90	-15,27	-12,07	-11,88	-19,27	-56,05	—
	DMA	56,16	44,42	38,34	37,16	40,33	47,19	54,62	63,36	75,01	94,15	145,55	—
	PDMA	59,59	42,20	28,07	15,55	20,64	39,32	58,08	77,27	97,24	119,77	152,13	—
SPI	DM	6,20	7,07	8,01	9,01	10,08	11,25	12,57	14,05	15,75	17,76	20,21	—
	DMA	6,72	7,45	8,26	9,13	10,20	11,51	13,04	15,03	17,67	20,83	24,75	—
	PDMA	35,60	31,06	26,34	20,97	19,02	21,47	24,79	34,40	50,17	69,43	94,39	—
Δ CS	DM	-52,36	-48,47	-44,20	-39,72	-35,28	-31,15	-27,85	-26,13	-27,63	-37,03	-76,27	—
	DMA	49,44	36,97	30,08	28,03	30,13	35,68	41,58	48,34	57,34	73,32	120,80	—
	PDMA	23,99	11,14	1,73	-5,42	1,62	17,85	33,29	42,87	47,07	50,34	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-15,66	-13,58	-11,23	-8,68	-6,07	-3,46	-1,05	0,82	1,43	-1,33	-17,79	—
	DMA	28,16	23,91	22,42	23,30	25,31	28,63	32,38	37,00	43,37	53,64	79,77	—
	PDMA	18,46	15,31	13,72	12,87	13,95	18,21	22,99	29,36	37,20	46,96	62,25	—
CPI	DM	-44,50	-41,17	-37,33	-33,14	-28,91	-24,89	-21,58	-19,81	-21,33	-31,17	-73,32	—
	DMA	55,50	44,49	39,69	40,24	43,17	48,91	55,30	63,17	74,25	93,59	148,44	—
	PDMA	23,68	17,29	14,35	12,84	14,77	23,25	32,02	41,46	51,89	65,28	89,61	—
SPI	DM	6,53	7,65	8,84	10,14	11,51	13,03	14,75	16,68	18,93	21,62	24,93	—
	DMA	7,13	8,08	9,13	10,28	11,57	13,03	14,75	16,87	19,62	22,91	26,95	—
	PDMA	14,44	13,78	13,24	12,90	13,32	14,33	16,05	20,05	25,89	32,86	41,20	—
Δ CS	DM	-51,03	-48,82	-46,17	-43,28	-40,42	-37,92	-36,33	-36,49	-40,26	-52,79	-98,25	—
	DMA	48,37	36,41	30,56	29,96	31,60	35,88	40,55	46,30	54,63	70,68	121,49	—
	PDMA	9,24	3,51	1,11	-0,07	1,45	8,92	15,97	21,41	26,00	32,42	48,41	—

Tabela 8.252: Constantes de acoplamento PW91B98 com base aug-pcJ-2.

	% E_X^{HF}	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	409,1	431,0	452,9	475,0	497,2	519,5	542,0	564,6	587,3	610,1	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,0	19,1	17,2	15,2	13,1	10,8	8,5	6,1	3,7	1,1	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,8	-74,1	-76,4	-78,8	-81,1	-83,5	-85,8	-88,2	-90,7	-93,1	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-5,0	-6,0	-7,0	-8,1	-9,1	-10,2	-11,3	-12,4	-13,5	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,9	44,6	45,4	46,1	46,8	47,6	48,3	49,1	49,9	50,7	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,1	-8,0	-8,9	-9,9	-10,8	-11,8	-12,7	-13,7	-14,7	-15,7	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	180,3	187,9	195,3	202,5	209,6	216,4	223,1	229,6	235,9	242,0	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1781,9	-1758,0	-1729,4	-1696,7	-1660,6	-1621,9	-1581,0	-1538,4	-1494,5	-1449,8	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-163,1	-145,5	-127,9	-110,5	-93,2	-76,1	-59,2	-42,4	-26,0	-9,7	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-65,4	-46,5	-27,8	-9,4	8,8	26,9	44,7	62,3	79,7	96,9	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-273,2	-309,0	-344,5	-381,1	-420,6	-465,8	-521,3	-595,9	-709,1	-918,2	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,3	134,8	136,3	137,9	139,5	141,1	142,7	144,4	146,1	147,8	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,3	-11,1	-11,9	-12,7	-13,4	-14,2	-15,0	-15,8	-16,6	-17,4	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	213,1	216,5	220,2	224,5	229,3	234,9	241,4	249,0	258,0	268,8	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	268,2	270,5	272,9	275,5	278,2	281,2	284,5	288,2	292,5	297,4	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,8	54,8	54,6	54,2	53,5	52,5	51,1	49,2	46,7	43,5	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	9,4	10,0	10,7	11,5	12,6	13,8	15,2	17,0	19,1	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,6	77,7	81,1	84,8	88,9	93,6	99,1	105,6	113,7	124,1	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,4	168,5	170,8	173,1	175,6	178,3	181,3	184,7	188,6	193,4	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,8	-1,8	-2,9	-4,1	-5,6	-7,4	-9,5	-12,2	-15,8	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,9	5,2	4,5	3,7	2,9	1,9	0,9	-0,3	-1,8	-3,7	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	11,7	12,0	12,3	12,7	13,1	13,8	14,5	15,6	17,1	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,3	18,5	18,8	19,2	19,7	20,2	21,0	22,0	23,2	25,0	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,4	34,7	37,0	39,3	41,7	44,2	46,7	49,2	51,8	54,4	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	134,7	136,4	138,2	140,1	141,9	143,8	145,6	147,5	149,5	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,5	-5,0	-5,6	-6,1	-6,7	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-17,29	-14,86	-12,22	-9,45	-6,63	-3,90	-1,40	0,49	1,06	-1,86	-19,10	—
	DMA	29,08	25,07	23,70	22,45	21,57	24,14	28,59	33,90	40,96	52,01	80,95	—
	PDMA	46,47	35,64	26,42	19,58	17,19	24,86	39,78	56,01	74,90	97,74	129,89	—
CPI	DM	-50,28	-45,85	-41,00	-35,95	-30,89	-26,17	-22,23	-19,92	-21,07	-30,92	-75,31	—
	DMA	58,66	48,38	43,85	39,35	35,33	39,14	46,94	56,32	69,04	90,37	152,76	—
	PDMA	72,33	54,25	38,59	24,88	15,52	24,49	43,17	62,46	82,74	105,89	140,82	—
SPI	DM	6,90	7,87	8,89	9,99	11,17	12,44	13,87	15,45	17,29	19,45	22,12	—
	DMA	7,39	7,97	8,92	10,05	11,47	13,15	15,13	17,45	20,37	23,88	28,29	—
	PDMA	27,52	22,00	17,50	15,70	18,41	25,13	37,30	51,29	69,15	91,77	121,88	—
ΔCS	DM	-57,18	-53,73	-49,89	-45,94	-42,06	-38,61	-36,09	-35,37	-38,36	-50,37	-97,43	—
	DMA	51,27	40,42	34,93	29,30	23,85	25,99	31,80	38,86	48,67	66,49	124,47	—
	PDMA	44,81	32,24	21,09	9,17	-2,89	-0,63	5,87	11,17	13,59	14,12	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,31	-14,32	-12,07	-9,66	-7,17	-4,77	-2,60	-1,08	-1,01	-4,82	-24,71	—
	DMA	29,12	25,47	24,81	24,23	24,01	26,62	30,75	35,84	42,88	54,39	86,04	—
	PDMA	18,08	14,09	12,22	11,51	13,42	18,10	24,66	31,83	40,41	51,14	68,62	—
CPI	DM	-47,27	-44,29	-40,82	-37,11	-33,36	-29,98	-27,42	-26,64	-29,65	-42,20	-92,72	—
	DMA	56,49	47,07	43,96	40,85	38,24	41,86	48,66	57,22	69,47	91,22	158,16	—
	PDMA	25,96	18,67	13,91	11,10	12,94	19,01	27,69	37,17	47,88	61,88	89,03	—
SPI	DM	7,50	8,74	10,05	11,45	12,97	14,63	16,49	18,58	21,02	23,94	27,60	—
	DMA	8,07	8,85	10,08	11,45	13,06	14,89	16,97	19,39	22,43	26,06	30,57	—
	PDMA	12,02	10,56	10,91	11,84	13,79	17,40	22,33	27,73	34,67	42,87	52,91	—
ΔCS	DM	-54,77	-53,03	-50,87	-48,56	-46,33	-44,61	-43,91	-45,22	-50,67	-66,14	-120,32	—
	DMA	48,42	38,22	33,88	29,40	25,18	26,97	31,69	37,83	47,04	65,16	127,59	—
	PDMA	13,94	8,11	3,00	-0,74	-0,85	1,61	5,36	9,44	13,21	19,00	36,12	—

Tabela 8.253: Constantes de acoplamento PW91LYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	408,6	433,0	457,5	482,3	507,3	532,6	558,1	583,8	609,8	636,0	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	20,9	19,1	17,1	15,0	12,8	10,6	8,2	5,8	3,3	0,7	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,0	-76,6	-79,2	-81,8	-84,5	-87,2	-89,9	-92,6	-95,4	-98,2	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,3	-6,4	-7,5	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,5	-14,7	-16,0	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,3	46,1	46,9	47,6	48,4	49,2	50,1	50,9	51,7	52,6	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,2	-9,2	-10,2	-11,2	-12,3	-13,3	-14,3	-15,4	-16,5	-17,6	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	160,1	168,5	176,9	185,2	193,3	201,3	209,2	216,9	224,5	231,9	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1817,5	-1793,8	-1765,0	-1732,1	-1695,7	-1656,5	-1615,2	-1572,2	-1527,9	-1482,7	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-168,4	-150,8	-133,3	-115,9	-98,7	-81,7	-64,8	-48,1	-31,7	-15,4	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-67,4	-48,4	-29,5	-10,9	7,4	25,6	43,6	61,4	79,0	96,5	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-280,4	-317,6	-355,0	-393,9	-436,7	-486,6	-549,6	-637,4	-778,9	-1071,0	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	133,8	135,3	136,7	138,2	139,7	141,3	142,9	144,5	146,1	147,7	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,6	-12,4	-13,2	-14,1	-14,9	-15,7	-16,5	-17,3	-18,1	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	200,4	203,4	206,8	210,8	215,3	220,6	226,9	234,4	243,4	254,5	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	275,6	277,9	280,4	283,0	285,8	289,0	292,5	296,5	301,1	306,7	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	57,2	57,1	56,8	56,3	55,4	54,2	52,5	50,3	47,3	43,4	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,0	10,6	11,3	12,2	13,2	14,4	15,9	17,7	19,9	22,6	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	67,8	70,7	73,9	77,4	81,5	86,3	91,9	99,0	108,0	120,5	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	168,5	170,6	172,8	175,2	177,7	180,5	183,7	187,3	191,8	197,5	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,2	-0,6	-1,6	-2,8	-4,2	-5,8	-7,8	-10,3	-13,6	-18,3	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,4	5,6	4,8	3,9	2,9	1,8	0,6	-0,9	-2,8	-5,5	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,7	13,0	13,3	13,6	14,1	14,7	15,5	16,6	18,1	20,3	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	20,1	20,4	20,7	21,2	21,7	22,5	23,4	24,7	26,4	29,0	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	30,1	32,1	34,3	36,4	38,7	40,9	43,2	45,5	47,9	50,3	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	133,3	134,9	136,6	138,3	140,1	141,8	143,6	145,4	147,2	149,0	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,6	-6,1	-6,7	-7,2	-7,8	-4,7
Total													
	DM	-20,36	-17,90	-15,24	-12,45	-9,65	-6,94	-4,58	-3,00	-3,30	-9,10	-48,74	—
	DMA	30,97	27,46	25,38	23,76	23,45	26,06	31,00	37,01	45,50	60,26	110,36	—
	PDMA	47,39	37,12	27,98	22,62	21,09	28,25	44,31	62,31	83,87	111,91	158,62	—
CPI													
	DM	-57,02	-52,45	-47,47	-42,30	-37,22	-32,54	-28,88	-27,39	-30,70	-47,65	-145,56	—
	DMA	63,49	54,33	48,42	42,99	40,31	44,17	53,10	64,10	79,85	109,21	220,20	—
	PDMA	72,43	54,51	39,34	29,26	21,39	28,10	47,60	67,88	89,58	115,95	169,20	—
SPI													
	DM	6,53	7,43	8,40	9,43	10,56	11,83	13,24	14,88	16,79	19,17	22,27	—
	DMA	7,11	7,75	8,48	9,66	11,08	12,77	14,80	17,15	20,31	24,37	29,81	—
	PDMA	29,03	24,38	19,64	17,75	20,86	28,36	41,89	58,22	79,68	108,94	150,86	—
ΔCS													
	DM	-63,54	-59,89	-55,87	-51,73	-47,78	-44,36	-42,12	-42,27	-47,49	-66,81	-167,83	—
	DMA	56,38	46,57	39,94	33,33	29,23	31,40	38,30	46,95	59,53	84,84	190,39	—
	PDMA	43,39	30,13	19,70	11,50	0,52	-0,25	5,71	9,66	9,90	7,01	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
	DM	-19,72	-17,70	-15,43	-13,00	-10,53	-8,14	-6,11	-4,93	-5,80	-12,80	-57,89	—
	DMA	31,13	28,06	26,61	25,65	26,07	28,83	33,50	39,34	47,94	63,55	118,96	—
	PDMA	17,23	14,09	12,55	14,31	17,24	21,76	28,80	36,63	46,33	59,33	87,08	—
CPI													
	DM	-54,48	-51,36	-47,77	-43,94	-40,18	-36,85	-34,63	-34,77	-40,17	-60,56	-170,00	—
	DMA	61,60	53,42	48,81	44,70	43,58	47,53	55,55	65,87	81,43	111,98	232,34	—
	PDMA	24,74	17,69	13,61	14,92	18,46	23,85	33,29	43,74	55,87	73,22	120,26	—
SPI													
	DM	7,02	8,18	9,44	10,79	12,28	13,95	15,82	18,02	20,63	23,94	28,35	—
	DMA	7,69	8,55	9,53	10,99	12,60	14,44	16,53	18,93	22,18	26,29	31,74	—
	PDMA	11,46	11,32	11,74	13,85	16,30	20,15	25,34	31,16	38,99	48,66	61,56	—
ΔCS													
	DM	-61,50	-59,54	-57,21	-54,73	-52,46	-50,80	-50,45	-52,79	-60,80	-84,50	-198,35	—
	DMA	53,91	44,87	39,28	33,71	30,98	33,09	39,02	46,94	59,25	85,69	200,60	—
	PDMA	13,28	6,37	1,87	1,06	2,16	3,70	7,95	12,58	16,88	24,56	58,70	—

Tabela 8.254: Constantes de acoplamento PW91P86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	366,1	388,7	411,6	434,6	457,9	481,4	505,1	529,1	553,2	577,6	602,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,5	22,8	21,1	19,3	17,4	15,5	13,5	11,4	9,2	7,0	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,1	-68,5	-70,9	-73,3	-75,8	-78,2	-80,7	-83,3	-85,8	-88,4	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,3	-5,3	-6,3	-7,3	-8,4	-9,4	-10,5	-11,6	-12,7	-13,9	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	41,2	41,9	42,6	43,3	44,0	44,8	45,5	46,3	47,0	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,3	-9,2	-10,1	-11,0	-12,0	-12,9	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,3	145,2	153,0	160,7	168,4	176,0	183,4	190,8	198,0	205,1	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1807,0	-1782,9	-1754,0	-1720,9	-1684,6	-1645,6	-1604,4	-1561,6	-1517,7	-1472,9	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,5	-160,5	-143,7	-126,9	-110,2	-93,7	-77,4	-61,3	-45,4	-29,6	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,5	-44,2	-26,1	-8,3	9,3	26,8	44,1	61,2	78,1	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-289,0	-326,3	-364,0	-403,4	-446,6	-497,2	-560,7	-648,6	-787,3	-1060,5	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,6	120,0	121,3	122,7	124,1	125,5	126,9	128,4	129,9	131,5	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-12,0	-12,8	-13,6	-14,3	-15,1	-15,8	-16,6	-17,3	-18,1	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,2	190,8	193,7	197,2	201,2	205,9	211,5	218,3	226,6	237,0	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	248,7	250,8	253,1	255,5	258,2	261,1	264,4	268,3	272,8	278,4	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,5	54,5	54,3	53,8	53,1	52,0	50,4	48,2	45,3	41,3	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,9	10,5	11,2	12,1	13,2	14,5	16,0	17,9	20,3	23,2	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,2	62,8	65,7	69,0	72,8	77,2	82,6	89,4	98,6	112,0	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	150,8	152,7	154,8	157,0	159,4	162,0	165,0	168,7	173,2	179,5	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,0	-0,7	-1,7	-2,8	-4,1	-5,6	-7,6	-10,1	-13,7	-18,9	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	4,1	3,3	2,4	1,5	0,3	-1,0	-2,7	-5,0	-8,2	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,6	11,9	12,2	12,6	13,2	13,9	14,8	16,1	18,0	20,8	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,4	18,7	19,1	19,6	20,3	21,1	22,2	23,7	25,9	29,1	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,8	26,7	28,7	30,6	32,7	34,7	36,8	38,9	41,0	43,2	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,7	120,2	121,7	123,3	124,9	126,5	128,2	129,9	131,5	133,2	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-3,1	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,1	-7,6	-4,7
Total													
Total	DM	-27,44	-25,13	-22,64	-20,02	-17,35	-14,84	-12,66	-11,23	-11,55	-16,71	-45,89	—
	DMA	32,56	29,17	26,45	23,95	22,02	20,63	22,01	27,63	35,89	49,90	90,58	—
	PDMA	50,73	40,30	29,83	21,58	20,55	22,10	33,22	51,30	73,79	103,33	152,34	—
CPI													
CPI	DM	-64,06	-59,75	-55,05	-50,15	-45,35	-40,98	-37,63	-36,38	-39,70	-55,20	-128,80	—
	DMA	71,12	63,72	57,93	52,01	46,40	41,45	42,08	51,87	67,03	94,33	182,13	—
	PDMA	88,41	71,48	55,28	40,12	28,55	18,40	26,06	44,83	65,61	90,45	134,69	—
SPI													
SPI	DM	-0,58	0,25	1,13	2,09	3,17	4,33	5,65	7,22	9,10	11,52	14,91	—
	DMA	4,29	3,83	3,36	3,37	4,15	5,37	7,29	9,85	13,06	17,32	23,45	—
	PDMA	23,11	17,43	11,18	7,99	14,68	24,81	38,47	56,04	79,79	112,78	165,29	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-63,48	-60,01	-56,19	-52,24	-48,52	-45,31	-43,28	-43,60	-48,80	-66,72	-143,71	—
	DMA	66,83	59,89	54,57	48,64	42,25	36,09	34,79	42,03	53,97	77,01	158,67	—
	PDMA	65,30	54,04	44,10	32,13	13,87	-6,42	-12,41	-11,20	-14,18	-22,34	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-27,07	-25,20	-23,09	-20,83	-18,50	-16,30	-14,45	-13,40	-14,25	-20,46	-53,57	—
	DMA	32,42	29,45	27,25	25,26	23,77	22,85	24,00	29,41	37,76	52,49	97,15	—
	PDMA	20,29	16,61	13,41	11,57	11,88	13,75	18,47	26,15	35,76	48,78	73,57	—
CPI													
CPI	DM	-60,88	-57,98	-54,64	-51,06	-47,55	-44,51	-42,57	-42,93	-48,29	-67,03	-149,66	—
	DMA	68,64	62,34	57,80	53,10	48,71	45,03	45,11	54,15	69,11	97,45	192,36	—
	PDMA	33,31	26,96	21,34	16,73	15,87	16,44	20,80	29,92	41,38	57,43	94,96	—
SPI													
SPI	DM	-1,05	0,02	1,18	2,43	3,85	5,39	7,18	9,31	11,93	15,37	20,35	—
	DMA	4,56	4,15	3,75	3,85	4,59	5,79	7,76	10,38	13,64	17,91	23,91	—
	PDMA	10,27	8,65	7,31	7,60	8,82	11,69	16,69	23,26	31,44	42,13	57,11	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-59,83	-58,00	-55,82	-53,49	-51,40	-49,90	-49,75	-52,24	-60,22	-82,40	-170,01	—
	DMA	64,08	58,19	54,05	49,25	44,12	39,24	37,35	43,77	55,47	79,54	168,45	—
	PDMA	23,04	18,31	14,03	9,13	7,06	4,75	4,11	6,66	9,94	15,29	37,85	—

Tabela 8.255: Constantes de acoplamento PW91PBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	361,6	384,8	408,1	431,7	455,6	479,6	503,9	528,4	553,1	578,1	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	25,0	23,4	21,7	19,9	18,0	16,1	14,0	11,9	9,8	7,6	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-65,9	-68,3	-70,8	-73,3	-75,8	-78,3	-80,9	-83,5	-86,1	-88,8	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,3	-13,5	-14,7	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,5	41,3	42,0	42,7	43,5	44,2	45,0	45,8	46,6	47,4	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,7	-11,7	-12,6	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	136,7	144,9	153,0	161,0	169,0	176,8	184,6	192,2	199,7	207,1	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1811,6	-1786,7	-1757,0	-1723,3	-1686,3	-1646,7	-1605,0	-1561,7	-1517,3	-1472,1	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-178,3	-161,3	-144,3	-127,4	-110,6	-94,0	-77,6	-61,3	-45,3	-29,4	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-81,8	-63,2	-44,8	-26,7	-8,7	9,0	26,6	44,0	61,3	78,3	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-290,8	-329,1	-367,8	-408,4	-453,4	-506,3	-573,7	-668,5	-822,4	-1142,7	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	119,4	120,8	122,2	123,6	125,1	126,6	128,1	129,6	131,2	132,8	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,1	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,6	190,3	193,5	197,1	201,4	206,6	212,7	220,3	229,6	241,5	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	251,3	253,6	256,0	258,7	261,6	264,8	268,6	273,0	278,3	284,8	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,3	46,6	43,0	38,1	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,5	11,2	12,0	13,1	14,3	15,8	17,6	19,8	22,6	26,2	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,0	62,8	65,8	69,3	73,3	78,2	84,2	92,1	103,1	120,1	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	152,2	154,3	156,4	158,8	161,3	164,2	167,6	171,8	177,3	185,2	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,0	-12,1	-16,5	-23,4	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,4	3,6	2,7	1,7	0,6	-0,6	-2,2	-4,3	-7,1	-11,5	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,9	12,3	12,7	13,2	13,8	14,7	15,8	17,5	19,9	23,8	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,2	22,2	23,5	25,4	28,2	32,7	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,7	26,7	28,6	30,6	32,6	34,7	36,8	39,0	41,1	43,3	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	119,6	121,2	122,8	124,5	126,1	127,8	129,5	131,3	133,0	134,8	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total													
	DM	-27,79	-25,42	-22,87	-20,20	-17,52	-14,97	-12,81	-11,48	-12,17	-18,81	-62,67	—
	DMA	32,82	29,54	26,90	24,70	22,91	21,72	23,26	29,50	38,71	55,12	112,44	—
	PDMA	48,85	38,30	28,40	25,19	25,59	27,99	40,30	60,76	86,45	122,57	190,22	—
CPI													
	DM	-65,30	-60,89	-56,13	-51,21	-46,39	-42,11	-38,98	-38,23	-42,78	-62,43	-172,10	—
	DMA	71,95	64,80	58,96	53,17	47,55	42,60	43,18	53,88	70,49	102,15	226,41	—
	PDMA	88,23	71,33	55,42	42,37	30,77	20,03	27,55	46,87	68,34	94,73	151,26	—
SPI													
	DM	-0,28	0,60	1,51	2,54	3,65	4,93	6,39	8,13	10,29	13,18	17,57	—
	DMA	4,12	3,68	3,38	3,82	4,84	6,41	8,65	11,63	15,41	20,63	28,87	—
	PDMA	19,97	14,08	8,59	12,59	21,79	33,82	49,64	70,95	99,73	142,98	218,79	—
Δ CS													
	DM	-65,02	-61,49	-57,64	-53,75	-50,04	-47,04	-45,37	-46,36	-53,07	-75,61	-189,67	—
	DMA	67,83	61,12	55,58	49,35	42,71	36,19	34,53	42,26	55,08	81,52	197,54	—
	PDMA	68,26	57,24	46,82	29,78	8,98	-13,80	-22,09	-24,09	-31,39	-48,25	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
	DM	-27,38	-25,43	-23,28	-20,95	-18,59	-16,34	-14,50	-13,53	-14,74	-22,50	-71,93	—
	DMA	32,71	29,89	27,78	26,03	24,68	23,98	25,31	31,38	40,73	58,05	121,21	—
	PDMA	19,57	16,18	13,84	13,26	14,13	16,44	21,73	30,23	41,00	56,08	89,72	—
CPI													
	DM	-62,15	-59,16	-55,76	-52,16	-48,66	-45,72	-44,04	-44,95	-51,69	-75,00	-197,33	—
	DMA	69,47	63,46	58,88	54,32	49,94	46,26	46,34	56,37	72,91	106,04	241,03	—
	PDMA	32,52	26,33	21,09	18,81	18,05	18,03	22,58	32,22	44,31	62,01	112,92	—
SPI													
	DM	-0,64	0,51	1,71	3,06	4,55	6,25	8,22	10,64	13,68	17,88	24,54	—
	DMA	4,44	4,06	3,86	4,28	5,25	6,84	9,13	12,16	15,97	21,13	29,05	—
	PDMA	9,61	8,38	8,26	8,99	11,12	15,23	21,07	28,71	38,44	51,51	71,87	—
Δ CS													
	DM	-61,51	-59,67	-57,47	-55,22	-53,21	-51,97	-52,26	-55,59	-65,37	-92,88	-221,87	—
	DMA	65,03	59,40	55,02	50,04	44,69	39,42	37,21	44,21	56,94	84,91	211,98	—
	PDMA	22,92	17,95	12,84	9,82	6,92	2,80	1,50	3,52	5,87	10,49	41,06	—

Tabela 8.256: Constantes de acoplamento PW91PW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	364,2	387,4	410,8	434,5	458,3	482,4	506,7	531,2	556,0	581,0	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,9	23,2	21,5	19,6	17,7	15,8	13,7	11,6	9,4	7,2	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-68,7	-71,2	-73,7	-76,2	-78,7	-81,3	-83,9	-86,5	-89,2	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,4	-13,5	-14,7	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,8	41,5	42,2	42,9	43,7	44,5	45,2	46,0	46,8	47,6	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,7	-12,7	-13,6	-14,6	-15,6	-16,6	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	137,6	145,9	154,0	162,1	170,0	177,9	185,7	193,3	200,8	208,2	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1815,2	-1790,1	-1760,3	-1726,4	-1689,3	-1649,5	-1607,6	-1564,2	-1519,7	-1474,3	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,6	-160,4	-143,4	-126,4	-109,6	-93,0	-76,5	-60,2	-44,1	-28,2	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,9	-62,3	-43,8	-25,6	-7,6	10,2	27,8	45,3	62,5	79,6	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-290,5	-328,8	-367,5	-408,1	-453,0	-506,0	-573,5	-668,7	-823,8	-1148,9	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	121,5	122,9	124,3	125,8	127,3	128,8	130,4	131,9	133,5	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,8	-13,6	-14,4	-15,2	-15,9	-16,7	-17,5	-18,3	-19,1	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	191,6	194,7	198,5	202,8	208,0	214,2	221,8	231,3	243,3	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,5	254,8	257,3	259,9	262,8	266,1	269,8	274,3	279,6	286,1	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,5	54,1	53,5	52,6	51,2	49,2	46,6	43,0	38,0	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,0	13,0	14,2	15,7	17,5	19,7	22,5	26,1	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,6	63,3	66,4	69,9	74,0	78,9	85,0	92,9	104,1	121,2	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,0	155,1	157,3	159,6	162,2	165,1	168,5	172,7	178,2	186,2	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,3	-2,3	-3,5	-5,0	-6,8	-9,1	-12,1	-16,5	-23,5	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,6	2,8	1,8	0,7	-0,5	-2,1	-4,2	-7,1	-11,4	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,9	12,2	12,6	13,1	13,8	14,7	15,8	17,4	19,8	23,8	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	19,3	19,8	20,4	21,1	22,1	23,5	25,4	28,1	32,6	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,1	27,0	29,0	31,0	33,1	35,1	37,3	39,4	41,6	43,8	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	121,9	123,5	125,1	126,8	128,5	130,2	132,0	133,7	135,5	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-27,51	-25,13	-22,57	-19,88	-17,19	-14,62	-12,45	-11,12	-11,84	-18,64	-65,03	—
	DMA	32,72	29,40	26,80	24,62	22,93	21,82	23,78	30,12	39,39	56,00	115,74	—
	PDMA	48,56	37,80	28,07	24,53	25,00	27,68	40,94	61,33	87,16	123,40	191,82	—
CPI													
CPI	DM	-65,15	-60,72	-55,93	-50,97	-46,15	-41,83	-38,68	-37,95	-42,60	-62,65	-178,33	—
	DMA	71,77	64,52	58,65	52,81	47,18	42,30	43,85	54,79	71,51	103,60	233,56	—
	PDMA	87,39	70,40	54,43	41,35	29,65	19,37	28,66	48,28	69,67	96,27	155,08	—
SPI													
SPI	DM	0,10	0,96	1,90	2,91	4,05	5,33	6,79	8,55	10,72	13,63	18,05	—
	DMA	4,07	3,64	3,45	3,95	5,14	6,80	9,07	12,03	15,84	21,10	29,34	—
	PDMA	20,09	13,89	8,73	12,20	21,60	33,78	49,95	70,90	99,98	143,30	218,77	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-65,25	-61,68	-57,83	-53,89	-50,19	-47,16	-45,48	-46,51	-53,32	-76,29	-196,37	—
	DMA	67,70	60,88	55,21	48,86	42,04	35,50	34,77	42,76	55,67	82,50	204,22	—
	PDMA	67,30	56,51	45,70	29,14	8,05	-14,40	-21,29	-22,63	-30,30	-47,04	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-27,11	-25,16	-22,98	-20,64	-18,27	-16,00	-14,14	-13,19	-14,43	-22,37	-74,66	—
	DMA	32,63	29,77	27,72	26,00	24,75	24,14	25,85	32,03	41,44	58,99	124,89	—
	PDMA	19,32	15,87	13,56	13,03	13,98	16,64	22,12	30,69	41,44	56,65	91,32	—
CPI													
CPI	DM	-62,08	-59,06	-55,64	-52,01	-48,50	-45,53	-43,83	-44,78	-51,61	-75,38	-204,32	—
	DMA	69,36	63,24	58,64	54,03	49,64	46,05	46,95	57,24	73,91	107,50	248,76	—
	PDMA	32,19	25,91	20,67	18,41	17,55	18,11	22,99	32,91	44,97	62,83	116,19	—
SPI													
SPI	DM	-0,21	0,92	2,15	3,48	4,99	6,71	8,69	11,12	14,18	18,41	25,08	—
	DMA	4,38	4,02	3,93	4,44	5,61	7,29	9,62	12,64	16,47	21,67	29,60	—
	PDMA	9,41	8,16	8,08	8,88	11,23	15,51	21,44	28,98	38,73	51,90	72,19	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-61,87	-59,98	-57,79	-55,49	-53,49	-52,24	-52,52	-55,90	-65,79	-93,79	-229,40	—
	DMA	64,98	59,22	54,71	49,59	44,03	38,76	37,33	44,60	57,44	85,83	219,16	—
	PDMA	22,78	17,75	12,59	9,53	6,32	2,60	1,55	3,92	6,25	10,93	44,00	—

Tabela 8.257: Constantes de acoplamento PW91TPSS com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	363,8	387,6	411,6	435,7	460,1	484,6	509,3	534,2	559,3	584,5	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	24,9	23,3	21,5	19,7	17,8	15,8	13,8	11,6	9,4	7,2	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,0	-69,5	-72,1	-74,7	-77,3	-79,9	-82,5	-85,2	-87,9	-90,6	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,5	-5,6	-6,7	-7,8	-8,9	-10,1	-11,3	-12,5	-13,7	-14,9	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	42,0	42,8	43,6	44,3	45,1	45,9	46,8	47,6	48,4	49,3	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,6	-8,5	-9,5	-10,5	-11,6	-12,6	-13,6	-14,7	-15,8	-16,8	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	146,2	155,2	164,1	173,0	181,8	190,5	199,1	207,6	216,1	224,4	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1815,8	-1791,5	-1762,4	-1729,3	-1692,8	-1653,6	-1612,4	-1569,5	-1525,4	-1480,6	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-179,3	-162,3	-145,4	-128,7	-112,1	-95,7	-79,4	-63,4	-47,5	-31,9	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-79,2	-60,7	-42,4	-24,3	-6,5	11,1	28,5	45,8	62,8	79,6	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-289,4	-327,6	-366,2	-406,6	-451,1	-503,5	-570,0	-663,3	-814,3	-1127,7	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	127,8	129,4	131,0	132,6	134,3	136,0	137,7	139,5	141,2	143,1	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,4	-12,3	-13,2	-14,1	-14,9	-15,8	-16,7	-17,6	-18,4	-19,3	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	188,4	191,3	194,6	198,5	203,0	208,4	215,0	223,0	232,9	245,5	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	266,6	269,2	272,0	275,0	278,2	281,9	286,0	290,9	296,6	303,8	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	56,1	56,0	55,6	55,0	54,0	52,5	50,5	47,7	43,9	38,7	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,9	11,6	12,5	13,5	14,8	16,3	18,2	20,5	23,3	27,0	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	61,3	64,1	67,3	70,9	75,1	80,2	86,5	94,6	106,0	123,2	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	162,1	164,4	166,9	169,5	172,4	175,6	179,3	183,8	189,6	197,9	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,5	-1,5	-2,6	-3,9	-5,4	-7,3	-9,6	-12,8	-17,3	-24,3	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	6,1	5,2	4,3	3,3	2,1	0,7	-0,8	-2,9	-5,8	-10,0	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,7	13,1	13,5	14,0	14,6	15,5	16,6	18,2	20,6	24,4	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	20,9	21,2	21,7	22,3	23,0	24,1	25,4	27,3	30,0	34,3	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,7	27,7	29,7	31,7	33,7	35,9	38,0	40,2	42,4	44,7	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	127,8	129,6	131,4	133,3	135,2	137,1	139,0	141,0	143,0	145,0	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-5,6	-6,1	-6,7	-7,3	-7,9	-8,5	-4,7
Total	DM	-25,36	-22,93	-20,32	-17,58	-14,82	-12,19	-9,91	-8,47	-8,96	-15,25	-57,72	—
	DMA	33,05	30,05	27,75	25,91	24,32	23,49	26,20	32,79	42,04	58,34	113,73	—
	PDMA	51,78	41,10	31,46	27,03	24,85	28,54	42,30	63,27	89,33	125,33	191,26	—
CPI	DM	-64,25	-59,79	-54,98	-50,01	-45,13	-40,76	-37,51	-36,61	-40,86	-59,85	-166,33	—
	DMA	71,07	63,57	57,58	51,77	46,22	41,69	45,02	56,39	72,88	104,02	223,67	—
	PDMA	86,60	69,48	52,91	39,68	28,58	18,70	29,69	49,55	70,96	97,06	152,58	—
SPI	DM	3,16	4,09	5,11	6,20	7,40	8,76	10,33	12,17	14,44	17,47	21,93	—
	DMA	5,17	5,47	5,87	6,95	8,25	10,15	12,41	15,48	19,43	24,84	33,11	—
	PDMA	26,24	20,28	15,73	17,75	22,11	35,76	51,55	73,34	102,80	146,05	219,63	—
ΔCS	DM	-67,41	-63,88	-60,09	-56,21	-52,53	-49,52	-47,84	-48,78	-55,30	-77,32	-188,25	—
	DMA	65,90	58,11	51,72	44,83	37,96	31,54	32,61	40,91	53,46	79,18	190,56	—
	PDMA	60,35	49,20	37,18	21,94	6,47	-17,05	-21,86	-23,79	-31,84	-49,00	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-24,82	-22,80	-20,55	-18,14	-15,68	-13,33	-11,34	-10,23	-11,20	-18,56	-66,43	—
	DMA	33,02	30,51	28,77	27,47	26,41	26,10	28,59	35,05	44,45	61,65	122,68	—
	PDMA	20,60	17,40	14,78	14,55	16,04	19,23	25,00	33,93	44,83	60,02	93,09	—
CPI	DM	-61,26	-58,20	-54,74	-51,08	-47,49	-44,45	-42,61	-43,35	-49,73	-72,30	-191,09	—
	DMA	68,76	62,36	57,60	53,02	48,69	45,47	48,17	58,95	75,39	107,96	237,91	—
	PDMA	32,46	25,96	19,93	17,45	17,10	17,97	23,65	33,97	46,19	63,70	113,64	—
SPI	DM	3,21	4,43	5,75	7,19	8,78	10,61	12,71	15,25	18,43	22,78	29,46	—
	DMA	5,53	6,02	6,60	7,82	9,28	11,21	13,52	16,66	20,65	26,03	34,05	—
	PDMA	11,48	10,82	10,82	12,32	15,23	20,20	26,03	33,90	43,77	57,20	77,27	—
ΔCS	DM	-64,47	-62,63	-60,49	-58,27	-56,27	-55,06	-55,32	-58,60	-68,16	-95,08	-220,55	—
	DMA	63,23	56,34	51,00	45,20	39,41	34,26	34,65	42,29	54,74	81,93	203,86	—
	PDMA	20,98	15,15	9,11	5,13	1,88	-2,23	-2,38	0,07	2,42	6,50	36,37	—

Tabela 8.258: Valores de PDMA total obtidos para troca PW91 com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
PW91B95	53,7	42,6	32,1	22,9	15,4	13,4	22,3	36,3	51,6	69,9	92,6
PW91B98	47,5	36,6	26,7	21,3	19,6	24,7	39,3	56,6	75,6	99,1	131,6
PW91B971	46,9	35,8	25,2	18,2	15,8	22,4	36,9	53,0	70,8	92,4	120,6
PW91B972	47,0	36,4	27,4	19,1	17,9	27,0	37,0	51,7	69,2	90,2	119,3
PW91LYP	48,2	37,5	29,4	24,3	22,6	27,9	44,0	62,1	84,0	113,6	161,5
PW91P86	51,2	39,8	29,8	23,9	23,4	25,0	33,8	52,8	74,7	105,4	156,7
PW91PBE	49,2	38,1	29,2	27,8	28,7	31,1	41,0	62,2	87,6	125,2	196,2
PW91PW91	48,9	37,8	28,9	27,4	28,1	30,8	41,6	63,0	88,4	126,1	197,9
PW91TPSS	52,1	41,1	32,4	28,8	28,3	31,5	42,8	63,9	90,7	128,2	197,2

8.4.1.8 Troca S

Tabela 8.259: Constantes de acoplamento SB95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	422,2	441,6	461,6	482,3	503,6	526,3	548,4	571,9	596,3	621,4	647,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	26,6	24,9	23,0	21,0	18,8	16,5	14,0	11,4	8,6	5,6	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-67,7	-70,0	-72,5	-75,0	-77,7	-80,4	-83,3	-86,3	-89,5	-92,7	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,1	-3,1	-4,2	-5,3	-6,4	-7,6	-8,9	-10,2	-11,6	-13,1	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,1	38,1	39,1	40,2	41,4	42,6	43,8	45,2	46,5	48,0	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,1	-5,0	-6,0	-7,0	-8,0	-9,2	-10,3	-11,6	-12,9	-14,3	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	126,1	133,8	141,8	150,2	158,8	167,8	177,1	186,6	196,5	206,6	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1722,6	-1707,6	-1686,2	-1659,3	-1627,6	-1591,8	-1552,6	-1510,7	-1466,4	-1420,3	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-192,9	-175,8	-158,4	-140,6	-122,5	-104,2	-85,7	-67,1	-48,3	-29,4	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-88,3	-70,4	-52,2	-33,8	-15,2	3,5	22,4	41,5	60,8	80,2	99,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,1	-300,1	-332,7	-364,9	-398,1	-434,1	-476,2	-529,9	-607,1	-738,7	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	97,1	100,0	103,2	106,5	109,9	113,6	117,5	121,5	125,8	130,2	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-7,3	-8,2	-9,2	-10,2	-11,2	-12,3	-13,4	-14,6	-15,8	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	166,5	170,1	173,9	178,3	183,1	188,6	195,0	202,5	211,3	222,1	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	208,4	213,4	218,6	224,2	230,0	236,2	242,9	250,2	258,2	267,1	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,3	50,3	51,2	51,9	52,5	52,8	52,7	52,2	51,2	49,3	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,5	7,0	7,5	8,1	8,9	9,8	11,0	12,3	14,1	16,2	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	44,4	47,4	50,5	54,0	57,9	62,2	67,2	73,0	80,1	89,0	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,7	129,4	133,4	137,6	142,0	146,7	151,7	157,3	163,4	170,4	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,4	0,9	0,3	-0,3	-1,1	-2,1	-3,3	-4,9	-6,9	-9,6	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	5,1	4,6	4,1	3,5	2,8	2,0	1,1	0,0	-1,5	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,2	10,4	10,7	11,0	11,3	11,7	12,3	13,0	13,9	15,1	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,9	15,3	15,7	16,2	16,8	17,5	18,3	19,4	20,7	22,4	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	15,7	18,0	20,4	23,0	25,7	28,6	31,7	34,9	38,3	41,9	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	97,5	100,6	103,9	107,3	111,0	114,8	118,8	123,0	127,3	131,9	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-1,8	-2,3	-2,7	-3,2	-3,7	-4,3	-4,9	-5,5	-6,2	-6,9	-4,7
Total	DM	-28,52	-26,15	-23,40	-20,28	-16,92	-13,36	-9,81	-6,42	-3,65	-2,66	-8,15	—
	DMA	35,02	29,42	26,05	22,55	19,12	16,98	16,08	18,75	24,52	34,91	54,82	—
	PDMA	68,60	57,48	46,73	35,90	24,31	12,64	11,87	24,50	41,94	63,25	90,89	—
CPI	DM	-52,06	-48,59	-44,33	-39,37	-33,98	-28,32	-22,93	-18,19	-15,27	-17,05	-34,85	—
	DMA	64,37	53,66	48,22	42,06	36,05	33,23	33,07	39,41	49,60	68,78	109,09	—
	PDMA	101,79	83,74	67,07	50,08	32,90	16,71	16,42	35,89	57,61	81,84	112,26	—
SPI	DM	-11,25	-9,69	-8,05	-6,27	-4,40	-2,39	-0,19	2,21	4,88	7,89	11,44	—
	DMA	13,49	11,65	9,79	8,25	6,71	5,07	3,62	3,61	6,13	10,07	15,03	—
	PDMA	44,26	38,22	31,81	25,50	18,01	9,65	8,53	16,15	30,45	49,61	75,22	—
ΔCS	DM	-40,82	-38,90	-36,28	-33,10	-29,58	-25,93	-22,73	-20,40	-20,15	-24,95	-46,29	—
	DMA	50,89	42,02	38,42	33,82	29,35	28,16	29,45	35,80	43,47	58,72	94,06	—
	PDMA	57,53	45,53	35,26	24,58	14,89	7,06	7,89	19,74	27,16	32,23	37,04	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-28,05	-26,11	-23,74	-20,97	-17,92	-14,63	-11,36	-8,25	-5,82	-5,37	-12,16	—
	DMA	34,78	29,28	26,31	23,20	20,20	18,66	17,80	19,89	25,43	36,15	57,56	—
	PDMA	34,49	28,95	24,11	19,23	14,10	9,47	9,07	13,22	21,63	32,37	47,30	—
CPI	DM	-46,94	-44,91	-42,04	-38,43	-34,36	-30,00	-25,96	-22,66	-21,38	-25,28	-46,81	—
	DMA	60,48	50,49	46,32	41,39	36,64	35,40	35,64	40,70	49,98	69,14	111,53	—
	PDMA	43,11	35,19	28,98	22,56	16,05	10,72	13,13	21,81	32,83	46,56	67,02	—
SPI	DM	-13,52	-11,65	-9,67	-7,54	-5,27	-2,82	-0,13	2,83	6,15	9,95	14,49	—
	DMA	15,02	12,97	10,92	9,22	7,55	5,78	4,08	3,88	6,55	10,77	16,05	—
	PDMA	27,85	24,15	20,36	16,68	12,60	8,50	5,96	6,61	13,01	21,46	32,14	—
ΔCS	DM	-33,42	-33,26	-32,37	-30,89	-29,09	-27,18	-25,83	-25,49	-27,53	-35,23	-61,30	—
	DMA	45,46	37,52	35,40	32,17	29,09	29,62	31,56	36,82	43,43	58,37	95,48	—
	PDMA	15,25	11,03	8,62	5,88	3,45	2,22	7,17	15,20	19,82	25,10	34,88	—

Tabela 8.260: Constantes de acoplamento SB971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	429,2	447,9	467,2	487,0	507,4	528,4	550,1	572,5	595,5	619,3	643,9	500
CO	$^1J_{CO}$	24,9	23,1	21,1	18,9	16,6	14,1	11,4	8,5	5,4	2,1	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-68,4	-70,7	-73,0	-75,5	-78,0	-80,7	-83,5	-86,4	-89,4	-92,5	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,2	-3,2	-4,2	-5,3	-6,4	-7,5	-8,8	-10,0	-11,4	-12,8	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,8	38,8	39,9	41,0	42,2	43,5	44,8	46,1	47,5	49,0	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,3	-5,2	-6,2	-7,2	-8,2	-9,4	-10,6	-11,8	-13,2	-14,6	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	154,4	162,3	170,3	178,5	186,9	195,5	204,3	213,2	222,2	231,4	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1766,6	-1749,4	-1725,8	-1696,7	-1662,7	-1624,8	-1583,4	-1539,2	-1492,7	-1444,5	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-182,6	-164,5	-146,0	-127,3	-108,3	-89,0	-69,7	-50,3	-30,8	-11,3	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-77,0	-58,3	-39,4	-20,4	-1,1	18,2	37,8	57,4	77,1	96,9	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-260,9	-295,0	-328,0	-361,1	-395,6	-434,0	-479,7	-539,8	-629,2	-790,7	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	103,6	106,9	110,3	113,9	117,8	121,8	126,0	130,4	135,1	140,0	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-6,5	-7,4	-8,3	-9,3	-10,3	-11,4	-12,5	-13,6	-14,8	-16,1	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	182,5	187,1	192,2	197,9	204,3	211,6	220,1	230,1	242,1	256,7	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	217,3	222,8	228,5	234,6	241,1	248,1	255,6	263,9	273,0	283,4	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	48,6	49,5	50,2	50,7	50,9	50,8	50,3	49,2	47,3	44,5	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,4	6,8	7,4	8,1	9,0	10,0	11,3	12,9	14,9	17,3	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	54,2	57,8	61,8	66,1	71,0	76,6	83,0	90,8	100,3	112,9	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	132,4	136,5	140,8	145,4	150,3	155,5	161,2	167,4	174,5	182,8	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,7	0,0	-0,6	-1,4	-2,4	-3,6	-5,1	-7,1	-9,7	-13,3	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,3	4,8	4,3	3,7	3,1	2,3	1,5	0,4	-0,8	-2,6	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,2	10,4	10,6	10,9	11,3	11,8	12,4	13,1	14,2	15,7	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,8	15,1	15,6	16,1	16,7	17,5	18,4	19,5	21,0	23,0	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	19,8	22,4	25,2	28,1	31,3	34,6	38,1	41,8	45,8	50,0	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	103,9	107,4	111,0	114,8	118,8	123,0	127,4	131,9	136,7	141,8	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,5	-2,0	-2,5	-3,0	-3,5	-4,1	-4,7	-5,3	-6,0	-6,8	-7,5	-4,7
Total													
Total	DM	-25,73	-23,12	-20,10	-16,79	-13,18	-9,47	-5,74	-2,28	0,37	0,64	-8,92	—
	DMA	32,92	27,38	23,70	20,12	17,08	16,29	20,15	25,83	33,05	43,54	68,67	—
	PDMA	60,81	49,11	37,97	26,24	14,33	9,30	21,90	39,09	59,28	84,00	118,03	—
CPI													
CPI	DM	-50,60	-46,83	-42,27	-37,18	-31,65	-26,05	-20,75	-16,43	-14,54	-18,96	-47,66	—
	DMA	63,36	52,30	45,69	39,36	33,92	33,16	39,71	48,41	59,72	77,56	128,26	—
	PDMA	91,29	72,57	55,14	37,62	20,06	10,36	29,52	50,71	73,45	98,58	132,83	—
SPI													
SPI	DM	-7,49	-5,73	-3,84	-1,83	0,35	2,69	5,26	8,09	11,30	15,01	19,49	—
	DMA	10,60	9,11	7,57	6,01	4,74	3,92	5,81	9,27	13,50	18,59	24,97	—
	PDMA	38,46	31,90	25,38	17,91	10,13	8,53	16,31	30,56	48,90	73,30	107,17	—
Δ CS													
Δ CS	DM	-43,11	-41,09	-38,43	-35,35	-32,00	-28,75	-26,01	-24,51	-25,84	-33,98	-67,15	—
	DMA	52,76	43,19	38,12	33,36	29,18	29,24	33,90	39,14	46,22	58,98	103,30	—
	PDMA	52,83	40,67	29,75	19,71	9,93	1,83	13,21	20,15	24,55	25,28	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-25,35	-23,16	-20,52	-17,54	-14,24	-10,79	-7,33	-4,14	-1,83	-2,15	-13,48	—
	DMA	32,95	27,55	24,26	21,10	18,58	18,23	21,63	27,07	34,21	44,97	72,17	—
	PDMA	30,79	25,19	20,12	14,95	10,02	7,41	11,74	19,79	29,93	42,20	60,22	—
CPI													
CPI	DM	-46,46	-44,18	-41,06	-37,36	-33,20	-28,98	-25,10	-22,31	-22,20	-29,05	-62,61	—
	DMA	60,50	50,20	44,82	39,76	35,70	36,16	41,40	49,01	59,48	77,13	130,91	—
	PDMA	39,09	30,96	24,39	17,78	11,34	9,26	17,27	27,52	39,39	53,84	78,24	—
SPI													
SPI	DM	-9,12	-6,99	-4,72	-2,30	0,35	3,20	6,34	9,84	13,84	18,54	24,32	—
	DMA	11,76	10,13	8,45	6,75	5,41	4,43	6,43	10,19	14,78	20,23	26,98	—
	PDMA	24,40	20,76	16,83	12,77	9,01	6,00	7,49	13,85	22,65	33,25	46,35	—
Δ CS													
Δ CS	DM	-37,34	-37,19	-36,34	-35,06	-33,55	-32,18	-31,44	-32,15	-36,04	-47,59	-86,93	—
	DMA	48,74	40,07	36,37	33,01	30,29	31,73	34,97	38,82	44,70	56,90	103,93	—
	PDMA	14,68	10,21	7,55	5,00	2,32	3,26	9,78	13,67	16,74	20,59	31,89	—

Tabela 8.261: Constantes de acoplamento SB972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	463,6	483,4	503,8	524,8	546,5	568,8	591,8	615,6	640,1	665,4	691,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,4	19,3	17,0	14,6	11,9	9,0	6,0	2,7	-0,7	-4,4	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,6	-76,1	-78,6	-81,3	-84,0	-86,9	-89,9	-93,0	-96,2	-99,6	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,0	-3,0	-4,1	-5,2	-6,3	-7,5	-8,7	-10,0	-11,4	-12,8	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,9	41,0	42,1	43,3	44,5	45,8	47,1	48,5	50,0	51,5	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-4,7	-5,6	-6,6	-7,7	-8,8	-9,9	-11,2	-12,5	-13,8	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	141,0	149,6	158,6	167,9	177,6	187,6	198,0	208,7	219,7	231,0	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1811,0	-1793,2	-1768,7	-1738,3	-1703,0	-1663,4	-1620,4	-1574,4	-1526,2	-1476,2	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-169,3	-150,9	-132,2	-113,4	-94,4	-75,3	-56,2	-37,0	-17,8	1,2	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,4	-42,5	-23,5	-4,4	14,8	34,1	53,5	72,9	92,5	112,0	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-252,0	-285,6	-318,1	-350,6	-384,7	-422,6	-468,2	-529,1	-622,2	-799,7	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	109,3	112,6	116,2	119,9	123,9	128,0	132,3	136,8	141,6	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-9,1	-10,1	-11,1	-12,2	-13,3	-14,4	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	181,4	185,9	191,0	196,7	203,1	210,4	219,0	229,1	241,2	255,9	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	219,4	224,7	230,3	236,2	242,4	249,1	256,4	264,3	273,0	282,8	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	48,9	49,7	50,4	50,9	51,2	51,1	50,7	49,7	48,1	45,5	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,0	6,4	6,9	7,5	8,3	9,2	10,2	11,6	13,3	15,4	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	54,5	58,1	62,1	66,6	71,6	77,4	84,2	92,5	102,9	116,9	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	134,3	138,3	142,5	147,0	151,8	156,9	162,4	168,6	175,5	183,7	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,3	0,7	0,0	-0,7	-1,6	-2,8	-4,3	-6,2	-8,8	-12,5	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	5,7	5,3	4,8	4,2	3,6	2,8	1,9	0,8	-0,7	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,0	10,1	10,3	10,6	10,9	11,3	11,7	12,4	13,3	14,6	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,6	14,9	15,3	15,7	16,3	16,9	17,7	18,7	20,0	21,8	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	22,3	25,0	27,7	30,7	33,8	37,1	40,5	44,2	48,1	52,1	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	105,6	109,0	112,5	116,3	120,1	124,2	128,4	132,9	137,5	142,4	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-1,4	-1,9	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,5	-5,2	-5,8	-6,5	-4,7
Total													
CPI	DM	-24,93	-22,22	-19,10	-15,62	-11,92	-8,05	-4,20	-0,62	2,06	1,88	-12,05	—
	DMA	32,33	26,71	22,47	20,53	18,97	20,04	24,43	29,98	37,29	48,40	75,85	—
	PDMA	58,22	46,82	35,46	25,23	15,36	17,87	27,37	40,81	59,88	84,04	118,82	—
SPI	DM	-49,83	-45,78	-40,93	-35,46	-29,61	-23,65	-17,98	-13,38	-11,42	-16,94	-56,05	—
	DMA	62,75	51,42	43,40	40,90	38,72	41,72	49,11	58,05	69,87	89,32	145,55	—
	PDMA	78,73	59,60	41,35	26,42	12,89	25,15	44,24	65,90	88,88	114,55	152,13	—
ΔCS	DM	-6,68	-4,93	-3,09	-1,07	1,06	3,38	5,91	8,75	11,94	15,68	20,21	—
	DMA	10,03	8,59	7,13	5,59	4,49	4,14	6,33	9,40	13,39	18,40	24,75	—
	PDMA	43,18	37,45	31,14	24,36	17,16	12,53	14,99	22,42	38,60	61,68	94,39	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
CPI	DM	-25,19	-22,90	-20,15	-17,00	-13,58	-9,97	-6,36	-3,03	-0,70	-1,52	-17,79	—
	DMA	32,90	27,41	23,50	22,18	21,32	21,75	25,84	31,20	38,44	49,93	79,77	—
	PDMA	29,79	24,22	18,91	15,09	12,26	11,48	15,39	21,71	30,79	42,92	62,25	—
SPI	DM	-47,17	-44,61	-41,17	-37,07	-32,55	-27,92	-23,63	-20,51	-20,31	-28,33	-73,32	—
	DMA	61,39	50,81	43,89	43,05	42,57	43,98	50,17	58,07	69,11	88,55	148,44	—
	PDMA	35,67	27,23	19,82	16,12	14,05	14,93	23,00	33,89	46,10	61,33	89,61	—
ΔCS	DM	-8,28	-6,19	-3,98	-1,56	1,02	3,83	6,92	10,42	14,38	19,10	24,93	—
	DMA	10,99	9,41	7,81	6,13	4,97	4,65	7,12	10,52	14,85	20,22	26,95	—
	PDMA	25,26	21,91	18,21	14,30	10,88	8,82	9,54	12,35	19,01	28,76	41,20	—
Total													
ΔCS	DM	-38,89	-38,42	-37,19	-35,51	-33,57	-31,75	-30,55	-30,93	-34,69	-47,43	-98,25	—
	DMA	50,40	41,40	36,08	36,92	37,60	39,33	43,05	47,55	54,26	68,33	121,49	—
	PDMA	10,41	5,32	1,61	1,83	3,16	6,11	13,46	21,54	27,09	32,58	48,41	—

Tabela 8.262: Constantes de acoplamento SB98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	419,3	437,9	457,0	476,8	497,1	518,0	539,6	561,9	584,9	608,6	633,1	500
CO	$^1J_{CO}$	24,7	22,9	20,9	18,7	16,3	13,8	11,1	8,3	5,2	1,9	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,9	-70,2	-72,6	-75,1	-77,7	-80,4	-83,2	-86,1	-89,1	-92,3	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,3	-3,3	-4,4	-5,4	-6,6	-7,7	-9,0	-10,3	-11,7	-13,1	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,3	39,3	40,4	41,6	42,8	44,1	45,4	46,8	48,3	49,8	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,6	-5,5	-6,5	-7,6	-8,7	-9,9	-11,1	-12,4	-13,8	-15,2	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	160,0	168,1	176,3	184,7	193,3	202,1	211,0	220,0	229,2	238,5	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1780,9	-1763,1	-1738,8	-1709,1	-1674,6	-1636,2	-1594,3	-1549,8	-1503,0	-1454,4	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-182,5	-164,6	-146,4	-127,8	-109,0	-90,0	-70,8	-51,6	-32,3	-13,0	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-77,8	-59,4	-40,8	-21,9	-2,9	16,2	35,6	55,0	74,5	94,2	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-268,0	-303,0	-337,3	-371,8	-408,4	-449,6	-499,8	-567,4	-671,9	-872,8	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	106,4	109,8	113,4	117,2	121,1	125,3	129,7	134,3	139,2	144,2	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-6,9	-7,8	-8,8	-9,8	-10,9	-12,0	-13,1	-14,3	-15,6	-16,8	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	185,5	190,2	195,4	201,3	207,8	215,4	224,2	234,6	247,1	262,6	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	221,6	227,3	233,2	239,5	246,2	253,5	261,3	269,9	279,6	290,5	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,1	50,0	50,7	51,1	51,3	51,2	50,6	49,4	47,3	44,1	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,5	7,0	7,6	8,3	9,2	10,4	11,7	13,4	15,5	18,2	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	56,0	59,8	63,9	68,4	73,5	79,3	86,1	94,3	104,6	118,4	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	135,4	139,6	144,1	148,9	153,9	159,4	165,3	171,9	179,4	188,3	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,6	0,0	-0,7	-1,6	-2,6	-3,9	-5,5	-7,6	-10,4	-14,5	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,2	4,7	4,2	3,6	2,9	2,2	1,3	0,2	-1,2	-3,2	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,3	10,5	10,8	11,1	11,5	12,0	12,7	13,5	14,7	16,4	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	15,0	15,4	15,9	16,4	17,1	17,9	18,9	20,1	21,8	24,0	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	20,8	23,6	26,4	29,5	32,8	36,3	40,0	43,9	48,0	52,4	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	106,6	110,2	114,0	117,9	122,1	126,4	131,0	135,7	140,7	145,9	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,1	-7,9	-4,7
Total													
Total	DM	-26,01	-23,37	-20,37	-17,05	-13,51	-9,83	-6,20	-2,96	-0,78	-1,90	-19,10	—
	DMA	32,82	27,43	24,17	20,64	17,60	17,62	22,18	28,27	36,21	48,39	80,95	—
	PDMA	59,46	48,04	36,91	25,11	13,83	10,25	24,25	42,35	63,60	90,29	129,89	—
CPI													
CPI	DM	-52,96	-49,25	-44,83	-39,80	-34,48	-29,14	-24,22	-20,59	-20,05	-28,06	-75,31	—
	DMA	64,42	53,80	48,19	41,93	36,23	35,25	42,00	51,34	63,98	85,35	152,76	—
	PDMA	90,98	72,61	55,59	38,17	20,93	10,45	29,86	51,32	74,40	100,66	140,82	—
SPI													
SPI	DM	-6,25	-4,39	-2,44	-0,36	1,87	4,33	7,01	9,97	13,35	17,29	22,12	—
	DMA	9,65	8,10	6,56	5,03	3,94	4,69	7,64	11,36	15,85	21,29	28,29	—
	PDMA	36,34	30,03	23,21	15,52	8,62	10,10	20,15	35,77	55,68	82,69	121,88	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-46,72	-44,86	-42,39	-39,44	-36,36	-33,47	-31,23	-30,56	-33,41	-45,35	-97,43	—
	DMA	54,77	45,70	41,63	36,90	32,29	30,55	34,36	39,98	48,14	64,07	124,47	—
	PDMA	54,64	42,58	32,37	22,65	12,31	0,34	9,71	15,55	18,72	17,97	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-25,63	-23,40	-20,76	-17,76	-14,51	-11,09	-7,73	-4,77	-2,97	-4,83	-24,71	—
	DMA	32,81	27,57	24,74	21,63	19,08	19,80	24,00	29,90	37,85	50,50	86,04	—
	PDMA	29,40	23,86	18,88	13,78	8,94	8,33	13,94	22,89	33,54	46,80	68,62	—
CPI													
CPI	DM	-48,98	-46,74	-43,73	-40,09	-36,14	-32,17	-28,70	-26,65	-28,01	-38,79	-92,72	—
	DMA	61,58	51,74	47,43	42,43	38,06	38,65	44,14	52,47	64,43	85,97	158,16	—
	PDMA	38,21	30,27	23,95	17,39	11,09	10,69	19,11	29,79	42,17	57,92	89,03	—
SPI													
SPI	DM	-7,66	-5,44	-3,09	-0,58	2,13	5,12	8,41	12,07	16,29	21,30	27,60	—
	DMA	10,68	8,98	7,29	5,64	4,48	5,29	8,50	12,55	17,40	23,21	30,57	—
	PDMA	22,62	18,93	14,98	11,00	7,30	6,52	9,97	17,58	26,90	38,23	52,91	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-41,32	-41,30	-40,64	-39,51	-38,27	-37,29	-37,11	-38,72	-44,30	-60,09	-120,32	—
	DMA	50,90	42,76	40,14	36,79	33,58	33,36	35,64	39,92	47,03	62,76	127,59	—
	PDMA	15,60	11,35	8,96	6,39	3,79	4,18	9,14	12,21	15,27	19,69	36,12	—

Tabela 8.263: Constantes de acoplamento SLYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	420,6	441,1	462,4	484,4	507,2	530,8	555,3	580,6	606,9	634,2	662,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,8	22,9	20,9	18,7	16,3	13,7	11,0	8,0	4,9	1,6	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-72,4	-75,1	-77,8	-80,7	-83,7	-86,9	-90,2	-93,7	-97,3	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,4	-5,5	-6,8	-8,0	-9,4	-10,8	-12,3	-13,9	-15,6	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	40,5	41,7	42,9	44,2	45,5	47,0	48,5	50,0	51,7	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-6,5	-7,5	-8,7	-9,9	-11,1	-12,5	-13,9	-15,4	-17,0	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,5	144,3	153,5	163,0	172,9	183,1	193,7	204,6	215,9	227,4	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1814,4	-1797,1	-1773,1	-1743,5	-1709,0	-1670,4	-1628,3	-1583,4	-1536,2	-1487,3	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,4	-169,5	-151,2	-132,8	-114,0	-95,2	-76,1	-57,0	-37,8	-18,6	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,8	-61,1	-42,3	-23,3	-4,1	15,1	34,6	54,2	73,9	93,8	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,1	-308,2	-344,0	-380,5	-419,8	-465,0	-521,4	-600,0	-727,9	-1000,8	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	109,4	113,0	116,8	120,7	124,9	129,4	134,0	138,9	144,0	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,9	-9,9	-11,0	-12,1	-13,3	-14,5	-15,7	-17,0	-18,4	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	179,6	184,2	189,4	195,4	202,4	210,6	220,6	232,8	248,3	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,4	232,3	238,4	245,0	252,0	259,5	267,8	276,9	287,3	299,2	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	52,1	52,7	53,2	53,3	53,0	52,2	50,7	48,2	44,2	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,4	15,5	18,1	21,5	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,4	53,8	57,6	61,8	66,7	72,3	78,9	87,3	98,2	113,8	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,2	140,5	145,0	149,9	155,0	160,6	166,8	173,7	181,8	191,8	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,2	-0,4	-1,3	-2,4	-3,8	-5,6	-8,0	-11,4	-16,5	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,0	4,4	3,8	3,1	2,2	1,1	-0,1	-2,0	-4,7	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,5	11,8	12,2	12,7	13,3	14,1	15,2	16,8	19,3	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,3	16,7	17,3	17,9	18,7	19,6	20,8	22,4	24,5	27,6	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,7	21,3	24,0	26,9	30,0	33,3	36,7	40,4	44,3	48,4	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,1	109,7	113,4	117,3	121,5	125,8	130,4	135,2	140,2	145,4	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,3	-4,9	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-4,7
Total													
Total	DM	-29,04	-26,40	-23,38	-20,05	-16,48	-12,86	-9,32	-6,28	-4,77	-8,31	-48,74	—
	DMA	34,53	29,43	26,08	22,41	19,57	19,73	24,00	30,75	39,93	55,48	110,36	—
	PDMA	59,82	48,15	36,94	24,93	14,17	12,21	27,30	46,76	70,77	102,43	158,62	—
CPI													
CPI	DM	-59,35	-55,57	-51,01	-45,94	-40,53	-35,23	-30,48	-27,44	-28,56	-42,62	-145,56	—
	DMA	69,39	59,34	53,54	47,12	41,91	41,15	47,12	57,96	73,27	101,80	220,20	—
	PDMA	91,57	72,82	55,57	37,59	22,32	14,76	33,37	55,94	80,40	109,77	169,20	—
SPI													
SPI	DM	-6,81	-5,01	-3,11	-1,06	1,15	3,55	6,21	9,23	12,69	16,85	22,27	—
	DMA	8,97	7,49	5,94	4,29	3,19	4,03	7,05	10,80	15,49	21,51	29,81	—
	PDMA	36,54	30,06	23,28	15,65	8,19	10,35	22,85	40,02	63,71	97,05	150,86	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-52,55	-50,56	-47,90	-44,88	-41,68	-38,77	-36,69	-36,66	-41,25	-59,47	-167,83	—
	DMA	60,42	51,84	47,60	42,83	38,72	37,13	40,07	47,16	57,79	80,29	190,39	—
	PDMA	55,03	42,76	32,29	21,95	14,13	4,41	10,52	15,92	16,68	12,72	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-28,99	-26,77	-24,11	-21,11	-17,83	-14,47	-11,19	-8,46	-7,37	-11,90	-57,89	—
	DMA	34,63	29,73	26,81	23,55	21,26	22,24	26,09	32,71	42,00	58,37	118,96	—
	PDMA	28,12	22,56	17,56	12,25	8,97	11,05	17,11	26,81	38,50	54,18	87,08	—
CPI													
CPI	DM	-55,81	-53,52	-50,38	-46,70	-42,67	-38,76	-35,49	-34,10	-37,31	-54,76	-170,00	—
	DMA	66,85	57,66	53,16	48,00	44,19	45,26	49,87	59,84	74,71	104,10	232,34	—
	PDMA	37,53	29,37	22,93	15,82	11,82	16,17	23,64	35,40	49,17	68,21	120,26	—
SPI													
SPI	DM	-8,35	-6,19	-3,91	-1,42	1,27	4,21	7,50	11,26	15,66	21,07	28,35	—
	DMA	9,85	8,24	6,54	4,75	3,62	4,53	7,79	11,85	16,85	23,19	31,74	—
	PDMA	20,89	17,32	13,43	9,51	6,77	7,12	12,09	20,20	30,29	43,38	61,56	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-47,46	-47,33	-46,47	-45,28	-43,94	-42,97	-42,99	-45,36	-52,97	-75,83	-198,35	—
	DMA	57,00	49,42	46,62	43,25	40,57	40,73	42,08	47,99	57,86	80,91	200,60	—
	PDMA	16,64	12,05	9,50	6,31	5,05	9,05	11,55	15,20	18,88	24,83	58,70	—

Tabela 8.264: Constantes de acoplamento SP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	381,1	399,9	419,4	439,6	460,5	482,1	504,4	527,6	551,6	576,4	602,2	500
CO	$^1J_{CO}$	27,8	26,2	24,4	22,5	20,4	18,2	15,9	13,3	10,7	7,8	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-63,0	-65,3	-67,6	-70,1	-72,7	-75,5	-78,3	-81,3	-84,4	-87,6	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,6	-3,6	-4,6	-5,7	-6,8	-8,0	-9,3	-10,6	-12,0	-13,5	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,4	36,3	37,4	38,5	39,6	40,8	42,1	43,4	44,8	46,3	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,9	-5,8	-6,8	-7,8	-8,9	-10,0	-11,2	-12,5	-13,8	-15,3	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	115,9	123,9	132,3	141,1	150,2	159,6	169,5	179,6	190,1	200,9	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1800,5	-1783,2	-1759,6	-1730,3	-1696,2	-1658,1	-1616,5	-1572,2	-1525,6	-1477,3	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-195,1	-178,1	-160,7	-142,9	-125,0	-106,8	-88,4	-69,9	-51,4	-32,7	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-92,2	-74,3	-56,2	-37,9	-19,3	-0,7	18,1	37,1	56,2	75,5	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-281,6	-317,8	-353,7	-390,5	-430,3	-476,0	-533,1	-612,1	-738,7	-997,4	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	94,1	97,1	100,3	103,7	107,2	111,0	115,0	119,1	123,5	128,2	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,7	-9,6	-10,6	-11,7	-12,7	-13,9	-15,0	-16,3	-17,5	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	165,1	168,8	172,9	177,6	182,9	189,1	196,5	205,4	216,6	231,0	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	204,8	210,1	215,6	221,5	227,8	234,7	242,2	250,6	260,2	271,5	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	48,8	49,7	50,4	50,9	51,1	50,9	50,2	48,7	46,3	42,3	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,2	7,8	8,5	9,4	10,5	11,8	13,5	15,7	18,4	22,0	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	44,3	47,4	50,8	54,7	59,1	64,2	70,4	78,2	88,9	105,0	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	122,0	125,9	130,0	134,3	139,0	144,1	149,7	156,1	163,9	173,9	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,7	0,1	-0,5	-1,3	-2,3	-3,6	-5,3	-7,7	-11,2	-16,8	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,4	3,9	3,3	2,6	1,9	0,9	-0,1	-1,6	-3,8	-7,2	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,2	10,5	10,8	11,2	11,8	12,4	13,3	14,6	16,5	19,6	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,9	15,4	15,9	16,6	17,4	18,3	19,6	21,3	23,7	27,6	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	14,6	16,9	19,4	22,0	24,8	27,8	30,9	34,2	37,8	41,5	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	94,6	97,7	101,1	104,6	108,4	112,3	116,4	120,7	125,2	130,0	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,8	-2,2	-2,7	-3,2	-3,7	-4,2	-4,8	-5,5	-6,1	-6,8	-7,6	-4,7
Total	DM	-34,95	-32,55	-29,79	-26,71	-23,43	-20,09	-16,85	-14,15	-12,84	-10,66	-45,89	—
	DMA	40,32	35,88	32,47	28,92	25,39	22,05	19,97	23,32	30,78	45,45	90,58	—
	PDMA	66,68	55,71	44,71	32,96	22,65	18,69	20,10	36,74	59,89	93,05	152,34	—
CPI	DM	-65,51	-62,06	-57,87	-53,13	-48,13	-43,21	-38,88	-36,23	-37,58	-50,71	-128,80	—
	DMA	75,84	67,99	62,69	56,76	50,51	44,46	40,66	47,83	60,91	87,69	182,13	—
	PDMA	105,82	88,85	72,50	55,74	38,60	23,84	16,40	34,86	56,98	84,78	134,69	—
SPI	DM	-12,53	-10,91	-9,19	-7,34	-5,33	-3,14	-0,70	2,05	5,30	9,35	14,91	—
	DMA	14,28	12,34	10,31	8,50	6,97	5,62	4,79	5,35	8,69	14,48	23,45	—
	PDMA	37,97	31,41	24,33	16,25	10,96	14,92	22,81	38,12	62,03	99,12	165,29	—
Δ CS	DM	-52,98	-51,15	-48,68	-45,79	-42,80	-40,07	-38,18	-38,27	-42,88	-60,06	-143,71	—
	DMA	61,56	55,65	52,38	48,26	43,54	38,84	35,87	42,47	52,22	73,21	158,67	—
	PDMA	67,86	57,44	48,17	39,49	27,65	8,92	-6,41	-3,26	-5,05	-14,34	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-35,07	-33,10	-30,70	-27,96	-24,99	-21,92	-18,96	-16,55	-15,66	-19,75	-53,57	—
	DMA	40,70	36,50	33,49	30,33	27,19	24,13	22,21	25,00	32,36	47,71	97,15	—
	PDMA	34,71	29,54	24,57	19,36	14,73	11,76	12,03	18,15	28,29	43,61	73,57	—
CPI	DM	-61,34	-59,34	-56,54	-53,15	-49,51	-45,96	-43,08	-42,06	-45,46	-61,83	-149,66	—
	DMA	72,70	65,86	61,84	57,15	52,13	47,34	44,42	50,40	62,88	90,41	192,36	—
	PDMA	44,94	38,20	32,28	26,05	19,60	15,76	15,98	23,61	35,21	52,92	94,96	—
SPI	DM	-14,86	-12,91	-10,83	-8,58	-6,12	-3,42	-0,40	3,07	7,26	12,62	20,35	—
	DMA	16,08	13,92	11,68	9,70	8,00	6,28	5,12	5,47	8,88	14,87	23,91	—
	PDMA	26,85	22,87	18,64	14,22	10,98	8,69	9,00	13,95	22,96	36,44	57,11	—
Δ CS	DM	-46,48	-46,43	-45,71	-44,57	-43,39	-42,54	-42,68	-45,13	-52,72	-74,45	-170,01	—
	DMA	56,62	51,94	50,16	47,45	44,13	41,06	39,30	44,93	54,00	75,54	168,45	—
	PDMA	18,09	15,33	13,64	11,82	8,61	7,07	6,98	9,66	12,25	16,48	37,85	—

Tabela 8.265: Constantes de acoplamento SPBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	377,2	396,5	416,4	437,0	458,3	480,4	503,3	526,9	551,5	576,9	603,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	28,4	26,8	25,0	23,1	21,0	18,8	16,5	13,9	11,2	8,3	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-62,8	-65,1	-67,5	-70,1	-72,7	-75,5	-78,4	-81,5	-84,6	-88,0	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,9	-3,9	-5,0	-6,1	-7,3	-8,6	-9,9	-11,3	-12,7	-14,3	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	35,4	36,4	37,5	38,6	39,7	41,0	42,3	43,6	45,1	46,6	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,2	-7,2	-8,3	-9,4	-10,6	-11,9	-13,2	-14,6	-16,1	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	114,8	123,1	131,8	140,8	150,2	160,0	170,2	180,7	191,6	202,8	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1805,8	-1787,7	-1763,2	-1733,1	-1698,3	-1659,5	-1617,4	-1572,5	-1525,5	-1476,6	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-196,0	-178,8	-161,3	-143,5	-125,4	-107,1	-88,7	-70,1	-51,4	-32,6	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-93,2	-75,2	-57,0	-38,5	-19,9	-1,1	17,8	37,0	56,3	75,7	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-282,5	-319,5	-356,3	-394,2	-435,3	-483,1	-543,2	-627,9	-766,9	-1065,7	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	94,4	97,5	100,8	104,3	107,9	111,8	115,9	120,2	124,7	129,4	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-9,2	-10,2	-11,2	-12,3	-13,5	-14,6	-15,9	-17,1	-18,5	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	164,3	168,0	172,2	177,0	182,5	189,1	196,9	206,6	218,9	235,0	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	206,7	212,1	217,8	223,9	230,5	237,6	245,6	254,6	265,0	277,5	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	49,0	49,8	50,5	50,9	50,9	50,5	49,5	47,6	44,4	39,4	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,6	8,2	9,0	10,0	11,3	12,8	14,7	17,2	20,4	24,8	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	43,9	47,1	50,6	54,5	59,1	64,5	71,1	79,8	92,0	111,5	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,9	126,9	131,1	135,6	140,4	145,7	151,7	158,6	167,1	178,9	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	-0,2	-0,9	-1,8	-2,9	-4,4	-6,3	-9,1	-13,3	-20,6	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	3,5	2,9	2,1	1,3	0,2	-1,0	-2,9	-5,5	-10,0	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,4	10,8	11,1	11,6	12,2	13,0	14,1	15,6	18,0	22,2	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	15,3	15,8	16,4	17,1	18,0	19,1	20,6	22,6	25,6	30,6	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	14,5	16,8	19,3	21,9	24,7	27,7	30,9	34,2	37,8	41,6	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	95,1	98,4	101,8	105,4	109,3	113,3	117,5	121,9	126,6	131,5	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-2,5	-2,9	-3,5	-4,0	-4,6	-5,2	-5,9	-6,6	-7,3	-8,1	-4,7
Total	DM	-35,36	-32,91	-30,09	-26,98	-23,66	-20,29	-17,04	-14,40	-13,35	-17,77	-62,67	—
	DMA	40,58	36,13	32,65	29,02	25,55	22,36	20,35	24,49	32,98	49,91	112,44	—
	PDMA	65,22	53,94	42,68	31,29	23,99	22,20	25,14	43,83	69,99	109,75	190,22	—
CPI	DM	-66,69	-63,14	-58,88	-54,11	-49,09	-44,20	-40,03	-37,75	-40,08	-56,72	-172,10	—
	DMA	76,87	69,08	63,68	57,69	51,40	45,56	41,55	49,17	63,74	94,25	226,41	—
	PDMA	106,26	89,23	72,67	55,70	38,43	25,96	17,65	36,37	59,40	88,66	151,26	—
SPI	DM	-12,39	-10,74	-8,97	-7,09	-5,01	-2,75	-0,18	2,73	6,26	10,79	17,57	—
	DMA	13,96	11,97	9,89	7,99	6,60	5,34	4,81	6,39	10,42	17,39	28,87	—
	PDMA	35,12	28,05	20,68	13,39	13,40	19,44	30,64	49,30	77,75	125,22	218,79	—
ΔCS	DM	-54,30	-52,40	-49,91	-47,02	-44,08	-41,45	-39,85	-40,49	-46,34	-67,51	-189,67	—
	DMA	62,91	57,12	53,79	49,70	44,80	40,22	36,75	42,79	53,32	76,85	197,54	—
	PDMA	71,14	61,18	52,00	42,31	25,03	6,52	-12,99	-12,93	-18,34	-36,56	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-35,47	-33,43	-30,97	-28,19	-25,17	-22,06	-19,07	-16,71	-16,07	-21,40	-71,93	—
	DMA	40,97	36,77	33,69	30,44	27,30	24,40	22,57	26,21	34,67	52,45	121,21	—
	PDMA	33,89	28,57	23,52	18,40	14,21	12,83	14,31	21,21	32,65	50,25	89,72	—
CPI	DM	-62,54	-60,43	-57,57	-54,17	-50,51	-47,01	-44,31	-43,73	-48,22	-68,46	-197,33	—
	DMA	73,74	66,97	62,85	58,11	53,05	48,51	45,43	51,89	65,98	97,60	241,03	—
	PDMA	44,75	38,02	31,94	25,60	19,01	17,82	17,55	25,35	37,81	57,06	112,92	—
SPI	DM	-14,65	-12,65	-10,52	-8,21	-5,67	-2,86	0,35	4,07	8,66	14,80	24,54	—
	DMA	15,75	13,55	11,25	9,16	7,50	5,85	4,99	6,45	10,58	17,72	29,05	—
	PDMA	25,53	21,30	17,04	12,86	10,51	9,00	11,82	18,02	28,68	45,01	71,87	—
ΔCS	DM	-47,89	-47,78	-47,05	-45,96	-44,84	-44,15	-44,66	-47,80	-56,88	-83,26	-221,87	—
	DMA	57,99	53,42	51,60	48,95	45,55	42,66	40,44	45,44	55,40	79,88	211,98	—
	PDMA	19,23	16,72	14,90	12,74	8,49	8,82	5,73	7,32	9,13	12,05	41,06	—

Tabela 8.266: Constantes de acoplamento SPW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	379,7	399,0	419,0	439,6	461,0	483,1	506,0	529,7	554,3	579,8	606,3	500
CO	$^1J_{CO}$	28,2	26,6	24,8	22,9	20,8	18,6	16,2	13,6	10,9	8,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-63,1	-65,4	-67,9	-70,4	-73,1	-75,9	-78,8	-81,9	-85,1	-88,4	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,9	-4,0	-5,0	-6,2	-7,4	-8,6	-9,9	-11,3	-12,8	-14,3	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,6	36,6	37,6	38,8	39,9	41,2	42,5	43,9	45,3	46,8	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,3	-6,3	-7,3	-8,3	-9,4	-10,6	-11,9	-13,2	-14,6	-16,1	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	115,6	123,9	132,7	141,7	151,2	161,0	171,2	181,8	192,7	203,9	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1809,4	-1791,2	-1766,6	-1736,4	-1701,4	-1662,5	-1620,1	-1575,1	-1527,9	-1478,9	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-195,3	-178,1	-160,6	-142,7	-124,5	-106,2	-87,6	-69,0	-50,2	-31,4	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-92,4	-74,3	-56,0	-37,5	-18,8	0,0	19,0	38,2	57,5	77,0	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-282,2	-319,2	-356,0	-393,9	-435,0	-482,7	-543,0	-627,8	-767,7	-1070,4	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	95,0	98,1	101,4	104,9	108,6	112,4	116,5	120,8	125,4	130,2	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,3	-9,2	-10,2	-11,3	-12,3	-13,5	-14,6	-15,9	-17,2	-18,5	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	165,3	169,1	173,3	178,2	183,8	190,3	198,3	208,1	220,5	236,7	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	207,7	213,1	218,9	225,0	231,6	238,8	246,8	255,8	266,3	278,8	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	49,0	49,9	50,5	50,9	50,9	50,5	49,5	47,6	44,4	39,3	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,5	8,2	9,0	10,0	11,2	12,8	14,7	17,1	20,4	24,7	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	44,4	47,5	51,1	55,1	59,6	65,1	71,8	80,5	92,8	112,6	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	123,6	127,6	131,8	136,3	141,2	146,5	152,5	159,5	168,0	179,8	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,4	-0,2	-0,9	-1,8	-3,0	-4,4	-6,4	-9,1	-13,4	-20,7	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,1	3,5	2,9	2,2	1,3	0,3	-1,0	-2,8	-5,5	-10,0	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,4	10,8	11,1	11,6	12,2	13,0	14,0	15,6	18,0	22,2	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	15,3	15,8	16,4	17,1	18,0	19,1	20,6	22,6	25,6	30,6	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	14,8	17,1	19,6	22,3	25,1	28,1	31,3	34,7	38,2	42,1	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	95,6	98,9	102,4	106,0	109,9	113,9	118,1	122,6	127,3	132,2	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,0	-2,5	-2,9	-3,5	-4,0	-4,6	-5,2	-5,9	-6,6	-7,3	-8,1	-4,7
Total	DM	-35,14	-32,68	-29,84	-26,71	-23,37	-19,97	-16,71	-14,03	-13,02	-17,55	-65,03	—
	DMA	40,34	35,85	32,35	28,78	25,31	22,09	20,44	24,87	33,59	50,73	115,74	—
	PDMA	64,77	53,32	42,08	30,51	23,60	21,46	25,47	44,13	70,94	110,73	191,82	—
CPI	DM	-66,58	-63,03	-58,75	-53,94	-48,87	-43,95	-39,75	-37,45	-39,86	-56,81	-178,33	—
	DMA	76,73	68,85	63,42	57,41	51,07	45,21	41,90	49,82	64,70	95,55	233,56	—
	PDMA	105,46	88,14	71,64	54,62	37,51	24,90	18,24	37,42	60,79	90,09	155,08	—
SPI	DM	-12,09	-10,43	-8,65	-6,74	-4,67	-2,39	0,19	3,14	6,67	11,24	18,05	—
	DMA	13,66	11,65	9,57	7,79	6,41	5,13	4,71	6,57	10,78	17,87	29,34	—
	PDMA	34,93	27,78	20,40	12,84	13,40	18,93	30,78	49,05	78,38	125,86	218,77	—
Δ CS	DM	-54,50	-52,60	-50,10	-47,20	-44,21	-41,57	-39,94	-40,59	-46,54	-68,05	-196,37	—
	DMA	63,07	57,19	53,85	49,62	44,66	40,08	37,19	43,25	53,92	77,69	204,22	—
	PDMA	70,54	60,35	51,24	41,78	24,11	5,98	-12,54	-11,63	-17,58	-35,77	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-35,26	-33,21	-30,74	-27,93	-24,88	-21,75	-18,75	-16,36	-15,74	-21,20	-74,66	—
	DMA	40,73	36,50	33,39	30,23	27,07	24,14	22,62	26,59	35,31	53,33	124,89	—
	PDMA	33,61	28,13	23,14	18,00	13,90	12,50	14,15	21,39	33,20	50,80	91,32	—
CPI	DM	-62,50	-60,40	-57,52	-54,08	-50,38	-46,85	-44,13	-43,52	-48,10	-68,69	-204,32	—
	DMA	73,66	66,80	62,66	57,90	52,80	48,23	45,69	52,48	66,92	98,91	248,76	—
	PDMA	44,41	37,42	31,47	25,08	18,72	17,39	17,39	25,70	38,54	57,77	116,19	—
SPI	DM	-14,30	-12,29	-10,14	-7,82	-5,26	-2,45	0,78	4,53	9,15	15,32	25,08	—
	DMA	15,41	13,18	10,88	8,94	7,28	5,62	4,87	6,67	10,99	18,26	29,60	—
	PDMA	25,31	20,99	16,73	12,55	10,19	8,74	11,65	18,07	29,09	45,43	72,19	—
Δ CS	DM	-48,20	-48,11	-47,38	-46,26	-45,12	-44,40	-44,91	-48,05	-57,25	-84,01	-229,40	—
	DMA	58,25	53,62	51,78	48,96	45,52	42,61	40,82	45,81	55,93	80,65	219,16	—
	PDMA	19,10	16,42	14,74	12,52	8,53	8,65	5,74	7,63	9,45	12,34	44,00	—

Tabela 8.267: Constantes de acoplamento STPSS com base aug-pcJ-2.

	$%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	378,8	398,7	419,2	440,4	462,2	484,8	508,2	532,3	557,3	583,2	610,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	28,3	26,7	24,9	23,0	20,9	18,7	16,3	13,7	10,9	8,0	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,6	-66,1	-68,6	-71,3	-74,1	-76,9	-80,0	-83,1	-86,4	-89,8	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-3,8	-4,9	-6,1	-7,3	-8,6	-10,0	-11,4	-12,9	-14,5	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,6	37,6	38,8	40,0	41,2	42,5	43,9	45,3	46,8	48,4	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,9	-5,9	-7,0	-8,1	-9,3	-10,5	-11,8	-13,2	-14,7	-16,3	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	122,8	131,9	141,4	151,3	161,6	172,4	183,6	195,2	207,3	219,8	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1810,4	-1792,8	-1768,8	-1739,3	-1704,9	-1666,5	-1624,8	-1580,2	-1533,5	-1485,0	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-197,2	-180,1	-162,6	-144,9	-126,9	-108,7	-90,4	-72,0	-53,5	-35,0	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-90,9	-72,9	-54,7	-36,4	-17,8	0,8	19,7	38,7	57,8	77,0	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-281,2	-318,2	-354,9	-392,7	-433,5	-480,8	-540,2	-623,5	-760,1	-1052,6	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	101,1	104,5	108,1	111,9	115,9	120,1	124,6	129,3	134,2	139,4	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,7	-8,7	-9,8	-10,9	-12,0	-13,3	-14,5	-15,9	-17,3	-18,7	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	164,7	168,5	172,9	177,9	183,6	190,5	198,7	208,9	221,8	238,8	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	219,6	225,4	231,6	238,2	245,3	253,1	261,7	271,4	282,6	296,0	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,4	51,2	51,8	52,2	52,2	51,8	50,7	48,7	45,3	40,0	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,8	8,5	9,3	10,4	11,6	13,2	15,2	17,7	21,1	25,6	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	44,8	48,0	51,7	55,8	60,5	66,1	73,0	82,0	94,6	114,6	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,1	135,4	140,0	144,9	150,1	155,9	162,4	169,8	178,9	191,3	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,3	-1,1	-2,1	-3,3	-4,8	-6,9	-9,8	-14,1	-21,6	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,4	4,8	4,1	3,4	2,5	1,5	0,1	-1,6	-4,3	-8,7	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,5	11,9	12,4	13,0	13,8	14,8	16,4	18,8	22,8	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,9	17,4	18,0	18,8	19,7	20,8	22,3	24,4	27,4	32,3	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	15,3	17,7	20,2	22,9	25,7	28,7	32,0	35,4	39,0	42,9	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	101,6	105,2	109,0	112,9	117,1	121,5	126,1	131,0	136,1	141,4	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,5	-3,0	-3,6	-4,1	-4,7	-5,4	-6,1	-6,8	-7,6	-8,5	-4,7
Total	DM	-33,42	-30,90	-27,98	-24,77	-21,35	-17,83	-14,45	-11,60	-10,33	-14,36	-57,72	—
	DMA	38,87	34,28	30,69	27,05	23,49	20,63	20,34	26,31	36,15	53,12	113,73	—
	PDMA	65,06	53,75	42,06	30,52	21,68	19,41	25,07	45,15	72,82	112,88	191,26	—
CPI	DM	-65,94	-62,35	-58,01	-53,18	-48,07	-43,06	-38,76	-36,28	-38,35	-54,34	-166,33	—
	DMA	76,30	68,16	62,65	56,56	50,13	44,15	41,24	50,19	66,12	96,23	223,67	—
	PDMA	104,88	87,50	70,76	53,71	36,26	23,65	17,94	37,87	61,86	90,96	152,58	—
SPI	DM	-9,58	-7,83	-5,96	-3,93	-1,75	0,67	3,38	6,50	10,21	14,96	21,93	—
	DMA	11,42	9,43	7,25	5,41	3,95	3,38	5,02	8,79	14,17	21,51	33,11	—
	PDMA	35,86	29,00	21,01	13,51	11,00	16,31	30,30	50,48	80,86	128,96	219,63	—
ΔCS	DM	-56,36	-54,51	-52,05	-49,25	-46,32	-43,74	-42,14	-42,78	-48,57	-69,30	-188,25	—
	DMA	64,88	58,73	55,39	51,15	46,17	40,77	36,22	41,40	51,94	74,72	190,56	—
	PDMA	69,03	58,50	49,75	40,20	25,26	7,35	-12,36	-12,60	-19,00	-38,00	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-33,43	-31,30	-28,73	-25,83	-22,68	-19,40	-16,25	-13,65	-12,75	-17,61	-66,43	—
	DMA	39,08	34,73	31,53	28,29	25,08	22,57	22,50	28,22	38,21	56,04	122,68	—
	PDMA	32,10	26,75	21,58	16,97	13,00	11,97	14,67	23,39	36,24	54,06	93,09	—
CPI	DM	-61,94	-59,79	-56,84	-53,36	-49,60	-45,95	-43,11	-42,28	-46,47	-65,97	-191,09	—
	DMA	73,34	66,19	61,94	57,08	51,86	47,15	44,89	52,84	68,45	99,65	237,91	—
	PDMA	44,77	37,65	31,37	24,81	18,01	16,55	16,60	25,86	39,51	58,72	113,64	—
SPI	DM	-11,50	-9,39	-7,12	-4,65	-1,97	1,02	4,42	8,37	13,19	19,58	29,46	—
	DMA	12,73	10,53	8,13	6,14	4,48	3,65	5,28	9,28	14,95	22,49	34,05	—
	PDMA	22,35	18,37	14,05	10,94	9,13	8,45	13,18	21,48	33,72	50,47	77,27	—
ΔCS	DM	-50,44	-50,40	-49,72	-48,71	-47,63	-46,97	-47,53	-50,65	-59,66	-85,55	-220,55	—
	DMA	60,61	55,66	53,81	50,94	47,38	43,50	39,61	43,56	53,50	77,16	203,86	—
	PDMA	22,42	19,28	17,32	13,87	8,88	8,10	3,42	4,38	5,79	8,25	36,37	—

Tabela 8.268: Valores de PDMA total obtidos para troca S com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
SB95	68,1	57,0	46,3	35,5	24,1	13,3	12,2	25,2	42,6	64,3	92,6
SB98	59,2	47,7	36,5	24,8	14,2	12,0	24,8	43,2	65,0	92,2	132,9
SB971	60,4	48,9	37,7	25,8	14,6	9,5	22,5	39,8	60,3	85,5	120,6
SB972	58,9	47,4	36,0	25,4	15,4	16,4	25,9	40,0	59,1	83,7	119,3
SLYP	60,1	48,4	37,2	25,4	15,9	14,8	27,2	46,8	71,1	103,7	161,6
SP86	66,6	55,4	44,6	32,8	23,9	21,1	21,4	37,2	60,9	94,8	156,5
SPBE	64,9	53,7	42,2	31,7	26,2	24,6	26,9	44,4	71,3	112,0	195,8
SPW91	64,6	53,2	41,8	31,2	25,5	24,0	26,6	44,8	72,0	112,8	197,7
STPSS	64,7	53,2	41,8	30,2	23,1	22,4	26,1	46,0	74,2	115,2	197,2

8.4.1.9 Troca TPSS

Tabela 8.269: Constantes de acoplamento TPSSB95 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	418,0	441,1	464,3	487,3	510,4	533,4	556,3	579,2	602,0	624,7	647,4	500
CO	$^1J_{CO}$	19,7	18,2	16,7	15,1	13,5	11,8	10,0	8,2	6,3	4,4	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,8	-77,0	-79,2	-81,4	-83,5	-85,7	-87,8	-89,9	-92,0	-94,1	-96,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,5	-4,7	-5,9	-7,0	-8,1	-9,2	-10,4	-11,5	-12,5	-13,6	-14,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,5	45,9	46,4	46,8	47,2	47,6	48,0	48,4	48,8	49,2	49,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,8	-6,9	-8,0	-9,1	-10,1	-11,1	-12,1	-13,0	-14,0	-14,9	-15,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	188,6	192,4	196,1	199,5	202,6	205,6	208,3	210,8	213,1	215,2	217,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1662,2	-1640,3	-1615,8	-1589,1	-1560,7	-1531,1	-1500,4	-1469,0	-1437,1	-1405,0	-1372,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-151,5	-137,4	-123,3	-109,1	-95,0	-80,9	-66,8	-52,7	-38,6	-24,5	-10,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-61,0	-44,4	-28,0	-11,7	4,5	20,6	36,6	52,5	68,3	84,0	99,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-253,4	-286,4	-319,9	-355,1	-393,4	-436,7	-488,1	-553,0	-642,1	-780,5	-1048,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	130,0	130,6	131,1	131,7	132,2	132,8	133,2	133,7	134,1	134,5	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,4	-9,3	-10,3	-11,2	-12,1	-12,9	-13,8	-14,6	-15,4	-16,2	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,3	189,9	192,7	195,9	199,5	203,6	208,3	213,7	219,9	227,1	235,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	262,7	263,7	264,8	265,8	267,0	268,2	269,6	271,1	272,9	274,9	277,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	57,4	57,3	57,0	56,6	56,0	55,2	54,1	52,7	51,0	49,0	46,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,5	9,9	10,3	10,8	11,5	12,2	13,2	14,3	15,6	17,1	18,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	66,0	68,0	70,2	72,5	75,1	77,9	81,2	84,9	89,2	94,4	100,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	162,8	164,0	165,1	166,3	167,6	168,9	170,4	172,0	173,9	176,0	178,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,3	0,5	-0,3	-1,3	-2,4	-3,6	-5,0	-6,6	-8,4	-10,7	-13,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	9,3	8,3	7,3	6,3	5,2	4,0	2,8	1,5	0,0	-1,6	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,7	10,9	11,2	11,6	12,0	12,5	13,1	13,7	14,6	15,6	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	19,0	19,2	19,4	19,6	19,9	20,3	20,8	21,5	22,3	23,3	24,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,6	34,0	35,3	36,7	38,0	39,3	40,6	41,9	43,2	44,4	45,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	129,9	130,7	131,5	132,2	132,9	133,6	134,3	135,0	135,6	136,2	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,4	-2,8	-3,3	-3,8	-4,2	-4,7	-5,1	-5,6	-6,0	-6,5	-6,9	-4,7
Total	DM	-12,22	-10,37	-8,45	-6,50	-4,59	-2,82	-1,30	-0,22	-0,01	-1,64	-8,15	—
	DMA	22,50	18,27	15,65	14,26	14,00	15,73	19,53	23,92	29,63	39,60	54,82	—
	PDMA	52,16	41,60	31,89	23,12	16,18	17,07	26,19	38,35	53,30	70,43	90,87	—
CPI	DM	-34,66	-30,95	-27,05	-23,15	-19,41	-16,05	-13,39	-11,90	-12,61	-17,82	-34,86	—
	DMA	46,55	36,51	29,81	25,90	24,54	27,56	35,10	43,75	55,25	76,29	109,08	—
	PDMA	68,85	52,36	37,17	24,56	16,13	17,59	34,48	51,49	69,23	88,78	112,20	—
SPI	DM	4,24	4,72	5,19	5,71	6,27	6,88	7,57	8,34	9,23	10,23	11,44	—
	DMA	4,85	4,89	5,26	5,72	6,27	7,05	8,11	9,37	10,85	12,69	15,03	—
	PDMA	39,92	33,71	28,02	22,07	16,21	16,69	20,12	28,72	41,61	56,97	75,22	—
ΔCS	DM	-38,90	-35,67	-32,24	-28,86	-25,68	-22,93	-20,96	-20,24	-21,84	-28,04	-46,30	—
	DMA	41,70	31,62	24,55	20,18	18,26	20,51	26,99	34,39	44,39	63,60	94,06	—
	PDMA	28,93	18,65	9,15	2,49	-0,08	0,90	14,36	22,77	27,62	31,81	36,98	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-10,97	-9,53	-7,99	-6,41	-4,86	-3,46	-2,31	-1,67	-1,97	-4,32	-12,16	—
	DMA	21,66	17,68	15,51	14,73	15,24	17,41	21,00	25,19	30,82	41,23	57,56	—
	PDMA	17,00	13,21	10,33	8,85	9,76	12,29	17,69	23,36	29,58	37,20	47,30	—
CPI	DM	-30,53	-28,10	-25,45	-22,80	-20,30	-18,22	-16,89	-16,84	-19,20	-26,50	-46,81	—
	DMA	43,61	34,22	28,49	25,82	25,94	29,76	36,45	44,38	55,44	77,02	111,53	—
	PDMA	25,07	17,99	12,22	9,22	10,75	15,61	23,53	31,64	40,62	51,65	67,02	—
SPI	DM	4,07	4,76	5,45	6,19	7,02	7,90	8,90	10,01	11,28	12,74	14,49	—
	DMA	4,78	4,96	5,52	6,21	7,02	7,92	9,12	10,42	11,88	13,71	16,05	—
	PDMA	10,79	9,53	8,88	8,56	9,01	9,73	13,21	17,00	21,09	26,09	32,14	—
ΔCS	DM	-34,60	-32,86	-30,90	-28,99	-27,32	-26,12	-25,79	-26,85	-30,48	-39,24	-61,30	—
	DMA	38,83	29,26	22,97	19,61	18,92	21,84	27,33	33,96	43,56	63,31	95,48	—
	PDMA	14,28	8,46	3,35	0,66	1,74	5,89	10,32	14,64	19,53	25,56	34,88	—

Tabela 8.270: Constantes de acoplamento TPSSB971 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	425,7	447,8	469,9	491,9	513,9	535,7	557,5	579,3	600,9	622,4	643,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	16,1	14,5	12,7	10,9	9,0	7,1	5,1	3,0	0,8	-1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,8	-77,8	-79,9	-81,9	-83,9	-86,0	-87,9	-89,9	-91,9	-93,8	-95,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,4	-4,6	-5,7	-6,8	-7,9	-9,0	-10,1	-11,2	-12,2	-13,3	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,6	47,1	47,5	47,9	48,3	48,7	49,1	49,5	49,9	50,3	50,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-7,1	-8,2	-9,2	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-14,2	-15,2	-16,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	213,2	217,1	220,6	224,0	227,0	229,9	232,5	234,9	237,0	238,9	240,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1703,6	-1679,6	-1653,0	-1624,3	-1594,0	-1562,4	-1529,7	-1496,5	-1462,7	-1428,8	-1394,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-139,2	-124,2	-109,3	-94,3	-79,5	-64,7	-50,0	-35,3	-20,7	-6,2	8,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-48,2	-30,9	-13,9	2,9	19,7	36,2	52,7	68,9	85,0	100,9	116,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-254,2	-287,5	-321,8	-358,2	-398,3	-444,5	-500,6	-573,5	-677,5	-849,1	-1221,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	139,2	139,9	140,6	141,3	141,9	142,5	143,1	143,6	144,1	144,6	145,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,4	-10,3	-11,3	-12,2	-13,1	-14,0	-14,8	-15,7	-16,5	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	210,4	213,8	217,7	222,0	226,8	232,3	238,6	245,8	254,1	263,8	275,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	275,6	276,9	278,2	279,6	281,2	282,8	284,7	286,8	289,2	292,1	295,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,5	56,1	55,5	54,8	53,8	52,5	50,9	49,0	46,6	43,7	40,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,4	9,8	10,3	11,0	11,7	12,7	13,8	15,0	16,6	18,4	20,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	80,8	83,4	86,2	89,3	92,8	96,7	101,1	106,4	112,7	120,5	130,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	172,4	173,7	175,1	176,6	178,1	179,8	181,6	183,7	186,2	189,2	193,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	-0,6	-1,7	-2,8	-4,2	-5,7	-7,4	-9,4	-11,9	-14,9	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,0	8,0	7,0	5,9	4,7	3,5	2,2	0,7	-0,9	-2,8	-5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,6	10,9	11,2	11,6	12,1	12,6	13,2	14,0	15,0	16,3	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	19,0	19,3	19,5	19,9	20,4	21,0	21,8	22,8	24,1	25,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	39,1	40,6	42,2	43,8	45,3	46,9	48,4	50,0	51,5	53,0	54,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	139,1	140,0	140,9	141,7	142,6	143,4	144,2	144,9	145,7	146,3	147,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	-4,5	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,0	-7,5	-4,7
Total	DM	-8,53	-6,52	-4,45	-2,36	-0,35	1,49	3,04	4,02	3,88	1,26	-8,92	—
	DMA	26,60	22,56	20,21	18,99	19,90	23,50	27,55	32,50	38,84	48,91	68,67	—
	PDMA	48,72	38,17	28,90	21,36	20,98	29,86	40,04	55,56	72,88	92,79	118,03	—
CPI	DM	-33,46	-29,50	-25,47	-21,47	-17,73	-14,48	-12,05	-11,17	-13,12	-21,27	-47,66	—
	DMA	49,32	39,08	32,71	28,89	29,80	36,81	44,56	53,77	65,68	85,91	128,26	—
	PDMA	59,99	43,29	29,58	17,29	15,17	32,20	49,47	67,13	85,47	106,13	132,83	—
SPI	DM	9,75	10,33	10,97	11,66	12,39	13,21	14,11	15,15	16,35	17,78	19,49	—
	DMA	9,94	10,44	11,04	11,73	12,63	13,74	15,07	16,90	19,15	21,78	24,97	—
	PDMA	40,45	34,42	28,40	24,34	25,25	28,14	33,12	47,08	63,65	83,01	107,17	—
ΔCS	DM	-43,22	-39,83	-36,45	-33,13	-30,12	-27,69	-26,17	-26,33	-29,47	-39,05	-67,15	—
	DMA	39,38	28,64	21,67	17,16	17,17	23,07	29,49	36,87	46,53	64,13	103,30	—
	PDMA	19,54	8,88	1,18	-7,05	-10,08	4,06	16,35	20,05	21,82	23,13	25,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-7,30	-5,70	-4,00	-2,28	-0,63	0,86	2,02	2,57	1,90	-1,55	-13,48	—
	DMA	26,91	23,18	21,35	20,77	22,10	25,45	29,28	34,02	40,31	50,79	72,17	—
	PDMA	19,20	15,81	14,14	13,11	14,56	19,36	25,09	31,48	38,84	47,71	60,22	—
CPI	DM	-30,49	-27,86	-25,13	-22,41	-19,97	-18,05	-17,03	-17,68	-21,43	-31,99	-62,61	—
	DMA	47,93	38,40	33,09	30,57	32,31	38,37	45,25	53,76	65,25	85,91	130,91	—
	PDMA	23,85	17,02	13,27	10,96	13,56	21,29	29,29	37,91	47,35	59,48	78,24	—
SPI	DM	10,53	11,35	12,25	13,21	14,25	15,40	16,68	18,15	19,85	21,87	24,32	—
	DMA	10,75	11,47	12,32	13,22	14,25	15,51	17,00	18,84	21,12	23,78	26,98	—
	PDMA	15,62	14,88	14,81	14,77	15,33	17,88	21,85	26,53	32,30	38,65	46,35	—
ΔCS	DM	-41,02	-39,21	-37,38	-35,62	-34,22	-33,45	-33,71	-35,83	-41,28	-53,86	-86,93	—
	DMA	37,18	26,93	20,77	17,35	18,06	22,86	28,25	34,92	44,13	62,13	103,93	—
	PDMA	8,24	2,14	-1,53	-3,81	-1,78	3,41	7,43	11,38	15,05	20,82	31,89	—

Tabela 8.271: Constantes de acoplamento TPSSB972 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	465,8	488,7	511,6	534,4	557,1	579,7	602,3	624,8	647,1	669,4	691,6	500
CO	$^1J_{CO}$	13,3	11,4	9,5	7,6	5,5	3,4	1,2	-1,0	-3,4	-5,8	-8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-82,1	-84,3	-86,4	-88,6	-90,7	-92,8	-94,9	-97,0	-99,1	-101,1	-103,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,0	-4,2	-5,4	-6,6	-7,7	-8,9	-10,0	-11,1	-12,2	-13,3	-14,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	49,2	49,6	50,0	50,5	50,9	51,3	51,6	52,0	52,4	52,7	53,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,0	-6,1	-7,3	-8,3	-9,4	-10,4	-11,5	-12,4	-13,4	-14,3	-15,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	210,4	214,7	218,7	222,5	226,1	229,4	232,5	235,3	237,9	240,3	242,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1748,5	-1723,0	-1694,9	-1664,7	-1632,7	-1599,5	-1565,4	-1530,6	-1495,5	-1460,2	-1424,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-125,6	-110,6	-95,7	-80,9	-66,1	-51,5	-37,0	-22,5	-8,1	6,1	20,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-32,3	-15,0	2,0	18,8	35,4	51,9	68,1	84,2	100,1	115,9	131,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-248,4	-281,1	-314,7	-350,6	-390,2	-436,2	-492,8	-567,8	-678,3	-871,2	-1349,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	141,3	141,9	142,6	143,2	143,7	144,3	144,8	145,3	145,7	146,2	146,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-6,8	-7,7	-8,6	-9,6	-10,5	-11,4	-12,3	-13,1	-14,0	-14,8	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	207,5	211,0	215,0	219,5	224,5	230,3	236,8	244,2	252,8	262,7	274,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	276,0	277,2	278,4	279,7	281,1	282,7	284,4	286,3	288,5	291,1	294,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	56,9	56,5	56,0	55,3	54,3	53,1	51,6	49,8	47,6	44,9	41,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,7	9,0	9,4	10,0	10,6	11,4	12,3	13,4	14,7	16,2	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	80,7	83,4	86,4	89,8	93,5	97,8	102,8	108,8	116,0	125,1	137,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	173,4	174,7	176,0	177,4	178,9	180,6	182,4	184,5	187,0	190,0	194,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,3	0,4	-0,6	-1,8	-3,1	-4,6	-6,3	-8,4	-10,9	-14,0	-18,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	10,4	9,4	8,4	7,4	6,3	5,1	3,9	2,5	0,9	-0,8	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,2	10,4	10,7	11,0	11,4	11,8	12,4	13,1	13,9	15,1	16,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,4	18,5	18,6	18,9	19,2	19,5	20,1	20,7	21,6	22,8	24,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	42,0	43,5	45,0	46,5	47,9	49,4	50,8	52,3	53,7	55,1	56,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	140,2	141,0	141,9	142,7	143,4	144,2	144,9	145,6	146,3	146,9	147,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,6	-2,1	-2,6	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,5	-4,7
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-7,41	-5,30	-3,12	-0,92	1,18	3,13	4,73	5,72	5,41	2,07	-12,05	—
	DMA	26,30	22,47	20,55	21,53	24,59	28,10	32,06	36,86	43,43	53,39	75,85	—
	PDMA	51,04	41,31	31,95	25,51	29,41	37,14	45,79	55,97	72,64	92,52	118,82	—
CPI													
	DM	-31,55	-27,35	-23,05	-18,80	-14,79	-11,32	-8,80	-7,91	-10,31	-20,22	-56,05	—
	DMA	47,57	37,85	32,59	34,13	40,35	47,28	55,07	64,42	76,93	96,84	145,55	—
	PDMA	51,09	36,47	23,19	17,14	30,45	47,34	64,71	82,40	101,22	122,32	152,13	—
SPI													
	DM	10,30	10,87	11,50	12,19	12,90	13,73	14,66	15,72	16,94	18,42	20,21	—
	DMA	10,70	11,19	11,71	12,29	13,03	14,03	15,18	16,65	18,87	21,53	24,75	—
	PDMA	51,01	44,87	38,38	31,65	28,64	29,67	31,91	36,59	51,69	70,66	94,39	—
ΔCS													
	DM	-41,85	-38,21	-34,55	-30,99	-27,69	-25,05	-23,46	-23,63	-27,25	-38,64	-76,27	—
	DMA	36,87	26,67	20,88	21,83	27,32	33,26	39,89	47,76	58,05	75,31	120,80	—
	PDMA	0,08	-8,40	-15,19	-14,51	1,81	17,67	32,81	45,81	49,53	51,66	57,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-6,83	-5,12	-3,30	-1,46	0,31	1,91	3,14	3,71	2,85	-1,40	-17,79	—
	DMA	27,16	23,67	22,32	23,93	26,71	29,94	33,69	38,39	44,97	55,33	79,77	—
	PDMA	21,97	19,51	17,56	17,01	18,50	22,01	26,28	31,96	39,41	48,46	62,25	—
CPI													
	DM	-29,98	-27,08	-24,05	-21,06	-18,31	-16,14	-14,99	-15,62	-19,85	-32,33	-73,32	—
	DMA	47,60	38,64	34,55	37,16	42,35	48,32	55,27	63,94	76,11	96,43	148,44	—
	PDMA	24,66	20,11	16,84	16,32	19,90	27,47	35,79	44,51	54,61	67,28	89,61	—
SPI													
	DM	10,98	11,78	12,66	13,62	14,63	15,80	17,09	18,58	20,31	22,38	24,93	—
	DMA	11,44	12,15	12,91	13,75	14,68	15,80	17,09	18,74	21,02	23,71	26,95	—
	PDMA	19,90	19,05	18,11	17,54	17,43	17,82	18,97	22,32	27,71	33,98	41,20	—
ΔCS													
	DM	-40,96	-38,86	-36,71	-34,68	-32,94	-31,94	-32,08	-34,20	-40,16	-54,71	-98,25	—
	DMA	36,16	26,49	21,64	23,41	27,67	32,52	38,18	45,20	55,09	72,72	121,49	—
	PDMA	4,76	1,06	-1,27	-1,22	2,47	9,65	16,82	22,19	26,89	33,30	48,41	—

Tabela 8.272: Constantes de acoplamento TPSSB98 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	412,9	435,2	457,4	479,6	501,8	523,9	545,9	567,8	589,6	611,4	633,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,5	15,9	14,2	12,5	10,7	8,8	6,9	4,9	2,8	0,7	-1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,2	-77,3	-79,3	-81,4	-83,5	-85,5	-87,6	-89,6	-91,6	-93,6	-95,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,5	-4,6	-5,8	-6,9	-8,1	-9,2	-10,3	-11,4	-12,5	-13,6	-14,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,2	47,7	48,1	48,6	49,0	49,5	49,9	50,3	50,7	51,1	51,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,4	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	219,3	223,3	226,9	230,4	233,6	236,5	239,2	241,7	244,0	246,0	247,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1719,0	-1694,2	-1666,8	-1637,4	-1606,4	-1574,2	-1541,1	-1507,3	-1473,2	-1438,9	-1404,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-139,3	-124,5	-109,8	-95,1	-80,4	-65,8	-51,2	-36,7	-22,3	-7,9	6,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-49,2	-32,2	-15,3	1,3	17,8	34,2	50,4	66,4	82,4	98,2	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-264,1	-298,7	-334,5	-372,9	-415,7	-465,9	-528,1	-611,2	-734,9	-953,4	-1507,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	142,9	143,7	144,4	145,2	145,9	146,6	147,2	147,8	148,4	149,0	149,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-9,8	-10,8	-11,8	-12,7	-13,7	-14,6	-15,5	-16,4	-17,3	-18,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	214,4	217,9	221,9	226,3	231,3	237,0	243,5	251,1	259,8	270,0	282,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	281,0	282,5	284,0	285,5	287,2	289,1	291,2	293,6	296,3	299,5	303,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,1	56,7	56,1	55,3	54,2	52,8	51,1	49,0	46,4	43,2	39,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,6	10,0	10,6	11,3	12,1	13,1	14,3	15,7	17,4	19,3	21,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	83,6	86,3	89,3	92,6	96,2	100,4	105,2	110,9	117,9	126,7	138,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	176,2	177,7	179,2	180,8	182,5	184,4	186,4	188,8	191,6	195,1	199,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,7	-1,8	-3,1	-4,5	-6,1	-7,9	-10,2	-12,9	-16,3	-20,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	9,1	8,1	7,0	5,9	4,7	3,4	2,0	0,4	-1,3	-3,5	-6,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,7	11,0	11,4	11,8	12,3	12,9	13,6	14,5	15,7	17,2	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,2	19,4	19,6	19,9	20,4	20,9	21,6	22,5	23,7	25,3	27,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	41,0	42,6	44,3	45,9	47,6	49,2	50,8	52,4	54,0	55,5	57,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	142,6	143,6	144,5	145,5	146,4	147,3	148,2	149,1	149,9	150,6	151,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-3,1	-3,6	-4,2	-4,7	-5,3	-5,8	-6,3	-6,8	-7,3	-7,9	-4,7
Total	DM	-8,78	-6,77	-4,70	-2,65	-0,69	1,06	2,42	3,07	2,27	-2,07	-19,10	—
	DMA	28,57	24,53	23,10	21,95	21,90	25,74	30,08	35,49	42,70	53,95	80,95	—
	PDMA	49,63	39,51	30,38	23,48	22,62	32,27	43,26	59,70	78,06	100,01	129,89	—
CPI	DM	-36,41	-32,52	-28,57	-24,71	-21,16	-18,22	-16,34	-16,35	-20,06	-32,43	-75,31	—
	DMA	51,70	41,34	37,10	33,33	31,85	39,18	47,46	57,53	71,23	93,86	152,76	—
	PDMA	60,70	44,40	31,44	19,11	15,47	32,64	49,93	67,76	86,84	108,69	140,82	—
SPI	DM	11,47	12,12	12,80	13,52	14,32	15,19	16,18	17,31	18,64	20,19	22,12	—
	DMA	11,61	12,21	12,84	13,61	14,60	15,89	17,34	19,33	21,77	24,69	28,29	—
	PDMA	41,52	35,93	29,60	26,69	27,87	32,00	38,36	53,79	71,62	93,64	121,88	—
ΔCS	DM	-47,88	-44,64	-41,37	-38,23	-35,48	-33,41	-32,52	-33,66	-38,70	-52,62	-97,43	—
	DMA	40,09	29,12	24,26	19,71	17,25	23,30	30,12	38,20	49,45	69,18	124,47	—
	PDMA	19,18	8,48	1,84	-7,58	-12,41	0,64	11,57	13,97	15,22	15,06	18,94	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-7,55	-5,92	-4,23	-2,53	-0,92	0,47	1,45	1,66	0,24	-5,10	-24,71	—
	DMA	29,10	25,36	24,57	24,03	24,44	28,06	32,22	37,46	44,72	56,52	86,04	—
	PDMA	19,94	16,94	15,58	14,50	16,42	22,13	28,11	34,87	42,88	52,79	68,62	—
CPI	DM	-33,63	-31,05	-28,40	-25,81	-23,56	-21,96	-21,51	-23,12	-28,81	-43,99	-92,72	—
	DMA	50,45	40,75	37,78	35,29	34,76	41,18	48,67	58,14	71,61	94,93	158,16	—
	PDMA	23,97	17,38	14,38	11,89	15,15	23,10	31,33	40,27	50,60	64,09	89,03	—
SPI	DM	12,52	13,41	14,36	15,38	16,50	17,73	19,12	20,72	22,59	24,82	27,60	—
	DMA	12,67	13,52	14,41	15,38	16,50	17,96	19,56	21,55	24,04	26,97	30,57	—
	PDMA	16,83	16,61	16,51	16,52	17,40	21,38	25,63	30,71	36,95	44,09	52,91	—
ΔCS	DM	-46,15	-44,46	-42,76	-41,19	-40,06	-39,69	-40,63	-43,84	-51,40	-68,81	-120,32	—
	DMA	37,78	27,23	23,37	19,91	18,26	23,22	29,11	36,59	47,57	67,96	127,59	—
	PDMA	7,13	0,77	-2,13	-4,63	-2,26	1,72	5,69	9,56	13,65	20,00	36,12	—

Tabela 8.273: Constantes de acoplamento TPSSLYP com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	412,8	437,7	462,7	487,7	512,7	537,7	562,7	587,6	612,6	637,5	662,5	500
CO	$^1J_{CO}$	17,5	15,9	14,1	12,4	10,5	8,6	6,6	4,6	2,4	0,3	-1,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-77,7	-80,0	-82,4	-84,8	-87,1	-89,5	-91,8	-94,1	-96,5	-98,8	-101,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,8	-6,1	-7,4	-8,7	-9,9	-11,2	-12,5	-13,7	-14,9	-16,1	-17,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	48,8	49,3	49,8	50,3	50,8	51,2	51,7	52,1	52,6	53,0	53,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,4	-8,7	-9,9	-11,1	-12,2	-13,4	-14,5	-15,6	-16,6	-17,7	-18,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	205,9	210,3	214,5	218,4	222,1	225,5	228,7	231,7	234,4	236,9	239,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1758,5	-1732,9	-1704,8	-1674,7	-1642,9	-1609,9	-1576,1	-1541,6	-1506,8	-1471,9	-1437,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-145,2	-130,5	-115,7	-101,1	-86,4	-71,8	-57,2	-42,7	-28,2	-13,8	0,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-51,7	-34,5	-17,5	-0,6	16,0	32,6	49,0	65,4	81,6	97,7	113,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-273,9	-310,1	-348,0	-389,1	-435,8	-491,5	-562,6	-661,6	-818,5	-1130,5	-2253,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	143,1	143,9	144,6	145,3	146,0	146,6	147,3	147,8	148,4	148,9	149,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,1	-11,1	-12,2	-13,2	-14,2	-15,1	-16,1	-17,1	-18,0	-18,9	-19,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	200,0	203,3	207,1	211,3	216,2	221,9	228,4	236,0	245,0	255,6	268,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	288,4	289,9	291,5	293,1	295,0	297,0	299,3	302,0	305,1	308,9	313,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	59,4	58,9	58,2	57,2	56,0	54,4	52,4	49,9	46,8	43,0	38,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,8	11,4	12,1	12,9	13,9	15,2	16,6	18,3	20,4	23,0	26,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	75,6	78,3	81,2	84,5	88,3	92,7	97,9	104,3	112,5	123,4	139,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	178,1	179,6	181,1	182,8	184,6	186,5	188,8	191,6	195,0	199,4	205,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,4	-0,6	-1,8	-3,1	-4,7	-6,5	-8,6	-11,2	-14,6	-19,0	-25,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	9,8	8,6	7,4	6,2	4,8	3,3	1,6	-0,2	-2,5	-5,4	-9,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,9	12,2	12,7	13,2	13,8	14,5	15,5	16,7	18,3	20,5	23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	21,0	21,3	21,6	22,0	22,5	23,3	24,2	25,4	27,1	29,4	32,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	38,0	39,5	41,0	42,5	44,0	45,5	47,0	48,4	49,9	51,3	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	142,6	143,5	144,4	145,4	146,2	147,1	147,9	148,7	149,5	150,2	150,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,6	-3,1	-3,7	-4,2	-4,7	-5,3	-5,8	-6,3	-6,8	-7,3	-7,8	-4,7
Total	DM	-12,03	-9,96	-7,86	-5,78	-3,83	-2,14	-0,95	-0,72	-2,57	-10,21	-48,74	—
	DMA	28,94	25,48	24,28	23,45	23,97	28,00	32,91	39,08	47,92	63,08	110,36	—
	PDMA	50,03	39,71	30,90	26,70	25,88	35,83	48,77	66,63	88,25	115,22	158,62	—
CPI	DM	-43,19	-39,14	-35,05	-31,11	-27,55	-24,78	-23,35	-24,44	-30,80	-51,30	-145,56	—
	DMA	53,65	44,65	40,92	37,78	37,48	45,18	54,61	66,45	83,53	114,63	220,20	—
	PDMA	59,45	43,21	31,33	24,37	19,28	36,66	54,86	73,74	94,28	119,45	169,20	—
SPI	DM	10,82	11,43	12,07	12,79	13,57	14,47	15,49	16,68	18,13	19,93	22,27	—
	DMA	10,82	11,43	12,07	12,93	14,07	15,40	16,99	19,00	21,81	25,27	29,81	—
	PDMA	43,12	37,13	30,59	28,41	30,72	35,22	44,29	61,42	83,83	112,12	150,86	—
ΔCS	DM	-54,01	-50,57	-47,12	-43,90	-41,13	-39,25	-38,84	-41,12	-48,93	-71,23	-167,83	—
	DMA	42,83	33,21	28,84	24,85	23,42	29,78	37,62	47,45	61,71	89,35	190,39	—
	PDMA	16,34	6,08	0,73	-4,04	-11,44	1,44	10,57	12,32	10,45	7,33	18,34	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-11,15	-9,46	-7,72	-6,00	-4,38	-3,05	-2,25	-2,51	-5,06	-14,08	-57,89	—
	DMA	29,37	26,30	25,78	25,63	26,85	30,67	35,42	41,49	50,54	66,65	118,96	—
	PDMA	17,97	15,37	14,79	17,02	20,07	26,08	32,72	40,05	49,29	61,65	87,08	—
CPI	DM	-40,84	-38,10	-35,30	-32,66	-30,41	-29,02	-29,09	-31,92	-40,54	-64,70	-170,00	—
	DMA	52,34	44,16	41,76	40,00	41,13	47,94	56,67	68,06	85,22	117,82	232,34	—
	PDMA	20,93	14,53	12,79	16,40	20,54	28,59	37,68	47,51	59,31	76,26	120,26	—
SPI	DM	11,69	12,57	13,49	14,51	15,65	16,93	18,40	20,12	22,23	24,86	28,35	—
	DMA	11,69	12,57	13,49	14,57	15,86	17,38	19,08	21,05	23,86	27,29	31,74	—
	PDMA	15,69	16,01	16,32	17,49	19,71	24,15	28,89	34,30	41,58	50,41	61,56	—
ΔCS	DM	-52,53	-50,67	-48,79	-47,17	-46,06	-45,95	-47,49	-52,04	-62,77	-89,56	-198,35	—
	DMA	40,65	31,59	28,27	25,43	25,27	30,56	37,59	47,01	61,36	90,53	200,60	—
	PDMA	5,24	-1,47	-3,53	-1,09	0,83	4,45	8,79	13,21	17,74	25,85	58,70	—

Tabela 8.274: Constantes de acoplamento TPSSP86 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	366,7	390,3	413,9	437,5	461,0	484,6	508,2	531,8	555,3	578,8	602,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,3	19,9	18,4	16,9	15,3	13,7	12,0	10,2	8,5	6,6	4,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,0	-71,3	-73,5	-75,7	-77,9	-80,1	-82,3	-84,5	-86,7	-88,9	-91,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,8	-5,0	-6,2	-7,3	-8,4	-9,6	-10,7	-11,8	-12,9	-14,0	-15,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,5	44,0	44,5	44,9	45,3	45,8	46,2	46,6	47,0	47,4	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-7,8	-8,9	-10,0	-11,0	-12,0	-13,0	-14,0	-14,9	-15,9	-16,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	181,6	185,7	189,5	193,1	196,5	199,6	202,6	205,3	207,8	210,0	212,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1750,1	-1724,2	-1695,8	-1665,4	-1633,5	-1600,4	-1566,5	-1532,0	-1497,2	-1462,3	-1427,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,6	-140,5	-126,3	-112,2	-98,1	-84,0	-70,0	-56,0	-42,0	-28,0	-14,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-65,6	-48,9	-32,5	-16,1	0,0	16,1	32,0	47,9	63,6	79,3	94,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-281,7	-318,4	-356,8	-398,6	-445,9	-502,3	-573,9	-672,4	-825,0	-1113,3	-1973,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,4	128,0	128,7	129,3	129,9	130,5	131,1	131,6	132,1	132,6	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-11,0	-12,0	-12,9	-13,8	-14,7	-15,5	-16,4	-17,2	-18,0	-18,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,2	190,1	193,4	197,2	201,6	206,7	212,7	219,7	228,0	238,0	250,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	260,6	261,9	263,4	264,9	266,7	268,6	270,8	273,5	276,6	280,5	285,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,5	56,1	55,5	54,7	53,5	52,1	50,2	47,8	44,7	40,9	35,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,3	12,0	12,9	13,9	15,2	16,8	18,6	20,8	23,6	26,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,3	69,8	72,5	75,5	79,0	83,2	88,3	94,7	103,2	115,2	133,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	159,8	161,1	162,6	164,1	165,8	167,8	170,0	172,8	176,4	181,5	189,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,1	-0,8	-1,9	-3,2	-4,6	-6,4	-8,5	-11,2	-14,8	-19,8	-27,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,8	6,8	5,6	4,4	3,0	1,5	-0,2	-2,3	-4,9	-8,4	-13,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,9	11,3	11,8	12,3	13,0	13,8	14,9	16,4	18,3	21,2	25,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,6	20,0	20,5	21,2	22,0	23,1	24,6	26,6	29,7	34,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,9	33,3	34,7	36,1	37,5	38,8	40,2	41,5	42,8	44,1	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,4	128,3	129,1	129,9	130,7	131,5	132,3	133,0	133,7	134,3	135,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,8	-3,3	-3,8	-4,3	-4,8	-5,3	-5,7	-6,2	-6,7	-7,1	-7,6	-4,7
Total													
Total	DM	-19,59	-17,64	-15,66	-13,71	-11,89	-10,32	-9,23	-9,07	-10,84	-17,58	-45,89	—
	DMA	26,88	23,57	21,84	20,60	19,91	19,82	23,43	29,64	38,20	52,47	90,58	—
	PDMA	48,66	38,36	28,19	21,49	19,35	22,19	37,78	56,47	78,61	107,36	152,34	—
CPI													
CPI	DM	-50,85	-47,01	-43,15	-39,44	-36,15	-33,59	-32,39	-33,62	-39,76	-58,29	-128,80	—
	DMA	58,33	50,12	45,49	41,51	38,42	36,32	42,57	54,09	70,44	99,11	182,13	—
	PDMA	72,83	56,90	42,41	29,11	21,28	15,74	32,34	50,46	69,94	93,72	134,69	—
SPI													
SPI	DM	3,33	3,89	4,50	5,15	5,90	6,75	7,76	8,93	10,37	12,28	14,91	—
	DMA	3,83	4,11	4,50	5,27	6,34	7,72	9,40	11,71	14,55	18,27	23,45	—
	PDMA	30,93	24,76	17,75	15,90	17,94	26,93	41,77	60,87	84,96	117,37	165,29	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-54,19	-50,90	-47,65	-44,59	-42,05	-40,34	-40,15	-42,55	-50,13	-70,57	-143,71	—
	DMA	54,50	46,01	40,99	36,24	32,08	28,60	33,17	42,38	55,88	80,84	158,67	—
	PDMA	41,90	32,14	24,66	13,21	3,35	-11,19	-9,44	-10,41	-15,02	-23,65	-30,60	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-18,99	-17,43	-15,80	-14,20	-12,72	-11,50	-10,80	-11,10	-13,52	-21,44	-53,57	—
	DMA	26,54	23,60	22,46	21,81	21,73	22,15	25,38	31,49	40,21	55,30	97,15	—
	PDMA	16,72	13,43	10,95	9,86	12,22	16,01	22,01	29,66	38,70	50,98	73,57	—
CPI													
CPI	DM	-47,88	-45,32	-42,71	-40,27	-38,26	-37,06	-37,33	-40,27	-48,60	-70,55	-149,66	—
	DMA	56,10	48,74	45,29	42,55	40,76	39,84	45,13	56,21	72,62	102,59	192,36	—
	PDMA	26,38	19,99	14,98	11,29	13,41	16,58	24,24	33,57	44,53	60,23	94,96	—
SPI													
SPI	DM	3,23	4,02	4,90	5,85	6,92	8,15	9,62	11,34	13,47	16,33	20,35	—
	DMA	3,80	4,27	4,90	5,86	7,09	8,54	10,18	12,48	15,28	18,92	23,91	—
	PDMA	9,28	8,39	7,85	8,76	11,30	15,58	20,29	26,64	34,21	43,87	57,11	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-51,11	-49,34	-47,61	-46,12	-45,18	-45,21	-46,95	-51,61	-62,07	-86,88	-170,01	—
	DMA	52,30	44,47	40,39	36,69	33,67	31,30	34,95	43,73	57,34	83,67	168,45	—
	PDMA	17,10	11,60	7,14	2,53	2,11	1,00	3,95	6,93	10,32	16,36	37,85	—

Tabela 8.275: Constantes de acoplamento TPSSPBE com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	362,6	386,7	410,8	434,9	459,0	483,1	507,2	531,3	555,3	579,3	603,3	500
CO	$^1J_{CO}$	21,9	20,5	19,0	17,5	15,9	14,2	12,6	10,8	9,0	7,2	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-68,9	-71,2	-73,5	-75,8	-78,0	-80,3	-82,5	-84,8	-87,0	-89,2	-91,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,3	-5,5	-6,7	-7,9	-9,1	-10,3	-11,4	-12,6	-13,7	-14,8	-15,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,7	44,2	44,7	45,1	45,6	46,0	46,5	46,9	47,3	47,8	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,3	-8,5	-9,6	-10,7	-11,7	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-16,7	-17,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	182,5	186,8	190,8	194,5	198,0	201,3	204,4	207,2	209,8	212,2	214,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1754,3	-1727,6	-1698,5	-1667,5	-1635,0	-1601,4	-1567,0	-1532,1	-1496,9	-1461,6	-1426,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-155,5	-141,2	-127,0	-112,7	-98,5	-84,3	-70,1	-56,0	-41,9	-27,8	-13,8	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-66,4	-49,7	-33,1	-16,6	-0,3	15,8	31,9	47,8	63,7	79,5	95,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-284,3	-321,9	-361,5	-404,8	-454,1	-513,5	-589,7	-696,6	-867,3	-1209,6	-2453,2	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	128,5	129,2	129,9	130,6	131,2	131,8	132,4	133,0	133,5	134,0	134,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,9	-11,8	-12,8	-13,7	-14,7	-15,6	-16,5	-17,3	-18,2	-19,0	-19,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	186,7	189,8	193,4	197,5	202,2	207,8	214,3	222,1	231,4	242,9	257,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	263,7	265,2	266,8	268,6	270,5	272,8	275,4	278,6	282,4	287,2	293,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	56,5	56,0	55,2	54,2	52,8	51,1	48,8	45,9	42,2	37,4	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,4	12,1	12,9	13,9	15,2	16,7	18,5	20,7	23,3	26,7	30,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	67,4	70,0	72,9	76,2	80,1	84,8	90,6	98,2	108,6	124,2	150,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	161,6	163,0	164,6	166,3	168,2	170,4	173,1	176,4	180,9	187,7	199,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,4	-1,5	-2,7	-4,1	-5,8	-7,8	-10,2	-13,5	-18,0	-24,7	-36,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	7,4	6,2	4,9	3,6	2,1	0,4	-1,6	-4,0	-7,3	-11,9	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,3	11,7	12,2	12,9	13,7	14,7	16,1	17,9	20,5	24,4	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	20,0	20,4	20,8	21,4	22,2	23,2	24,6	26,5	29,2	33,5	41,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	31,9	33,3	34,7	36,1	37,5	38,9	40,3	41,6	43,0	44,3	45,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	128,7	129,6	130,5	131,3	132,2	133,0	133,8	134,5	135,3	136,0	136,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,7	-7,1	-7,6	-8,1	-4,7
Total	DM	-19,80	-17,80	-15,79	-13,80	-11,96	-10,41	-9,37	-9,38	-11,65	-20,14	-62,67	—
	DMA	27,33	24,22	22,64	21,66	21,06	21,17	25,09	31,85	41,47	58,39	112,44	—
	PDMA	46,94	36,10	26,88	23,53	23,00	28,99	46,23	67,02	92,83	128,10	190,22	—
CPI	DM	-51,93	-48,03	-44,14	-40,45	-37,19	-34,83	-33,89	-35,80	-43,49	-66,78	-172,10	—
	DMA	58,87	51,08	46,65	42,90	39,77	37,81	44,24	56,56	74,62	108,24	226,41	—
	PDMA	72,60	56,70	42,22	31,56	23,13	17,42	34,20	52,73	73,06	98,43	151,26	—
SPI	DM	3,77	4,36	5,00	5,73	6,54	7,49	8,62	9,99	11,71	14,07	17,57	—
	DMA	4,19	4,52	5,04	6,08	7,34	8,97	11,05	13,73	17,16	21,84	28,87	—
	PDMA	28,13	21,00	15,63	17,64	22,90	37,48	55,05	77,50	107,34	149,85	218,79	—
ΔCS	DM	-55,69	-52,39	-49,14	-46,18	-43,73	-42,32	-42,51	-45,79	-55,20	-80,85	-189,67	—
	DMA	54,68	46,56	41,61	36,82	32,43	28,84	33,19	42,83	57,46	86,40	197,54	—
	PDMA	44,47	35,70	26,58	13,92	0,23	-20,06	-20,85	-24,76	-34,28	-51,42	-67,53	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-19,15	-17,52	-15,86	-14,21	-12,70	-11,49	-10,81	-11,28	-14,19	-23,98	-71,93	—
	DMA	27,04	24,36	23,38	22,98	22,99	23,58	27,12	33,83	43,67	61,62	121,21	—
	PDMA	16,21	13,06	10,99	11,90	15,03	19,16	25,85	34,24	44,42	58,87	89,72	—
CPI	DM	-48,98	-46,36	-43,74	-41,33	-39,38	-38,39	-38,97	-42,66	-52,71	-79,91	-197,33	—
	DMA	56,62	49,72	46,50	44,03	42,22	41,51	46,97	58,94	77,21	112,61	241,03	—
	PDMA	25,59	19,24	14,37	13,65	15,24	18,62	26,35	36,14	47,89	65,27	112,92	—
SPI	DM	3,80	4,66	5,59	6,65	7,82	9,21	10,85	12,86	15,45	19,04	24,54	—
	DMA	4,29	4,85	5,59	6,78	8,19	9,79	11,85	14,51	17,86	22,39	29,05	—
	PDMA	8,99	8,30	8,38	10,56	14,86	19,58	25,47	32,77	41,75	53,94	71,87	—
ΔCS	DM	-52,78	-51,02	-49,33	-47,98	-47,20	-47,60	-49,82	-55,52	-68,16	-98,95	-221,87	—
	DMA	52,33	44,87	40,91	37,25	34,03	31,72	35,12	44,43	59,35	90,22	211,98	—
	PDMA	16,61	10,94	5,99	3,09	0,38	-0,96	0,88	3,37	6,15	11,33	41,06	—

Tabela 8.276: Constantes de acoplamento TPSSPW91 com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	365,5	389,5	413,7	437,8	461,9	486,0	510,1	534,2	558,3	582,3	606,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,7	20,3	18,8	17,2	15,6	13,9	12,2	10,5	8,7	6,8	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,3	-71,6	-73,9	-76,2	-78,5	-80,7	-83,0	-85,2	-87,5	-89,7	-91,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-5,6	-6,7	-7,9	-9,1	-10,3	-11,4	-12,6	-13,7	-14,9	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,9	44,4	44,9	45,3	45,8	46,3	46,7	47,1	47,6	48,0	48,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,5	-9,6	-10,7	-11,8	-12,8	-13,8	-14,8	-15,8	-16,8	-17,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,4	187,7	191,7	195,5	199,0	202,4	205,4	208,3	210,9	213,3	215,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1757,4	-1730,7	-1701,5	-1670,4	-1637,7	-1604,0	-1569,5	-1534,4	-1499,1	-1463,8	-1428,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-154,6	-140,3	-126,0	-111,8	-97,5	-83,3	-69,0	-54,9	-40,7	-26,6	-12,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-65,5	-48,7	-32,0	-15,6	0,7	17,0	33,1	49,1	65,0	80,8	96,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-284,0	-321,6	-361,1	-404,4	-453,8	-513,2	-589,6	-697,0	-869,3	-1217,5	-2525,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,1	129,9	130,6	131,2	131,9	132,5	133,1	133,7	134,2	134,7	135,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-11,8	-12,8	-13,7	-14,7	-15,6	-16,5	-17,4	-18,2	-19,0	-19,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,0	191,1	194,7	198,9	203,7	209,3	215,9	223,7	233,1	244,7	259,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,9	266,4	268,0	269,8	271,8	274,1	276,7	279,9	283,7	288,5	294,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,5	56,0	55,3	54,2	52,8	51,1	48,8	45,9	42,2	37,4	31,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,4	12,0	12,9	13,9	15,1	16,6	18,4	20,6	23,2	26,6	30,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,0	70,6	73,5	76,9	80,8	85,5	91,4	99,1	109,6	125,4	152,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,4	163,9	165,4	167,2	169,1	171,3	174,0	177,3	181,9	188,7	200,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-1,5	-2,7	-4,1	-5,8	-7,8	-10,3	-13,5	-18,0	-24,8	-36,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	7,4	6,2	5,0	3,6	2,1	0,4	-1,5	-4,0	-7,2	-11,8	-19,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,7	12,2	12,9	13,7	14,7	16,0	17,8	20,4	24,3	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,0	20,3	20,8	21,4	22,2	23,2	24,5	26,4	29,2	33,4	40,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,4	33,8	35,2	36,6	38,0	39,4	40,7	42,1	43,4	44,8	46,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,3	130,2	131,1	132,0	132,9	133,7	134,5	135,2	136,0	136,7	137,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,7	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,7	-7,2	-7,6	-8,1	-4,7
Total													
Total	DM	-19,50	-17,50	-15,45	-13,47	-11,62	-10,04	-9,01	-9,02	-11,32	-20,04	-65,03	—
	DMA	27,38	24,27	22,80	21,82	21,25	21,51	25,70	32,48	42,18	59,35	115,74	—
	PDMA	46,58	35,70	26,88	23,37	22,98	29,58	46,88	67,73	93,49	129,02	191,82	—
CPI													
CPI	DM	-51,73	-47,82	-43,87	-40,19	-36,94	-34,51	-33,61	-35,51	-43,32	-67,18	-178,33	—
	DMA	58,60	50,78	46,47	42,74	39,65	38,04	45,12	57,47	75,70	109,87	233,56	—
	PDMA	71,51	55,67	41,32	30,69	22,66	18,40	35,48	54,03	74,44	100,25	155,08	—
SPI													
SPI	DM	4,13	4,73	5,39	6,13	6,95	7,91	9,03	10,40	12,15	14,53	18,05	—
	DMA	4,48	4,83	5,43	6,48	7,75	9,39	11,45	14,16	17,60	22,30	29,34	—
	PDMA	28,29	21,05	16,28	18,00	23,20	37,78	55,24	77,78	107,46	150,11	218,77	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-55,86	-52,55	-49,27	-46,32	-43,89	-42,42	-42,64	-45,91	-55,46	-81,71	-196,37	—
	DMA	54,12	45,96	41,04	36,26	31,89	28,65	33,66	43,31	58,10	87,57	204,22	—
	PDMA	43,23	34,63	25,05	12,69	-0,54	-19,38	-19,76	-23,75	-33,02	-49,87	-63,69	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total													
Total	DM	-18,85	-17,22	-15,53	-13,87	-12,35	-11,12	-10,47	-10,93	-13,88	-23,93	-74,66	—
	DMA	27,14	24,46	23,60	23,20	23,24	23,91	27,75	34,48	44,42	62,64	124,89	—
	PDMA	16,05	12,89	11,11	12,01	15,29	19,48	26,25	34,66	44,97	59,54	91,32	—
CPI													
CPI	DM	-48,85	-46,23	-43,56	-41,15	-39,20	-38,16	-38,78	-42,47	-52,65	-80,48	-204,32	—
	DMA	56,41	49,49	46,42	43,95	42,18	41,64	47,82	59,81	78,27	114,28	248,76	—
	PDMA	25,00	18,78	14,12	13,36	15,40	18,91	26,96	36,70	48,55	66,41	116,19	—
SPI													
SPI	DM	4,22	5,09	6,04	7,11	8,30	9,68	11,32	13,34	15,95	19,57	25,08	—
	DMA	4,62	5,20	6,04	7,25	8,67	10,27	12,32	15,00	18,38	22,92	29,60	—
	PDMA	9,17	8,36	8,79	10,97	15,21	19,93	25,71	33,10	42,22	54,26	72,19	—
ΔCS													
ΔCS	DM	-53,07	-51,32	-49,60	-48,26	-47,50	-47,84	-50,10	-55,81	-68,60	-100,05	-229,40	—
	DMA	51,79	44,29	40,38	36,70	33,51	31,37	35,50	44,81	59,89	91,36	219,16	—
	PDMA	15,83	10,42	5,33	2,39	0,19	-1,02	1,25	3,60	6,33	12,15	44,00	—

Tabela 8.277: Constantes de acoplamento TPSSTPSS com base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	366,0	390,6	415,1	439,7	464,2	488,7	513,1	537,4	561,6	585,8	610,0	500
CO	$^1J_{CO}$	21,7	20,3	18,8	17,3	15,7	14,0	12,3	10,5	8,7	6,8	4,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,2	-72,5	-74,9	-77,3	-79,6	-82,0	-84,3	-86,6	-88,9	-91,1	-93,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,0	-5,3	-6,6	-7,8	-9,1	-10,3	-11,5	-12,7	-13,9	-15,1	-16,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,3	45,8	46,4	46,9	47,3	47,8	48,3	48,8	49,2	49,7	50,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,9	-8,1	-9,3	-10,4	-11,6	-12,7	-13,8	-14,9	-15,9	-17,0	-17,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	195,7	200,5	205,0	209,3	213,4	217,2	220,8	224,1	227,2	230,0	232,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1757,5	-1731,7	-1703,3	-1673,0	-1641,1	-1608,0	-1574,1	-1539,7	-1504,9	-1470,0	-1435,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-156,7	-142,5	-128,4	-114,3	-100,2	-86,1	-72,1	-58,1	-44,2	-30,3	-16,4	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-63,8	-47,2	-30,7	-14,3	1,8	17,8	33,8	49,6	65,2	80,8	96,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-282,7	-320,1	-359,5	-402,5	-451,3	-510,0	-585,2	-690,4	-857,9	-1192,7	-2403,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	138,0	138,8	139,6	140,4	141,1	141,9	142,6	143,2	143,8	144,4	144,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,2	-11,3	-12,4	-13,4	-14,5	-15,5	-16,5	-17,4	-18,4	-19,3	-20,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,5	190,8	194,6	198,9	203,9	209,8	216,7	225,0	234,9	247,0	262,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	280,6	282,3	284,1	286,1	288,3	290,8	293,7	297,1	301,3	306,4	312,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	58,3	57,7	56,9	55,8	54,3	52,4	50,0	46,9	43,0	38,0	31,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	12,0	12,6	13,5	14,5	15,7	17,3	19,1	21,4	24,1	27,5	31,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	68,8	71,5	74,5	78,0	82,1	87,0	93,1	100,9	111,6	127,4	153,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	172,7	174,3	176,1	178,0	180,1	182,5	185,3	188,9	193,6	200,5	211,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,6	-1,7	-3,0	-4,5	-6,2	-8,3	-10,9	-14,3	-18,9	-25,6	-36,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	9,4	8,2	6,8	5,4	3,8	2,0	0,0	-2,5	-5,8	-10,3	-17,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,0	12,5	13,0	13,7	14,5	15,5	16,9	18,6	21,1	24,9	31,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	22,1	22,5	22,9	23,5	24,2	25,2	26,6	28,4	31,1	35,2	42,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,9	34,4	35,8	37,2	38,7	40,1	41,5	42,9	44,2	45,6	46,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	137,9	138,9	140,0	141,0	141,9	142,9	143,8	144,7	145,5	146,3	147,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-4,7
Total	DM	-16,92	-14,90	-12,86	-10,83	-8,96	-7,34	-6,24	-6,16	-8,28	-16,47	-57,72	—
	DMA	29,51	26,71	25,40	24,44	23,91	24,23	28,44	35,26	44,86	61,59	113,73	—
	PDMA	51,70	41,22	32,92	29,32	28,23	30,82	48,29	69,59	95,67	130,80	191,26	—
CPI	DM	-50,36	-46,46	-42,57	-38,85	-35,58	-33,14	-32,15	-33,90	-41,34	-64,00	-166,33	—
	DMA	59,09	51,88	47,75	44,01	40,98	39,65	46,85	59,14	76,97	110,00	223,67	—
	PDMA	72,03	56,46	41,98	30,62	22,83	19,94	36,81	55,37	75,56	100,96	152,58	—
SPI	DM	7,60	8,24	8,93	9,71	10,56	11,57	12,76	14,18	15,97	18,39	21,93	—
	DMA	7,81	8,25	9,01	10,09	11,39	12,92	14,93	17,75	21,31	26,09	33,11	—
	PDMA	36,79	30,05	26,27	28,37	32,19	38,80	56,71	80,01	110,42	152,68	219,63	—
ΔCS	DM	-57,96	-54,70	-51,51	-48,55	-46,14	-44,71	-44,91	-48,08	-57,30	-82,39	-188,25	—
	DMA	51,28	43,63	38,74	33,92	29,60	26,73	31,92	41,38	55,66	83,91	190,56	—
	PDMA	35,25	26,41	15,71	2,25	-9,36	-18,86	-19,90	-24,64	-34,87	-51,73	-67,05	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄													
Total	DM	-16,09	-14,43	-12,72	-11,02	-9,46	-8,15	-7,40	-7,74	-10,47	-19,92	-66,43	—
	DMA	29,54	27,20	26,51	26,13	26,22	27,00	30,86	37,63	47,46	65,20	122,68	—
	PDMA	18,92	16,15	14,37	14,99	18,37	22,77	29,39	38,00	48,40	62,94	93,09	—
CPI	DM	-47,52	-44,89	-42,26	-39,80	-37,82	-36,73	-37,24	-40,75	-50,49	-76,98	-191,09	—
	DMA	57,12	50,85	47,96	45,48	43,76	43,33	49,66	61,59	79,65	114,42	237,91	—
	PDMA	26,70	20,64	15,72	14,15	16,31	20,06	27,96	37,84	49,64	67,18	113,64	—
SPI	DM	8,08	9,00	10,01	11,12	12,36	13,83	15,55	17,65	20,32	23,98	29,46	—
	DMA	8,33	9,02	10,01	11,25	12,73	14,43	16,40	19,20	22,70	27,35	34,05	—
	PDMA	12,93	12,69	13,34	15,63	19,94	24,85	30,50	38,13	47,44	59,67	77,27	—
ΔCS	DM	-55,60	-53,89	-52,27	-50,92	-50,18	-50,56	-52,79	-58,40	-70,81	-100,96	-220,55	—
	DMA	48,79	41,83	37,95	34,23	31,03	28,90	33,26	42,39	56,95	87,07	203,86	—
	PDMA	13,77	7,94	2,38	-1,49	-3,63	-4,79	-2,54	-0,29	2,21	7,51	36,37	—

Tabela 8.278: Valores de PDMA total obtidos para troca TPSS com base HuzIII-su3.

E_X^{HF} (%)	0%	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
TPSSB95	53,1	42,4	32,4	23,4	17,9	16,8	25,7	38,9	54,0	71,5	92,6
TPSSB98	50,6	39,9	29,9	24,5	23,0	31,5	44,1	61,0	79,7	102,2	132,9
TPSSB971	49,7	39,0	28,6	22,1	19,9	29,2	40,7	56,6	74,2	94,5	120,6
TPSSB972	52,1	42,3	32,5	23,7	27,2	35,0	43,6	54,6	71,9	92,1	119,3
TPSSLYP	51,1	40,4	31,8	28,3	27,3	34,2	48,5	67,1	89,1	116,9	161,6
TPSSP86	49,9	38,6	28,7	23,7	21,4	24,9	38,3	57,2	79,7	109,6	156,5
TPSSPBE	47,8	36,5	28,7	26,3	26,5	31,8	46,8	68,2	94,5	131,1	195,8
TPSSPW91	47,6	36,2	28,7	26,0	26,1	31,5	47,5	68,7	95,3	131,9	197,7
TPSSTPSS	52,5	41,3	34,2	31,7	30,4	33,0	49,1	70,7	97,5	133,9	197,2

8.4.2 Geometrias Otimizadas

Tabela 8.279: Constantes de acoplamento BB95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	478,2	515,6	552,4	588,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,8	12,6	9,4	6,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-79,1	-83,5	-87,4	-91,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-7,3	-8,1	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,9	46,1	47,2	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,8	-10,5	-11,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	177,8	187,5	196,8	205,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1527,7	-1500,6	-1466,8	-1427,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-121,3	-98,9	-77,2	-56,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-23,4	2,1	26,6	50,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-244,3	-221,1	-199,3	-179,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,3	125,2	126,0	126,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,4	-13,1	-13,7	-14,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,1	199,1	202,4	205,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,3	253,7	254,3	254,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,7	55,5	55,1	54,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,5	11,1	11,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,4	72,1	74,9	77,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,6	156,8	158,0	159,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,0	-3,0	-4,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,6	1,9	1,1	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,0	13,4	13,8	14,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,7	19,9	20,2	20,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,9	34,7	36,6	38,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,2	124,3	125,2	126,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-4,1	-4,5	-5,0	-4,7
Total	DM	-3,89	1,75	7,52	13,35	—
	DMA	11,53	9,19	10,91	15,62	—
	PDMA	19,46	10,96	15,02	28,67	—
CPI	DM	-12,35	0,16	12,93	25,77	—
	DMA	23,15	17,44	20,44	30,14	—
	PDMA	32,39	15,62	19,55	41,83	—
SPI	DM	2,31	2,92	3,56	4,25	—
	DMA	3,02	3,15	3,92	4,98	—
	PDMA	9,97	7,55	11,69	19,02	—
ΔCS	DM	-14,66	-2,76	9,37	21,53	—
	DMA	20,13	14,29	16,52	25,16	—
	PDMA	22,42	8,06	7,86	22,81	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-2,80	2,54	8,08	13,72	—
	DMA	11,30	9,80	11,75	15,97	—
	PDMA	7,94	7,17	10,26	15,53	—
CPI	DM	-9,74	1,47	13,06	24,83	—
	DMA	21,62	17,89	21,32	29,63	—
	PDMA	10,03	8,58	13,77	22,54	—
SPI	DM	2,55	3,37	4,25	5,18	—
	DMA	3,36	3,57	4,38	5,47	—
	PDMA	6,33	6,10	7,55	10,13	—
ΔCS	DM	-12,29	-1,90	8,81	19,65	—
	DMA	18,26	14,32	16,94	24,16	—
	PDMA	3,70	2,48	6,22	12,42	—

Tabela 8.280: Constantes de acoplamento BB971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	450,1	486,4	522,2	557,3	500,0
CO	$^1J_{CO}$	16,2	12,8	9,4	6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-76,4	-80,6	-84,5	-88,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,5	-6,2	-7,0	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,2	46,4	47,7	48,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,3	-9,1	-9,7	-10,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	196,4	205,6	214,3	222,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1594,4	-1571,5	-1540,1	-1502,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-125,5	-101,5	-78,1	-55,5	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-30,2	-3,9	22,8	47,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-258,8	-237,9	-217,5	-198,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	131,7	132,8	133,9	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,7	-12,5	-13,2	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	215,3	218,8	222,6	226,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	263,7	264,4	265,2	266,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,2	53,9	53,5	52,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,6	10,1	10,6	11,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	80,6	83,9	87,2	90,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	163,0	164,4	165,9	167,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,5	-2,5	-3,5	-4,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,0	2,2	1,4	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,6	13,0	13,4	13,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,2	19,4	19,7	20,1	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	36,7	38,9	41,2	43,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	130,7	132,0	133,2	134,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,4	-3,9	-4,4	-4,9	-4,7
Total	DM	-5,10	0,40	6,20	12,09	—
	DMA	17,23	14,58	14,85	18,67	—
	PDMA	24,13	14,46	15,59	29,50	—
CPI	DM	-21,10	-9,13	3,51	16,33	—
	DMA	31,66	24,35	23,53	30,91	—
	PDMA	39,75	21,52	15,75	38,05	—
SPI	DM	6,64	7,39	8,17	8,99	—
	DMA	6,64	7,41	8,49	9,69	—
	PDMA	12,68	9,29	15,48	23,23	—
ΔCS	DM	-27,74	-16,51	-4,66	7,34	—
	DMA	25,02	16,93	15,03	21,22	—
	PDMA	27,07	12,23	0,28	14,82	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-3,87	1,28	6,76	12,41	—
	DMA	17,44	15,65	16,37	19,50	—
	PDMA	11,23	10,50	11,67	16,43	—
CPI	DM	-18,69	-8,15	3,08	14,67	—
	DMA	30,31	24,89	25,10	30,71	—
	PDMA	13,59	11,07	12,13	19,92	—
SPI	DM	7,54	8,54	9,58	10,68	—
	DMA	7,54	8,54	9,65	10,88	—
	PDMA	9,40	10,06	11,32	13,75	—
ΔCS	DM	-26,23	-16,69	-6,50	3,99	—
	DMA	22,77	16,35	15,45	19,83	—
	PDMA	4,19	1,01	0,81	6,18	—

Tabela 8.281: Constantes de acoplamento B971P86 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	380,4	430,1	480,2	529,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,5	15,6	11,7	7,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-62,9	-69,2	-75,5	-81,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-6,8	-7,9	-9,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,6	39,0	41,4	43,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-9,2	-10,3	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	143,8	158,8	173,9	189,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1497,3	-1487,3	-1467,1	-1435,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-140,4	-111,6	-84,1	-57,5	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-53,0	-19,0	13,5	44,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-344,8	-306,3	-268,3	-232,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	111,2	114,1	117,1	120,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-11,8	-13,1	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,7	190,8	197,3	204,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	228,0	232,8	238,0	243,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	52,8	52,2	51,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	11,5	12,6	14,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,8	70,6	75,7	81,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	139,3	143,2	147,4	151,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,6	-2,1	-3,9	-5,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	2,2	0,7	-0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,6	11,5	12,7	14,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,4	18,3	19,3	20,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,6	32,5	35,2	38,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	110,5	113,5	116,6	119,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,8	-3,6	-4,3	-5,1	-4,7
Total	DM	-16,42	-9,02	-1,31	6,74	—
	DMA	19,85	11,97	7,07	9,90	—
	PDMA	36,90	17,93	12,63	30,62	—
CPI	DM	-33,91	-18,80	-3,04	13,29	—
	DMA	38,22	21,04	9,73	15,75	—
	PDMA	61,75	30,49	8,18	32,40	—
SPI	DM	-3,59	-1,85	-0,04	1,93	—
	DMA	6,39	5,32	5,12	5,61	—
	PDMA	18,67	8,71	15,89	29,31	—
ΔCS	DM	-30,32	-16,95	-3,00	11,36	—
	DMA	31,83	15,72	4,61	10,13	—
	PDMA	43,08	21,78	-7,71	3,10	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-15,73	-8,73	-1,28	6,61	—
	DMA	19,36	12,03	7,79	9,61	—
	PDMA	16,66	9,68	8,10	13,77	—
CPI	DM	-30,50	-17,28	-3,19	11,64	—
	DMA	35,24	19,74	10,55	14,34	—
	PDMA	22,59	10,88	8,00	15,77	—
SPI	DM	-4,36	-2,15	0,19	2,74	—
	DMA	7,15	6,11	5,67	5,97	—
	PDMA	12,09	8,76	8,18	12,23	—
ΔCS	DM	-26,14	-15,13	-3,38	8,90	—
	DMA	28,09	13,63	4,88	8,37	—
	PDMA	10,50	2,12	-0,17	3,55	—

Tabela 8.282: Constantes de acoplamento B971PBE com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	382,1	432,5	483,1	533,3	500,0
CO	$^1J_{CO}$	19,9	16,0	12,1	8,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-63,3	-69,7	-76,0	-82,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,3	-7,3	-8,5	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	36,7	39,2	41,6	43,9	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,8	-9,8	-10,9	-12,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	144,2	159,6	174,9	190,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1502,1	-1491,0	-1470,1	-1438,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-140,6	-111,7	-84,0	-57,5	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-53,0	-18,9	13,7	45,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-338,2	-299,9	-262,1	-226,4	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	111,9	114,9	118,0	121,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,2	-12,5	-13,9	-15,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	184,4	190,8	197,6	205,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	230,4	235,5	241,0	246,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,0	52,5	51,7	50,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,4	12,4	13,6	15,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	66,0	70,9	76,4	82,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	140,6	144,7	149,0	153,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,3	-2,9	-4,8	-7,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,8	1,5	0,0	-1,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,0	12,0	13,3	14,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	18,0	19,0	20,2	21,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,6	32,4	35,2	38,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	111,3	114,4	117,6	120,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,9	-4,7	-5,5	-4,7
Total	DM	-16,14	-8,63	-0,81	7,32	—
	DMA	19,34	11,47	7,21	10,31	—
	PDMA	33,63	18,48	16,21	36,52	—
CPI	DM	-33,66	-18,35	-2,46	13,99	—
	DMA	37,77	20,35	10,19	16,65	—
	PDMA	60,52	29,07	9,15	34,10	—
SPI	DM	-3,29	-1,49	0,41	2,43	—
	DMA	5,83	4,95	5,02	5,66	—
	PDMA	13,91	10,72	21,38	38,30	—
ΔCS	DM	-30,37	-16,86	-2,87	11,56	—
	DMA	31,95	15,41	5,17	10,99	—
	PDMA	46,61	18,34	-12,23	-4,20	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-15,36	-8,22	-0,65	7,36	—
	DMA	18,84	11,43	7,89	9,96	—
	PDMA	15,37	8,65	9,25	16,13	—
CPI	DM	-30,23	-16,80	-2,58	12,39	—
	DMA	34,75	19,00	11,08	15,31	—
	PDMA	21,24	9,37	9,20	17,51	—
SPI	DM	-3,92	-1,62	0,83	3,49	—
	DMA	6,60	5,61	5,43	5,85	—
	PDMA	10,85	8,10	9,29	15,08	—
ΔCS	DM	-26,31	-15,18	-3,41	8,90	—
	DMA	28,15	13,39	5,65	9,46	—
	PDMA	10,39	1,28	-0,09	2,43	—

Tabela 8.283: Constantes de acoplamento B971PW91 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	385,1	435,6	486,3	536,6	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,6	15,7	11,7	7,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,8	-70,3	-76,6	-82,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,3	-7,3	-8,4	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,0	39,5	42,0	44,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-9,8	-10,8	-12,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,6	161,1	176,4	191,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1504,8	-1493,6	-1472,6	-1440,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-139,5	-110,5	-82,8	-56,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,9	-17,7	15,0	46,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-342,8	-304,0	-265,9	-229,8	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,5	115,4	118,5	121,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,2	-12,5	-13,9	-15,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,7	192,0	198,9	206,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	231,2	236,3	241,8	247,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	52,6	51,7	50,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,3	12,3	13,5	15,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,6	71,6	77,0	83,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	141,2	145,3	149,7	154,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-2,9	-4,8	-7,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,5	0,0	-1,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,0	12,0	13,3	14,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,9	18,9	20,1	21,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,0	32,8	35,6	38,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	111,9	115,0	118,1	121,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,9	-4,7	-5,5	-4,7
Total	DM	-16,00	-8,46	-0,61	7,55	—
	DMA	19,24	11,39	6,93	10,42	—
	PDMA	33,22	18,09	15,76	36,82	—
CPI	DM	-33,77	-18,38	-2,42	14,11	—
	DMA	37,74	20,25	9,56	16,95	—
	PDMA	59,48	28,25	8,12	35,36	—
SPI	DM	-2,97	-1,18	0,71	2,75	—
	DMA	5,68	4,89	4,99	5,63	—
	PDMA	13,95	10,63	21,36	37,90	—
ΔCS	DM	-30,80	-17,20	-3,13	11,36	—
	DMA	32,06	15,37	4,57	11,32	—
	PDMA	45,53	17,62	-13,24	-2,54	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-15,26	-8,08	-0,49	7,56	—
	DMA	18,77	11,40	7,63	10,03	—
	PDMA	15,04	8,55	9,12	16,26	—
CPI	DM	-30,46	-16,95	-2,66	12,38	—
	DMA	34,82	19,01	10,52	15,50	—
	PDMA	20,83	9,28	8,93	17,96	—
SPI	DM	-3,56	-1,26	1,18	3,85	—
	DMA	6,42	5,54	5,40	5,82	—
	PDMA	10,58	7,99	9,26	14,95	—
ΔCS	DM	-26,90	-15,69	-3,84	8,53	—
	DMA	28,40	13,47	5,12	9,68	—
	PDMA	10,25	1,28	-0,33	3,01	—

Tabela 8.284: Constantes de acoplamento B971TPSS com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	385,3	436,5	487,9	538,7	500,0
CO	$^1J_{CO}$	19,8	15,8	11,9	7,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-64,5	-71,1	-77,6	-83,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,2	-7,3	-8,5	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,1	40,7	43,3	45,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,6	-9,7	-10,8	-12,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	154,5	171,1	187,7	204,4	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1507,0	-1496,6	-1476,7	-1445,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-142,7	-113,9	-86,2	-59,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-51,5	-17,5	15,0	46,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-339,7	-300,5	-262,2	-226,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	120,2	123,4	126,8	130,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,8	-12,2	-13,7	-15,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	185,6	192,2	199,4	207,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	245,4	251,0	257,0	263,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,6	54,1	53,1	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,9	12,9	14,1	15,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	67,5	72,6	78,3	84,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	150,3	154,8	159,6	164,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,4	-3,1	-5,2	-7,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,3	2,9	1,2	-0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,7	12,8	14,0	15,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,8	20,8	22,0	23,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	30,7	33,6	36,4	39,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	119,4	122,8	126,2	129,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-4,1	-4,9	-5,7	-4,7
Total	DM	-13,91	-6,27	1,66	9,93	—
	DMA	17,48	9,91	6,50	12,43	—
	PDMA	34,35	17,74	14,96	37,77	—
CPI	DM	-33,04	-17,58	-1,55	15,03	—
	DMA	36,96	19,31	8,97	18,83	—
	PDMA	59,19	27,42	7,42	36,09	—
SPI	DM	0,12	2,03	4,01	6,20	—
	DMA	3,19	3,01	4,68	7,73	—
	PDMA	16,13	10,64	20,49	39,01	—
Δ CS	DM	-33,16	-19,61	-5,57	8,83	—
	DMA	33,78	16,30	4,29	11,09	—
	PDMA	43,06	16,78	-13,07	-2,92	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-12,96	-5,67	2,04	10,23	—
	DMA	16,73	9,73	7,17	12,34	—
	PDMA	13,96	8,23	9,76	18,75	—
CPI	DM	-29,69	-16,09	-1,71	13,41	—
	DMA	34,01	17,99	9,87	17,59	—
	PDMA	20,77	8,50	8,16	18,90	—
SPI	DM	-0,09	2,35	4,93	7,78	—
	DMA	3,45	3,38	5,10	8,30	—
	PDMA	8,72	8,03	10,99	18,65	—
Δ CS	DM	-29,60	-18,44	-6,64	5,63	—
	DMA	30,56	14,61	4,77	9,29	—
	PDMA	12,06	0,47	-2,83	0,25	—

Tabela 8.285: Constantes de acoplamento B972B95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	467,1	517,9	568,9	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,6	11,3	7,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,6	-79,1	-85,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,9	-8,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	41,9	44,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,9	-9,7	-10,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,6	181,4	195,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1393,8	-1377,2	-1352,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-112,5	-84,3	-56,6	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-19,7	13,6	45,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-247,3	-217,2	-189,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	110,5	114,3	118,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,7	-11,9	-13,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	183,5	190,3	197,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,0	231,8	238,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	53,5	53,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,0	10,7	11,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,9	68,8	74,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	139,2	143,9	148,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-2,1	-3,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,8	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	12,0	13,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,4	18,2	19,2	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,2	33,3	36,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,8	113,7	117,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-4,0	-4,6	-4,7
Total	DM	-2,85	4,62	12,33	—
	DMA	12,62	9,95	16,33	—
	PDMA	21,73	8,58	23,46	—
CPI	DM	-1,20	13,62	28,86	—
	DMA	21,00	16,56	31,94	—
	PDMA	30,94	8,68	35,83	—
SPI	DM	-4,07	-1,99	0,20	—
	DMA	6,47	5,11	4,88	—
	PDMA	14,98	8,51	14,38	—
ΔCS	DM	2,87	15,60	28,66	—
	DMA	14,53	11,46	27,06	—
	PDMA	15,96	0,17	21,45	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	-1,81	5,29	12,73	—
	DMA	12,66	11,16	17,00	—
	PDMA	10,67	7,80	12,26	—
CPI	DM	2,15	15,12	28,69	—
	DMA	19,63	18,08	32,07	—
	PDMA	10,90	8,61	19,02	—
SPI	DM	-4,85	-2,28	0,45	—
	DMA	7,30	5,83	5,41	—
	PDMA	10,49	7,18	7,06	—
ΔCS	DM	7,00	17,40	28,24	—
	DMA	12,33	12,25	26,66	—
	PDMA	0,41	1,43	11,95	—

Tabela 8.286: Constantes de acoplamento B972B971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	425,2	473,6	522,4	500,0
CO	$^1J_{CO}$	16,9	12,6	8,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-67,3	-73,5	-79,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,7	-6,6	-7,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	37,9	40,6	43,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,8	-8,7	-9,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	183,6	195,9	208,4	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1440,1	-1432,0	-1411,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-124,0	-93,8	-63,9	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-36,2	-0,8	33,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-272,6	-244,4	-217,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	114,4	118,4	122,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,7	-10,8	-12,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	198,8	206,2	214,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	229,9	236,2	242,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,7	51,7	51,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,4	10,0	10,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	73,0	78,4	84,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	142,5	147,5	152,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,9	-2,2	-3,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,3	2,4	1,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,4	11,2	12,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	16,5	17,3	18,1	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,7	36,3	39,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	113,8	118,0	122,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,9	-3,6	-4,3	-4,7
Total	DM	-5,85	1,34	9,01	—
	DMA	12,31	8,69	11,04	—
	PDMA	28,77	12,95	17,58	—
CPI	DM	-11,91	2,00	16,92	—
	DMA	20,18	12,73	18,57	—
	PDMA	44,48	18,53	22,78	—
SPI	DM	-1,41	0,86	3,21	—
	DMA	6,53	5,73	5,52	—
	PDMA	17,25	8,86	13,76	—
Δ CS	DM	-10,50	1,14	13,70	—
	DMA	13,65	7,00	13,05	—
	PDMA	27,23	9,66	9,02	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	-4,50	2,19	9,47	—
	DMA	11,58	9,12	11,56	—
	PDMA	13,07	9,51	10,15	—
CPI	DM	-7,98	3,78	16,72	—
	DMA	17,08	12,42	18,54	—
	PDMA	14,79	9,84	12,46	—
SPI	DM	-1,82	0,97	3,88	—
	DMA	7,35	6,58	6,19	—
	PDMA	11,75	9,25	8,37	—
Δ CS	DM	-6,16	2,81	12,84	—
	DMA	9,73	5,84	12,35	—
	PDMA	3,04	0,59	4,09	—

Tabela 8.287: Constantes de acoplamento B972B98 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	409,0	458,0	507,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,1	12,7	8,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-66,3	-72,7	-79,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-6,7	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,4	41,2	43,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,2	-9,1	-10,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	190,5	203,1	215,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1454,5	-1445,4	-1427,0	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-129,0	-98,6	-69,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,9	-7,5	26,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-314,0	-285,4	-257,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,0	122,1	126,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-11,4	-12,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,5	210,0	218,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	235,2	241,7	248,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,2	52,2	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,7	10,3	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	75,5	81,2	87,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	146,4	151,5	156,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-2,4	-4,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,2	2,2	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,5	11,3	12,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	16,9	17,7	18,6	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,0	37,7	41,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,5	121,8	126,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,7	-4,5	-4,7
Total	DM	-7,82	-0,51	7,15	—
	DMA	12,78	7,87	8,09	—
	PDMA	29,44	13,81	16,07	—
CPI	DM	-18,79	-4,66	10,11	—
	DMA	22,45	11,66	11,75	—
	PDMA	48,43	21,87	17,29	—
SPI	DM	0,22	2,54	4,98	—
	DMA	5,70	5,09	5,41	—
	PDMA	15,52	7,90	15,17	—
ΔCS	DM	-19,01	-7,20	5,13	—
	DMA	16,75	6,58	6,34	—
	PDMA	32,91	13,97	2,12	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	-6,43	0,41	7,69	—
	DMA	11,83	7,91	8,50	—
	PDMA	12,26	8,90	9,55	—
CPI	DM	-14,88	-2,88	9,93	—
	DMA	18,90	10,58	11,73	—
	PDMA	14,67	9,06	11,09	—
SPI	DM	0,08	2,94	5,96	—
	DMA	6,40	5,86	6,02	—
	PDMA	10,41	8,79	8,37	—
ΔCS	DM	-14,96	-5,82	3,97	—
	DMA	12,50	4,72	5,71	—
	PDMA	4,26	0,27	2,72	—

Tabela 8.288: Constantes de acoplamento B972LYP com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	405,9	459,8	514,5	500,0
CO	$^1J_{CO}$	17,4	12,9	8,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-68,1	-75,1	-82,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-7,4	-8,4	-9,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,5	42,4	45,3	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,4	-10,3	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	169,4	185,0	200,8	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1487,8	-1479,4	-1461,7	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-137,6	-107,2	-77,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-48,6	-12,8	21,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-337,9	-306,9	-276,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	117,8	121,9	126,3	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,3	-12,6	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	189,3	196,9	205,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	241,9	248,4	255,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,1	54,0	53,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,1	11,8	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	68,2	73,8	80,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	147,7	152,9	158,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,8	-2,4	-4,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,3	2,2	0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,6	12,5	13,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	18,5	19,5	20,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	31,2	34,7	38,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	117,0	121,2	125,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-3,7	-4,5	-4,7
Total	DM	-12,04	-4,38	3,66	—
	DMA	15,12	7,72	6,60	—
	PDMA	30,45	14,60	16,72	—
CPI	DM	-27,77	-12,81	2,85	—
	DMA	30,26	13,81	9,05	—
	PDMA	51,58	25,58	15,71	—
SPI	DM	-0,50	1,80	4,25	—
	DMA	4,02	3,25	4,81	—
	PDMA	14,95	6,54	17,46	—
Δ CS	DM	-27,27	-14,61	-1,39	—
	DMA	26,24	10,56	4,25	—
	PDMA	36,63	19,04	-1,74	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	-10,96	-3,74	3,97	—
	DMA	14,22	7,51	7,03	—
	PDMA	11,19	8,25	11,21	—
CPI	DM	-24,19	-11,31	2,46	—
	DMA	26,93	12,41	9,28	—
	PDMA	14,34	9,60	12,75	—
SPI	DM	-0,78	2,08	5,14	—
	DMA	4,44	3,75	5,31	—
	PDMA	8,77	7,22	10,01	—
Δ CS	DM	-23,41	-13,39	-2,68	—
	DMA	22,49	8,66	3,97	—
	PDMA	5,56	2,39	2,74	—

Tabela 8.289: Constantes de acoplamento B98LYP com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	414,4	467,6	521,7	574,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,9	11,5	7,0	2,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,8	-76,6	-83,4	-90,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-7,7	-8,8	-10,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,9	43,6	46,3	48,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-9,7	-10,8	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	182,3	198,8	215,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1502,7	-1493,9	-1476,4	-1446,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-134,2	-104,1	-75,2	-47,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-43,6	-8,4	25,4	58,2	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-376,1	-337,2	-299,7	-263,7	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,3	125,7	129,4	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-12,0	-13,4	-14,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,1	200,9	208,3	216,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	246,9	252,6	258,6	265,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,3	55,1	54,4	53,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,5	11,2	12,3	13,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	71,4	76,7	82,4	88,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	156,4	161,2	166,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-1,9	-3,7	-5,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	3,2	1,8	0,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,3	12,3	13,4	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,4	19,2	20,3	21,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,5	36,7	39,9	43,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,3	124,9	128,5	132,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-3,4	-4,2	-5,1	-4,7
Total	DM	-12,37	-4,62	3,43	11,80	—
	DMA	16,24	9,06	7,48	15,03	—
	PDMA	32,64	15,83	15,82	38,28	—
CPI	DM	-31,39	-15,77	0,36	17,16	—
	DMA	33,68	16,50	9,51	23,35	—
	PDMA	50,32	22,49	17,44	49,65	—
SPI	DM	1,58	3,57	5,67	7,87	—
	DMA	3,45	3,61	5,99	8,94	—
	PDMA	19,68	10,94	14,63	29,94	—
ΔCS	DM	-33,16	-19,61	-5,57	8,83	—
	DMA	33,78	16,30	4,29	11,09	—
	PDMA	43,06	16,78	-13,07	-2,92	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-11,62	-4,26	3,50	11,70	—
	DMA	15,63	9,17	7,93	14,88	—
	PDMA	12,14	8,50	11,57	20,62	—
CPI	DM	-28,67	-15,01	-0,64	14,56	—
	DMA	31,19	15,81	9,42	21,36	—
	PDMA	16,28	9,14	12,26	25,82	—
SPI	DM	1,50	4,01	6,68	9,51	—
	DMA	3,65	4,05	6,78	9,89	—
	PDMA	8,95	8,01	11,05	16,63	—
ΔCS	DM	-30,17	-19,02	-7,32	5,05	—
	DMA	27,54	11,76	2,64	11,47	—
	PDMA	7,33	1,13	1,21	9,19	—

Tabela 8.290: Constantes de acoplamento B98P86 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	376,3	426,2	476,7	526,7	500,0
CO	$^1J_{CO}$	20,2	16,2	12,2	8,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-61,9	-68,3	-74,7	-81,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,7	-6,7	-7,8	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	35,8	38,3	40,9	43,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,0	-9,1	-10,1	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	141,2	156,5	171,8	187,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1494,0	-1484,6	-1464,4	-1433,7	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-142,5	-113,6	-85,8	-59,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-54,8	-20,8	11,9	43,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-329,1	-293,2	-258,3	-225,1	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	108,4	111,7	115,1	118,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,3	-11,6	-12,9	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	181,5	187,9	194,9	202,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	223,4	228,9	234,8	241,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,7	52,5	52,0	51,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,5	11,3	12,5	13,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	63,5	68,5	73,9	79,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	136,0	140,4	145,1	150,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,5	-2,0	-3,7	-5,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,3	2,1	0,7	-0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	10,5	11,4	12,5	13,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,1	18,0	19,1	20,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,3	31,3	34,2	37,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	107,6	111,1	114,6	118,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,8	-3,5	-4,3	-5,1	-4,7
Total	DM	-16,86	-9,47	-1,70	6,37	—
	DMA	20,18	12,63	7,86	10,09	—
	PDMA	38,34	19,30	12,63	29,52	—
CPI	DM	-33,04	-18,18	-2,59	13,54	—
	DMA	37,71	21,85	11,25	15,97	—
	PDMA	63,75	32,12	9,39	31,08	—
SPI	DM	-4,99	-3,07	-1,04	1,12	—
	DMA	7,33	5,86	5,37	5,77	—
	PDMA	19,71	9,90	15,00	28,38	—
ΔCS	DM	-28,04	-15,11	-1,55	12,42	—
	DMA	30,38	15,99	5,87	10,20	—
	PDMA	44,05	22,21	-5,61	2,70	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-16,15	-9,15	-1,66	6,25	—
	DMA	19,65	12,69	8,62	9,89	—
	PDMA	17,78	10,34	8,00	13,30	—
CPI	DM	-29,36	-16,42	-2,54	12,05	—
	DMA	34,50	20,46	12,06	14,73	—
	PDMA	23,60	11,46	8,26	15,25	—
SPI	DM	-5,98	-3,56	-0,98	1,78	—
	DMA	8,23	6,72	5,98	6,17	—
	PDMA	13,30	9,48	7,79	11,80	—
ΔCS	DM	-23,38	-12,86	-1,56	10,27	—
	DMA	26,27	13,74	6,08	8,56	—
	PDMA	10,29	1,98	0,47	3,46	—

Tabela 8.291: Constantes de acoplamento B98PBE com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	378,0	428,5	479,5	530,2	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,6	16,6	12,7	8,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-62,3	-68,8	-75,2	-81,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-7,2	-8,4	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	36,0	38,5	41,1	43,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-9,7	-10,7	-12,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	141,6	157,2	172,8	188,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1498,8	-1488,4	-1467,5	-1436,1	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-142,7	-113,8	-85,8	-59,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-54,9	-20,8	12,0	43,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-322,8	-286,9	-252,1	-219,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,0	112,4	115,9	119,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,0	-12,3	-13,7	-15,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	181,1	187,8	195,1	203,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	225,7	231,5	237,7	244,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,5	52,2	51,5	50,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	12,2	13,4	15,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,7	68,8	74,4	80,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	137,3	141,8	146,6	151,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,7	-4,5	-6,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,8	1,4	0,0	-1,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,9	11,9	13,1	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,7	18,7	19,9	21,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,3	31,3	34,2	37,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,4	111,9	115,5	119,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,9	-4,7	-5,5	-4,7
Total	DM	-16,60	-9,11	-1,24	6,95	—
	DMA	19,69	12,62	8,00	10,39	—
	PDMA	35,47	19,43	15,99	34,99	—
CPI	DM	-32,82	-17,79	-2,05	14,21	—
	DMA	37,29	22,37	11,74	16,68	—
	PDMA	62,57	31,18	10,38	32,67	—
SPI	DM	-4,71	-2,74	-0,65	1,63	—
	DMA	6,78	5,46	5,26	5,77	—
	PDMA	15,59	10,82	20,11	36,70	—
ΔCS	DM	-28,10	-15,05	-1,40	12,58	—
	DMA	30,51	16,91	6,48	10,91	—
	PDMA	46,97	20,36	-9,73	-4,04	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-15,81	-8,69	-1,08	6,98	—
	DMA	19,14	12,65	8,72	10,13	—
	PDMA	16,53	9,35	9,06	15,55	—
CPI	DM	-29,11	-15,99	-1,95	12,77	—
	DMA	34,03	21,03	12,61	15,49	—
	PDMA	22,23	10,43	9,42	16,87	—
SPI	DM	-5,58	-3,07	-0,41	2,53	—
	DMA	7,68	6,21	5,73	6,01	—
	PDMA	12,15	8,51	8,78	14,53	—
ΔCS	DM	-23,53	-12,92	-1,54	10,24	—
	DMA	26,35	14,82	6,88	9,48	—
	PDMA	10,07	1,91	0,64	2,33	—

Tabela 8.292: Constantes de acoplamento B98PW91 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	381,0	431,6	482,7	533,5	500,0
CO	$^1J_{CO}$	20,3	16,3	12,3	8,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-62,8	-69,3	-75,7	-82,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,2	-7,2	-8,3	-9,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	36,3	38,8	41,4	43,7	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,6	-9,6	-10,7	-12,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	143,1	158,7	174,3	190,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1501,5	-1491,0	-1470,0	-1438,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-141,7	-112,6	-84,6	-57,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-53,7	-19,5	13,4	45,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-326,9	-290,9	-255,7	-222,5	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	109,6	112,9	116,5	120,0	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,0	-12,3	-13,7	-15,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	182,4	189,0	196,3	204,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	226,6	232,3	238,5	245,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,6	52,2	51,5	50,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,1	12,1	13,4	15,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,3	69,4	75,1	81,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	137,9	142,5	147,3	152,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,1	-2,7	-4,6	-6,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,8	1,4	0,0	-1,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	10,9	11,9	13,1	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,6	18,6	19,9	21,4	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,6	31,6	34,6	37,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	109,0	112,5	116,1	119,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,1	-3,9	-4,7	-5,5	-4,7
Total	DM	-16,44	-8,93	-1,02	7,17	—
	DMA	19,57	12,21	7,62	10,47	—
	PDMA	34,88	18,78	15,61	35,44	—
CPI	DM	-32,87	-17,78	-1,98	14,31	—
	DMA	37,20	21,51	10,93	16,93	—
	PDMA	61,46	29,76	9,16	33,84	—
SPI	DM	-4,39	-2,44	-0,32	1,93	—
	DMA	6,63	5,39	5,20	5,74	—
	PDMA	15,39	10,72	20,35	36,61	—
ΔCS	DM	-28,48	-15,34	-1,66	12,38	—
	DMA	30,57	16,12	5,73	11,19	—
	PDMA	46,07	19,03	-11,19	-2,77	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-15,68	-8,54	-0,89	7,17	—
	DMA	19,05	12,25	8,35	10,17	—
	PDMA	16,22	8,98	8,85	15,64	—
CPI	DM	-29,29	-16,11	-2,02	12,74	—
	DMA	34,05	20,21	11,86	15,62	—
	PDMA	21,81	9,73	9,01	17,23	—
SPI	DM	-5,21	-2,72	-0,02	2,88	—
	DMA	7,52	6,12	5,65	5,97	—
	PDMA	11,92	8,40	8,73	14,43	—
ΔCS	DM	-24,08	-13,39	-2,00	9,86	—
	DMA	26,53	14,09	6,21	9,65	—
	PDMA	9,89	1,33	0,27	2,80	—

Tabela 8.293: Constantes de acoplamento B98TPSS com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	381,1	432,4	484,1	535,6	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,5	16,5	12,5	8,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-63,5	-70,1	-76,7	-83,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-7,2	-8,4	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	37,3	40,0	42,7	45,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-9,5	-10,6	-11,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	151,6	168,7	185,5	202,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1503,8	-1494,1	-1474,1	-1443,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-144,8	-115,9	-88,0	-61,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-53,4	-19,4	13,3	44,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-323,8	-287,4	-252,0	-218,7	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,2	120,8	124,7	128,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-12,0	-13,5	-15,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	182,2	189,1	196,7	205,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	240,5	246,8	253,6	260,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,1	53,7	52,9	51,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,6	13,9	15,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,1	70,4	76,3	82,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	146,9	151,8	157,1	162,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-2,9	-4,9	-7,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,2	2,8	1,2	-0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	12,6	13,9	15,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,4	20,5	21,8	23,3	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,3	32,4	35,4	38,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	116,3	120,1	124,0	128,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-4,0	-4,8	-5,7	-4,7
Total	DM	-14,43	-6,78	1,22	9,54	—
	DMA	17,82	10,74	6,65	11,72	—
	PDMA	35,75	18,11	14,29	35,95	—
CPI	DM	-32,20	-16,99	-1,15	15,25	—
	DMA	36,49	21,25	10,58	18,42	—
	PDMA	61,26	29,44	8,69	34,49	—
SPI	DM	-1,39	0,71	2,95	5,35	—
	DMA	4,13	3,04	3,77	6,81	—
	PDMA	17,04	9,80	18,39	37,02	—
ΔCS	DM	-30,81	-17,70	-4,09	9,91	—
	DMA	32,36	18,21	6,81	11,60	—
	PDMA	44,22	19,64	-9,70	-2,53	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-13,47	-6,17	1,60	9,83	—
	DMA	17,04	10,60	7,29	11,62	—
	PDMA	15,00	8,65	9,05	17,64	—
CPI	DM	-28,58	-15,25	-1,09	13,80	—
	DMA	33,30	19,93	11,47	17,28	—
	PDMA	21,79	9,45	8,43	18,07	—
SPI	DM	-1,84	0,82	3,68	6,77	—
	DMA	4,53	3,43	4,08	7,26	—
	PDMA	9,78	8,03	9,53	17,31	—
ΔCS	DM	-26,74	-16,07	-4,77	7,03	—
	DMA	28,77	16,50	7,39	10,02	—
	PDMA	12,01	1,41	-1,10	0,76	—

Tabela 8.294: Constantes de acoplamento OB95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	470,6	508,0	545,2	582,1	500,0
CO	$^1J_{CO}$	17,6	14,2	10,8	7,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,8	-80,2	-84,5	-88,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-8,0	-8,5	-9,0	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,2	42,9	44,5	46,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-10,1	-10,6	-11,1	-11,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	175,8	185,4	194,7	203,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1457,4	-1437,7	-1412,6	-1382,8	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-125,1	-101,5	-78,7	-56,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-31,6	-4,0	22,0	47,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-173,1	-161,8	-151,2	-140,5	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	114,6	116,8	119,1	121,3	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,7	-13,3	-13,9	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,9	192,3	196,9	201,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	240,1	242,5	245,0	247,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,6	52,7	52,6	52,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,0	11,3	11,8	12,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,9	68,2	71,8	75,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	145,9	148,5	151,1	153,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,9	-2,7	-3,7	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	1,1	0,6	0,0	-0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,6	13,1	13,5	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,1	19,4	19,8	20,3	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	30,1	32,3	34,7	36,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	113,7	116,1	118,3	120,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-4,0	-4,4	-4,8	-5,2	-4,7
Total	DM	-1,77	3,64	9,13	14,74	—
	DMA	13,47	9,78	12,08	17,78	—
	PDMA	23,76	15,84	17,05	30,39	—
CPI	DM	-1,53	9,57	20,84	32,31	—
	DMA	25,69	17,68	23,15	36,20	—
	PDMA	40,86	21,79	17,87	40,92	—
SPI	DM	-1,94	-0,71	0,54	1,85	—
	DMA	4,51	3,98	3,97	4,28	—
	PDMA	11,21	11,47	16,44	22,67	—
Δ CS	DM	0,41	10,29	20,30	30,46	—
	DMA	21,18	13,70	19,18	31,92	—
	PDMA	29,66	10,32	1,42	18,25	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	0,06	5,03	10,17	15,49	—
	DMA	13,13	10,14	13,20	18,50	—
	PDMA	10,17	8,64	10,54	15,80	—
CPI	DM	2,98	12,43	22,22	32,34	—
	DMA	23,60	17,55	24,76	36,62	—
	PDMA	13,88	11,30	14,99	23,68	—
SPI	DM	-2,18	-0,67	0,90	2,52	—
	DMA	5,08	4,44	4,30	4,55	—
	PDMA	7,32	6,59	7,12	9,74	—
Δ CS	DM	5,16	13,10	21,32	29,82	—
	DMA	18,52	13,11	20,46	32,07	—
	PDMA	6,57	4,72	7,87	13,94	—

Tabela 8.295: Constantes de acoplamento OB972 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	471,0	508,8	547,1	583,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,2	10,3	6,3	2,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,7	-82,4	-86,9	-91,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,4	-8,0	-8,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,5	45,2	46,9	48,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-9,2	-9,7	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	189,2	200,1	210,7	220,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1558,4	-1541,5	-1517,4	-1487,6	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-122,3	-97,1	-72,5	-49,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-31,2	-1,9	26,0	52,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-211,6	-199,6	-187,8	-175,6	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,9	125,2	127,5	129,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-11,5	-12,1	-12,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	204,9	210,1	215,6	221,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,1	252,7	255,3	257,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,8	50,8	50,6	50,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,8	10,2	10,5	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	76,0	80,2	84,6	89,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,6	156,4	159,2	162,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,8	-2,8	-3,8	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,8	1,2	0,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,7	12,1	12,5	13,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,1	18,4	18,7	19,1	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,9	38,3	40,7	43,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	123,9	126,3	128,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,6	-4,0	-4,4	-4,7
Total	DM	-3,94	1,63	7,40	13,29	—
	DMA	14,77	12,51	14,82	19,22	—
	PDMA	21,16	14,01	17,60	30,97	—
CPI	DM	-12,72	-1,42	10,35	22,26	—
	DMA	29,72	23,76	27,36	35,55	—
	PDMA	38,97	20,45	21,66	45,74	—
SPI	DM	2,50	3,87	5,25	6,71	—
	DMA	3,81	4,26	5,62	7,25	—
	PDMA	8,09	9,29	14,62	20,15	—
ΔCS	DM	-15,22	-5,29	5,10	15,55	—
	DMA	25,91	19,50	21,74	28,31	—
	PDMA	30,88	11,16	7,03	25,59	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-2,47	2,62	8,00	13,57	—
	DMA	14,66	13,37	16,17	19,92	—
	PDMA	9,44	9,27	12,09	16,74	—
CPI	DM	-9,37	0,13	10,28	20,73	—
	DMA	28,07	24,45	29,00	35,35	—
	PDMA	12,07	11,23	16,49	25,24	—
SPI	DM	2,84	4,54	6,25	8,05	—
	DMA	4,35	4,85	6,29	8,05	—
	PDMA	7,41	7,76	8,71	10,21	—
ΔCS	DM	-12,21	-4,41	4,03	12,68	—
	DMA	23,72	19,60	22,71	27,30	—
	PDMA	4,66	3,47	7,78	15,04	—

Tabela 8.296: Constantes de acoplamento PBEB95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	493,2	528,3	562,8	596,8	500,0
CO	$^1J_{CO}$	14,5	11,4	8,4	5,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-80,7	-84,8	-88,5	-92,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,4	-7,1	-7,9	-8,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,3	46,5	47,5	48,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,8	-9,4	-10,2	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	175,0	185,0	194,7	203,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1524,0	-1497,8	-1464,7	-1426,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-115,6	-93,7	-72,6	-52,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-15,8	8,8	32,4	55,0	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-232,7	-211,2	-191,0	-172,7	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	125,0	125,8	126,5	127,3	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,6	-13,3	-14,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	197,8	200,7	203,8	207,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	253,3	253,7	254,2	254,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,4	55,2	54,9	54,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,8	10,2	10,8	11,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	70,9	73,4	76,0	78,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	156,1	157,2	158,3	159,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,1	-2,0	-3,0	-4,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,0	2,2	1,4	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,8	13,2	13,6	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,3	19,6	19,9	20,3	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	34,1	35,8	37,5	39,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	123,8	124,7	125,6	126,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,5	-4,0	-4,5	-4,9	-4,7
Total	DM	-2,16	3,23	8,75	14,35	—
	DMA	10,90	9,83	12,05	16,66	—
	PDMA	18,46	9,28	16,28	29,53	—
CPI	DM	-8,81	3,19	15,45	27,81	—
	DMA	21,63	18,66	22,87	32,39	—
	PDMA	28,67	12,77	24,10	45,54	—
SPI	DM	2,72	3,27	3,84	4,48	—
	DMA	3,03	3,35	4,11	5,12	—
	PDMA	10,97	6,73	10,55	17,78	—
ΔCS	DM	-11,53	-0,08	11,61	23,33	—
	DMA	18,60	15,32	18,77	27,27	—
	PDMA	17,69	6,04	13,54	27,76	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-1,19	3,91	9,20	14,63	—
	DMA	10,89	10,82	12,80	16,95	—
	PDMA	8,26	7,78	10,57	15,67	—
CPI	DM	-6,61	4,13	15,26	26,59	—
	DMA	20,71	19,91	23,42	31,63	—
	PDMA	11,00	9,91	14,91	23,43	—
SPI	DM	2,98	3,75	4,55	5,42	—
	DMA	3,34	3,82	4,62	5,65	—
	PDMA	6,15	6,14	7,24	9,70	—
ΔCS	DM	-9,59	0,38	10,71	21,17	—
	DMA	17,37	16,09	18,80	25,98	—
	PDMA	4,85	3,77	7,66	13,73	—

Tabela 8.297: Constantes de acoplamento PBEB971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	466,9	500,9	534,5	567,5	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,7	11,4	8,2	5,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-78,2	-82,1	-85,7	-89,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,2	-6,0	-6,7	-7,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,7	46,8	48,0	49,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-8,7	-9,4	-10,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	193,2	202,7	211,8	220,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1589,4	-1567,6	-1537,2	-1499,9	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-118,9	-95,4	-72,7	-50,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-21,7	4,4	29,6	53,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-246,0	-226,4	-207,6	-190,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,5	133,4	134,4	135,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,9	-12,7	-13,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	217,5	220,9	224,5	228,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	263,5	264,2	265,1	266,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,9	53,7	53,3	52,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,7	10,3	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	82,5	85,5	88,7	92,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	163,5	164,8	166,2	167,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-2,5	-3,5	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	2,5	1,7	0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,4	12,8	13,2	13,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,9	19,1	19,4	19,8	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	38,2	40,2	42,3	44,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,3	132,5	133,6	134,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,8	-4,3	-4,9	-4,7
Total	DM	-3,11	2,16	7,69	13,33	—
	DMA	16,52	14,10	16,25	19,80	—
	PDMA	23,39	13,19	17,82	30,65	—
CPI	DM	-17,06	-5,54	6,54	18,85	—
	DMA	29,26	22,66	26,45	33,33	—
	PDMA	35,27	17,44	22,17	42,70	—
SPI	DM	7,12	7,80	8,54	9,27	—
	DMA	7,17	7,81	8,77	9,87	—
	PDMA	14,67	10,07	14,63	21,82	—
ΔCS	DM	-24,18	-13,34	-2,00	9,58	—
	DMA	22,09	14,85	17,68	23,45	—
	PDMA	20,59	7,37	7,54	20,88	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-2,00	2,90	8,13	13,53	—
	DMA	17,00	15,46	17,66	20,53	—
	PDMA	12,28	11,27	12,79	16,77	—
CPI	DM	-15,10	-5,03	5,73	16,86	—
	DMA	28,52	23,87	27,63	32,78	—
	PDMA	14,33	12,12	14,66	21,10	—
SPI	DM	8,07	8,99	9,98	10,98	—
	DMA	8,13	8,99	9,98	11,12	—
	PDMA	10,70	10,63	11,35	13,44	—
ΔCS	DM	-23,17	-14,02	-4,25	5,88	—
	DMA	20,39	14,88	17,65	21,66	—
	PDMA	3,63	1,49	3,31	7,66	—

Tabela 8.298: Constantes de acoplamento PW91B95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	484,8	521,1	556,9	592,1	500,0
CO	$^1J_{CO}$	15,2	12,1	8,9	5,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-80,4	-84,3	-88,1	-91,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,3	-7,1	-7,9	-8,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,4	46,5	47,6	48,5	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,8	-9,5	-10,3	-11,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	178,0	187,7	196,9	205,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1531,9	-1504,4	-1470,0	-1430,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-119,4	-97,0	-75,6	-54,7	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-19,7	5,3	29,3	52,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-238,6	-216,3	-195,4	-176,2	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	125,0	125,8	126,6	127,3	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,0	-12,7	-13,5	-14,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	196,8	199,8	202,9	206,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	254,0	254,3	254,7	255,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,6	55,4	55,1	54,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,8	10,3	10,8	11,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	69,9	72,5	75,2	78,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	156,3	157,3	158,4	159,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,0	-1,9	-2,9	-4,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,9	2,1	1,3	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	13,0	13,3	13,7	14,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,5	19,8	20,1	20,4	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	33,4	35,2	37,2	39,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	123,8	124,8	125,6	126,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,5	-4,0	-4,5	-5,0	-4,7
Total	DM	-3,20	2,35	8,00	13,73	—
	DMA	11,45	9,67	11,65	16,01	—
	PDMA	19,54	10,24	15,29	28,89	—
CPI	DM	-11,15	1,20	13,76	26,45	—
	DMA	22,96	18,40	22,00	30,90	—
	PDMA	31,09	14,33	21,59	43,35	—
SPI	DM	2,63	3,19	3,77	4,41	—
	DMA	3,00	3,27	4,07	5,09	—
	PDMA	11,08	7,24	10,67	18,29	—
ΔCS	DM	-13,77	-1,99	9,99	22,04	—
	DMA	19,96	15,13	17,93	25,81	—
	PDMA	20,01	7,09	10,91	25,06	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-2,20	3,07	8,49	14,04	—
	DMA	11,34	10,48	12,49	16,32	—
	PDMA	8,36	7,48	10,34	15,52	—
CPI	DM	-8,79	2,29	13,71	25,35	—
	DMA	21,79	19,27	22,77	30,25	—
	PDMA	11,06	9,30	14,21	22,75	—
SPI	DM	2,88	3,66	4,47	5,35	—
	DMA	3,31	3,72	4,58	5,61	—
	PDMA	6,29	6,08	7,37	9,96	—
ΔCS	DM	-11,67	-1,37	9,24	20,00	—
	DMA	18,48	15,55	18,19	24,64	—
	PDMA	4,78	3,22	6,84	12,79	—

Tabela 8.299: Constantes de acoplamento PW91B971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

PW91	% E_X^{HF}	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	457,6	492,9	527,6	561,8	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,5	12,2	8,9	5,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,5	-81,5	-85,2	-88,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,2	-6,0	-6,8	-7,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	46,9	48,0	49,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,8	-9,4	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	196,5	205,7	214,4	222,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1599,1	-1575,7	-1543,9	-1505,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-123,1	-99,2	-76,1	-53,8	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-26,2	0,5	26,0	50,6	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-252,5	-232,3	-212,7	-194,3	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,5	133,5	134,4	135,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-12,1	-12,9	-13,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	216,1	219,5	223,2	227,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	264,4	265,0	265,6	266,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,2	53,9	53,5	52,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,4	9,8	10,3	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	81,2	84,3	87,6	91,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	163,7	165,0	166,3	167,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,4	-3,5	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,2	2,4	1,6	0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,6	13,0	13,3	13,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,1	19,3	19,6	20,0	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	37,3	39,4	41,6	44,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,4	132,5	133,6	134,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,8	-4,4	-4,9	-4,7
Total	DM	-4,31	1,12	6,75	12,56	—
	DMA	17,37	14,70	15,75	19,40	—
	PDMA	24,43	13,77	16,47	29,78	—
CPI	DM	-19,74	-7,84	4,54	17,15	—
	DMA	31,48	24,27	25,45	32,46	—
	PDMA	38,20	19,76	18,94	40,06	—
SPI	DM	7,00	7,68	8,38	9,19	—
	DMA	7,03	7,68	8,63	9,82	—
	PDMA	14,32	9,38	14,66	22,24	—
ΔCS	DM	-26,74	-15,52	-3,84	7,96	—
	DMA	24,46	16,59	16,81	22,64	—
	PDMA	23,88	10,37	4,29	17,82	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-3,17	1,89	7,23	12,81	—
	DMA	17,77	15,98	17,24	20,22	—
	PDMA	12,16	11,18	12,11	16,53	—
CPI	DM	-17,59	-7,17	3,89	15,31	—
	DMA	30,51	25,25	26,89	32,15	—
	PDMA	14,56	12,07	13,50	20,34	—
SPI	DM	7,93	8,85	9,81	10,89	—
	DMA	7,96	8,85	9,82	11,05	—
	PDMA	10,31	10,49	11,04	13,60	—
ΔCS	DM	-25,52	-16,02	-5,92	4,42	—
	DMA	22,55	16,40	17,07	21,10	—
	PDMA	4,24	1,57	2,46	6,74	—

Tabela 8.300: Constantes de acoplamento SB971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	486,1	519,4	552,9	586,7	500,0
CO	$^1J_{CO}$	14,5	11,2	7,7	4,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-77,0	-81,0	-85,0	-88,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,3	-5,2	-6,1	-7,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	42,5	44,1	45,7	47,2	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,3	-7,3	-8,2	-9,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	182,3	193,3	204,3	215,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1570,7	-1537,8	-1501,2	-1459,3	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-101,8	-79,7	-57,8	-36,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	5,7	28,8	51,5	73,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-129,5	-125,7	-123,0	-121,5	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	114,2	117,5	121,0	124,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,3	-10,3	-11,4	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	198,6	204,2	210,3	217,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	231,8	236,6	241,6	247,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,9	51,3	51,4	51,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,7	8,3	9,1	10,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	70,0	74,4	79,1	84,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	142,3	146,3	150,6	155,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,3	-2,2	-3,3	-4,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,0	2,3	1,5	0,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,1	12,5	13,0	13,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,0	17,5	18,1	18,7	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	32,4	35,1	38,0	41,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	112,3	115,9	119,7	123,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,1	-3,7	-4,3	-4,8	-4,7
Total	DM	-0,96	4,65	10,39	16,34	—
	DMA	17,47	15,67	17,92	19,97	—
	PDMA	18,47	14,89	24,13	34,48	—
CPI	DM	0,05	10,84	21,81	33,09	—
	DMA	32,75	29,45	35,14	40,15	—
	PDMA	22,68	23,10	40,97	58,22	—
SPI	DM	-1,70	0,11	2,02	4,05	—
	DMA	6,27	5,56	5,30	5,17	—
	PDMA	15,38	8,86	11,78	17,07	—
ΔCS	DM	1,75	10,73	19,79	29,04	—
	DMA	26,47	23,89	29,84	34,97	—
	PDMA	7,29	14,24	29,19	41,15	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-0,76	4,64	10,23	16,07	—
	DMA	19,27	17,10	18,60	19,85	—
	PDMA	14,87	12,47	13,56	15,07	—
CPI	DM	0,99	10,54	20,34	30,51	—
	DMA	35,09	31,02	35,00	38,27	—
	PDMA	18,74	16,21	20,74	24,77	—
SPI	DM	-2,10	0,11	2,46	4,96	—
	DMA	7,10	6,40	5,98	5,68	—
	PDMA	11,88	9,58	8,04	7,61	—
ΔCS	DM	3,09	10,43	17,88	25,55	—
	DMA	27,99	24,62	29,02	32,59	—
	PDMA	6,86	6,63	12,70	17,16	—

Tabela 8.301: Constantes de acoplamento SB972 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	478,2	514,4	549,4	584,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,9	10,3	6,6	2,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-82,2	-86,5	-90,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-4,2	-5,1	-6,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,5	44,9	46,6	48,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,7	-6,6	-7,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	159,7	172,5	186,0	199,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1636,2	-1612,3	-1580,3	-1542,0	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-117,2	-94,8	-72,7	-50,9	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-9,9	13,7	37,0	59,8	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-163,3	-156,5	-150,6	-145,8	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	113,4	116,5	119,8	123,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,2	-8,1	-9,1	-10,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	192,3	197,6	203,4	209,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	229,3	233,6	238,1	242,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,6	51,1	51,5	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	7,1	7,6	8,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,1	70,3	74,8	79,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,4	144,1	148,0	152,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-0,5	-1,4	-2,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	4,0	3,3	2,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,4	11,7	12,0	12,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,3	16,6	17,0	17,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,6	34,2	37,0	39,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	110,7	114,1	117,5	121,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-2,5	-3,0	-3,5	-4,7
Total	DM	-7,62	-2,12	3,67	9,68	—
	DMA	21,42	17,73	18,45	20,67	—
	PDMA	31,77	20,84	23,32	27,76	—
CPI	DM	-14,38	-3,71	7,54	19,19	—
	DMA	41,33	33,89	36,12	41,86	—
	PDMA	37,11	19,75	33,23	51,31	—
SPI	DM	-2,65	-0,95	0,83	2,71	—
	DMA	6,81	5,89	5,49	5,13	—
	PDMA	27,86	21,64	16,06	10,49	—
ΔCS	DM	-11,73	-2,76	6,71	16,48	—
	DMA	34,51	28,00	30,62	36,73	—
	PDMA	9,25	-1,89	17,17	40,82	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-7,74	-2,50	3,10	8,99	—
	DMA	22,91	19,83	19,81	21,40	—
	PDMA	19,64	16,52	16,29	17,65	—
CPI	DM	-13,33	-3,95	6,09	16,63	—
	DMA	42,97	37,15	37,53	41,57	—
	PDMA	24,22	20,86	21,88	26,57	—
SPI	DM	-3,44	-1,38	0,80	3,11	—
	DMA	7,48	6,52	6,18	5,89	—
	PDMA	16,12	13,19	11,98	10,78	—
ΔCS	DM	-9,89	-2,57	5,29	13,52	—
	DMA	35,49	30,63	31,35	35,68	—
	PDMA	8,11	7,67	9,90	15,79	—

Tabela 8.302: Constantes de acoplamento SB98 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	60%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	471,7	505,2	538,9	572,9	500,0
CO	$^1J_{CO}$	14,6	11,2	7,8	4,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-76,2	-80,3	-84,4	-88,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,5	-5,4	-6,3	-7,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,2	44,8	46,4	48,0	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,6	-7,6	-8,6	-9,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	189,2	200,5	211,6	222,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1586,1	-1554,4	-1516,3	-1475,5	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-106,5	-84,5	-62,6	-41,0	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-0,6	22,4	45,1	67,4	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-162,2	-158,4	-155,6	-154,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	117,6	121,1	124,7	128,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,8	-10,9	-12,0	-13,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	201,8	207,6	213,9	220,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	236,9	241,8	247,1	252,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,4	51,7	51,8	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,9	8,6	9,4	10,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	72,2	76,7	81,7	87,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	146,0	150,2	154,6	159,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,4	-2,4	-3,5	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,9	2,1	1,3	0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	12,2	12,6	13,1	13,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,3	17,8	18,5	19,2	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	33,3	36,3	39,3	42,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	115,8	119,6	123,5	127,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,8	-4,4	-5,0	-4,7
Total	DM	-2,62	2,98	8,85	14,80	—
	DMA	17,12	14,00	16,15	19,37	—
	PDMA	18,66	12,14	21,89	34,05	—
CPI	DM	-5,90	4,78	15,92	27,13	—
	DMA	32,99	26,44	31,86	37,04	—
	PDMA	25,49	17,62	35,17	52,59	—
SPI	DM	-0,22	1,66	3,66	5,75	—
	DMA	5,47	4,87	4,63	6,41	—
	PDMA	13,65	8,12	12,15	20,45	—
Δ CS	DM	-5,68	3,12	12,26	21,37	—
	DMA	27,52	21,56	27,23	30,63	—
	PDMA	11,84	9,50	23,02	32,15	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄						
Total	DM	-2,36	3,06	8,78	14,63	—
	DMA	18,60	15,49	16,86	19,43	—
	PDMA	13,63	11,20	12,14	15,36	—
CPI	DM	-4,93	4,52	14,50	24,60	—
	DMA	34,73	28,34	32,04	35,50	—
	PDMA	17,64	14,45	18,63	22,92	—
SPI	DM	-0,38	1,93	4,38	6,97	—
	DMA	6,19	5,61	5,18	7,06	—
	PDMA	10,54	8,70	7,15	9,55	—
Δ CS	DM	-4,55	2,59	10,12	17,63	—
	DMA	28,54	22,73	26,86	28,44	—
	PDMA	7,10	5,74	11,47	13,37	—

Tabela 8.303: Constantes de acoplamento TPSSB95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,0	527,3	562,7	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,6	9,8	7,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,1	-86,8	-90,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-7,2	-8,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,6	48,4	49,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-9,6	-10,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	211,5	216,2	220,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1485,4	-1459,1	-1428,6	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-104,3	-85,0	-66,1	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-9,0	14,0	36,1	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-239,9	-218,6	-198,0	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,8	130,8	130,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,2	-12,1	-13,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,9	199,0	202,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	260,8	260,3	259,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,8	56,4	55,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	10,6	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,8	76,9	79,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	161,9	162,3	162,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-2,1	-3,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	3,6	2,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,4	12,9	13,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,1	20,3	20,5	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	37,8	39,0	40,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,0	130,1	130,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-4,3	-4,7	-4,7
Total	DM	2,34	7,23	12,19	—
	DMA	10,34	9,77	13,84	—
	PDMA	21,08	11,44	18,74	—
CPI	DM	-1,37	9,86	21,19	—
	DMA	17,54	15,85	24,94	—
	PDMA	25,19	10,58	29,71	—
SPI	DM	5,07	5,31	5,59	—
	DMA	5,07	5,31	5,71	—
	PDMA	18,07	12,07	10,70	—
ΔCS	DM	-6,44	4,56	15,60	—
	DMA	12,47	10,54	19,23	—
	PDMA	7,12	-1,49	19,01	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	3,53	8,15	12,88	—
	DMA	10,49	10,93	14,69	—
	PDMA	9,98	9,64	13,24	—
CPI	DM	0,89	10,95	21,20	—
	DMA	16,89	17,33	25,32	—
	PDMA	11,71	10,97	18,62	—
SPI	DM	5,56	6,00	6,48	—
	DMA	5,56	6,00	6,51	—
	PDMA	8,65	8,61	9,10	—
ΔCS	DM	-4,67	4,95	14,72	—
	DMA	11,33	11,33	18,81	—
	PDMA	3,06	2,36	9,52	—

Tabela 8.304: Constantes de acoplamento TPSSP86 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

	$\%E_X^{HF}$	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	439,2	476,4	512,7	500,0
CO	$^1J_{CO}$	14,5	11,8	9,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-76,8	-80,8	-84,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,8	-7,6	-8,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	45,6	46,5	47,3	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,7	-10,6	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	205,7	210,6	215,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1568,7	-1538,6	-1504,4	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-108,2	-89,0	-70,2	-84,0
BF ₃	$^1J_{BF}$	-14,2	8,8	30,9	15,0
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-261,7	-240,9	-220,8	-300,0
CH ₄	$^1J_{CH}$	129,1	129,2	129,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,9	-13,8	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	197,0	200,7	204,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	260,7	260,7	260,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,1	54,3	53,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	12,2	12,9	13,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	77,5	80,3	83,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	160,3	161,1	161,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-2,8	-4,0	-5,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,0	1,8	0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	13,0	13,6	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	21,0	21,4	21,9	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	37,5	38,8	40,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	128,3	128,6	128,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-4,3	-4,9	-5,3	-4,7
Total	DM	-4,28	0,86	6,07	—
	DMA	14,52	11,77	12,60	—
	PDMA	17,67	14,30	25,29	—
CPI	DM	-16,55	-4,94	6,78	—
	DMA	27,80	20,25	20,87	—
	PDMA	26,81	12,67	23,87	—
SPI	DM	4,71	5,11	5,55	—
	DMA	4,77	5,55	6,53	—
	PDMA	10,97	15,49	26,34	—
Δ CS	DM	-21,25	-10,04	1,24	—
	DMA	23,03	14,70	14,34	—
	PDMA	15,84	-2,82	-2,48	—
Desconsiderando $^1J_{BF}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{CH}$ e $^2J_{HH}$ da molécula de C ₂ H ₄					
Total	DM	-3,59	1,33	6,38	—
	DMA	15,09	12,94	13,34	—
	PDMA	9,46	10,52	14,96	—
CPI	DM	-15,28	-4,81	5,87	—
	DMA	27,66	21,65	21,37	—
	PDMA	10,02	9,80	15,65	—
SPI	DM	5,41	6,05	6,78	—
	DMA	5,42	6,24	7,16	—
	PDMA	9,03	11,07	14,42	—
Δ CS	DM	-20,69	-10,86	-0,91	—
	DMA	22,24	15,41	14,21	—
	PDMA	0,99	-1,27	1,23	—

8.5 Variação da porcentagem de E_X^{HF} para os funcionais de longo alcance

8.5.1 Geometrias Experimentais

Tabela 8.305: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	446,5	468,4	490,6	513,0	535,8	558,9	582,4	606,4	630,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,2	18,3	16,2	14,1	11,8	9,4	6,9	4,2	1,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,1	-78,5	-81,0	-83,5	-86,1	-88,7	-91,4	-94,2	-97,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-7,5	-8,5	-9,6	-10,8	-12,0	-13,2	-14,4	-15,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,8	44,7	45,6	46,6	47,6	48,6	49,6	50,7	51,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-10,2	-11,1	-12,1	-13,1	-14,1	-15,1	-16,2	-17,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,2	154,7	165,2	175,6	186,0	196,4	206,7	217,0	227,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1770,3	-1738,5	-1704,7	-1669,0	-1631,8	-1593,3	-1553,6	-1513,1	-1471,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,5	-118,1	-103,5	-88,8	-74,0	-59,1	-44,2	-29,1	-14,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,8	-12,6	2,6	18,0	33,5	49,1	64,9	80,7	96,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-387,3	-418,1	-451,8	-490,7	-537,9	-599,4	-687,2	-847,1	-1126,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,5	125,1	127,8	130,5	133,3	136,1	139,0	142,0	145,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-13,0	-13,8	-14,6	-15,4	-16,2	-17,0	-17,9	-18,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	199,7	204,4	209,9	216,2	223,4	231,9	241,9	253,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,7	260,0	264,7	269,6	274,9	280,6	286,9	294,0	301,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,9	57,4	56,6	55,6	54,2	52,3	49,9	46,8	42,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,0	10,9	11,9	13,1	14,4	16,0	17,9	20,1	22,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	69,3	73,4	78,1	83,6	90,1	98,1	108,1	121,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,0	160,4	164,0	167,9	172,1	176,7	181,9	187,9	195,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,9	-3,1	-4,5	-6,2	-8,2	-10,9	-14,3	-19,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,3	3,6	2,8	1,9	0,8	-0,3	-1,8	-3,7	-6,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,2	13,5	13,9	14,4	15,0	15,9	17,0	18,5	20,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,7	20,3	21,1	22,1	23,2	24,7	26,6	29,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,8	32,0	34,3	36,6	39,1	41,6	44,2	46,9	49,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	125,6	128,4	131,2	134,1	137,1	140,1	143,2	146,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,6	-7,2	-4,7
Total	DM	-21,66	-18,60	-15,53	-12,51	-9,65	-7,17	-5,52	97,22	-11,62	—
	DMA	25,83	23,40	21,77	22,14	25,45	30,42	36,78	107,97	61,12	—
	PDMA	28,00	19,83	15,51	17,91	31,33	46,70	64,77	107,14	114,28	—
CPI	DM	-54,17	-48,94	-43,75	-38,85	-34,54	-31,37	-30,46	208,93	-52,30	—
	DMA	55,90	49,83	44,08	42,26	46,92	55,17	66,17	229,22	112,17	—
	PDMA	43,03	30,36	20,62	17,81	33,10	50,77	69,63	139,42	116,14	—
SPI	DM	2,19	3,64	5,16	6,81	8,60	10,57	12,78	15,29	18,22	—
	DMA	3,77	4,03	5,41	7,38	9,71	12,27	15,23	19,05	23,67	—
	PDMA	16,97	12,11	11,77	17,97	30,03	43,71	61,21	83,46	112,91	—
ΔCS	DM	-56,36	-52,58	-48,91	-45,65	-43,14	-41,95	-43,24	193,63	-70,52	—
	DMA	52,13	45,80	38,67	34,88	37,21	42,91	50,94	210,16	88,50	—
	PDMA	26,06	18,25	8,85	-0,16	3,07	7,06	8,42	55,96	3,23	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.306: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	440,4	462,4	484,7	507,3	530,2	553,5	577,2	500
CO	$^1J_{CO}$	20,1	18,1	16,1	13,9	11,6	9,1	6,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,8	-78,2	-80,7	-83,3	-85,9	-88,5	-91,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,5	-7,5	-8,6	-9,7	-10,9	-12,1	-13,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	44,1	45,0	46,0	46,9	47,9	48,9	50,0	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,3	-10,2	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	148,9	159,6	170,2	180,8	191,4	201,9	212,4	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1773,8	-1742,8	-1709,5	-1674,2	-1637,2	-1598,8	-1559,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-136,2	-121,5	-106,7	-91,8	-76,8	-61,7	-46,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-32,7	-17,3	-1,7	13,9	29,7	45,6	61,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-371,5	-401,7	-434,6	-471,9	-516,6	-573,9	-654,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	124,8	127,4	130,1	132,9	135,7	138,6	141,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,4	-13,2	-14,0	-14,8	-15,6	-16,4	-17,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	197,0	201,2	206,0	211,5	217,7	224,9	233,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	259,7	264,2	268,9	273,9	279,3	285,1	291,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	57,7	57,2	56,4	55,4	54,0	52,2	49,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,1	11,0	12,0	13,2	14,5	16,1	17,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	66,6	70,3	74,4	79,1	84,5	90,9	98,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	159,4	162,9	166,6	170,5	174,7	179,3	184,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,8	-1,8	-3,0	-4,4	-6,1	-8,1	-10,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,5	3,8	3,0	2,1	1,1	0,0	-1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	13,1	13,4	13,8	14,3	14,9	15,7	16,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	19,4	19,9	20,5	21,3	22,2	23,3	24,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	30,2	32,4	34,7	37,1	39,6	42,2	44,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	124,9	127,7	130,6	133,5	136,4	139,5	142,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-4,7
Total	DM	-21,01	-17,93	-14,81	-11,70	-8,73	-6,06	-4,10	—
	DMA	25,85	23,82	22,18	21,82	24,98	30,00	36,10	—
	PDMA	29,58	21,81	17,26	17,36	29,92	45,43	63,13	—
CPI	DM	-53,93	-48,64	-43,35	-38,29	-33,70	-30,10	-28,43	—
	DMA	55,73	49,60	43,75	40,18	44,50	52,86	63,28	—
	PDMA	45,74	32,96	23,27	16,47	30,20	48,22	67,14	—
SPI	DM	3,13	4,58	6,12	7,79	9,58	11,57	13,73	—
	DMA	3,94	4,91	6,36	8,35	10,66	13,24	16,16	—
	PDMA	17,73	13,64	12,85	18,01	29,73	43,39	60,18	—
Δ CS	DM	-57,05	-53,22	-49,47	-46,08	-43,28	-41,67	-42,16	—
	DMA	51,79	44,69	37,39	31,83	33,84	39,62	47,12	—
	PDMA	28,01	19,33	10,41	-1,54	0,47	4,83	6,96	—

Tabela 8.307: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	434,2	456,3	478,7	501,4	524,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,0	18,0	15,9	13,7	11,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,4	-77,9	-80,4	-83,0	-85,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-7,5	-8,6	-9,8	-10,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,4	45,3	46,3	47,3	48,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-10,3	-11,3	-12,3	-13,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,8	164,6	175,4	186,2	196,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1777,3	-1747,1	-1714,3	-1679,5	-1642,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-140,0	-125,1	-110,1	-94,9	-79,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-37,7	-22,0	-6,2	9,7	25,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-355,8	-385,7	-417,8	-453,7	-496,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,0	129,7	132,5	135,3	138,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,1	-15,0	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,6	202,8	207,6	213,1	219,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	263,8	268,4	273,2	278,3	283,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,4	56,9	56,2	55,2	53,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,3	11,2	12,2	13,3	14,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,5	71,2	75,3	80,0	85,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	161,9	165,4	169,1	173,0	177,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,8	-3,0	-4,3	-6,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,7	4,0	3,2	2,3	1,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,0	13,3	13,7	14,1	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	20,1	20,7	21,4	22,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	32,8	35,2	37,6	40,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,1	129,9	132,8	135,8	138,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-4,7
Total	DM	-20,37	-17,28	-14,11	-10,94	-7,86	—
	DMA	26,17	24,28	22,65	21,74	24,71	—
	PDMA	31,38	23,73	19,27	18,32	28,68	—
CPI	DM	-53,69	-48,39	-43,03	-37,80	-32,97	—
	DMA	55,58	49,45	43,52	38,69	42,55	—
	PDMA	48,56	35,75	26,02	18,84	27,35	—
SPI	DM	4,07	5,53	7,09	8,76	10,56	—
	DMA	4,60	5,82	7,35	9,31	11,63	—
	PDMA	18,77	14,91	14,33	17,94	29,66	—
ΔCS	DM	-57,76	-53,92	-50,12	-46,56	-43,53	—
	DMA	50,98	43,63	36,17	29,38	30,93	—
	PDMA	29,79	20,84	11,69	0,90	-2,32	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.308: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-ccJ-2.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	428,0	450,2	472,7	500
CO	$^1J_{CO}$	19,9	17,9	15,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,0	-77,6	-80,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,5	-7,6	-8,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	44,7	45,6	46,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,4	-10,4	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	158,9	169,9	180,8	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1780,8	-1751,3	-1719,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-144,0	-128,8	-113,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-42,9	-26,9	-10,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-340,4	-370,0	-401,4	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	129,4	132,1	134,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,7	-13,5	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	200,2	204,4	209,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	268,0	272,6	277,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	57,2	56,7	56,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,5	11,4	12,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	68,4	72,1	76,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	164,4	167,9	171,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,7	-1,8	-2,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,9	4,2	3,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	12,9	13,2	13,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	19,8	20,3	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	30,9	33,2	35,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	129,3	132,2	135,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,1	-3,6	-4,0	-4,7
Total	DM	-19,73	-16,64	-13,43	—
	DMA	26,65	24,76	23,15	—
	PDMA	33,49	25,79	21,20	—
CPI	DM	-53,49	-48,17	-42,75	—
	DMA	55,49	49,32	43,35	—
	PDMA	51,62	38,79	28,85	—
SPI	DM	5,02	6,49	8,07	—
	DMA	5,50	6,75	8,34	—
	PDMA	20,19	16,26	15,59	—
ΔCS	DM	-58,51	-54,66	-50,82	—
	DMA	49,99	42,56	35,01	—
	PDMA	31,43	22,52	13,26	—

Tabela 8.309: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	164,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1784,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-148,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-48,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-325,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	131,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	272,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	166,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	12,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	131,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-4,7
Total	DM	-19,11	—
	DMA	27,12	—
	PDMA	35,48	—
CPI	DM	-53,30	—
	DMA	55,39	—
	PDMA	54,74	—
SPI	DM	5,97	—
	DMA	6,39	—
	PDMA	21,36	—
ΔCS	DM	-59,27	—
	DMA	49,00	—
	PDMA	33,37	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS
DE LONGO ALCANCE

492

Tabela 8.310: Constantes de acoplamento ω B97 variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	489,1	522,9	556,9	591,1	625,6	660,3	695,3	730,6	766,1	500
CO	$^1J_{CO}$	20,6	17,0	13,2	9,0	4,6	-0,1	-5,1	-10,4	-16,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,4	-79,1	-82,8	-86,5	-90,2	-94,0	-97,8	-101,6	-105,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-7,2	-7,8	-8,5	-9,1	-9,7	-10,4	-11,1	-11,7	-12,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	40,3	41,6	42,9	44,2	45,5	46,8	48,1	49,4	50,7	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,0	-9,4	-9,9	-10,4	-10,8	-11,3	-11,8	-12,2	-12,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	165,5	171,5	177,5	183,3	188,9	194,5	199,9	205,2	210,4	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1633,0	-1602,1	-1570,5	-1538,4	-1506,1	-1473,6	-1441,2	-1408,9	-1376,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-91,9	-71,9	-51,8	-31,6	-11,3	9,0	29,3	49,8	70,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	7,0	29,1	51,3	73,6	96,0	118,5	141,2	163,8	186,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-326,4	-343,2	-361,7	-382,5	-406,7	-436,0	-473,3	-516,6	-568,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	112,4	115,3	118,3	121,2	124,2	127,1	130,0	133,0	135,9	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,5	-11,8	-12,1	-12,4	-12,7	-13,0	-13,3	-13,5	-13,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	201,3	209,2	217,9	227,5	238,0	249,5	262,3	276,3	291,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	240,8	245,4	250,2	255,1	260,1	265,4	270,8	276,5	282,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,9	49,9	48,6	47,2	45,6	43,8	41,8	39,5	36,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,9	11,4	12,0	12,6	13,3	14,0	14,8	15,6	16,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	71,3	77,5	84,4	92,0	100,4	109,9	120,6	132,8	146,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	146,6	150,5	154,5	158,7	163,0	167,6	172,3	177,4	182,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-3,3	-4,5	-5,9	-7,4	-9,0	-10,9	-13,0	-15,4	-18,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	1,9	1,5	1,1	0,6	0,1	-0,3	-0,9	-1,6	-2,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,7	11,9	12,1	12,4	12,6	13,0	13,4	13,8	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,3	17,6	17,9	18,2	18,6	19,1	19,6	20,2	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	31,4	34,4	37,4	40,5	43,6	46,8	50,1	53,4	56,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	112,1	115,2	118,3	121,4	124,5	127,6	130,7	133,7	136,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,5	-3,9	-4,2	-4,5	-4,9	-5,2	-5,5	-5,9	-6,2	-4,7
Total	DM	-10,58	-6,03	-1,46	3,11	7,62	12,04	16,24	107,97	23,00	—
	DMA	14,03	13,68	16,44	19,95	23,97	29,07	34,82	114,45	53,81	—
	PDMA	12,34	15,29	26,67	39,46	53,08	68,31	84,93	126,28	122,10	—
CPI	DM	-23,75	-15,66	-7,66	0,16	7,72	14,80	21,15	234,14	29,16	—
	DMA	25,59	25,01	30,46	36,65	43,50	51,76	60,82	244,10	95,40	—
	PDMA	13,34	15,17	33,71	54,04	75,02	97,09	119,68	198,70	167,59	—
SPI	DM	-0,92	1,03	3,09	5,27	7,55	10,02	12,64	15,45	18,49	—
	DMA	5,56	5,38	6,16	7,71	9,65	12,43	15,76	19,37	23,31	—
	PDMA	11,60	15,37	21,50	28,76	36,99	47,21	59,44	73,17	88,74	—
Δ CS	DM	-22,83	-16,70	-10,76	-5,10	0,16	4,78	8,51	218,69	10,68	—
	DMA	20,03	19,63	24,30	28,95	33,85	39,33	45,06	224,73	72,09	—
	PDMA	1,74	-0,19	12,21	25,29	38,03	49,88	60,24	125,53	78,85	—

Tabela 8.311: Constantes de acoplamento ω B97 variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	474,5	508,4	542,6	577,0	611,7	646,7	682,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,3	17,7	13,9	9,8	5,3	0,6	-4,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-73,8	-77,5	-81,2	-84,9	-88,7	-92,5	-96,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,2	-7,9	-8,5	-9,2	-9,8	-10,5	-11,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,8	41,1	42,5	43,8	45,1	46,4	47,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,6	-10,0	-10,5	-11,0	-11,4	-11,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,7	173,9	179,9	185,9	191,7	197,4	203,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1632,8	-1601,7	-1569,6	-1537,0	-1504,0	-1470,7	-1437,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-100,4	-80,0	-59,5	-38,9	-18,2	2,5	23,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-4,3	18,1	40,7	63,5	86,3	109,3	132,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-307,8	-324,2	-342,0	-361,7	-384,4	-411,3	-444,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,1	115,1	118,1	121,1	124,1	127,1	130,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-12,1	-12,4	-12,7	-13,0	-13,3	-13,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,5	207,1	215,5	224,7	234,9	246,1	258,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	241,3	246,0	250,8	255,7	260,9	266,2	271,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,8	49,8	48,6	47,2	45,7	43,9	41,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	11,6	12,2	12,8	13,5	14,2	14,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,5	75,5	82,1	89,4	97,4	106,4	116,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	146,2	150,2	154,2	158,4	162,7	167,2	171,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-4,1	-5,4	-6,9	-8,5	-10,2	-12,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,9	1,5	1,1	0,6	0,1	-0,3	-0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,6	11,7	12,0	12,2	12,5	12,8	13,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,4	17,6	17,9	18,3	18,7	19,1	19,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,3	33,3	36,3	39,4	42,5	45,8	49,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	111,8	115,0	118,1	121,3	124,4	127,5	130,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,8	-4,1	-4,5	-4,8	-5,2	-5,5	-4,7
Total	DM	-11,23	-6,63	-1,97	2,68	7,31	11,88	16,26	—
	DMA	14,56	11,53	14,04	17,42	21,60	26,59	32,43	—
	PDMA	15,21	11,29	21,98	34,67	48,61	63,70	80,28	—
CPI	DM	-24,82	-16,60	-8,37	-0,28	7,55	15,05	21,97	—
	DMA	27,05	20,22	25,25	31,30	38,55	46,64	56,03	—
	PDMA	21,28	7,28	25,08	45,62	67,26	89,51	112,29	—
SPI	DM	-1,26	0,69	2,73	4,86	7,13	9,55	12,07	—
	DMA	5,39	5,15	5,82	7,25	9,17	11,89	15,13	—
	PDMA	10,76	14,23	19,70	26,64	34,94	44,77	56,81	—
Δ CS	DM	-23,56	-17,29	-11,10	-5,14	0,42	5,51	9,90	—
	DMA	21,66	15,06	19,43	24,05	29,38	34,74	40,90	—
	PDMA	10,52	-6,95	5,38	18,98	32,33	44,75	55,47	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.312: Constantes de acoplamento ωB97 variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	459,9	494,0	528,3	562,9	597,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	21,9	18,4	14,6	10,5	6,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,1	-75,8	-79,5	-83,3	-87,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-7,9	-8,6	-9,2	-9,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	40,7	42,0	43,4	44,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-9,7	-10,1	-10,6	-11,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	169,8	176,2	182,4	188,5	194,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1633,7	-1602,4	-1570,0	-1536,8	-1503,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-109,4	-88,5	-67,6	-46,5	-25,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-16,1	6,8	29,9	53,1	76,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-289,2	-305,5	-322,8	-341,7	-363,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	111,8	114,9	117,9	121,0	124,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-12,3	-12,7	-13,0	-13,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,7	205,1	213,2	222,1	231,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	241,7	246,4	251,3	256,3	261,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,7	49,7	48,5	47,2	45,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,4	11,9	12,4	13,0	13,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,8	73,6	79,9	86,9	94,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	145,8	149,8	153,9	158,0	162,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-3,8	-5,0	-6,4	-7,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,9	1,5	1,0	0,6	0,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,4	11,6	11,8	12,0	12,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,4	17,7	18,0	18,3	18,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,2	32,2	35,2	38,3	41,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	111,5	114,7	117,9	121,1	124,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,8	-4,1	-4,5	-4,8	-4,7
Total	DM	-11,95	-7,29	-2,58	2,16	6,90	—
	DMA	16,01	10,89	11,77	15,03	19,30	—
	PDMA	18,49	12,23	17,59	30,02	44,01	—
CPI	DM	-26,08	-17,69	-9,30	-0,96	7,19	—
	DMA	30,66	18,93	20,34	26,20	33,72	—
	PDMA	30,06	10,47	16,69	37,15	59,22	—
SPI	DM	-1,59	0,34	2,34	4,45	6,69	—
	DMA	5,27	4,99	5,49	6,84	8,73	—
	PDMA	10,01	13,52	18,26	24,79	32,86	—
ΔCS	DM	-24,50	-18,03	-11,64	-5,42	0,50	—
	DMA	25,40	13,93	14,85	19,36	24,99	—
	PDMA	20,05	-3,06	-1,56	12,36	26,37	—

Tabela 8.313: Constantes de acoplamento ω B97 variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	445,5	479,6	514,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,5	19,1	15,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,4	-74,1	-77,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-8,0	-8,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,9	40,2	41,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,8	-10,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	172,1	178,6	185,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1635,6	-1604,1	-1571,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-118,8	-97,4	-76,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-28,4	-4,8	18,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-270,8	-287,0	-303,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	111,5	114,6	117,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,6	-12,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,0	203,1	211,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,1	246,9	251,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	50,5	49,6	48,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,6	12,1	12,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,2	71,7	77,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	145,4	149,4	153,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,3	-3,4	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,9	1,4	1,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,2	11,4	11,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,5	17,8	18,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,1	31,0	34,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	111,1	114,4	117,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,7	-4,1	-4,7
Total	DM	-12,75	-8,04	-3,26	—
	DMA	18,24	12,52	9,62	—
	PDMA	22,70	15,81	13,31	—
CPI	DM	-27,51	-18,96	-10,41	—
	DMA	35,84	23,00	15,57	—
	PDMA	39,91	19,75	8,24	—
SPI	DM	-1,93	-0,03	1,98	—
	DMA	5,33	4,84	5,26	—
	PDMA	10,08	12,92	17,03	—
Δ CS	DM	-25,58	-18,94	-12,39	—
	DMA	30,50	18,16	10,31	—
	PDMA	29,83	6,82	-8,79	—

Tabela 8.314: Constantes de acoplamento ω B97 variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	431,3	500
CO	$^1J_{CO}$	23,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-68,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-7,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	174,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1638,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-128,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-41,0	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-252,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	111,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	194,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	242,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	50,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	11,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	145,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	1,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	26,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	110,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-4,7
Total	DM	-13,60	—
	DMA	20,59	—
	PDMA	28,14	—
CPI	DM	-29,05	—
	DMA	41,15	—
	PDMA	49,92	—
SPI	DM	-2,27	—
	DMA	5,51	—
	PDMA	12,17	—
Δ CS	DM	-26,77	—
	DMA	35,64	—
	PDMA	37,75	—

Tabela 8.315: Constantes de acoplamento ω B97X variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	486,5	507,3	533,4	565,9	606,0	654,9	713,6	783,1	863,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,9	19,2	18,8	17,5	15,0	10,6	3,5	-7,6	-24,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,1	-78,4	-83,5	-89,7	-97,3	-106,4	-117,5	-131,1	-147,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,6	-7,9	-12,0	-17,3	-23,9	-32,5	-43,4	-57,4	-75,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,7	42,8	46,5	50,7	55,8	62,0	69,6	79,0	91,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-10,1	-14,2	-19,6	-26,6	-36,1	-48,9	-66,4	-90,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,0	174,7	201,1	233,3	272,9	322,1	383,9	463,2	567,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1641,6	-1642,9	-1639,3	-1631,3	-1619,7	-1605,2	-1588,7	-1570,8	-1551,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-103,0	-93,0	-81,1	-67,4	-52,2	-35,5	-17,6	1,0	20,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-3,6	8,8	23,3	40,0	58,9	80,1	103,8	129,8	157,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-288,1	-358,9	-459,2	-642,6	-1421,8	-4923,4	199,5	-142,1	-320,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,5	118,0	132,6	150,1	171,0	196,5	228,1	268,0	319,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-12,7	-17,0	-22,5	-29,8	-39,7	-53,1	-71,9	-98,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,6	199,6	221,6	264,1	395,3	-1875,9	-25,7	87,3	185,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	223,5	253,8	291,7	345,8	459,8	-966,8	256,4	360,8	427,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,7	52,6	47,4	30,3	-42,0	1432,0	262,7	220,3	225,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,4	11,6	17,8	32,0	82,4	-868,0	-106,0	-72,0	-63,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,3	68,5	83,2	119,1	382,4	-114,0	-22,2	1,8	13,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,5	153,6	177,0	213,4	366,0	143,2	218,2	264,7	311,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	-2,9	-9,2	-25,9	-155,7	93,5	49,8	40,3	37,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,9	1,8	-2,5	-13,9	-99,6	61,5	30,7	21,2	14,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,6	12,4	16,1	26,3	110,2	-53,5	-26,5	-22,4	-23,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	15,6	18,7	24,1	36,8	129,6	-45,5	-13,4	-5,6	-2,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,8	31,0	36,3	43,0	51,6	62,8	77,8	98,4	128,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	105,1	118,2	133,8	152,3	174,7	202,2	236,5	280,4	338,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-3,8	-5,7	-8,2	-11,5	-16,0	-22,4	-31,8	-46,4	-4,7
Total	DM	-13,31	-10,12	-6,31	-2,42	-3,60	-278,54	34,76	41,35	54,30	—
	DMA	17,19	13,99	23,63	46,41	128,97	442,70	96,87	94,51	108,23	—
	PDMA	26,02	10,27	41,39	123,87	601,66	955,18	342,14	332,06	374,51	—
CPI	DM	-24,07	-25,39	-27,92	-36,49	-97,62	-404,57	74,26	58,16	58,92	—
	DMA	28,84	27,63	39,30	65,69	148,24	481,05	123,88	114,75	129,66	—
	PDMA	25,70	11,80	25,08	56,90	113,11	261,51	189,25	245,29	326,17	—
SPI	DM	-5,42	1,09	9,54	22,57	65,35	-186,12	5,79	29,03	50,91	—
	DMA	8,65	3,99	12,14	32,27	114,83	414,59	77,05	79,67	92,52	—
	PDMA	26,25	9,15	53,35	172,98	959,92	1463,87	454,26	395,69	409,96	—
Δ CS	DM	-18,65	-26,48	-37,46	-59,06	-162,97	-218,45	68,48	29,14	8,01	—
	DMA	20,19	23,63	27,16	33,42	33,40	66,46	46,83	35,08	37,14	—
	PDMA	-0,56	2,66	-28,27	-116,08	-846,81	-1202,36	-265,01	-150,40	-83,78	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.316: Constantes de acoplamento ω B97X variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	488,2	508,1	533,3	564,8	603,8	651,6	709,2	500
CO	$^1J_{CO}$	18,5	18,8	18,4	17,1	14,6	10,2	3,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,2	-78,3	-83,3	-89,4	-96,8	-105,7	-116,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-4,3	-7,5	-11,6	-16,7	-23,3	-31,7	-42,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,7	42,7	46,3	50,5	55,5	61,5	68,9	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-6,5	-9,6	-13,6	-18,8	-25,7	-34,9	-47,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	157,2	178,3	204,0	235,5	274,2	322,2	382,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1639,8	-1643,6	-1642,0	-1635,6	-1625,2	-1611,5	-1595,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-108,8	-98,8	-87,0	-73,3	-58,0	-41,2	-23,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-9,4	3,0	17,6	34,3	53,2	74,5	98,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-277,5	-345,7	-440,1	-603,6	-1159,6	-1651,0	272,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	104,9	117,1	131,4	148,5	169,0	193,9	224,7	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,9	-12,1	-16,1	-21,5	-28,5	-38,0	-51,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	184,2	197,4	217,5	254,4	353,6	2242,1	-86,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	221,3	250,9	287,5	337,8	430,8	1667,5	218,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,2	52,6	48,4	34,6	-17,1	-1207,0	295,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,0	10,9	16,3	28,2	64,8	832,6	-127,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	59,4	66,8	79,5	107,3	226,0	-236,7	-39,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	134,1	151,7	174,0	206,1	286,9	78,3	206,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	0,6	-2,2	-7,5	-20,3	-78,6	155,9	58,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,2	2,4	-1,2	-10,0	-48,5	101,5	36,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	10,4	11,9	15,0	22,6	59,4	-93,1	-32,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	15,3	18,1	22,8	32,6	74,3	-88,1	-19,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	26,0	30,1	35,3	41,8	50,1	60,9	75,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	104,2	117,1	132,4	150,5	172,5	199,3	232,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,1	-3,5	-5,4	-7,7	-10,9	-15,3	-21,4	-4,7
Total	DM	-13,35	-10,32	-6,66	-2,90	-4,94	63,57	32,15	—
	DMA	18,04	13,78	21,76	41,95	95,83	332,00	105,02	—
	PDMA	30,10	10,36	31,83	99,37	336,70	1078,38	379,14	—
CPI	DM	-23,44	-24,86	-27,17	-34,19	-75,29	-108,81	78,93	—
	DMA	30,18	27,19	37,39	61,37	123,60	182,55	129,25	—
	PDMA	30,53	14,23	19,86	49,94	99,64	156,22	184,68	—
SPI	DM	-5,95	0,34	8,39	20,05	46,65	189,98	-2,16	—
	DMA	9,14	3,94	10,29	27,71	75,46	441,59	87,25	—
	PDMA	29,79	7,52	40,61	135,62	510,54	1754,63	521,75	—
Δ CS	DM	-17,48	-25,20	-35,56	-54,24	-121,94	-298,79	81,09	—
	DMA	21,04	23,25	27,10	33,67	48,14	-259,04	42,00	—
	PDMA	0,74	6,71	-20,75	-85,68	-410,90	-1598,41	-337,07	—

Tabela 8.317: Constantes de acoplamento ω B97X variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	490,1	509,2	533,4	563,9	601,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,1	18,3	17,9	16,6	14,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,3	-78,3	-83,2	-89,1	-96,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-7,1	-11,1	-16,2	-22,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,7	42,7	46,1	50,2	55,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,1	-9,1	-13,0	-18,0	-24,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	161,9	182,4	207,5	238,1	275,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1636,1	-1642,7	-1643,4	-1638,8	-1629,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-114,6	-104,7	-92,9	-79,3	-63,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-15,3	-2,8	11,7	28,5	47,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-267,1	-333,2	-422,3	-569,6	-993,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,3	116,2	130,3	146,9	167,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-11,4	-15,3	-20,5	-27,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	182,9	195,3	213,8	246,3	324,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	219,2	248,2	283,6	330,9	410,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,6	52,4	49,1	37,9	-0,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	10,3	15,0	25,0	52,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	58,5	65,3	76,5	98,9	170,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,9	150,0	171,3	200,6	257,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	-1,6	-6,2	-16,4	-51,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	2,8	-0,2	-7,2	-30,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,2	11,5	14,1	20,0	41,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,9	17,6	21,7	29,7	54,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	25,2	29,2	34,2	40,5	48,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,5	116,1	131,0	148,8	170,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-3,3	-5,0	-7,3	-10,4	-4,7
Total	DM	-13,30	-10,45	-6,94	-3,25	-3,97	—
	DMA	18,76	13,70	20,53	38,22	79,38	—
	PDMA	33,84	14,01	25,56	80,80	236,44	—
CPI	DM	-22,60	-24,20	-26,38	-32,24	-61,61	—
	DMA	31,27	26,76	36,65	57,44	107,68	—
	PDMA	35,28	18,02	19,04	43,12	89,04	—
SPI	DM	-6,47	-0,37	7,32	18,00	38,30	—
	DMA	9,58	4,13	8,71	24,13	58,63	—
	PDMA	32,79	11,07	30,33	108,44	344,54	—
Δ CS	DM	-16,13	-23,83	-33,70	-50,24	-99,91	—
	DMA	21,69	22,64	27,95	33,30	49,05	—
	PDMA	2,49	6,95	-11,29	-65,32	-255,49	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.318: Constantes de acoplamento ω B97X variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	492,3	510,6	533,9	500
CO	$^1J_{CO}$	17,6	17,8	17,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,4	-78,4	-83,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-3,7	-6,8	-10,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,8	42,6	46,0	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,7	-8,6	-12,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	167,1	187,0	211,4	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1630,0	-1639,8	-1643,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-120,4	-110,7	-99,0	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-21,3	-8,7	5,8	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-257,0	-321,0	-405,7	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	103,8	115,5	129,2	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,8	-10,8	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	181,6	193,3	210,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	217,2	245,6	280,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,1	52,1	49,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,4	9,7	13,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	57,7	64,0	74,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	131,7	148,4	168,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,3	-1,0	-5,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,7	3,3	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,0	11,2	13,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,6	17,1	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,4	28,2	33,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	102,8	115,2	129,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,6	-3,0	-4,7	-4,7
Total	DM	-13,11	-10,47	-7,13	—
	DMA	19,33	13,73	19,72	—
	PDMA	37,64	18,21	22,07	—
CPI	DM	-21,51	-23,35	-25,50	—
	DMA	32,04	26,21	36,46	—
	PDMA	39,97	22,24	21,59	—
SPI	DM	-6,95	-1,02	6,35	—
	DMA	10,01	4,58	7,44	—
	PDMA	35,93	15,25	22,43	—
Δ CS	DM	-14,56	-22,33	-31,85	—
	DMA	22,02	21,63	29,02	—
	PDMA	4,03	6,99	-0,83	—

Tabela 8.319: Constantes de acoplamento ω B97X variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	494,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-74,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	172,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1621,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-126,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-247,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	103,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	180,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	215,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	23,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	102,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-4,7
Total	DM	-12,80	—
	DMA	19,73	—
	PDMA	41,22	—
CPI	DM	-20,15	—
	DMA	32,49	—
	PDMA	44,83	—
SPI	DM	-7,41	—
	DMA	10,38	—
	PDMA	38,57	—
ΔCS	DM	-12,74	—
	DMA	22,11	—
	PDMA	6,27	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS
DE LONGO ALCANCE

502

Tabela 8.320: Constantes de acoplamento ω B97XD variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	464,8	480,1	500,6	527,4	561,8	605,0	658,1	722,0	797,3	500
CO	$^1J_{CO}$	18,6	19,5	19,9	19,7	18,8	16,6	12,6	6,0	-4,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,3	-73,8	-78,1	-83,5	-90,0	-98,1	-108,0	-120,1	-135,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,8	-5,7	-9,4	-14,0	-20,0	-27,6	-37,3	-49,8	-66,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,5	41,2	44,6	48,5	53,2	59,0	66,1	75,0	86,4	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,5	-8,3	-12,0	-16,9	-23,3	-32,0	-43,7	-59,9	-82,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	154,6	172,3	194,2	221,5	255,2	297,3	350,3	418,3	507,5	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1626,0	-1636,4	-1640,3	-1638,3	-1631,2	-1620,1	-1605,8	-1589,6	-1571,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-115,5	-105,6	-93,7	-79,9	-64,4	-47,3	-28,8	-9,1	11,0	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-18,6	-6,0	8,4	24,8	43,4	64,4	87,9	113,8	142,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-252,9	-317,1	-400,7	-529,6	-826,1	2507,8	766,4	-14,0	-232,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	100,4	111,9	125,6	141,9	161,7	185,8	215,7	253,4	302,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-8,0	-11,0	-14,9	-20,0	-26,8	-36,0	-48,6	-66,2	-91,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	178,0	188,4	203,5	228,9	286,1	600,8	-139,5	74,7	171,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	210,7	238,7	272,5	316,3	385,2	635,5	157,5	339,1	418,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,0	53,8	52,3	44,9	17,2	-186,1	345,5	225,7	218,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	7,1	9,4	13,5	22,1	45,4	192,3	-174,6	-83,9	-67,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	56,7	62,2	71,0	88,1	141,6	-709,5	-32,6	5,6	19,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	127,7	144,0	164,2	191,1	240,2	-187,8	200,1	254,2	302,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,6	-0,4	-4,1	-12,0	-39,1	414,7	57,0	39,1	34,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,9	3,4	0,7	-5,3	-25,6	301,3	40,7	24,7	16,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	9,9	11,2	13,4	18,6	37,3	-291,8	-34,6	-23,6	-22,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	14,4	16,9	20,6	27,8	49,9	-302,9	-22,8	-7,5	-2,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,2	28,0	32,8	38,9	46,7	57,0	70,7	89,5	116,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	99,9	112,2	126,8	144,3	165,5	191,6	224,1	265,8	320,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,6	-2,9	-4,6	-6,9	-9,9	-14,0	-19,7	-28,3	-41,4	-4,7
Total	DM	-14,66	-12,27	-9,16	-5,64	-3,55	105,03	42,76	38,84	50,11	—
	DMA	21,49	15,10	16,06	30,95	63,28	278,47	126,43	91,59	99,12	—
	PDMA	39,74	20,83	17,55	62,22	191,34	1589,50	401,02	320,02	344,08	—
CPI	DM	-23,27	-25,52	-27,95	-32,84	-51,23	262,19	116,08	59,25	55,58	—
	DMA	35,67	27,85	30,38	47,85	85,52	305,70	163,37	112,21	116,95	—
	PDMA	41,60	24,19	16,94	35,08	73,97	179,04	173,69	210,00	279,74	—
SPI	DM	-8,35	-2,55	4,61	14,31	31,42	-10,21	-11,01	23,88	46,10	—
	DMA	11,09	5,75	5,56	18,55	46,98	258,49	99,35	76,47	86,05	—
	PDMA	38,38	18,36	17,99	82,13	277,42	2623,85	567,73	400,70	391,27	—
Δ CS	DM	-14,93	-22,96	-32,56	-47,14	-82,65	272,40	127,10	35,37	9,48	—
	DMA	24,58	22,09	24,82	29,31	38,54	47,21	64,03	35,74	30,90	—
	PDMA	3,22	5,83	-1,06	-47,05	-203,45	-2444,81	-394,04	-190,71	-111,53	—

Tabela 8.321: Constantes de acoplamento ω B97XD variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	465,9	480,9	501,0	527,4	561,4	604,1	656,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	19,3	19,7	19,6	18,6	16,4	12,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,4	-73,9	-78,1	-83,4	-89,9	-97,9	-107,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-5,6	-9,2	-13,9	-19,8	-27,3	-37,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,5	41,3	44,5	48,4	53,1	58,9	65,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-8,1	-11,8	-16,6	-23,0	-31,6	-43,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,7	175,1	196,8	223,7	257,1	298,8	351,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1624,3	-1636,2	-1641,3	-1640,2	-1633,8	-1623,1	-1609,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-117,9	-108,0	-96,1	-82,3	-66,8	-49,6	-31,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-21,0	-8,4	6,0	22,6	41,2	62,3	85,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-248,9	-312,4	-394,7	-519,8	-798,5	5952,5	875,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	100,4	111,8	125,3	141,5	161,1	185,0	214,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-10,8	-14,6	-19,7	-26,4	-35,5	-47,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	177,5	187,8	202,5	226,9	280,4	536,7	-193,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	210,3	238,1	271,5	314,6	380,8	590,2	120,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,7	53,5	52,3	45,5	20,3	-142,3	380,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,0	9,2	13,2	21,3	42,7	160,6	-198,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	56,4	61,7	70,2	86,3	132,7	-7262,0	-42,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,4	143,7	163,5	189,8	235,2	-3686,0	193,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,7	-0,2	-3,8	-11,2	-34,6	3912,2	62,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	3,6	0,9	-4,6	-22,2	2815,2	44,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	9,9	11,0	13,2	17,9	34,0	-2805,6	-38,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,3	16,7	20,4	27,1	46,2	-3011,1	-26,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	23,9	27,6	32,4	38,4	46,1	56,3	69,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,8	112,0	126,5	143,9	164,9	190,7	223,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-2,8	-4,5	-6,7	-9,7	-13,7	-19,4	-4,7
Total	DM	-14,54	-12,23	-9,20	-5,71	-3,61	-122,72	42,93	—
	DMA	21,65	15,05	15,95	30,03	60,36	1222,26	136,95	—
	PDMA	40,94	22,55	16,89	57,53	172,81	13256,26	432,75	—
CPI	DM	-22,80	-25,17	-27,65	-32,31	-49,21	574,78	125,32	—
	DMA	35,95	27,50	30,57	46,85	82,88	618,67	173,06	—
	PDMA	43,50	25,79	18,04	32,81	70,96	281,07	174,72	—
SPI	DM	-8,48	-2,75	4,33	13,79	29,83	-634,23	-17,49	—
	DMA	11,17	5,92	5,22	17,69	43,84	1664,89	110,47	—
	PDMA	39,06	20,18	16,05	75,66	247,50	22771,40	621,98	—
Δ CS	DM	-14,32	-22,43	-31,97	-46,10	-79,04	1209,01	142,81	—
	DMA	24,77	21,58	25,35	29,17	39,04	-1046,22	62,60	—
	PDMA	4,44	5,61	1,99	-42,85	-176,53	-22490,33	-447,26	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

Tabela 8.322: Constantes de acoplamento ω B97XD variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	467,1	481,7	501,4	527,4	561,0	500
CO	$^1J_{CO}$	18,3	19,2	19,6	19,4	18,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,5	-73,9	-78,1	-83,3	-89,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,6	-5,5	-9,1	-13,7	-19,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,6	41,3	44,5	48,4	53,0	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-5,2	-7,9	-11,6	-16,3	-22,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	161,0	178,1	199,5	226,0	259,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1622,1	-1635,7	-1642,0	-1641,9	-1636,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-120,4	-110,5	-98,6	-84,8	-69,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-23,4	-10,7	3,7	20,3	39,0	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-244,8	-307,8	-388,7	-510,3	-773,0	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	100,3	111,7	125,1	141,2	160,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,6	-10,5	-14,3	-19,3	-26,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	177,1	187,2	201,5	225,0	275,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	209,9	237,5	270,6	313,0	376,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,3	53,3	52,2	45,9	23,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,9	9,1	12,9	20,6	40,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	56,1	61,3	69,5	84,6	125,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	127,2	143,3	162,9	188,6	231,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,8	-0,1	-3,5	-10,4	-31,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,0	3,7	1,2	-4,0	-19,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,8	10,9	12,9	17,3	31,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	14,2	16,6	20,1	26,4	43,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	23,5	27,2	31,9	37,9	45,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	99,8	111,9	126,2	143,4	164,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,4	-2,7	-4,4	-6,6	-9,5	-4,7
Total	DM	-14,39	-12,17	-9,22	-5,78	-3,63	—
	DMA	21,79	14,98	15,85	29,20	57,77	—
	PDMA	42,27	23,89	16,10	53,14	157,34	—
CPI	DM	-22,26	-24,78	-27,30	-31,79	-47,35	—
	DMA	36,14	27,15	30,77	45,99	80,43	—
	PDMA	45,23	27,41	19,29	30,50	68,02	—
SPI	DM	-8,61	-2,91	4,05	13,30	28,44	—
	DMA	11,27	6,06	4,91	16,89	41,16	—
	PDMA	40,10	21,32	13,76	69,75	222,84	—
Δ CS	DM	-13,65	-21,87	-31,35	-45,09	-75,79	—
	DMA	24,87	21,09	25,86	29,10	39,27	—
	PDMA	5,13	6,09	5,53	-39,25	-154,82	—

Tabela 8.323: Constantes de acoplamento ω B97XD variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	468,3	482,6	501,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,2	19,0	19,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,7	-74,0	-78,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-5,3	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,6	41,3	44,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-7,8	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	164,3	181,2	202,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1619,4	-1634,7	-1642,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-122,8	-113,0	-101,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-25,9	-13,1	1,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-240,8	-303,2	-382,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	100,4	111,6	124,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-10,3	-14,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	176,6	186,6	200,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	209,5	236,9	269,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,0	53,0	52,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,9	8,9	12,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	55,8	60,9	68,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,0	143,0	162,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,8	0,0	-3,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	3,8	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,7	10,8	12,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,0	16,4	19,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	23,1	26,7	31,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	99,7	111,7	125,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-2,6	-4,3	-4,7
Total	DM	-14,23	-12,10	-9,23	—
	DMA	21,89	14,88	15,77	—
	PDMA	43,31	25,28	15,47	—
CPI	DM	-21,69	-24,35	-26,95	—
	DMA	36,29	26,72	30,95	—
	PDMA	47,16	29,04	20,36	—
SPI	DM	-8,76	-3,11	3,77	—
	DMA	11,33	6,21	4,63	—
	PDMA	40,49	22,51	11,88	—
Δ CS	DM	-12,93	-21,24	-30,71	—
	DMA	24,96	20,51	26,31	—
	PDMA	6,67	6,53	8,48	—

Tabela 8.324: Constantes de aco-
plamento ω B97XD variando α com
 $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	469,5	500
CO	$^1J_{CO}$	18,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-70,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-2,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,7	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-4,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	167,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1616,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-125,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-28,3	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-236,8	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	100,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-7,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	176,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	209,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	6,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	55,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	126,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	1,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	5,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	9,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	13,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	22,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	99,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-1,2	-4,7
Total	DM	-14,02	—
	DMA	21,96	—
	PDMA	44,64	—
CPI	DM	-21,03	—
	DMA	36,34	—
	PDMA	48,87	—
SPI	DM	-8,89	—
	DMA	11,42	—
	PDMA	41,54	—
ΔCS	DM	-12,14	—
	DMA	24,92	—
	PDMA	7,33	—

Tabela 8.325: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP variando γ na base aug-pcJ-2.

	γ	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7	0,75	Exp.
HF	¹ J _{HF}	451,7	454,0	456,7	459,8	463,3	467,0	470,9	475,0	479,1	483,2	487,3	500
CO	¹ J _{CO}	18,2	18,3	18,3	18,2	18,1	17,9	17,6	17,3	16,9	16,4	15,9	16,4
H ₂ O	¹ J _{OH}	-77,4	-77,6	-77,8	-78,2	-78,6	-79,0	-79,5	-80,1	-80,6	-81,2	-81,8	-80,6
H ₂ O	² J _{HH}	-7,2	-7,3	-7,5	-7,7	-8,0	-8,3	-8,5	-8,8	-9,1	-9,4	-9,6	-7,3
NH ₃	¹ J _{NH}	45,2	45,2	45,2	45,2	45,3	45,5	45,7	46,0	46,3	46,5	46,8	43,8
NH ₃	² J _{HH}	-9,9	-10,1	-10,3	-10,6	-10,8	-11,2	-11,5	-11,8	-12,1	-12,4	-12,6	-9,6
PH ₃	¹ J _{PH}	164,2	162,6	162,3	163,2	165,2	167,9	171,1	174,5	178,0	181,4	184,6	188,2
PF ₃	¹ J _{PF}	-1750,9	-1749,7	-1748,8	-1747,5	-1745,6	-1742,7	-1738,8	-1733,9	-1728,2	-1722,0	-1715,5	-1441
BHF ₂	¹ J _{BF}	-131,2	-127,8	-124,2	-120,3	-116,4	-112,4	-108,4	-104,5	-100,8	-97,3	-94,0	-84
BF ₃	¹ J _{BF}	-28,7	-24,9	-20,7	-16,2	-11,7	-7,3	-3,0	1,1	5,0	8,6	12,1	15
F ₂ O	¹ J _{OF}	-371,9	-380,9	-390,5	-400,1	-409,7	-419,2	-428,4	-437,5	-446,5	-455,4	-464,0	-300
CH ₄	¹ J _{CH}	129,4	129,0	128,9	129,1	129,7	130,4	131,3	132,2	133,2	134,2	135,2	125,3
CH ₄	² J _{HH}	-12,9	-13,1	-13,3	-13,6	-13,9	-14,3	-14,6	-14,9	-15,2	-15,5	-15,7	-12,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CC}	201,6	201,7	202,2	203,0	204,2	205,6	207,3	209,1	211,0	213,0	215,0	174,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CH}	267,8	267,0	266,9	267,4	268,4	269,8	271,5	273,3	275,2	277,2	279,0	247,6
C ₂ H ₂	² J _{CH}	56,9	57,0	57,0	57,0	56,8	56,5	56,2	55,9	55,4	55,0	54,6	50,1
C ₂ H ₂	³ J _{HH}	10,8	10,9	11,1	11,4	11,8	12,2	12,6	13,0	13,4	13,8	14,2	9,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CC}	70,2	70,4	70,8	71,5	72,4	73,5	74,9	76,4	78,0	79,6	81,2	67,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CH}	164,7	164,4	164,5	165,0	165,9	167,0	168,3	169,7	171,2	172,6	174,1	156,3
C ₂ H ₄	² J _{CH}	-1,4	-1,6	-1,8	-2,2	-2,6	-3,0	-3,5	-4,0	-4,6	-5,1	-5,6	-2,4
C ₂ H ₄	² J _{HH}	4,4	4,2	3,9	3,5	3,2	2,8	2,5	2,1	1,8	1,4	1,1	2,3
C ₂ H ₄	³ J _{HH_c}	13,1	13,2	13,3	13,5	13,7	13,9	14,1	14,3	14,5	14,7	14,9	11,7
C ₂ H ₄	³ J _{HH_t}	19,9	19,9	20,0	20,2	20,4	20,6	20,9	21,2	21,5	21,7	22,0	19
C ₂ H ₆	¹ J _{CC}	32,2	32,4	32,6	33,0	33,5	34,1	34,8	35,5	36,3	37,1	37,8	34,5
C ₂ H ₆	¹ J _{CH}	129,5	129,1	129,1	129,4	130,0	130,8	131,7	132,8	133,8	134,9	135,9	125,2
C ₂ H ₆	² J _{CH}	-3,4	-3,5	-3,6	-3,7	-3,9	-4,1	-4,3	-4,4	-4,6	-4,8	-4,9	-4,7
Total	DM	-17,70	-17,78	-17,72	-17,49	-17,09	-16,58	-15,93	-15,21	-14,47	-13,72	-12,96	—
	DMA	24,43	24,36	24,33	24,28	24,24	24,19	24,13	24,10	24,07	24,09	24,13	—
	PDMA	26,47	24,86	23,20	21,10	19,80	19,08	18,66	19,04	20,05	21,32	22,66	—
CPI	DM	-48,98	-49,01	-48,93	-48,65	-48,16	-47,52	-46,70	-45,78	-44,81	-43,86	-42,88	—
	DMA	50,16	50,15	50,04	49,66	49,11	48,39	47,46	46,44	45,35	44,35	43,43	—
	PDMA	39,82	37,55	35,28	32,75	30,20	27,81	25,15	22,74	20,41	18,33	16,69	—
SPI	DM	5,25	5,13	5,17	5,36	5,70	6,11	6,64	7,21	7,79	8,38	8,98	—
	DMA	5,57	5,45	5,49	5,67	6,01	6,45	7,03	7,73	8,47	9,23	9,98	—
	PDMA	16,68	15,56	14,34	12,56	12,17	12,68	13,91	16,33	19,78	23,51	27,04	—
Δ CS	DM	-54,23	-54,14	-54,09	-54,01	-53,86	-53,63	-53,34	-52,99	-52,60	-52,24	-51,86	—
	DMA	44,60	44,71	44,55	44,00	43,10	41,94	40,44	38,71	36,89	35,12	33,45	—
	PDMA	23,14	21,99	20,94	20,18	18,03	15,13	11,24	6,40	0,63	-5,18	-10,36	—

Tabela 8.326: Constantes de acoplamento ω B97 variando γ na base aug-pcJ-2.

	γ	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7	0,75	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	427,3	436,1	445,5	455,6	466,3	477,6	489,2	501,0	512,7	524,4	535,9	500
CO	$^1J_{CO}$	24,9	24,6	24,3	23,9	23,4	22,6	21,7	20,6	19,2	17,8	16,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-68,5	-69,5	-70,6	-71,8	-73,1	-74,6	-76,0	-77,6	-79,1	-80,7	-82,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,8	-6,0	-6,2	-6,6	-7,0	-7,4	-7,9	-8,3	-8,8	-9,3	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	38,0	38,2	38,6	39,0	39,5	40,1	40,7	41,4	42,1	42,9	43,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,7	-7,9	-8,1	-8,5	-9,0	-9,4	-9,9	-10,4	-10,9	-11,3	-11,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	158,3	156,7	157,1	159,3	163,0	167,7	173,0	178,6	184,0	189,2	194,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1663,7	-1663,4	-1663,7	-1663,0	-1660,3	-1654,8	-1646,6	-1636,2	-1624,0	-1610,7	-1596,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-142,2	-132,5	-122,3	-111,8	-101,2	-90,7	-80,4	-70,6	-61,2	-52,4	-44,1	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-51,2	-39,5	-27,2	-14,8	-2,4	9,4	20,8	31,6	41,8	51,2	60,1	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-261,3	-277,6	-294,3	-310,7	-326,6	-342,1	-357,7	-373,5	-389,8	-406,7	-424,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	106,7	107,1	108,0	109,4	111,2	113,2	115,5	117,9	120,2	122,5	124,7	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-10,4	-10,6	-10,9	-11,2	-11,7	-12,2	-12,6	-13,1	-13,5	-13,9	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	187,4	188,9	191,1	194,2	198,1	203,0	208,6	214,9	221,7	228,8	236,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	232,5	232,7	234,0	236,3	239,4	243,2	247,5	252,1	256,8	261,5	266,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,8	52,1	52,1	51,8	51,3	50,5	49,5	48,4	47,1	45,6	44,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,7	9,7	10,0	10,4	11,0	11,7	12,4	13,2	14,0	14,8	15,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	60,0	61,3	63,2	65,6	68,8	72,8	77,4	82,7	88,5	94,6	101,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	138,7	139,3	140,7	142,7	145,4	148,5	151,9	155,6	159,4	163,2	166,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,5	-0,9	-1,4	-2,2	-3,2	-4,4	-5,7	-7,1	-8,7	-10,3	-12,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,4	3,1	2,8	2,3	1,8	1,2	0,5	-0,1	-0,7	-1,4	-2,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	10,8	11,0	11,2	11,5	11,9	12,3	12,7	13,2	13,7	14,2	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	16,6	16,6	16,8	17,0	17,4	17,9	18,4	19,0	19,7	20,3	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	25,1	26,1	27,2	28,5	30,0	31,7	33,6	35,5	37,4	39,4	41,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	106,1	106,5	107,5	109,0	110,9	113,1	115,4	117,9	120,3	122,7	125,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,6	-2,8	-3,0	-3,2	-3,5	-3,8	-4,1	-4,5	-4,8	-5,1	-5,3	-4,7
Total	DM	-17,75	-17,14	-16,25	-15,09	-13,60	-11,84	-9,89	-7,80	-5,69	-3,60	-1,59	—
	DMA	24,26	22,32	20,10	18,42	17,06	15,72	15,08	15,82	17,74	19,78	22,21	—
	PDMA	38,39	32,78	26,68	19,64	16,55	15,13	18,09	24,98	33,20	41,74	50,40	—
CPI	DM	-35,71	-34,70	-33,44	-31,85	-29,85	-27,50	-24,91	-22,21	-19,54	-16,95	-14,55	—
	DMA	47,11	42,83	38,20	35,14	32,65	29,75	28,42	29,15	31,65	34,15	37,58	—
	PDMA	62,71	53,23	43,17	33,06	22,99	13,34	13,01	20,62	28,19	35,23	42,74	—
SPI	DM	-4,59	-4,27	-3,65	-2,80	-1,69	-0,36	1,13	2,77	4,47	6,19	7,91	—
	DMA	7,51	7,28	6,83	6,16	5,63	5,43	5,30	6,03	7,55	9,24	10,94	—
	PDMA	20,56	17,78	14,59	9,80	11,83	16,44	21,81	28,18	36,86	46,52	56,03	—
Δ CS	DM	-31,12	-30,43	-29,78	-29,05	-28,16	-27,14	-26,04	-24,98	-24,00	-23,14	-22,46	—
	DMA	39,60	35,55	31,37	28,98	27,01	24,33	23,12	23,12	24,10	24,91	26,64	—
	PDMA	42,16	35,46	28,58	23,25	11,16	-3,10	-8,79	-7,56	-8,67	-11,29	-13,29	—

Tabela 8.327: Constantes de acoplamento ω B97X variando γ na base aug-pcJ-2.

	γ	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	491,9	497,9	504,3	511,3	518,7	526,6	534,7	542,9	551,2	559,5	567,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,4	19,1	18,9	18,6	18,2	17,6	16,8	15,9	14,9	13,8	12,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,8	-76,5	-77,2	-78,1	-79,0	-80,0	-81,1	-82,2	-83,4	-84,5	-85,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,3	-6,4	-6,7	-7,0	-7,4	-7,8	-8,2	-8,7	-9,1	-9,5	-9,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,3	41,5	41,7	42,0	42,4	42,8	43,3	43,9	44,4	45,0	45,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,5	-8,7	-9,0	-9,3	-9,8	-10,2	-10,7	-11,2	-11,6	-12,1	-12,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,9	165,0	165,8	168,2	172,0	176,8	182,1	187,6	193,1	198,3	203,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1644,2	-1643,0	-1641,6	-1639,2	-1635,0	-1628,6	-1620,2	-1610,0	-1598,4	-1586,1	-1573,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-104,2	-97,5	-90,1	-82,5	-74,6	-66,8	-59,0	-51,6	-44,4	-37,7	-31,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-4,7	3,3	11,9	20,9	29,8	38,5	47,0	55,0	62,6	69,6	76,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-312,2	-326,5	-341,5	-356,7	-371,9	-387,3	-403,0	-419,3	-436,4	-454,2	-472,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,3	112,5	113,1	114,2	115,7	117,4	119,3	121,3	123,2	125,2	127,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,3	-11,5	-11,9	-12,4	-12,8	-13,3	-13,7	-14,1	-14,5	-14,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,9	193,0	194,8	197,2	200,3	204,2	208,6	213,5	218,7	224,1	229,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	240,2	240,2	241,2	243,1	245,7	248,9	252,5	256,4	260,4	264,3	268,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,4	53,4	53,1	52,7	52,0	51,1	50,1	49,0	47,8	46,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,9	10,0	10,3	10,8	11,3	12,0	12,7	13,5	14,3	15,0	15,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,5	64,5	66,0	68,0	70,5	73,7	77,4	81,5	86,0	90,8	95,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	145,0	145,4	146,5	148,2	150,4	153,0	155,9	159,0	162,2	165,5	168,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,0	-1,3	-1,8	-2,5	-3,4	-4,4	-5,6	-6,8	-8,2	-9,5	-10,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	2,9	2,5	2,0	1,5	0,9	0,2	-0,3	-1,0	-1,6	-2,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,4	11,5	11,8	12,1	12,4	12,8	13,3	13,7	14,2	14,7	15,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,2	17,2	17,4	17,7	18,1	18,6	19,2	19,8	20,4	21,1	21,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,4	29,1	30,0	31,1	32,3	33,7	35,2	36,8	38,4	39,9	41,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	112,1	112,4	113,1	114,3	115,8	117,6	119,6	121,7	123,7	125,8	127,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,0	-3,2	-3,3	-3,6	-3,8	-4,1	-4,4	-4,7	-5,0	-5,3	-5,5	-4,7
Total	DM	-11,90	-11,56	-10,96	-10,12	-9,02	-7,69	-6,22	-4,65	-3,07	-1,52	-0,06	—
	DMA	14,67	14,27	13,96	14,22	15,25	16,30	17,56	19,15	21,33	23,57	26,02	—
	PDMA	18,10	14,49	9,96	9,18	13,71	19,02	25,36	32,03	40,39	48,38	56,66	—
CPI	DM	-25,30	-24,79	-24,04	-22,97	-21,59	-19,94	-18,11	-16,24	-14,36	-12,62	-11,03	—
	DMA	27,10	26,35	26,11	27,34	30,01	32,50	34,85	37,22	40,53	43,84	47,10	—
	PDMA	22,01	16,20	9,74	10,41	16,29	23,10	29,82	36,98	44,84	52,50	59,92	—
SPI	DM	-2,07	-1,85	-1,37	-0,69	0,20	1,29	2,51	3,85	5,21	6,61	7,98	—
	DMA	5,55	5,40	5,05	4,61	4,43	4,41	4,88	5,90	7,26	8,71	10,57	—
	PDMA	15,23	13,24	10,13	8,28	11,82	16,03	22,09	28,40	37,14	45,36	54,27	—
Δ CS	DM	-23,23	-22,94	-22,66	-22,29	-21,79	-21,23	-20,62	-20,08	-19,57	-19,23	-19,01	—
	DMA	21,55	20,95	21,06	22,73	25,58	28,09	29,97	31,32	33,27	35,13	36,53	—
	PDMA	6,78	2,96	-0,38	2,13	4,47	7,07	7,73	8,58	7,70	7,14	5,65	—

Tabela 8.328: Constantes de acoplamento ω B97XD variando γ na base aug-pcJ-2.

	γ	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7	0,75	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	489,0	494,0	499,4	505,3	511,7	518,4	525,5	532,6	539,9	547,0	554,1	500
CO	$^1J_{CO}$	19,3	19,1	18,9	18,6	18,2	17,7	17,1	16,3	15,4	14,4	13,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,2	-75,7	-76,3	-77,1	-77,9	-78,8	-79,7	-80,7	-81,7	-82,7	-83,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,5	-6,7	-7,0	-7,3	-7,7	-8,1	-8,6	-9,0	-9,4	-9,8	-10,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	42,0	42,1	42,3	42,5	42,9	43,3	43,8	44,3	44,8	45,4	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,1	-9,3	-9,7	-10,1	-10,5	-11,0	-11,5	-11,9	-12,4	-12,8	-13,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	174,6	173,6	174,3	176,6	180,3	184,8	190,0	195,4	200,7	205,9	210,7	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1634,7	-1631,8	-1628,7	-1624,6	-1619,1	-1611,7	-1602,6	-1592,0	-1580,4	-1568,1	-1555,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-97,9	-91,7	-85,0	-77,9	-70,7	-63,5	-56,4	-49,6	-43,0	-36,8	-31,0	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	3,1	10,2	17,9	25,9	33,9	41,8	49,3	56,6	63,4	69,8	75,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-345,5	-359,3	-373,9	-389,0	-404,3	-420,0	-436,2	-453,1	-470,8	-489,3	-508,7	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	114,5	114,7	115,2	116,2	117,6	119,2	120,9	122,8	124,6	126,4	128,1	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-12,0	-12,3	-12,7	-13,2	-13,7	-14,1	-14,6	-15,0	-15,4	-15,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	191,8	192,9	194,4	196,6	199,5	202,9	206,8	211,1	215,7	220,5	225,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	244,8	244,8	245,8	247,6	250,1	253,2	256,7	260,4	264,2	267,9	271,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	54,0	54,2	54,2	53,9	53,5	52,9	52,1	51,1	50,1	48,9	47,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,1	10,3	10,6	11,1	11,8	12,5	13,3	14,1	14,9	15,6	16,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,4	65,3	66,6	68,4	70,7	73,4	76,7	80,3	84,2	88,3	92,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	147,9	148,3	149,2	150,8	152,9	155,3	158,0	160,9	163,9	166,9	169,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,2	-1,5	-2,0	-2,7	-3,5	-4,4	-5,5	-6,7	-7,9	-9,2	-10,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,8	2,6	2,2	1,7	1,1	0,5	-0,1	-0,8	-1,5	-2,1	-2,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,7	11,9	12,1	12,4	12,8	13,2	13,7	14,2	14,7	15,2	15,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,5	17,6	17,8	18,2	18,6	19,2	19,8	20,4	21,1	21,8	22,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,6	30,3	31,2	32,1	33,3	34,6	36,0	37,5	39,0	40,4	41,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	115,0	115,2	115,8	116,9	118,3	120,0	121,9	123,8	125,7	127,6	129,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,5	-3,7	-3,9	-4,2	-4,4	-4,7	-5,0	-5,3	-5,6	-5,8	-4,7
Total	DM	-11,47	-11,13	-10,60	-9,83	-8,80	-7,60	-6,26	-4,87	-3,47	-2,11	-0,83	—
	DMA	14,17	13,81	13,45	14,25	15,41	16,53	18,01	19,88	21,92	24,21	26,52	—
	PDMA	13,87	10,63	8,17	10,90	16,03	21,49	27,76	35,03	42,70	50,52	58,36	—
CPI	DM	-25,62	-25,13	-24,43	-23,45	-22,19	-20,73	-19,11	-17,45	-15,85	-14,35	-13,06	—
	DMA	27,36	26,67	26,25	28,55	30,99	33,24	35,62	38,60	41,82	44,95	48,05	—
	PDMA	16,23	10,99	8,62	14,14	20,61	27,02	33,38	39,93	47,31	54,39	61,22	—
SPI	DM	-1,09	-0,87	-0,47	0,17	1,01	2,02	3,16	4,36	5,62	6,87	8,13	—
	DMA	4,49	4,37	4,07	3,77	3,99	4,29	5,09	6,15	7,33	8,99	10,73	—
	PDMA	12,14	10,37	7,84	8,52	12,67	17,44	23,64	31,43	39,32	47,69	56,26	—
Δ CS	DM	-24,53	-24,26	-23,96	-23,62	-23,20	-22,75	-22,27	-21,81	-21,47	-21,23	-21,20	—
	DMA	22,88	22,30	22,18	24,78	27,00	28,95	30,52	32,45	34,49	35,96	37,31	—
	PDMA	4,09	0,62	0,78	5,61	7,94	9,59	9,74	8,50	7,99	6,70	4,96	—

8.5.2 Geometrias Otimizadas

Tabela 8.329: Constantes de acoplamento CAM-B3LYP com otimização de geometrias na base aug-pcJ-2.

	Func.	CAMB3	CAMB3	Exp.
	α	19%	19%	—
	$\alpha + \beta$	65%	65%	—
	γ	0,33	0,33	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	455,6	441,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	15,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,7	-78,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-6,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,2	47,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	162,3	175,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1749,1	-1638,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-125,7	-124,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-22,4	-25,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-386,6	-279,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,9	128,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,0	202,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	266,9	262,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,0	57,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,6	73,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	164,4	160,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,0	2,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	14,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,0	20,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,5	34,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	129,1	127,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,6	-3,5	-4,7
Total	DM	-17,75	-9,61	—
	DMA	24,35	17,37	—
	PDMA	23,87	21,73	—
CPI	DM	-48,96	-29,35	—
	DMA	50,09	34,30	—
	PDMA	36,17	35,05	—
SPI	DM	5,15	4,87	—
	DMA	5,47	4,95	—
	PDMA	14,85	11,95	—
ΔCS	DM	-54,11	-34,22	—
	DMA	44,62	29,35	—
	PDMA	21,32	23,10	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS
DE LONGO ALCANCE

512

Tabela 8.330: Constantes de acoplamento ω B97 com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97 0%	ω B97 0%	ω B97 10%	ω B97 10%	ω B97 0% / 10%	ω B97 20%	ω B97 20%	ω B97 0% / 20%	ω B97 30%	ω B97 30%	ω B97 0% / 30%	Exp. —
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	455,6	443,8	489,1	489,1	477,7	522,9	533,0	511,7	556,9	533,0	546,0	500
CO	$^1J_{CO}$	23,9	23,5	20,6	19,1	20,2	17,0	14,5	16,6	13,2	14,5	12,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-71,8	-72,4	-75,4	-77,3	-76,1	-79,1	-82,0	-79,7	-82,8	-82,0	-83,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,6	-6,0	-7,2	-6,4	-6,6	-7,8	-6,8	-7,2	-8,5	-6,8	-7,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,0	40,0	40,3	41,5	41,3	41,6	43,1	42,6	42,9	43,1	43,9	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,5	-7,9	-9,0	-8,3	-8,4	-9,4	-8,6	-8,8	-9,9	-8,6	-9,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	159,3	169,5	165,5	177,0	175,6	171,5	184,2	181,4	177,5	184,2	187,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1663,0	-1551,8	-1633,0	-1530,8	-1529,0	-1602,1	-1505,2	-1505,2	-1570,5	-1505,2	-1480,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-111,8	-125,6	-91,9	-99,3	-105,6	-71,9	-73,0	-85,5	-51,8	-73,0	-65,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-14,8	-35,0	7,0	-4,5	-12,6	29,1	25,8	9,8	51,3	25,8	32,5	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-310,7	-200,6	-326,4	-178,6	-211,1	-343,2	-157,6	-222,2	-361,7	-157,6	-234,1	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	109,4	109,8	112,4	112,4	112,7	115,3	114,8	115,7	118,3	114,8	118,7	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,2	-11,2	-11,5	-11,5	-11,5	-11,8	-11,8	-11,8	-12,1	-11,8	-12,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	194,2	194,5	201,3	201,1	201,4	209,2	208,2	209,0	217,9	208,2	217,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	236,3	235,0	240,8	238,1	239,5	245,4	241,3	244,1	250,2	241,3	248,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,8	52,1	50,9	51,3	51,3	49,9	50,5	50,3	48,6	50,5	49,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,4	10,1	10,9	10,4	10,6	11,4	10,7	11,1	12,0	10,7	11,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	65,6	67,5	71,3	72,7	72,9	77,5	78,2	78,7	84,4	78,2	85,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	142,7	140,5	146,6	143,5	144,2	150,5	146,6	148,0	154,5	146,6	151,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-2,2	-1,8	-3,3	-2,8	-2,8	-4,5	-3,8	-3,9	-5,9	-3,8	-5,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,3	1,5	1,9	1,1	1,2	1,5	0,7	0,8	1,1	0,7	0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,5	12,1	11,7	12,3	12,2	11,9	12,5	12,4	12,1	12,5	12,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,0	17,5	17,3	17,7	17,8	17,6	17,9	18,0	17,9	17,9	18,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,5	30,2	31,4	33,0	33,1	34,4	35,8	36,0	37,4	35,8	39,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	109,0	108,0	112,1	110,7	111,1	115,2	113,3	114,3	118,3	113,3	117,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,2	-3,5	-3,5	-3,5	-3,9	-3,8	-3,8	-4,2	-3,8	-4,2	-4,7
Total	DM	-15,09	-7,88	-10,58	-1,42	-3,44	-6,03	5,13	1,05	-1,46	5,13	5,60	—
	DMA	18,42	18,96	14,03	14,20	13,92	13,68	13,96	9,92	16,44	13,96	11,20	—
	PDMA	19,64	28,17	12,34	17,03	19,08	15,29	16,26	12,81	26,67	16,26	20,72	—
CPI	DM	-31,85	-14,85	-23,75	-1,76	-6,86	-15,66	11,50	1,15	-7,66	11,50	9,17	—
	DMA	35,14	36,25	25,59	25,33	24,88	25,01	24,63	15,49	30,46	24,63	17,83	—
	PDMA	33,06	49,32	13,34	23,16	28,47	15,17	16,18	7,96	33,71	16,18	19,18	—
SPI	DM	-2,80	-2,77	-0,92	-1,17	-0,93	1,03	0,47	0,99	3,09	0,47	2,97	—
	DMA	6,16	6,27	5,56	6,04	5,87	5,38	6,13	5,83	6,16	6,13	6,33	—
	PDMA	9,80	12,66	11,60	12,54	12,20	15,37	16,33	16,36	21,50	16,33	21,85	—
Δ CS	DM	-29,05	-12,09	-22,83	-0,59	-5,94	-16,70	11,03	0,16	-10,76	11,03	6,20	—
	DMA	28,98	29,98	20,03	19,29	19,01	19,63	18,49	9,66	24,30	18,49	11,49	—
	PDMA	23,25	36,66	1,74	10,62	16,27	-0,19	-0,15	-8,40	12,21	-0,15	-2,67	—

Tabela 8.331: Constantes de acoplamento ω B97 com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97 0%	ω B97 0%	ω B97 10%	ω B97 10%	ω B97 0% / 10%	ω B97 20%	ω B97 20%	ω B97 0% / 20%	ω B97 30%	ω B97 30%	ω B97 0% / 30%	Exp. —
	$\alpha + \beta$	100%	100%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	—
	γ	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	455,6	443,8	474,5	472,2	462,9	508,4	517,1	497,1	542,6	561,6	531,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,9	23,5	21,3	20,8	20,8	17,7	16,2	17,3	13,9	11,4	13,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-71,8	-72,4	-73,8	-74,7	-74,4	-77,5	-79,7	-78,1	-81,2	-84,4	-81,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-6,0	-7,2	-6,8	-6,7	-7,9	-7,2	-7,3	-8,5	-7,6	-7,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,0	40,0	39,8	40,5	40,9	41,1	42,1	42,2	42,5	43,6	43,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,5	-7,9	-9,1	-8,7	-8,5	-9,6	-9,1	-8,9	-10,0	-9,4	-9,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	159,3	169,5	167,7	177,2	177,6	173,9	184,6	183,7	179,9	191,9	189,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1663,0	-1551,8	-1632,8	-1532,9	-1527,3	-1601,7	-1510,4	-1503,2	-1569,6	-1483,2	-1478,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-111,8	-125,6	-100,4	-114,5	-114,3	-80,0	-87,7	-93,7	-59,5	-60,5	-73,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-14,8	-35,0	-4,3	-24,2	-24,4	18,1	6,8	-1,4	40,7	37,6	21,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-310,7	-200,6	-307,8	-203,4	-197,5	-324,2	-182,2	-208,6	-342,0	-161,4	-220,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,4	109,8	112,1	112,4	112,5	115,1	115,0	115,5	118,1	117,5	118,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,2	-11,2	-11,8	-11,8	-11,8	-12,1	-12,1	-12,1	-12,4	-12,4	-12,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,2	194,5	199,5	199,6	199,8	207,1	206,6	207,1	215,5	214,1	215,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	236,3	235,0	241,3	239,9	239,9	246,0	243,1	244,6	250,8	246,4	249,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,8	52,1	50,8	51,1	51,1	49,8	50,2	50,2	48,6	49,2	49,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,1	11,1	10,8	10,8	11,6	11,2	11,3	12,2	11,5	11,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	67,5	69,5	71,4	71,3	75,5	76,8	76,9	82,1	82,6	83,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	142,7	140,5	146,2	143,8	143,9	150,2	147,0	147,7	154,2	150,1	151,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-1,8	-3,0	-2,5	-2,5	-4,1	-3,6	-3,6	-5,4	-4,7	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	1,5	1,9	1,0	1,1	1,5	0,5	0,7	1,1	0,1	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	12,1	11,6	12,0	12,1	11,7	12,3	12,3	12,0	12,5	12,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,0	17,5	17,4	17,8	17,9	17,6	18,0	18,1	17,9	18,2	18,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,5	30,2	30,3	31,9	32,0	33,3	34,8	35,0	36,3	37,7	38,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,0	108,0	111,8	110,9	110,8	115,0	113,5	114,0	118,1	116,2	117,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-3,5	-3,4	-3,5	-3,8	-3,8	-3,8	-4,1	-4,1	-4,1	-4,7
Total	DM	-15,09	-7,88	-11,23	-4,41	-4,25	-6,63	2,12	0,31	-1,97	8,83	4,91	—
	DMA	18,42	18,96	14,56	15,31	15,66	11,53	11,85	10,58	14,04	15,13	10,11	—
	PDMA	19,64	28,17	15,21	22,51	22,54	11,29	13,82	15,67	21,98	22,91	16,64	—
CPI	DM	-31,85	-14,85	-24,82	-8,67	-8,35	-16,60	4,51	-0,16	-8,37	18,06	8,03	—
	DMA	35,14	36,25	27,05	28,36	29,22	20,22	20,29	17,53	25,25	27,43	15,66	—
	PDMA	33,06	49,32	21,28	36,87	37,52	7,28	11,03	16,20	25,08	25,81	11,27	—
SPI	DM	-2,80	-2,77	-1,26	-1,28	-1,25	0,69	0,36	0,65	2,73	2,05	2,63	—
	DMA	6,16	6,27	5,39	5,73	5,71	5,15	5,67	5,49	5,82	6,11	6,04	—
	PDMA	9,80	12,66	10,76	11,98	11,54	14,23	15,88	15,27	19,70	20,79	20,59	—
Δ CS	DM	-29,05	-12,09	-23,56	-7,39	-7,10	-17,29	4,15	-0,82	-11,10	16,01	5,40	—
	DMA	28,98	29,98	21,66	22,63	23,50	15,06	14,62	12,03	19,43	21,32	9,62	—
	PDMA	23,25	36,66	10,52	24,89	25,98	-6,95	-4,85	0,92	5,38	5,02	-9,32	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS DE LONGO ALCANCE

514

Tabela 8.332: Constantes de acoplamento ω B97 com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97 0%	ω B97 0%	ω B97 10%	ω B97 10%	ω B97 0% / 10%	ω B97 20%	ω B97 20%	ω B97 0% / 20%	ω B97 30%	ω B97 30%	ω B97 0% / 30%	Exp. —
	$\alpha + \beta$	100%	100%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	—
	γ	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	455,6	443,8	459,9	455,4	448,1	494,0	500,8	482,5	528,3	545,8	517,1	500
CO	$^1J_{CO}$	23,9	23,5	21,9	22,4	21,5	18,4	17,9	18,0	14,6	13,1	14,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-71,8	-72,4	-72,1	-72,4	-72,7	-75,8	-77,4	-76,4	-79,5	-82,2	-80,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,6	-6,0	-7,3	-7,1	-6,7	-7,9	-7,6	-7,4	-8,6	-8,0	-8,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	39,0	40,0	39,4	39,4	40,5	40,7	41,0	41,8	42,0	42,7	43,1	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,5	-7,9	-9,2	-9,2	-8,6	-9,7	-9,6	-9,0	-10,1	-9,9	-9,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	159,3	169,5	169,8	177,3	179,7	176,2	185,0	185,9	182,4	192,5	191,9	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1663,0	-1551,8	-1633,7	-1530,7	-1526,7	-1602,4	-1513,2	-1502,4	-1570,0	-1489,2	-1476,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-111,8	-125,6	-109,4	-130,5	-123,4	-88,5	-102,9	-102,3	-67,6	-75,4	-81,2	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-14,8	-35,0	-16,1	-44,8	-36,5	6,8	-12,7	-13,0	29,9	18,8	10,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-310,7	-200,6	-289,2	-229,4	-183,8	-305,5	-207,5	-194,9	-322,8	-185,9	-206,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	109,4	109,8	111,8	112,4	112,2	114,9	115,1	115,3	117,9	117,7	118,3	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,2	-11,2	-12,0	-12,0	-12,0	-12,3	-12,3	-12,3	-12,7	-12,7	-12,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	194,2	194,5	197,7	198,0	198,2	205,1	205,0	205,2	213,2	212,5	213,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	236,3	235,0	241,7	241,6	240,4	246,4	244,9	245,1	251,3	248,3	249,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	51,8	52,1	50,7	50,8	51,0	49,7	49,9	50,0	48,5	48,9	48,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,4	10,1	11,4	11,3	11,0	11,9	11,6	11,5	12,4	11,9	12,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	65,6	67,5	67,8	69,8	69,8	73,6	75,4	75,2	79,9	81,1	81,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	142,7	140,5	145,8	144,2	143,6	149,8	147,3	147,4	153,9	150,6	151,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-2,2	-1,8	-2,6	-2,3	-2,2	-3,8	-3,3	-3,3	-5,0	-4,4	-4,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,3	1,5	1,9	0,9	1,1	1,5	0,4	0,7	1,0	0,0	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,5	12,1	11,4	11,8	11,9	11,6	12,0	12,1	11,8	12,2	12,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,0	17,5	17,4	17,9	18,0	17,7	18,2	18,2	18,0	18,4	18,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,5	30,2	29,2	30,7	30,9	32,2	33,7	33,9	35,2	36,6	36,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	109,0	108,0	111,5	111,1	110,5	114,7	113,8	113,7	117,9	116,5	116,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,2	-3,4	-3,4	-3,4	-3,8	-3,7	-3,7	-4,1	-4,0	-4,1	-4,7
Total	DM	-15,09	-7,88	-11,95	-7,38	-5,10	-7,29	-0,89	-0,51	-2,58	5,80	4,16	—
	DMA	18,42	18,96	16,01	16,26	17,50	10,89	11,65	12,30	11,77	12,21	9,52	—
	PDMA	19,64	28,17	18,49	28,70	26,73	12,23	19,12	18,99	17,59	16,27	14,70	—
CPI	DM	-31,85	-14,85	-26,08	-15,50	-9,95	-17,69	-2,46	-1,65	-9,30	11,04	6,72	—
	DMA	35,14	36,25	30,66	31,03	33,74	18,93	20,28	21,92	20,34	21,07	14,68	—
	PDMA	33,06	49,32	30,06	51,11	46,99	10,47	24,41	25,42	16,69	11,43	8,91	—
SPI	DM	-2,80	-2,77	-1,59	-1,42	-1,54	0,34	0,26	0,33	2,34	1,97	2,29	—
	DMA	6,16	6,27	5,27	5,43	5,59	4,99	5,31	5,25	5,49	5,71	5,74	—
	PDMA	9,80	12,66	10,01	12,26	11,87	13,52	15,24	14,27	18,26	19,82	18,95	—
Δ CS	DM	-29,05	-12,09	-24,50	-14,08	-8,41	-18,03	-2,72	-1,97	-11,64	9,07	4,43	—
	DMA	28,98	29,98	25,40	25,59	28,14	13,93	14,97	16,67	14,85	15,36	8,94	—
	PDMA	23,25	36,66	20,05	38,85	35,12	-3,06	9,17	11,15	-1,56	-8,39	-10,04	—

Tabela 8.333: Constantes de acoplamento ω B97X com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97X 15,77%	ω B97X 15,77%	ω B97X 10%	ω B97X 10%	ω B97X 15,77% / 10%	ω B97X 20%	ω B97X 20%	ω B97X 15,77% / 20%	ω B97X 30%	ω B97X 30%	ω B97X 15,77% / 30%	Exp.
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	497,9	494,5	486,5	438,9	483,1	507,3	535,6	503,9	533,4	635,1	529,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,1	17,7	18,9	21,4	17,5	19,2	14,9	17,7	18,8	8,1	17,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,5	-77,7	-74,1	-70,1	-75,3	-78,4	-83,3	-79,6	-83,5	-96,9	-84,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-5,8	-4,6	-4,5	-4,0	-7,9	-6,8	-7,2	-12,0	-9,4	-11,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,5	42,7	39,7	39,4	40,9	42,8	45,1	44,1	46,5	50,9	47,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,0	-7,0	-6,6	-6,3	-10,1	-9,1	-9,4	-14,2	-12,0	-13,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,0	175,4	153,0	152,5	163,3	174,7	192,1	185,0	201,1	233,1	211,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1643,0	-1537,0	-1641,6	-1518,7	-1536,7	-1642,9	-1542,1	-1536,3	-1639,3	-1525,0	-1531,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-97,5	-103,2	-103,0	-131,2	-108,9	-93,0	-83,1	-98,6	-81,1	-37,3	-86,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	3,3	-6,5	-3,6	-40,9	-13,7	8,8	17,7	-0,8	23,3	72,1	14,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-326,5	-210,6	-288,1	-264,9	-180,2	-358,9	-172,7	-235,4	-459,2	-86,7	-307,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,5	112,5	105,5	108,0	105,5	118,0	115,9	118,0	132,6	124,3	132,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-9,5	-9,4	-9,5	-12,7	-12,7	-12,7	-17,0	-16,6	-17,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	193,0	193,5	185,6	186,6	186,4	199,6	199,0	199,7	221,6	213,7	220,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	240,2	237,9	223,5	227,9	221,3	253,8	245,7	251,3	291,7	265,7	288,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	53,6	53,7	53,9	53,8	52,6	53,2	53,0	47,4	51,2	48,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,0	9,6	8,4	8,6	8,0	11,6	10,5	11,1	17,8	13,6	16,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,5	66,9	60,3	62,5	63,0	68,5	70,0	70,4	83,2	78,4	83,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	145,4	142,7	135,5	136,5	133,0	153,6	147,6	150,6	177,0	160,1	172,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,0	0,2	0,5	0,4	-2,9	-2,3	-2,4	-9,2	-6,1	-7,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,9	2,0	3,9	3,6	3,0	1,8	0,7	0,9	-2,5	-3,1	-3,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	12,2	10,6	10,9	11,3	12,4	13,3	13,0	16,1	16,4	16,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,2	17,8	15,6	16,4	16,2	18,7	18,8	19,2	24,1	22,0	24,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,1	30,9	26,8	28,2	28,5	31,0	32,7	32,8	36,3	36,9	38,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	112,4	111,1	105,1	106,6	103,8	118,2	114,5	116,8	133,8	123,2	132,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,1	-2,4	-2,3	-2,3	-3,8	-3,8	-3,8	-5,7	-5,5	-5,7	-4,7
Total	DM	-11,56	-3,39	-13,31	-11,20	-5,50	-10,12	2,55	-1,68	-6,31	17,74	3,10	—
	DMA	14,27	12,92	17,19	17,51	17,60	13,99	13,29	10,12	23,63	27,72	13,14	—
	PDMA	14,49	17,41	26,02	37,53	28,43	10,27	10,55	12,39	41,39	49,91	34,88	—
CPI	DM	-24,79	-5,40	-24,07	-20,51	-5,56	-25,39	6,13	-5,23	-27,92	35,55	-5,00	—
	DMA	26,35	22,98	28,84	30,76	29,71	27,63	25,27	18,21	39,30	56,12	15,53	—
	PDMA	16,20	23,80	25,70	54,57	34,88	11,80	9,57	15,15	25,08	64,08	13,64	—
SPI	DM	-1,85	-1,92	-5,42	-4,37	-5,45	1,09	-0,07	0,92	9,54	4,67	9,03	—
	DMA	5,40	5,55	8,65	7,79	8,71	3,99	4,51	4,19	12,14	6,90	11,39	—
	PDMA	13,24	12,73	26,25	25,02	23,69	9,15	11,26	10,36	53,35	39,52	50,46	—
Δ CS	DM	-22,94	-3,48	-18,65	-16,14	-0,12	-26,48	6,19	-6,15	-37,46	30,88	-14,03	—
	DMA	20,95	17,44	20,19	22,98	21,00	23,63	20,77	14,02	27,16	49,22	4,13	—
	PDMA	2,96	11,07	-0,56	29,55	11,18	2,66	-1,70	4,79	-28,27	24,56	-36,82	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS
DE LONGO ALCANCE

516

Tabela 8.334: Constantes de acoplamento ω B97X com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97X 15,77%	ω B97X 15,77%	ω B97X 10%	ω B97X 10%	ω B97X 15,77% / 10%	ω B97X 20%	ω B97X 20%	ω B97X 15,77% / 20%	ω B97X 30%	ω B97X 30%	ω B97X 15,77% / 30%	Exp. —
	$\alpha + \beta$	100%	100%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	—
	γ	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	497,9	494,5	488,2	431,7	484,8	508,1	528,4	504,7	533,3	628,3	529,8	500
CO	$^1J_{CO}$	19,1	17,7	18,5	21,8	17,0	18,8	15,2	17,3	18,4	8,3	16,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-76,5	-77,7	-74,2	-68,9	-75,3	-78,3	-82,1	-79,5	-83,3	-95,8	-84,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,4	-5,8	-4,3	-4,3	-3,7	-7,5	-6,6	-6,9	-11,6	-9,2	-10,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,5	42,7	39,7	38,8	40,9	42,7	44,6	44,0	46,3	50,5	47,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,7	-8,0	-6,5	-6,3	-5,9	-9,6	-8,8	-8,9	-13,6	-11,6	-12,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	165,0	175,4	157,2	152,3	167,5	178,3	191,9	188,7	204,0	233,1	214,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1643,0	-1537,0	-1639,8	-1509,7	-1534,7	-1643,6	-1542,4	-1536,5	-1642,0	-1532,3	-1533,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-97,5	-103,2	-108,8	-141,7	-114,7	-98,8	-92,6	-104,5	-87,0	-45,8	-92,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	3,3	-6,5	-9,4	-52,3	-19,6	3,0	7,1	-6,7	17,6	63,3	8,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-326,5	-210,6	-277,5	-278,7	-172,0	-345,7	-184,2	-225,8	-440,1	-95,7	-294,4	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	112,5	112,5	104,9	107,9	104,9	117,1	115,9	117,1	131,4	124,2	131,4	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,3	-11,3	-8,9	-8,8	-8,9	-12,1	-12,1	-12,1	-16,1	-15,9	-16,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	193,0	193,5	184,2	185,0	185,1	197,4	197,4	197,7	217,5	211,9	216,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	240,2	237,9	221,3	227,5	219,1	250,9	245,1	248,4	287,5	264,9	284,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,4	53,6	53,2	53,4	53,3	52,6	52,9	52,9	48,4	51,2	49,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,0	9,6	8,0	8,4	7,7	10,9	10,1	10,4	16,3	12,9	15,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,5	66,9	59,4	61,4	62,2	66,8	68,9	69,0	79,5	77,1	80,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	145,4	142,7	134,1	136,1	131,7	151,7	147,1	148,8	174,0	159,3	170,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,3	-1,0	0,6	0,9	0,8	-2,2	-1,8	-1,8	-7,5	-5,4	-6,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,9	2,0	4,2	4,1	3,3	2,4	1,3	1,4	-1,2	-2,3	-2,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,5	12,2	10,4	10,5	11,1	11,9	12,8	12,6	15,0	15,7	15,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,2	17,8	15,3	16,2	15,8	18,1	18,4	18,7	22,8	21,4	23,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,1	30,9	26,0	27,4	27,8	30,1	31,8	31,9	35,3	36,3	37,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	112,4	111,1	104,2	106,4	103,0	117,1	114,4	115,8	132,4	122,9	130,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,1	-2,1	-2,0	-2,1	-3,5	-3,5	-3,5	-5,4	-5,2	-5,3	-4,7
Total	DM	-11,56	-3,39	-13,35	-12,61	-5,61	-10,32	0,93	-1,99	-6,66	16,04	2,57	—
	DMA	14,27	12,92	18,04	18,00	18,33	13,78	12,99	10,82	21,76	26,28	12,70	—
	PDMA	14,49	17,41	30,10	43,48	32,32	10,36	12,06	14,69	31,83	42,97	30,03	—
CPI	DM	-24,79	-5,40	-23,44	-23,47	-5,15	-24,86	2,69	-5,00	-27,17	32,02	-4,79	—
	DMA	26,35	22,98	30,18	31,60	30,82	27,19	24,62	20,04	37,39	53,56	16,74	—
	PDMA	16,20	23,80	30,53	63,30	39,56	14,23	13,19	20,16	19,86	56,53	16,51	—
SPI	DM	-1,85	-1,92	-5,95	-4,65	-5,95	0,34	-0,36	0,21	8,39	4,33	7,97	—
	DMA	5,40	5,55	9,14	8,02	9,18	3,94	4,47	4,07	10,29	6,27	9,75	—
	PDMA	13,24	12,73	29,79	28,94	27,02	7,52	11,24	10,68	40,61	33,02	39,96	—
Δ CS	DM	-22,94	-3,48	-17,48	-18,83	0,81	-25,20	3,05	-5,21	-35,56	27,69	-12,76	—
	DMA	20,95	17,44	21,04	23,58	21,64	23,25	20,15	15,97	27,10	47,29	6,99	—
	PDMA	2,96	11,07	0,74	34,36	12,54	6,71	1,96	9,48	-20,75	23,51	-23,45	—

Tabela 8.335: Constantes de acoplamento ω B97X com otimização de geometrias para $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2.

	Func. α	ω B97X 15,77%	ω B97X 15,77%	ω B97X 10%	ω B97X 10%	ω B97X 15,77% / 10%	ω B97X 20%	ω B97X 20%	ω B97X 15,77% / 20%	ω B97X 30%	ω B97X 30%	ω B97X 15,77% / 30%	Exp.
	$\alpha + \beta$	100%	100%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	60%	—
	γ	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	497,9	494,5	490,1	424,6	486,7	509,2	520,5	505,8	533,4	621,2	530,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,1	17,7	18,1	22,3	16,6	18,3	15,6	16,8	17,9	8,6	16,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,5	-77,7	-74,3	-67,6	-75,4	-78,3	-80,9	-79,5	-83,2	-94,7	-84,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-5,8	-4,0	-4,1	-3,4	-7,1	-6,4	-6,5	-11,1	-9,0	-10,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,5	42,7	39,7	38,2	40,9	42,7	44,1	43,9	46,1	50,0	47,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,0	-6,1	-6,1	-5,5	-9,1	-8,4	-8,4	-13,0	-11,2	-12,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,0	175,4	161,9	151,8	172,2	182,4	191,8	192,8	207,5	233,3	217,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1643,0	-1537,0	-1636,1	-1497,5	-1531,1	-1642,7	-1540,4	-1535,3	-1643,4	-1538,0	-1534,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-97,5	-103,2	-114,6	-152,5	-120,5	-104,7	-102,7	-110,4	-92,9	-54,7	-98,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	3,3	-6,5	-15,3	-64,2	-25,6	-2,8	-2,8	-12,7	11,7	54,2	2,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-326,5	-210,6	-267,1	-292,6	-163,9	-333,2	-196,4	-216,4	-422,3	-105,3	-282,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,5	112,5	104,3	108,0	104,3	116,2	115,9	116,2	130,3	124,1	130,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,3	-8,4	-8,2	-8,4	-11,4	-11,4	-11,4	-15,3	-15,1	-15,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	193,0	193,5	182,9	183,3	184,0	195,3	195,7	195,9	213,8	210,1	213,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	240,2	237,9	219,2	227,3	217,0	248,2	244,7	245,7	283,6	264,1	280,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,4	53,6	52,6	53,0	52,8	52,4	52,6	52,6	49,1	51,1	49,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,0	9,6	7,7	8,2	7,3	10,3	9,8	9,8	15,0	12,3	14,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,5	66,9	58,5	60,2	61,5	65,3	67,7	67,8	76,5	75,8	77,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	145,4	142,7	132,9	135,8	130,5	150,0	146,6	147,2	171,3	158,7	167,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,0	0,9	1,3	1,1	-1,6	-1,3	-1,3	-6,2	-4,7	-5,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,9	2,0	4,5	4,6	3,6	2,8	1,8	1,9	-0,2	-1,5	-1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,5	12,2	10,2	10,1	10,9	11,5	12,3	12,2	14,1	15,1	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	17,2	17,8	14,9	15,9	15,5	17,6	18,1	18,2	21,7	20,9	22,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,1	30,9	25,2	26,5	27,0	29,2	31,1	31,0	34,2	35,7	35,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	112,4	111,1	103,5	106,3	102,2	116,1	114,1	114,8	131,0	122,6	129,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,1	-1,9	-1,7	-1,8	-3,3	-3,3	-3,2	-5,0	-5,0	-5,0	-4,7
Total	DM	-11,56	-3,39	-13,30	-13,93	-5,63	-10,45	-0,64	-2,21	-6,94	14,37	2,14	—
	DMA	14,27	12,92	18,76	18,39	18,98	13,70	12,82	11,91	20,53	24,73	12,90	—
	PDMA	14,49	17,41	33,84	49,58	36,17	14,01	15,00	17,23	25,56	36,03	26,22	—
CPI	DM	-24,79	-5,40	-22,60	-26,24	-4,54	-24,20	-0,63	-4,62	-26,38	28,50	-4,48	—
	DMA	26,35	22,98	31,27	32,24	31,72	26,76	24,28	22,36	36,65	50,72	19,17	—
	PDMA	16,20	23,80	35,28	72,32	44,30	18,02	19,92	25,60	19,04	48,66	19,89	—
SPI	DM	-1,85	-1,92	-6,47	-4,90	-6,44	-0,37	-0,65	-0,45	7,32	4,01	7,00	—
	DMA	5,40	5,55	9,58	8,23	9,64	4,13	4,41	4,25	8,71	5,67	8,29	—
	PDMA	13,24	12,73	32,79	32,90	30,20	11,07	11,40	11,09	30,33	26,77	30,87	—
Δ CS	DM	-22,94	-3,48	-16,13	-21,34	1,90	-23,83	0,02	-4,17	-33,70	24,49	-11,48	—
	DMA	20,95	17,44	21,69	24,00	22,08	22,64	19,88	18,12	27,95	45,04	10,88	—
	PDMA	2,96	11,07	2,49	39,42	14,10	6,95	8,53	14,51	-11,29	21,88	-10,99	—

8.5. VARIAÇÃO DA PORCENTAGEM DE E_X^{HF} PARA OS FUNCIONAIS
DE LONGO ALCANCE

518

Tabela 8.336: Constantes de acoplamento ω B97X com otimização de geometrias na base aug-pcJ-2.

	Func.	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	ω B97X	Exp.
	α	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	15,77%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,30	0,30	0,35	0,35	0,30 / 0,35	0,40	0,40	0,30 / 0,40	0,45	0,45	0,30 / 0,45	—
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	497,9	494,5	504,3	504,3	500,9	511,3	515,3	507,9	518,7	527,7	515,4	500
CO	$^1J_{CO}$	19,1	17,7	18,9	16,7	17,4	18,6	15,7	17,1	18,2	14,5	16,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-76,5	-77,7	-77,2	-79,1	-78,4	-78,1	-80,8	-79,3	-79,0	-82,5	-80,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,4	-5,8	-6,7	-5,8	-6,0	-7,0	-5,9	-6,4	-7,4	-6,1	-6,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,5	42,7	41,7	43,3	42,9	42,0	43,9	43,2	42,4	44,8	43,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,7	-8,0	-9,0	-8,1	-8,3	-9,3	-8,3	-8,7	-9,8	-8,5	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	165,0	175,4	165,8	178,1	176,1	168,2	182,5	178,4	172,0	188,0	182,1	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1643,0	-1537,0	-1641,6	-1539,7	-1538,2	-1639,2	-1538,2	-1538,9	-1635,0	-1535,6	-1538,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-97,5	-103,2	-90,1	-93,1	-95,8	-82,5	-82,4	-88,1	-74,6	-72,2	-80,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	3,3	-6,5	11,9	5,5	2,1	20,9	18,1	11,2	29,8	29,8	20,2	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-326,5	-210,6	-341,5	-198,0	-221,2	-356,7	-185,0	-231,5	-371,9	-171,9	-241,3	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	112,5	112,5	113,1	113,0	113,1	114,2	113,7	114,2	115,7	114,8	115,7	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,3	-11,3	-11,5	-11,5	-11,5	-11,9	-11,9	-11,9	-12,4	-12,3	-12,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	193,0	193,5	194,8	195,0	195,0	197,2	197,0	197,2	200,3	199,6	200,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	240,2	237,9	241,2	237,8	238,9	243,1	238,4	240,7	245,7	239,7	243,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,4	53,6	53,4	53,7	53,7	53,1	53,6	53,5	52,7	53,4	53,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,0	9,6	10,3	9,7	9,9	10,8	10,0	10,3	11,3	10,3	10,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	64,5	66,9	66,0	68,1	68,1	68,0	69,8	69,8	70,5	71,8	72,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	145,4	142,7	146,5	143,2	143,7	148,2	144,2	145,3	150,4	145,7	147,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,3	-1,0	-1,8	-1,4	-1,5	-2,5	-2,0	-2,1	-3,4	-2,7	-2,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	2,9	2,0	2,5	1,6	1,6	2,0	1,1	1,2	1,5	0,6	0,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_c}$	11,5	12,2	11,8	12,5	12,4	12,1	12,8	12,7	12,4	13,1	13,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HH_t}$	17,2	17,8	17,4	17,9	17,9	17,7	18,1	18,1	18,1	18,4	18,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,1	30,9	30,0	31,6	31,7	31,1	32,6	32,7	32,3	33,7	33,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	112,4	111,1	113,1	111,5	111,8	114,3	112,3	113,0	115,8	113,5	114,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,2	-3,1	-3,3	-3,3	-3,3	-3,6	-3,6	-3,6	-3,8	-3,8	-3,8	-4,7
Total	DM	-11,56	-3,39	-10,96	-1,60	-2,77	-10,12	0,62	-1,88	-9,02	3,03	-0,72	—
	DMA	14,27	12,92	13,96	12,37	11,57	14,22	12,43	10,52	15,25	14,01	10,05	—
	PDMA	14,49	17,41	9,96	13,42	14,01	9,18	11,09	10,13	13,71	15,41	10,53	—
CPI	DM	-24,79	-5,40	-24,04	-1,53	-4,49	-22,97	3,09	-3,27	-21,59	7,92	-1,69	—
	DMA	26,35	22,98	26,11	21,73	20,04	27,34	21,96	17,85	30,01	25,85	17,09	—
	PDMA	16,20	23,80	9,74	14,75	16,54	10,41	10,11	8,69	16,29	19,25	7,87	—
SPI	DM	-1,85	-1,92	-1,37	-1,65	-1,51	-0,69	-1,20	-0,87	0,20	-0,55	-0,01	—
	DMA	5,40	5,55	5,05	5,50	5,36	4,61	5,44	5,13	4,43	5,33	4,88	—
	PDMA	13,24	12,73	10,13	12,45	12,16	8,28	11,80	11,19	11,82	12,59	12,48	—
Δ CS	DM	-22,94	-3,48	-22,66	0,12	-2,98	-22,29	4,29	-2,41	-21,79	8,47	-1,68	—
	DMA	20,95	17,44	21,06	16,23	14,68	22,73	16,52	12,72	25,58	20,52	12,21	—
	PDMA	2,96	11,07	-0,38	2,30	4,38	2,13	-1,69	-2,50	4,47	6,66	-4,61	—

Tabela 8.337: Constantes de acoplamento ω B97XD com otimização de geometrias na base aug-pcJ-2.

	Func.	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	ω 97XD	Exp.
	α	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	22,20%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,20	0,20	0,30	0,30	0,20	0,35	0,35	0,20	0,40	0,40	0,20	0,45	0,45	0,20	—
						/			/			/			/	
	Geom.	Exp.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.	Otm.	Otm.	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	484,2	487,1	494,0	499,4	496,8	499,4	507,9	502,2	505,3	517,7	508,1	511,7	528,6	514,4	500
CO	$^1J_{CO}$	19,6	17,9	19,1	16,4	17,4	18,9	15,6	17,2	18,6	14,7	16,9	18,2	13,7	16,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-74,7	-75,8	-75,7	-78,0	-76,9	-76,3	-79,3	-77,5	-77,1	-80,7	-78,2	-77,9	-82,3	-79,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,4	-6,0	-6,7	-5,8	-6,2	-7,0	-5,9	-6,5	-7,3	-6,0	-6,8	-7,7	-6,2	-7,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,9	43,0	42,1	43,8	43,1	42,3	44,3	43,3	42,5	45,0	43,5	42,9	45,7	43,9	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-9,0	-8,4	-9,3	-8,4	-8,8	-9,7	-8,5	-9,1	-10,1	-8,7	-9,5	-10,5	-9,0	-9,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	176,7	186,4	173,6	186,2	183,1	174,3	188,5	183,7	176,6	192,4	185,9	180,3	197,5	189,3	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1637,8	-1533,9	-1631,8	-1529,0	-1531,5	-1628,7	-1527,7	-1530,9	-1624,6	-1525,2	-1529,8	-1619,1	-1520,8	-1527,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-103,1	-104,8	-91,7	-90,2	-93,3	-85,0	-81,7	-86,6	-77,9	-72,8	-79,5	-70,7	-63,1	-72,3	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-3,0	-8,4	10,2	9,3	4,9	17,9	19,3	12,6	25,9	29,6	20,7	33,9	40,6	28,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-333,4	-220,1	-359,3	-203,2	-239,2	-373,9	-193,2	-249,5	-389,0	-182,6	-259,6	-404,3	-170,6	-269,4	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	114,7	114,7	114,7	114,4	114,7	115,2	114,7	115,2	116,2	115,4	116,2	117,6	116,3	117,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,8	-11,8	-12,0	-12,0	-12,0	-12,3	-12,3	-12,3	-12,7	-12,7	-12,7	-13,2	-13,1	-13,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	191,3	191,8	192,9	193,2	193,1	194,4	194,5	194,5	196,6	196,2	196,5	199,5	198,3	199,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	245,6	243,0	244,8	240,9	242,3	245,8	240,8	243,2	247,6	241,4	244,9	250,1	242,6	247,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	53,7	53,9	54,2	54,5	54,4	54,2	54,6	54,4	53,9	54,6	54,3	53,5	54,3	53,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	10,1	9,7	10,3	9,6	9,8	10,6	9,8	10,2	11,1	10,1	10,6	11,8	10,5	11,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	63,7	66,1	65,3	67,5	67,4	66,6	68,5	68,5	68,4	69,9	70,0	70,7	71,6	71,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	148,1	145,3	148,3	144,8	145,4	149,2	145,2	146,3	150,8	146,1	147,7	152,9	147,4	149,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-1,0	-0,8	-1,5	-1,2	-1,2	-2,0	-1,6	-1,6	-2,7	-2,1	-2,2	-3,5	-2,7	-2,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	3,0	2,0	2,6	1,7	1,6	2,2	1,3	1,3	1,7	0,8	0,8	1,1	0,3	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,5	12,2	11,9	12,6	12,5	12,1	12,9	12,7	12,4	13,2	13,0	12,8	13,6	13,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,5	18,1	17,6	18,1	18,1	17,8	18,3	18,3	18,2	18,5	18,6	18,6	18,8	18,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	29,0	30,7	30,3	31,9	31,9	31,2	32,6	32,7	32,1	33,5	33,7	33,3	34,5	34,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	115,2	113,9	115,2	113,5	113,8	115,8	113,8	114,5	116,9	114,6	115,6	118,3	115,6	117,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,3	-3,3	-3,5	-3,5	-3,5	-3,7	-3,7	-3,6	-3,9	-3,9	-3,9	-4,2	-4,1	-4,1	-4,7
Total	DM	-11,64	-3,17	-11,13	-0,71	-2,59	-10,60	0,91	-1,99	-9,83	2,85	-1,16	-8,80	5,12	-0,10	—
	DMA	14,39	11,95	13,81	10,63	9,83	13,45	10,99	8,67	14,25	12,53	8,38	15,41	14,31	8,55	—
	PDMA	16,48	17,27	10,63	11,41	12,44	8,17	10,98	9,42	10,90	14,27	9,37	16,03	18,87	12,79	—
CPI	DM	-25,99	-5,81	-25,13	-0,04	-4,68	-24,43	3,49	-3,82	-23,45	7,50	-2,65	-22,19	12,11	-1,21	—
	DMA	27,92	21,94	26,67	18,60	16,94	26,25	19,40	14,35	28,55	23,14	13,96	30,99	27,42	14,55	—
	PDMA	20,60	24,06	10,99	11,02	13,09	8,62	10,28	6,46	14,14	18,35	7,31	20,61	27,19	12,02	—
SPI	DM	-1,12	-1,24	-0,87	-1,21	-1,05	-0,47	-0,98	-0,65	0,17	-0,57	-0,07	1,01	-0,01	0,71	—
	DMA	4,47	4,63	4,37	4,79	4,63	4,07	4,82	4,51	3,77	4,75	4,29	3,99	4,69	4,15	—
	PDMA	13,47	12,29	10,37	11,69	11,96	7,84	11,50	11,59	8,52	11,27	10,88	12,67	12,77	13,35	—
Δ CS	DM	-24,87	-4,57	-24,26	1,17	-3,63	-23,96	4,47	-3,16	-23,62	8,07	-2,59	-23,20	12,12	-1,92	—
	DMA	23,45	17,31	22,30	13,81	12,31	22,18	14,58	9,84	24,78	18,38	9,67	27,00	22,72	10,41	—
	PDMA	7,13	11,77	0,62	-0,67	1,13	0,78	-1,23	-5,13	5,61	7,07	-3,57	7,94	14,42	-1,33	—

8.6 Geração de novos funcionais de longo alcance

8.6.1 Geometrias Experimentais

Tabela 8.338: Constantes de acoplamento LC-BLYP variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,33$ corresponde ao CAM-B3LYP.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	450,6	472,8	495,2	518,0	541,0	564,5	588,3	612,6	637,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,0	18,0	16,0	13,8	11,5	9,1	6,5	3,8	1,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,9	-79,4	-81,9	-84,5	-87,1	-89,7	-92,5	-95,3	-98,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-7,6	-8,7	-9,8	-11,0	-12,2	-13,4	-14,7	-16,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,3	45,2	46,1	47,1	48,1	49,1	50,2	51,2	52,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-10,3	-11,2	-12,2	-13,2	-14,2	-15,3	-16,4	-17,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,3	155,9	166,4	176,9	187,4	197,9	208,3	218,6	228,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1775,7	-1744,2	-1710,6	-1675,1	-1638,1	-1599,7	-1560,3	-1519,9	-1478,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-133,4	-119,0	-104,3	-89,6	-74,8	-59,8	-44,8	-29,7	-14,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-27,4	-12,2	3,1	18,5	34,1	49,8	65,7	81,6	97,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-388,5	-419,3	-453,2	-492,2	-539,5	-600,9	-688,5	-846,0	-1124,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,7	126,3	129,0	131,7	134,5	137,4	140,3	143,3	146,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-13,1	-13,9	-14,7	-15,5	-16,3	-17,2	-18,0	-18,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	199,6	204,4	209,9	216,2	223,4	231,9	241,9	253,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	257,9	262,3	266,9	271,9	277,2	283,0	289,4	296,4	304,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,3	57,8	57,1	56,0	54,6	52,7	50,3	47,2	43,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,9	12,0	13,1	14,5	16,1	17,9	20,2	22,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,8	69,5	73,6	78,3	83,8	90,3	98,1	108,0	121,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,4	161,8	165,4	169,3	173,5	178,1	183,3	189,3	196,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,9	-3,1	-4,5	-6,2	-8,2	-10,8	-14,2	-18,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,5	3,8	3,0	2,0	1,0	-0,1	-1,6	-3,5	-5,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,4	13,7	14,1	14,6	15,3	16,1	17,2	18,6	20,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,4	20,0	20,6	21,4	22,3	23,5	24,9	26,8	29,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,0	32,2	34,5	36,8	39,3	41,8	44,4	47,1	49,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	124,0	126,7	129,5	132,4	135,4	138,3	141,4	144,5	147,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,1	-6,7	-7,2	-4,7
Total	DM	-21,47	-18,43	-15,35	-12,33	-9,45	-6,95	-5,28	97,45	-11,24	—
	DMA	25,95	23,71	22,20	22,99	26,26	31,37	37,75	108,84	61,97	—
	PDMA	28,22	20,40	16,37	18,62	31,88	47,34	65,29	107,72	114,29	—
CPI	DM	-54,42	-49,18	-44,00	-39,09	-34,77	-31,55	-30,61	208,81	-52,11	—
	DMA	56,00	49,95	44,42	43,60	48,15	56,73	67,83	230,70	113,65	—
	PDMA	42,38	30,20	21,00	19,04	34,22	52,10	71,22	141,12	117,85	—
SPI	DM	2,69	4,13	5,66	7,30	9,11	11,09	13,29	15,79	18,73	—
	DMA	3,91	4,47	5,90	7,87	10,21	12,77	15,70	19,48	24,06	—
	PDMA	17,83	13,21	12,98	18,32	30,18	43,84	60,95	83,24	111,68	—
ΔCS	DM	-57,11	-53,31	-49,66	-46,39	-43,89	-42,64	-43,90	193,02	-70,84	—
	DMA	52,09	45,47	38,52	35,73	37,95	43,95	52,13	211,22	89,59	—
	PDMA	24,56	16,99	8,02	0,73	4,04	8,26	10,28	57,88	6,17	—

Tabela 8.339: Constantes de acoplamento LC-BLYP variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,33$ corresponde ao CAM-B3LYP.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	444,4	466,7	489,3	512,1	535,4	559,0	583,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,9	17,9	15,8	13,6	11,3	8,8	6,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,6	-79,1	-81,6	-84,2	-86,8	-89,5	-92,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-7,7	-8,8	-9,9	-11,1	-12,3	-13,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,6	45,5	46,5	47,5	48,5	49,5	50,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-10,4	-11,3	-12,3	-13,3	-14,4	-15,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,1	160,8	171,5	182,2	192,9	203,5	214,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1779,0	-1748,2	-1715,1	-1680,1	-1643,3	-1605,1	-1565,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-137,1	-122,4	-107,6	-92,6	-77,5	-62,4	-47,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-32,3	-16,8	-1,2	14,4	30,3	46,2	62,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-372,6	-403,0	-436,0	-473,4	-518,2	-575,4	-655,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,9	128,6	131,3	134,1	137,0	139,9	142,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,5	-13,3	-14,1	-14,9	-15,7	-16,6	-17,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,9	201,2	206,0	211,5	217,7	225,0	233,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	262,0	266,5	271,2	276,3	281,7	287,6	294,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	58,1	57,6	56,8	55,8	54,4	52,6	50,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,2	11,1	12,1	13,3	14,6	16,2	18,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,8	70,5	74,6	79,3	84,7	91,0	98,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,8	164,3	168,0	171,9	176,1	180,7	185,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-1,9	-3,0	-4,4	-6,1	-8,1	-10,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,6	3,9	3,1	2,3	1,2	0,0	-1,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	13,6	14,0	14,5	15,1	15,9	16,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,7	20,2	20,8	21,6	22,4	23,5	24,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,3	32,6	34,9	37,3	39,8	42,4	45,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	128,9	131,8	134,7	137,7	140,7	143,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-5,6	-6,2	-4,7
Total	DM	-20,83	-17,75	-14,62	-11,50	-8,51	-5,84	-3,86	—
	DMA	26,07	24,15	22,61	22,62	25,90	30,97	37,07	—
	PDMA	29,60	22,21	18,02	17,69	30,69	46,44	63,88	—
CPI	DM	-54,14	-48,87	-43,58	-38,51	-33,88	-30,27	-28,58	—
	DMA	55,81	49,73	44,07	41,38	45,99	54,42	64,89	—
	PDMA	45,22	33,03	23,71	17,09	31,47	49,61	68,64	—
SPI	DM	3,60	5,07	6,62	8,31	10,09	12,07	14,27	—
	DMA	4,27	5,39	6,87	8,85	11,17	13,77	16,66	—
	PDMA	18,15	14,27	13,85	18,13	30,12	44,11	60,39	—
ΔCS	DM	-57,74	-53,95	-50,20	-46,82	-43,98	-42,35	-42,86	—
	DMA	51,54	44,33	37,20	32,53	34,82	40,65	48,23	—
	PDMA	27,07	18,75	9,86	-1,05	1,36	5,50	8,26	—

Tabela 8.340: Constantes de acoplamento LC-BLYP variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,33$ corresponde ao CAM-B3LYP.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	438,2	460,6	483,3	506,3	529,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,8	17,8	15,7	13,4	11,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-76,3	-78,8	-81,3	-83,9	-86,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-7,7	-8,8	-10,0	-11,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,9	45,8	46,8	47,8	48,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-10,4	-11,4	-12,4	-13,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	155,0	165,9	176,8	187,6	198,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1782,2	-1752,2	-1719,8	-1685,2	-1648,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-141,0	-126,0	-111,0	-95,8	-80,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-37,4	-21,6	-5,7	10,2	26,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-356,9	-387,0	-419,2	-455,2	-497,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	128,2	131,0	133,7	136,6	139,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-13,4	-14,2	-15,1	-15,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,5	202,8	207,6	213,1	219,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	266,2	270,7	275,6	280,7	286,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,9	57,4	56,6	55,6	54,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	11,3	12,3	13,4	14,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,7	71,4	75,5	80,2	85,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	163,3	166,8	170,6	174,5	178,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,8	-3,0	-4,4	-6,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,1	3,3	2,5	1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	13,6	13,9	14,4	14,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,9	20,4	21,0	21,7	22,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,7	33,0	35,4	37,8	40,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,3	131,2	134,1	137,1	140,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,6	-5,1	-4,7
Total	DM	-20,17	-17,07	-13,90	-10,72	-7,62	—
	DMA	26,47	24,61	23,07	22,57	25,64	—
	PDMA	31,69	24,31	19,99	19,52	29,31	—
CPI	DM	-53,90	-48,59	-43,23	-38,01	-33,15	—
	DMA	55,65	49,54	43,77	39,88	44,03	—
	PDMA	48,09	35,77	26,36	19,45	28,62	—
SPI	DM	4,57	6,05	7,61	9,29	11,11	—
	DMA	5,08	6,33	7,88	9,87	12,16	—
	PDMA	19,65	15,91	15,33	19,58	29,82	—
ΔCS	DM	-58,47	-54,64	-50,84	-47,30	-44,26	—
	DMA	50,57	43,20	35,89	30,02	31,87	—
	PDMA	28,44	19,86	11,03	-0,12	-1,20	—

Tabela 8.341: Constantes de acoplamento LC-BLYP variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,33$ corresponde ao CAM-B3LYP.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	432,0	454,4	477,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,7	17,7	15,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,9	-78,4	-81,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-7,7	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,2	46,1	47,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-10,5	-11,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,2	171,2	182,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1785,3	-1756,2	-1724,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-144,9	-129,8	-114,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,5	-26,5	-10,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-341,5	-371,3	-402,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,6	133,4	136,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,7	-13,6	-14,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,1	204,4	209,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	270,4	275,0	280,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,6	57,1	56,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,6	11,4	12,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	72,4	76,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	165,8	169,4	173,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-1,8	-3,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	4,3	3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,2	13,5	13,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,1	20,6	21,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,1	33,4	35,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	130,5	133,4	136,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,6	-4,1	-4,7
Total	DM	-19,50	-16,41	-13,20	—
	DMA	26,93	25,10	23,55	—
	PDMA	33,63	26,29	22,07	—
CPI	DM	-53,64	-48,35	-42,93	—
	DMA	55,49	49,41	43,53	—
	PDMA	51,07	38,70	29,26	—
SPI	DM	5,53	7,01	8,60	—
	DMA	5,99	7,27	8,89	—
	PDMA	20,84	17,19	16,79	—
ΔCS	DM	-59,17	-55,37	-51,53	—
	DMA	49,50	42,14	34,63	—
	PDMA	30,24	21,52	12,47	—

Tabela 8.342: Constantes de acoplamento LC-BLYP variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,33$ corresponde ao CAM-B3LYP.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	425,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	19,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1788,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-149,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-47,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-326,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	274,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	57,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	168,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	132,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-4,7
Total	DM	-18,85	—
	DMA	27,44	—
	PDMA	35,90	—
CPI	DM	-53,44	—
	DMA	55,40	—
	PDMA	54,27	—
SPI	DM	6,51	—
	DMA	6,93	—
	PDMA	22,42	—
ΔCS	DM	-59,94	—
	DMA	48,47	—
	PDMA	31,85	—

Tabela 8.343: Constantes de acoplamento LC-B98 variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,40$ corresponde ao ω B97.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	442,6	460,2	478,5	497,7	517,7	538,7	560,6	583,6	607,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	14,9	13,5	11,9	10,2	8,2	6,1	3,8	1,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,8	-72,1	-74,6	-77,1	-79,8	-82,6	-85,6	-88,7	-92,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-3,7	-4,7	-5,9	-7,1	-8,4	-9,8	-11,3	-12,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,1	39,3	40,6	41,9	43,3	44,8	46,3	47,9	49,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-6,4	-7,4	-8,5	-9,6	-10,8	-12,1	-13,6	-15,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	150,7	160,1	169,8	179,9	190,3	201,0	212,2	223,7	235,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1644,4	-1622,6	-1599,2	-1574,4	-1548,4	-1521,3	-1493,2	-1464,3	-1434,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-104,4	-93,6	-82,3	-70,6	-58,6	-46,2	-33,5	-20,5	-7,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-6,4	5,2	17,3	29,9	42,8	56,3	70,2	84,4	99,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-305,7	-334,1	-365,5	-401,1	-443,2	-495,9	-567,3	2007,3	-882,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,3	108,3	112,6	117,1	121,8	126,8	132,0	137,6	143,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,9	-9,8	-10,8	-11,8	-12,9	-14,1	-15,3	-16,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,0	195,3	201,3	208,0	215,6	224,5	234,9	247,4	262,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	206,6	214,3	222,5	231,2	240,6	250,7	261,7	273,9	287,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,4	54,6	54,6	54,4	53,8	52,7	51,0	48,5	44,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	7,4	8,2	9,1	10,2	11,6	13,3	15,4	18,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,8	69,4	73,5	78,1	83,5	89,9	97,7	107,5	120,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,6	135,8	141,4	147,3	153,7	160,7	168,4	177,1	187,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,6	-0,1	-1,0	-2,1	-3,5	-5,3	-7,5	-10,5	-14,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,3	3,8	3,2	2,4	1,5	0,3	-1,1	-3,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,3	10,6	11,0	11,4	11,9	12,6	13,5	14,8	16,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,1	14,7	15,4	16,3	17,2	18,4	19,8	21,6	24,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,4	31,8	34,3	37,0	39,8	42,8	46,0	49,5	53,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	104,0	108,3	112,8	117,5	122,4	127,6	133,1	138,9	145,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,0	-2,5	-3,0	-3,5	-4,1	-4,8	-5,4	-6,2	-7,0	-4,7
Total	DM	-16,33	-13,63	-10,82	-7,97	-5,15	-2,48	-0,25	104,09	-1,33	—
	DMA	20,33	17,67	15,38	14,83	16,09	20,08	26,59	109,41	48,60	—
	PDMA	32,49	24,46	17,35	16,16	18,67	29,85	46,25	91,02	92,03	—
CPI	DM	-30,20	-26,70	-23,17	-19,75	-16,66	-14,28	-13,36	228,31	-26,51	—
	DMA	33,75	29,48	25,86	25,98	30,12	38,21	48,42	237,76	86,16	—
	PDMA	31,61	21,48	14,11	20,90	28,92	44,37	61,88	139,75	104,21	—
SPI	DM	-6,16	-4,05	-1,77	0,67	3,29	6,18	9,37	13,00	17,14	—
	DMA	10,49	9,01	7,70	6,65	5,80	6,78	10,59	15,28	21,06	—
	PDMA	33,13	26,66	19,72	12,68	11,15	19,20	34,78	55,29	83,09	—
Δ CS	DM	-24,04	-22,65	-21,41	-20,42	-19,96	-20,46	-22,74	215,31	-43,65	—
	DMA	23,25	20,47	18,16	19,34	24,32	31,43	37,83	222,48	65,10	—
	PDMA	-1,52	-5,18	-5,61	8,22	17,76	25,17	27,10	84,47	21,11	—

Tabela 8.344: Constantes de acoplamento LC-B98 variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,40$ corresponde ao ω B97.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	438,6	456,0	474,1	493,0	512,7	533,4	555,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,1	14,8	13,3	11,7	9,9	8,0	5,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,4	-71,7	-74,1	-76,6	-79,2	-82,0	-85,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,5	-3,4	-4,5	-5,6	-6,8	-8,1	-9,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,1	39,3	40,5	41,8	43,2	44,7	46,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,3	-6,2	-7,1	-8,2	-9,3	-10,5	-11,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	155,0	164,5	174,2	184,3	194,7	205,4	216,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1641,6	-1621,0	-1598,7	-1574,7	-1549,4	-1522,7	-1494,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-111,0	-100,0	-88,6	-76,8	-64,5	-51,9	-39,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-14,5	-2,6	9,7	22,5	35,7	49,3	63,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-288,0	-315,5	-345,4	-378,9	-417,8	-465,2	-527,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,2	108,3	112,5	117,0	121,7	126,6	131,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-8,6	-9,5	-10,5	-11,5	-12,6	-13,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,6	194,7	200,4	206,8	214,1	222,4	232,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	206,2	213,9	222,0	230,6	239,9	249,8	260,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	54,1	54,2	54,0	53,6	52,7	51,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	7,2	8,0	8,8	9,8	11,1	12,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	69,1	73,0	77,5	82,5	88,4	95,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	130,2	135,3	140,8	146,7	153,0	159,7	167,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,1	-0,6	-1,7	-2,9	-4,5	-6,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	4,5	4,0	3,5	2,8	1,9	0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,1	10,4	10,7	11,1	11,6	12,2	12,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,0	14,6	15,3	16,0	16,9	18,0	19,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,9	31,2	33,7	36,4	39,2	42,2	45,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,9	108,1	112,5	117,2	122,1	127,3	132,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,8	-2,3	-2,8	-3,3	-3,9	-4,5	-5,2	-4,7
Total	DM	-16,16	-13,47	-10,67	-7,78	-4,88	-2,07	0,44	—
	DMA	21,13	17,54	14,95	13,56	14,63	18,07	24,08	—
	PDMA	36,18	27,84	19,69	15,55	16,39	24,84	39,78	—
CPI	DM	-29,58	-26,06	-22,50	-18,95	-15,61	-12,77	-11,01	—
	DMA	35,45	29,01	24,65	22,91	26,81	34,21	43,63	—
	PDMA	37,81	26,85	16,22	15,79	24,25	38,07	55,56	—
SPI	DM	-6,32	-4,23	-1,99	0,40	2,99	5,77	8,83	—
	DMA	10,63	9,13	7,83	6,71	5,71	6,24	9,75	—
	PDMA	34,99	28,56	22,24	15,37	10,63	15,14	28,21	—
Δ CS	DM	-23,26	-21,83	-20,51	-19,35	-18,60	-18,55	-19,84	—
	DMA	24,83	19,88	16,81	16,20	21,10	27,97	33,87	—
	PDMA	2,82	-1,71	-6,02	0,41	13,62	22,93	27,34	—

Tabela 8.345: Constantes de acoplamento LC-B98 variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,40$ corresponde ao ω B97.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	435,1	452,2	470,0	488,6	508,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,9	14,6	13,1	11,5	9,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,0	-71,2	-73,6	-76,1	-78,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,2	-3,2	-4,2	-5,4	-6,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,1	39,2	40,5	41,8	43,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-5,9	-6,8	-7,9	-9,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	159,6	169,1	178,8	188,9	199,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1637,2	-1618,1	-1597,0	-1574,0	-1549,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-117,8	-106,7	-95,1	-83,1	-70,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-22,8	-10,7	1,8	14,8	28,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-270,7	-297,4	-326,3	-358,0	-394,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,3	108,3	112,5	116,9	121,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-8,3	-9,2	-10,1	-11,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,2	194,2	199,7	205,8	212,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	205,8	213,5	221,6	230,1	239,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,5	53,7	53,6	53,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	7,1	7,8	8,6	9,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,5	68,9	72,7	76,9	81,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,8	134,9	140,4	146,1	152,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,2	0,5	-0,3	-1,2	-2,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,1	4,7	4,2	3,7	3,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,0	10,2	10,5	10,8	11,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,9	14,4	15,1	15,8	16,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,3	30,7	33,1	35,8	38,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,7	107,9	112,3	117,0	121,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,7
Total	DM	-15,91	-13,26	-10,47	-7,58	-4,65	—
	DMA	22,28	17,59	14,80	12,33	13,25	—
	PDMA	40,19	31,67	23,32	14,90	14,27	—
CPI	DM	-28,81	-25,36	-21,79	-18,16	-14,64	—
	DMA	38,01	28,96	24,14	19,93	23,56	—
	PDMA	44,73	32,64	21,80	10,67	19,25	—
SPI	DM	-6,45	-4,38	-2,17	0,17	2,68	—
	DMA	10,74	9,25	7,95	6,76	5,68	—
	PDMA	36,86	30,96	24,44	18,00	10,63	—
Δ CS	DM	-22,36	-20,98	-19,62	-18,34	-17,32	—
	DMA	27,27	19,72	16,19	13,17	17,88	—
	PDMA	7,87	1,68	-2,65	-7,33	8,62	—

Tabela 8.346: Constantes de acoplamento LC-B98 variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,40$ corresponde ao ω B97.

	$\%E_X^{\text{HF}}$	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	432,0	448,7	466,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,7	14,4	12,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,6	-70,8	-73,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,0	-3,0	-4,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,0	39,2	40,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-5,6	-6,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	164,5	173,9	183,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1631,0	-1613,5	-1593,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-124,8	-113,6	-101,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-31,4	-19,0	-6,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-253,8	-279,9	-307,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,4	108,3	112,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,2	-8,0	-8,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,0	193,8	199,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	205,6	213,2	221,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,6	52,9	53,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,5	7,0	7,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,3	68,7	72,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,5	134,6	140,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,4	0,7	0,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,2	4,8	4,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,8	10,0	10,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,8	14,3	14,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,8	30,1	32,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,7	107,8	112,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-1,9	-2,4	-4,7
Total	DM	-15,59	-13,00	-10,24	—
	DMA	23,32	18,71	14,59	—
	PDMA	43,99	35,43	26,89	—
CPI	DM	-27,92	-24,55	-21,01	—
	DMA	40,34	31,50	23,50	—
	PDMA	51,61	39,44	27,24	—
SPI	DM	-6,55	-4,52	-2,35	—
	DMA	10,84	9,33	8,05	—
	PDMA	38,40	32,49	26,64	—
Δ CS	DM	-21,37	-20,03	-18,66	—
	DMA	29,50	22,17	15,45	—
	PDMA	13,20	6,95	0,60	—

Tabela 8.347: Constantes de acoplamento LC-B98 variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,40$ corresponde ao ω B97.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	429,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-68,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-1,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	38,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	169,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1622,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-131,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-40,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-237,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	104,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	205,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	129,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	103,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-4,7
Total	DM	-15,17	—
	DMA	24,25	—
	PDMA	47,94	—
CPI	DM	-26,80	—
	DMA	42,40	—
	PDMA	58,57	—
SPI	DM	-6,64	—
	DMA	10,93	—
	PDMA	40,15	—
Δ CS	DM	-20,16	—
	DMA	31,47	—
	PDMA	18,42	—

Tabela 8.348: Constantes de acoplamento LC-B98(X) variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,30$ corresponde ao ω B97X.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	432,2	447,3	466,9	491,8	523,1	561,8	608,9	665,2	731,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,0	18,7	19,0	18,7	17,7	15,7	12,3	6,9	-0,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-73,5	-77,9	-83,3	-89,7	-97,4	-106,9	-118,3	-132,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,2	-6,1	-9,7	-14,2	-20,0	-27,4	-36,7	-48,7	-64,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	42,1	45,6	49,6	54,4	60,2	67,2	75,8	86,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-8,7	-12,4	-17,2	-23,4	-31,8	-43,1	-58,4	-79,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	157,2	175,3	197,0	223,1	255,0	294,0	342,3	403,1	480,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1664,0	-1670,5	-1672,7	-1671,3	-1667,2	-1661,5	-1655,1	-1649,1	-1644,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-125,0	-118,0	-108,9	-97,6	-84,2	-69,0	-52,1	-33,7	-14,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-28,1	-18,8	-7,2	6,5	22,7	41,4	62,5	86,1	112,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-307,0	-376,9	-470,9	-622,6	-1000,7	1370,2	704,0	-31,1	-266,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,0	121,7	136,8	154,7	176,2	202,3	234,8	275,8	329,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-11,4	-15,3	-20,4	-27,2	-36,4	-49,0	-66,5	-91,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	193,1	207,0	226,9	260,3	334,1	701,0	-306,0	25,5	129,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	218,8	247,7	282,9	329,1	402,9	657,3	82,5	319,1	407,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,2	54,3	51,7	42,1	9,6	-197,9	430,4	255,1	237,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	9,5	13,8	22,5	45,6	175,6	-201,9	-89,8	-70,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,3	73,8	85,7	108,7	177,2	-2365,7	-67,8	-8,6	12,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	137,0	154,7	176,6	206,4	261,2	-951,1	196,6	260,4	313,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,5	-1,9	-6,4	-16,1	-47,8	1191,7	75,8	49,9	42,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,9	3,4	0,5	-5,7	-25,7	726,2	46,2	27,5	18,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,6	12,0	14,4	19,8	38,2	-715,9	-39,2	-25,3	-23,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	15,1	17,7	21,6	29,0	50,8	-760,1	-27,8	-9,5	-3,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	29,1	33,4	38,8	45,5	54,1	65,3	80,1	100,5	129,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,8	122,3	138,3	157,3	180,2	208,2	243,2	287,8	346,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-3,5	-5,3	-7,7	-10,8	-15,1	-21,1	-29,9	-43,3	-4,7
Total	DM	-17,60	-15,13	-12,12	-9,08	-9,18	-19,36	28,27	31,72	42,23	—
	DMA	21,83	19,65	26,10	40,21	75,21	412,15	139,85	94,40	100,31	—
	PDMA	37,62	20,70	31,70	76,56	208,75	3868,17	461,33	342,87	357,41	—
CPI	DM	-36,13	-39,09	-42,92	-50,67	-77,56	146,85	96,58	41,54	33,48	—
	DMA	39,78	41,18	45,81	58,49	97,47	197,81	152,47	104,35	105,95	—
	PDMA	46,57	34,30	31,58	38,26	63,83	127,60	151,87	185,31	248,33	—
SPI	DM	-4,01	2,44	10,46	21,43	40,97	-141,25	-21,82	24,53	48,64	—
	DMA	8,66	3,85	11,65	26,80	58,89	569,34	130,59	87,10	96,17	—
	PDMA	31,06	10,73	31,79	104,65	315,03	6611,25	688,26	458,42	437,40	—
Δ CS	DM	-32,12	-41,53	-53,38	-72,10	-118,53	288,09	118,40	17,01	-15,16	—
	DMA	31,12	37,33	34,16	31,69	38,59	-371,53	21,88	17,25	9,78	—
	PDMA	15,51	23,57	-0,21	-66,39	-251,21	-6483,65	-536,39	-273,11	-189,07	—

Tabela 8.349: Constantes de acoplamento LC-B98(X) variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,30$ corresponde ao ω B97X.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	434,2	448,5	467,2	491,2	521,5	559,1	605,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	18,3	18,5	18,3	17,3	15,2	11,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,0	-73,5	-77,8	-83,0	-89,3	-96,9	-106,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,9	-5,7	-9,3	-13,8	-19,4	-26,7	-35,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,1	42,0	45,4	49,4	54,0	59,7	66,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-8,3	-11,8	-16,4	-22,6	-30,7	-41,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	162,9	180,6	201,8	227,5	258,7	296,9	344,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1660,4	-1669,4	-1673,7	-1674,0	-1671,2	-1666,3	-1660,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-130,2	-123,4	-114,4	-103,2	-90,0	-74,8	-57,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-33,4	-24,1	-12,6	1,1	17,2	35,9	57,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-296,1	-363,7	-452,9	-591,7	-906,6	11760,5	1012,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,3	120,8	135,5	153,0	174,0	199,6	231,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-10,8	-14,5	-19,5	-26,0	-34,8	-46,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,8	205,0	223,6	253,6	315,3	543,8	-688,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	216,6	245,0	279,2	323,1	389,2	558,9	-145,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,6	54,0	52,0	44,2	19,0	-104,2	652,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	9,0	12,8	20,3	38,7	116,6	-335,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	72,6	83,3	102,7	151,3	595,1	-123,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,6	153,0	174,1	201,9	246,9	489,1	166,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,8	-1,4	-5,4	-13,4	-35,6	-251,1	103,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,2	3,8	1,3	-3,8	-17,8	-148,5	62,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,5	11,6	13,7	18,0	30,6	159,2	-55,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,8	17,2	20,8	27,0	42,4	182,8	-45,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,4	32,5	37,8	44,3	52,6	63,4	77,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,0	121,2	136,8	155,4	177,8	205,2	239,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,9	-3,2	-5,0	-7,2	-10,3	-14,4	-20,1	-4,7
Total	DM	-17,44	-15,13	-12,25	-9,23	-8,74	521,06	16,33	—
	DMA	21,94	19,52	25,18	38,04	66,63	587,89	191,86	—
	PDMA	40,93	24,54	27,90	66,09	161,72	1045,57	625,96	—
CPI	DM	-35,05	-38,15	-41,86	-48,68	-70,12	1090,09	123,12	—
	DMA	39,45	40,31	45,52	57,19	89,26	1141,60	179,54	—
	PDMA	50,45	38,09	33,76	39,89	56,59	436,82	155,01	—
SPI	DM	-4,53	1,75	9,46	19,70	36,27	103,77	-61,98	—
	DMA	9,10	4,27	10,26	23,99	50,03	181,84	200,90	—
	PDMA	33,95	14,61	23,61	85,31	238,81	1491,98	971,32	—
Δ CS	DM	-30,53	-39,89	-51,32	-68,38	-106,38	986,32	185,10	—
	DMA	30,35	36,04	35,26	33,20	39,24	959,76	-21,36	—
	PDMA	16,50	23,47	10,15	-45,42	-182,22	-1055,16	-816,31	—

Tabela 8.350: Constantes de acoplamento LC-B98(X) variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,30$ corresponde ao ω B97X.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	436,4	450,0	467,8	490,8	520,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,2	17,8	18,1	17,8	16,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,1	-73,6	-77,7	-82,8	-88,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-5,4	-8,9	-13,3	-18,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	42,0	45,3	49,1	53,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-7,8	-11,2	-15,7	-21,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	169,1	186,4	207,2	232,3	262,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1654,6	-1666,6	-1673,3	-1675,5	-1674,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-135,4	-128,8	-120,0	-108,9	-95,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-38,8	-29,6	-18,1	-4,4	11,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-285,4	-351,0	-436,0	-563,9	-831,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	107,7	120,0	134,4	151,5	172,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-10,2	-13,8	-18,5	-24,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,6	203,2	220,6	247,8	300,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	214,5	242,4	275,7	317,8	378,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,0	53,6	52,1	45,9	25,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	8,5	11,9	18,4	33,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,0	71,5	81,3	98,0	135,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	134,4	151,3	171,8	198,1	237,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,1	-0,9	-4,5	-11,3	-28,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,3	4,1	1,9	-2,3	-12,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,3	11,4	13,2	16,7	25,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,5	16,8	20,1	25,5	37,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,6	31,7	36,7	43,1	51,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	107,2	120,2	135,5	153,7	175,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-3,0	-4,6	-6,8	-9,7	-4,7
Total	DM	-17,17	-15,04	-12,29	-9,30	-8,23	—
	DMA	22,46	19,31	24,35	36,21	60,51	—
	PDMA	44,15	28,23	24,94	57,89	132,01	—
CPI	DM	-33,73	-37,05	-40,70	-46,85	-64,24	—
	DMA	40,11	39,25	45,26	56,09	83,35	—
	PDMA	54,73	41,85	36,14	41,60	53,94	—
SPI	DM	-5,02	1,10	8,55	18,23	32,85	—
	DMA	9,51	4,69	9,01	21,63	43,77	—
	PDMA	36,39	18,23	16,73	69,83	189,26	—
Δ CS	DM	-28,71	-38,15	-49,25	-65,09	-97,08	—
	DMA	30,60	34,56	36,25	34,46	39,58	—
	PDMA	18,35	23,62	19,40	-28,23	-135,31	—

Tabela 8.351: Constantes de acoplamento LC-B98(X) variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,30$ corresponde ao ω B97X.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	438,9	451,8	468,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,7	17,3	17,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,3	-73,7	-77,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,3	-5,0	-8,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	42,0	45,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-7,3	-10,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,8	192,7	213,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1646,3	-1661,6	-1671,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-140,6	-134,3	-125,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-44,3	-35,1	-23,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-274,9	-338,6	-420,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	107,2	119,2	133,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-9,6	-13,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,5	201,5	217,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	212,6	240,0	272,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,3	53,1	52,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,4	8,1	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,4	70,5	79,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	133,3	149,8	169,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,4	-0,5	-3,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	4,4	2,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,1	11,1	12,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,2	16,4	19,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,8	30,8	35,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,5	119,2	134,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-2,7	-4,3	-4,7
Total	DM	-16,77	-14,83	-12,24	—
	DMA	22,82	19,34	23,57	—
	PDMA	47,38	32,05	23,28	—
CPI	DM	-32,16	-35,70	-39,43	—
	DMA	40,44	38,77	44,94	—
	PDMA	58,89	46,16	38,51	—
SPI	DM	-5,48	0,48	7,70	—
	DMA	9,89	5,09	7,90	—
	PDMA	38,94	21,71	12,11	—
Δ CS	DM	-26,68	-36,18	-47,13	—
	DMA	30,54	33,68	37,04	—
	PDMA	19,94	24,45	26,40	—

Tabela 8.352: Constantes de acoplamento LC-B98(X) variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,30$ corresponde ao ω B97X.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	441,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1634,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-145,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-49,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-264,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	210,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	63,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	132,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	9,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	13,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	105,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-4,7
Total	DM	-16,22	—
	DMA	23,00	—
	PDMA	50,52	—
CPI	DM	-30,25	—
	DMA	40,42	—
	PDMA	63,27	—
SPI	DM	-5,93	—
	DMA	10,23	—
	PDMA	41,17	—
Δ CS	DM	-24,33	—
	DMA	30,18	—
	PDMA	22,09	—

Tabela 8.353: Constantes de acoplamento LC-B98(XD) variando α com $\alpha + \beta = 100\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,20$ corresponde ao ω B97XD.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	427,8	440,6	458,3	482,0	512,8	551,9	600,3	658,9	728,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,7	18,5	18,9	18,8	17,8	15,8	12,3	6,9	-0,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,4	-72,8	-77,1	-82,3	-88,8	-96,7	-106,4	-118,3	-132,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,8	-5,7	-9,4	-14,2	-20,2	-27,9	-37,8	-50,5	-66,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	42,1	45,5	49,5	54,4	60,4	67,7	76,8	88,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-8,3	-12,0	-17,0	-23,6	-32,4	-44,4	-60,9	-84,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	165,7	182,4	203,0	228,5	260,1	299,5	349,2	412,7	495,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1656,6	-1668,9	-1674,5	-1674,5	-1670,3	-1663,1	-1654,3	-1645,0	-1635,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-137,0	-128,7	-117,8	-104,7	-89,2	-71,8	-52,6	-31,9	-10,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,2	-31,1	-17,7	-1,9	16,3	37,1	60,4	86,3	114,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-279,0	-347,5	-437,6	-577,8	-902,9	3724,6	775,2	-31,7	-269,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,1	122,0	137,3	155,7	178,0	205,4	239,7	283,6	341,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,8	-10,9	-14,9	-20,3	-27,5	-37,2	-50,8	-70,0	-98,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	192,3	205,7	225,1	257,4	329,2	688,6	-281,8	36,4	150,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	218,4	247,9	283,7	330,4	404,3	656,3	103,7	333,4	421,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,7	51,7	43,0	12,3	-190,4	418,3	253,6	240,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,9	9,2	13,2	21,6	43,9	171,5	-194,7	-88,1	-70,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,9	72,9	84,1	105,2	165,0	7009,8	-69,7	-6,6	15,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,5	154,4	176,5	206,1	257,9	3652,7	199,6	267,9	324,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	-1,4	-5,6	-14,5	-42,2	-3408,7	77,9	49,8	42,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,3	3,9	1,2	-4,5	-22,0	-2066,4	47,4	27,2	17,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,4	11,6	13,8	18,6	34,6	2076,6	-40,8	-25,8	-24,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	15,0	17,5	21,2	28,1	47,2	2243,5	-28,6	-9,0	-2,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,2	32,5	38,0	45,0	54,0	65,7	81,6	103,6	135,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,7	122,4	138,7	158,2	182,0	211,4	248,4	296,2	360,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,8	-3,2	-5,1	-7,5	-10,8	-15,3	-21,8	-31,4	-46,3	-4,7
Total	DM	-17,15	-14,85	-11,79	-8,31	-6,64	546,77	32,81	33,81	45,73	—
	DMA	23,07	19,38	25,95	39,32	69,91	1010,82	140,95	95,77	102,63	—
	PDMA	44,12	26,33	30,82	72,53	187,65	10737,31	466,03	346,95	365,75	—
CPI	DM	-34,81	-38,21	-41,94	-48,59	-70,41	359,68	102,61	42,04	35,03	—
	DMA	42,48	40,54	46,03	57,39	88,23	410,99	158,70	104,89	107,48	—
	PDMA	57,32	42,63	37,61	42,95	58,00	197,23	155,52	190,75	259,15	—
SPI	DM	-4,19	2,27	10,32	21,23	40,12	683,96	-18,38	27,78	53,59	—
	DMA	8,83	3,87	11,23	26,07	56,48	1450,69	127,93	89,07	99,08	—
	PDMA	34,44	14,37	25,83	94,22	282,74	18466,71	693,74	461,50	443,93	—
Δ CS	DM	-30,62	-40,48	-52,26	-69,82	-110,53	-324,28	120,99	14,26	-18,56	—
	DMA	33,65	36,66	34,80	31,32	31,75	-1039,70	30,77	15,82	8,40	—
	PDMA	22,88	28,26	11,78	-51,26	-224,74	-18269,48	-538,22	-270,76	-184,78	—

Tabela 8.354: Constantes de acoplamento LC-B98(XD) variando α com $\alpha + \beta = 80\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,20$ corresponde ao ω B97XD.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	428,9	441,4	458,7	482,0	512,4	551,1	599,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,6	18,4	18,8	18,6	17,7	15,6	12,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,5	-72,9	-77,1	-82,3	-88,6	-96,5	-106,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,7	-5,6	-9,3	-14,0	-20,0	-27,6	-37,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,2	42,1	45,4	49,5	54,3	60,2	67,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,2	-8,1	-11,8	-16,7	-23,2	-32,0	-43,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	169,3	185,7	206,1	231,2	262,5	301,5	350,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1654,2	-1668,1	-1675,0	-1676,1	-1672,5	-1665,9	-1657,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-139,3	-131,0	-120,3	-107,1	-91,7	-74,2	-54,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-44,5	-33,4	-20,0	-4,2	14,0	34,9	58,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-274,6	-342,4	-431,0	-567,0	-872,3	10530,6	884,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,0	121,8	137,0	155,2	177,3	204,5	238,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-10,7	-14,6	-19,9	-27,0	-36,7	-50,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,8	205,0	223,8	255,0	322,1	619,5	-372,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	217,9	247,2	282,6	328,5	399,5	613,2	50,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,8	53,5	51,7	43,7	15,7	-149,0	470,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	9,0	12,9	20,8	41,3	145,4	-225,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,6	72,5	83,2	103,1	155,9	1046,0	-87,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,2	153,9	175,8	204,7	252,9	718,2	189,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	-1,2	-5,3	-13,6	-37,9	-475,0	86,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,4	4,0	1,5	-3,8	-19,2	-284,7	52,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	10,3	11,5	13,6	18,0	31,9	295,0	-46,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	14,9	17,3	21,0	27,4	44,3	329,0	-34,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,8	32,1	37,5	44,4	53,3	65,0	80,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,6	122,2	138,3	157,7	181,3	210,4	247,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-3,1	-5,0	-7,4	-10,6	-15,1	-21,4	-4,7
Total	DM	-16,97	-14,77	-11,79	-8,36	-6,60	501,48	31,00	—
	DMA	23,21	19,23	25,72	38,67	67,12	599,73	154,89	—
	PDMA	45,49	27,79	29,76	69,01	171,39	1741,75	511,92	—
CPI	DM	-34,17	-37,71	-41,49	-47,91	-68,03	977,89	111,98	—
	DMA	42,66	40,05	46,11	57,16	85,94	1029,58	168,47	—
	PDMA	59,13	44,19	38,83	43,78	56,55	401,28	156,56	—
SPI	DM	-4,35	2,06	9,99	20,65	38,45	152,11	-28,38	—
	DMA	8,94	3,95	10,77	25,11	53,31	284,51	144,93	—
	PDMA	35,48	15,76	23,11	87,52	255,60	2724,76	772,51	—
Δ CS	DM	-29,82	-39,77	-51,48	-68,56	-106,47	825,78	140,36	—
	DMA	33,72	36,10	35,34	32,05	32,62	745,08	23,55	—
	PDMA	23,65	28,43	15,73	-43,75	-199,04	-2323,49	-615,94	—

Tabela 8.355: Constantes de acoplamento LC-B98(XD) variando α com $\alpha + \beta = 60\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,20$ corresponde ao ω B97XD.

	α	10%	20%	30%	40%	50%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,1	442,3	459,2	482,0	512,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,4	18,2	18,6	18,4	17,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,6	-73,0	-77,1	-82,2	-88,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,6	-5,5	-9,1	-13,8	-19,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,3	42,1	45,4	49,4	54,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,1	-7,9	-11,6	-16,5	-22,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	173,0	189,1	209,2	234,0	265,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1651,3	-1667,0	-1675,3	-1677,4	-1674,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-141,7	-133,5	-122,7	-109,6	-94,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-46,8	-35,7	-22,3	-6,5	11,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-270,3	-337,4	-424,5	-556,5	-844,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,0	121,6	136,7	154,7	176,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,4	-10,4	-14,4	-19,6	-26,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,3	204,3	222,7	252,7	315,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	217,4	246,5	281,5	326,7	395,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,5	53,2	51,7	44,3	18,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,8	8,8	12,6	20,1	39,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,3	72,0	82,4	101,2	148,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,9	153,5	175,1	203,3	248,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,2	-1,0	-4,9	-12,7	-34,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,4	4,1	1,7	-3,2	-16,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,2	11,4	13,3	17,5	29,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,8	17,2	20,7	26,8	41,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,4	31,7	37,1	43,9	52,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,5	121,9	137,9	157,2	180,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-3,0	-4,8	-7,2	-10,4	-4,7
Total	DM	-16,77	-14,67	-11,77	-8,38	-6,53	—
	DMA	23,30	19,14	25,48	38,07	64,74	—
	PDMA	46,74	29,27	28,56	65,78	158,32	—
CPI	DM	-33,50	-37,20	-41,01	-47,24	-65,85	—
	DMA	42,75	39,71	46,15	56,95	84,08	—
	PDMA	60,77	45,80	39,88	44,68	56,74	—
SPI	DM	-4,49	1,85	9,68	20,11	36,97	—
	DMA	9,04	4,06	10,32	24,23	50,56	—
	PDMA	36,46	17,16	20,25	81,25	232,81	—
Δ CS	DM	-29,01	-39,05	-50,69	-67,34	-102,82	—
	DMA	33,71	35,65	35,83	32,72	33,52	—
	PDMA	24,32	28,64	19,63	-36,56	-176,07	—

Tabela 8.356: Constantes de acoplamento LC-B98(XD) variando α com $\alpha + \beta = 40\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,20$ corresponde ao ω B97XD.

	α	10%	20%	30%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	431,3	443,1	459,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,3	18,1	18,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,7	-73,0	-77,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,4	-5,3	-9,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,3	42,1	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-7,7	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	176,8	192,7	212,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1647,7	-1665,3	-1675,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-144,0	-135,9	-125,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-49,2	-38,1	-24,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-266,0	-332,4	-418,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,9	121,5	136,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,3	-10,2	-14,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,8	203,6	221,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	216,9	245,8	280,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,2	53,0	51,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,7	8,7	12,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,0	71,5	81,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,6	153,1	174,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,3	-0,9	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	4,2	1,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,2	11,3	13,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,6	17,1	20,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,0	31,2	36,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,4	121,7	137,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,5	-2,9	-4,7	-4,7
Total	DM	-16,54	-14,54	-11,73	—
	DMA	23,38	19,24	25,25	—
	PDMA	48,11	30,75	27,68	—
CPI	DM	-32,75	-36,60	-40,50	—
	DMA	42,80	39,82	46,21	—
	PDMA	62,66	47,89	41,13	—
SPI	DM	-4,65	1,64	9,37	—
	DMA	9,15	4,15	9,89	—
	PDMA	37,44	18,18	17,82	—
Δ CS	DM	-28,09	-38,24	-49,87	—
	DMA	33,65	35,67	36,32	—
	PDMA	25,22	29,71	23,31	—

Tabela 8.357: Constantes de acoplamento LC-B98(XD) variando α com $\alpha + \beta = 20\%$ na base aug-pcJ-2. O valor de $\gamma = 0,20$ corresponde ao ω B97XD.

	α	10%	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	432,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	17,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-69,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-2,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-4,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	180,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1643,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-146,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-51,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-261,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	108,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	216,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	6,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	64,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	135,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	10,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	14,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	108,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,4	-4,7
Total	DM	-16,28	—
	DMA	23,41	—
	PDMA	49,29	—
CPI	DM	-31,93	—
	DMA	42,75	—
	PDMA	64,42	—
SPI	DM	-4,81	—
	DMA	9,23	—
	PDMA	38,20	—
Δ CS	DM	-27,12	—
	DMA	33,51	—
	PDMA	26,23	—

8.6.1.1 B1B95 (LC-BB95)

Tabela 8.358: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	406,9	411,0	415,1	419,1	423,1	427,6	433,0	439,4	446,6	454,4	462,7	471,2	479,7	488,2	496,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,8	23,9	23,8	23,8	23,8	23,8	23,8	23,8	23,6	23,3	22,8	22,1	21,3	20,5	19,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,5	-70,7	-70,9	-71,1	-71,3	-71,6	-72,1	-72,8	-73,6	-74,5	-75,5	-76,6	-77,7	-78,8	-79,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,9	-3,7	-3,6	-3,6	-3,7	-4,0	-4,3	-4,7	-5,2	-5,7	-6,2	-6,8	-7,3	-7,8	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	41,5	41,3	41,0	40,7	40,6	40,6	40,7	40,9	41,2	41,6	42,1	42,6	43,2	43,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-6,3	-6,1	-6,1	-6,3	-6,6	-7,0	-7,5	-8,0	-8,6	-9,2	-9,7	-10,3	-10,8	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,3	143,1	138,6	132,8	127,7	124,7	124,2	126,1	129,9	135,1	141,1	147,6	154,2	160,7	166,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1712,6	-1708,4	-1706,2	-1706,2	-1708,0	-1711,0	-1713,7	-1714,8	-1713,0	-1707,9	-1699,6	-1688,6	-1675,7	-1661,4	-1646,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,7	-178,4	-176,4	-172,0	-166,0	-159,1	-151,6	-143,7	-135,5	-127,2	-119,0	-111,0	-103,3	-95,9	-89,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,7	-80,6	-77,9	-72,7	-65,7	-57,5	-48,6	-39,3	-30,0	-20,7	-11,8	-3,3	4,6	12,1	19,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-270,3	-275,4	-284,3	-297,4	-313,6	-331,7	-350,1	-368,0	-385,2	-401,9	-418,2	-434,5	-451,2	-468,3	-485,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,8	116,8	114,7	112,8	111,3	110,5	110,3	110,7	111,7	113,1	114,7	116,6	118,5	120,4	122,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,4	-9,1	-9,0	-9,2	-9,5	-10,0	-10,5	-11,1	-11,7	-12,3	-12,9	-13,5	-14,0	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,4	183,5	182,2	181,3	180,8	180,6	181,0	182,0	183,6	185,8	188,6	191,7	195,2	199,0	202,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,9	244,3	240,4	236,9	234,2	232,6	232,1	232,8	234,4	236,7	239,5	242,7	246,1	249,6	253,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,2	55,0	55,2	55,6	56,1	56,6	56,9	57,2	57,2	57,1	56,8	56,4	55,9	55,3	54,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,5	8,2	8,0	7,8	7,9	8,1	8,5	8,9	9,5	10,1	10,8	11,5	12,2	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,2	56,0	55,3	54,9	54,6	54,6	54,8	55,5	56,7	58,3	60,3	62,7	65,3	68,2	71,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,5	149,2	146,8	144,6	143,1	142,3	142,4	143,2	144,6	146,5	148,8	151,3	154,0	156,7	159,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,1	1,2	1,2	1,2	1,2	1,0	0,6	0,2	-0,3	-0,9	-1,7	-2,5	-3,4	-4,3	-5,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	6,2	6,2	6,1	5,8	5,5	5,1	4,6	4,0	3,4	2,8	2,2	1,5	0,9	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,5	11,6	11,6	11,8	11,9	12,1	12,3	12,6	12,9	13,2	13,6	13,9	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,2	18,0	17,7	17,4	17,2	17,1	17,1	17,3	17,5	17,8	18,3	18,7	19,2	19,8	20,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,1	23,4	23,2	23,2	23,3	23,5	24,0	24,6	25,5	26,7	28,0	29,4	30,8	32,3	33,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,0	117,0	114,9	113,0	111,6	110,9	110,8	111,4	112,5	114,0	115,7	117,7	119,7	121,7	123,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,0	-2,0	-2,1	-2,3	-2,5	-2,7	-3,0	-3,4	-3,7	-4,0	-4,4	-4,7	-5,0	-4,7
Total	DM	-21,42	-21,92	-22,51	-23,15	-23,73	-24,10	-24,16	-23,80	-23,08	-22,00	-20,67	-19,17	-17,62	-16,01	-14,48	—
	DMA	27,75	27,77	27,62	27,19	27,49	27,75	27,66	27,17	26,28	25,04	23,59	22,00	20,57	19,39	19,08	—
	PDMA	55,20	56,48	56,40	55,03	52,74	49,31	44,87	39,76	33,90	27,49	21,16	15,71	10,36	5,71	1,27	—
CPI	DM	-49,59	-49,54	-49,77	-50,30	-50,93	-51,43	-51,52	-51,06	-50,04	-48,49	-46,56	-44,40	-42,18	-39,93	-37,85	—
	DMA	59,34	58,43	57,05	55,15	52,22	48,55	44,55	40,43	36,29	32,13	28,03	23,93	19,83	15,73	11,63	—
	PDMA	87,27	87,74	86,03	82,25	77,60	71,85	65,33	58,11	50,44	42,47	34,53	26,82	19,42	12,44	5,83	—
SPI	DM	-0,75	-1,67	-2,51	-3,23	-3,79	-4,07	-4,10	-3,81	-3,31	-2,57	-1,69	-0,67	0,39	1,53	2,66	—
	DMA	4,58	5,28	6,03	6,69	7,16	7,36	7,30	7,00	6,47	5,76	5,01	4,22	3,67	3,54	4,26	—
	PDMA	31,68	33,55	34,67	35,07	34,51	32,79	29,86	26,31	21,76	16,51	11,35	7,56	4,16	1,52	—	—
ΔCS	DM	-48,84	-47,87	-47,26	-47,07	-47,14	-47,36	-47,42	-47,25	-46,73	-45,92	-44,88	-43,73	-42,58	-41,45	-40,51	—
	DMA	54,76	53,15	51,01	48,47	48,06	48,19	48,13	47,68	46,82	45,57	43,92	42,03	39,93	37,46	35,02	—
	PDMA	55,59	54,20	51,36	47,18	43,09	39,06	35,47	31,80	28,68	25,96	23,17	19,25	15,78	-0,48	-5,96	—

Tabela 8.359: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	430,1	433,7	437,3	440,8	444,4	448,5	453,4	459,0	465,4	472,5	479,7	487,3	494,9	502,5	510,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,1	22,2	22,2	22,1	22,1	22,2	22,2	22,1	21,9	21,6	21,2	20,5	19,8	19,0	18,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,9	-73,1	-73,3	-73,4	-73,6	-73,9	-74,3	-74,9	-75,6	-76,5	-77,4	-78,3	-79,3	-80,3	-81,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,9	-4,7	-4,6	-4,6	-4,7	-4,9	-5,2	-5,6	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-7,9	-8,4	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	42,3	42,0	41,8	41,5	41,4	41,4	41,5	41,7	42,0	42,4	42,8	43,3	43,8	44,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,2	-7,0	-7,0	-7,1	-7,4	-7,8	-8,2	-8,7	-9,2	-9,8	-10,3	-10,8	-11,3	-11,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	152,9	150,8	146,7	141,5	136,9	134,1	133,6	135,3	138,7	143,3	148,8	154,6	160,6	166,4	171,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1692,8	-1689,7	-1687,3	-1686,0	-1685,8	-1686,3	-1686,6	-1685,7	-1682,5	-1676,8	-1668,5	-1658,0	-1646,0	-1632,9	-1619,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-160,8	-161,7	-160,0	-156,2	-151,0	-144,8	-138,1	-131,0	-123,7	-116,2	-108,8	-101,6	-94,7	-88,1	-81,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-62,1	-62,2	-60,0	-55,6	-49,5	-42,3	-34,4	-26,1	-17,8	-9,6	-1,6	6,0	13,2	19,9	26,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-304,4	-308,9	-316,6	-328,0	-342,4	-358,4	-375,0	-391,5	-407,7	-423,6	-439,5	-455,7	-472,2	-489,3	-506,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,3	118,5	116,5	114,8	113,4	112,7	112,5	113,0	113,8	115,1	116,6	118,3	120,0	121,8	123,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-10,2	-9,9	-9,8	-9,9	-10,2	-10,6	-11,1	-11,6	-12,2	-12,8	-13,3	-13,8	-14,3	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	187,9	186,1	184,9	184,1	183,6	183,5	184,0	185,1	186,7	188,9	191,6	194,7	198,1	201,7	205,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,0	246,7	243,1	239,9	237,4	236,0	235,6	236,3	237,8	239,9	242,6	245,6	248,7	252,0	255,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,3	55,4	55,8	56,2	56,6	56,9	57,0	57,0	56,8	56,5	56,0	55,4	54,8	54,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,2	8,9	8,6	8,4	8,4	8,4	8,7	9,0	9,5	10,1	10,7	11,4	12,1	12,7	13,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,6	58,5	57,8	57,4	57,2	57,1	57,5	58,2	59,4	61,0	63,0	65,3	67,9	70,7	73,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,5	151,3	149,1	147,2	145,8	145,1	145,2	146,0	147,3	149,1	151,2	153,6	156,0	158,6	161,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	0,5	0,6	0,6	0,5	0,3	0,0	-0,4	-1,0	-1,6	-2,4	-3,2	-4,0	-4,9	-5,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,6	5,6	5,5	5,3	4,9	4,5	4,0	3,5	2,9	2,3	1,7	1,1	0,5	0,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,7	11,7	11,7	11,7	11,8	11,9	12,1	12,2	12,5	12,8	13,1	13,4	13,8	14,1	14,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,4	18,2	17,9	17,7	17,5	17,5	17,5	17,7	17,9	18,3	18,7	19,1	19,6	20,1	20,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,0	25,4	25,1	25,1	25,2	25,4	25,8	26,5	27,3	28,3	29,5	30,8	32,2	33,6	34,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,6	118,8	116,9	115,2	113,9	113,2	113,2	113,7	114,7	116,1	117,7	119,5	121,3	123,1	124,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,7	-2,9	-3,1	-3,4	-3,7	-4,0	-4,3	-4,6	-4,9	-5,2	-4,7
Total	DM	-19,13	-19,64	-20,18	-20,71	-21,17	-21,43	-21,38	-21,00	-20,30	-19,32	-18,12	-16,79	-15,40	-14,00	-12,66	—
	DMA	22,90	23,17	23,66	24,14	24,54	24,69	24,53	24,02	23,18	22,08	20,79	19,58	18,47	18,49	19,36	—
	PDMA	44,20	45,50	45,87	45,00	43,10	39,87	35,88	31,06	25,60	20,05	14,30	14,00	14,28	18,14	23,43	—
CPI	DM	-45,34	-45,40	-45,59	-45,95	-46,37	-46,61	-46,52	-46,00	-45,02	-43,63	-41,95	-40,10	-38,18	-36,33	-34,59	—
	DMA	48,59	48,73	48,94	49,26	49,61	49,72	49,43	48,64	47,33	45,54	43,45	41,26	39,04	38,20	39,25	—
	PDMA	69,01	69,93	69,12	66,54	62,69	57,72	51,84	45,34	38,50	31,39	24,55	18,95	14,20	15,91	20,59	—
SPI	DM	0,08	-0,75	-1,55	-2,20	-2,69	-2,96	-2,94	-2,67	-2,18	-1,49	-0,65	0,30	1,31	2,37	3,42	—
	DMA	4,07	4,42	5,13	5,72	6,15	6,33	6,27	5,96	5,47	4,87	4,17	3,67	3,39	4,03	4,78	—
	PDMA	26,00	27,58	28,82	29,20	28,73	26,79	24,17	20,59	16,14	11,73	6,79	10,37	14,33	19,78	25,52	—
ΔCS	DM	-45,42	-44,65	-44,04	-43,75	-43,69	-43,65	-43,58	-43,33	-42,84	-42,14	-41,29	-40,40	-39,50	-38,69	-38,01	—
	DMA	44,52	44,31	43,81	43,54	43,46	43,38	43,15	42,68	41,85	40,66	39,28	37,59	35,64	34,17	34,47	—
	PDMA	43,01	42,35	40,30	37,34	33,97	30,92	27,67	24,75	22,36	19,66	17,77	8,58	-0,12	-3,86	-4,92	—

Tabela 8.360: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	453,4	456,5	459,6	462,7	465,9	469,6	473,9	478,9	484,5	490,6	497,1	503,7	510,4	517,1	523,9	500
CO	$^1J_{CO}$	20,3	20,4	20,4	20,3	20,4	20,4	20,4	20,4	20,2	19,9	19,5	18,9	18,2	17,5	16,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,4	-75,5	-75,7	-75,8	-75,9	-76,2	-76,6	-77,1	-77,7	-78,5	-79,3	-80,1	-81,0	-81,9	-82,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,9	-5,7	-5,6	-5,6	-5,7	-5,9	-6,1	-6,5	-6,9	-7,3	-7,7	-8,2	-8,6	-9,0	-9,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,2	43,0	42,8	42,6	42,4	42,2	42,2	42,3	42,5	42,8	43,1	43,5	43,9	44,4	44,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,3	-8,1	-7,9	-7,9	-8,0	-8,2	-8,6	-9,0	-9,4	-9,9	-10,4	-10,8	-11,3	-11,8	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	160,4	158,4	154,7	150,1	146,0	143,5	143,1	144,5	147,5	151,6	156,5	161,7	166,9	172,1	177,0	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1668,2	-1666,0	-1663,7	-1661,6	-1659,9	-1658,7	-1657,4	-1655,0	-1651,0	-1645,0	-1636,9	-1627,2	-1616,2	-1604,3	-1592,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-143,8	-144,8	-143,5	-140,3	-135,8	-130,4	-124,5	-118,2	-111,7	-105,1	-98,5	-92,1	-86,0	-80,1	-74,6	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-43,6	-43,9	-42,1	-38,4	-33,1	-26,9	-20,0	-12,8	-5,4	1,7	8,8	15,6	22,0	28,0	33,6	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-337,7	-341,6	-348,4	-358,4	-371,1	-385,5	-400,7	-416,1	-431,5	-447,0	-462,6	-478,6	-495,2	-512,3	-529,9	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	121,8	120,1	118,4	116,8	115,6	115,0	114,8	115,2	116,0	117,2	118,5	120,0	121,6	123,2	124,7	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,3	-10,9	-10,6	-10,6	-10,7	-10,9	-11,3	-11,7	-12,2	-12,7	-13,2	-13,7	-14,2	-14,6	-15,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	190,7	189,0	187,9	187,1	186,8	186,8	187,4	188,5	190,2	192,3	195,0	197,9	201,1	204,5	208,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	252,2	249,2	245,9	243,0	240,8	239,5	239,2	239,9	241,3	243,3	245,7	248,5	251,4	254,4	257,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,5	55,4	55,6	55,9	56,2	56,5	56,7	56,8	56,6	56,4	56,0	55,5	54,9	54,2	53,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,7	9,4	9,1	9,0	8,9	9,1	9,3	9,7	10,2	10,7	11,3	12,0	12,6	13,3	13,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	62,2	61,1	60,5	60,1	59,9	60,0	60,4	61,1	62,3	63,9	65,9	68,1	70,6	73,3	76,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	155,5	153,6	151,5	149,8	148,6	148,0	148,1	148,8	150,1	151,7	153,7	155,9	158,2	160,5	162,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,3	-0,2	-0,1	-0,1	-0,2	-0,4	-0,7	-1,2	-1,7	-2,4	-3,1	-3,9	-4,7	-5,6	-6,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,8	4,9	4,9	4,9	4,7	4,4	4,0	3,5	3,0	2,4	1,9	1,3	0,7	0,2	-0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,9	11,8	11,8	11,9	12,0	12,1	12,3	12,5	12,7	13,0	13,3	13,6	14,0	14,3	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	18,6	18,4	18,2	18,0	17,9	17,8	17,9	18,1	18,4	18,7	19,1	19,6	20,1	20,5	21,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,0	27,4	27,2	27,1	27,2	27,4	27,8	28,4	29,1	30,1	31,2	32,3	33,6	34,8	36,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	122,3	120,6	118,9	117,4	116,3	115,7	115,6	116,1	117,0	118,2	119,7	121,3	122,9	124,6	126,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-2,9	-2,9	-2,9	-3,0	-3,1	-3,3	-3,5	-3,7	-4,0	-4,3	-4,6	-4,8	-5,1	-5,3	-4,7
Total	DM	-16,62	-17,13	-17,62	-18,07	-18,42	-18,58	-18,50	-18,13	-17,48	-16,63	-15,57	-14,42	-13,23	-12,03	-10,89	—
	DMA	20,14	20,35	20,69	21,10	21,39	21,48	21,30	20,82	20,08	19,15	18,20	17,66	18,27	19,28	20,60	—
	PDMA	33,91	35,08	35,45	34,87	33,11	30,37	26,72	22,19	17,64	12,67	12,21	13,11	17,74	23,05	28,61	—
CPI	DM	-40,59	-40,75	-40,94	-41,20	-41,43	-41,55	-41,38	-40,86	-39,98	-38,83	-37,39	-35,86	-34,35	-32,84	-31,45	—
	DMA	42,74	42,96	43,17	43,40	43,59	43,58	43,24	42,48	41,31	39,85	38,19	37,19	37,85	39,33	41,13	—
	PDMA	52,60	53,56	52,97	50,82	47,50	43,21	38,11	32,40	26,31	20,69	16,34	12,94	16,99	21,93	27,01	—
SPI	DM	0,97	0,19	-0,52	-1,11	-1,54	-1,75	-1,73	-1,46	-0,99	-0,35	0,44	1,31	2,26	3,23	4,19	—
	DMA	3,57	3,77	4,20	4,74	5,11	5,27	5,21	4,93	4,52	3,97	3,55	3,34	3,90	4,59	5,54	—
	PDMA	20,21	21,54	22,60	23,18	22,56	20,95	18,36	14,71	11,29	6,78	9,18	13,24	18,29	23,86	29,78	—
Δ CS	DM	-41,56	-40,93	-40,42	-40,09	-39,89	-39,80	-39,66	-39,40	-39,00	-38,47	-37,83	-37,18	-36,61	-36,06	-35,65	—
	DMA	39,17	39,19	38,97	38,66	38,48	38,32	38,03	37,56	36,79	35,88	34,64	33,85	33,95	34,74	35,59	—
	PDMA	32,39	32,02	30,37	27,63	24,94	22,25	19,74	17,69	15,02	13,91	7,16	-0,30	-1,30	-1,93	-2,77	—

Tabela 8.361: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	477,0	479,5	482,2	484,8	487,7	490,9	494,6	498,9	503,8	509,1	514,7	520,4	526,3	532,1	538,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,4	18,5	18,5	18,5	18,5	18,5	18,5	18,5	18,4	18,1	17,7	17,2	16,6	15,9	15,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-78,0	-78,1	-78,2	-78,3	-78,5	-78,9	-79,3	-79,9	-80,5	-81,2	-81,9	-82,7	-83,5	-84,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-6,8	-6,6	-6,6	-6,7	-6,9	-7,1	-7,4	-7,8	-8,1	-8,5	-8,9	-9,3	-9,7	-10,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	43,8	43,6	43,4	43,2	43,1	43,1	43,2	43,3	43,6	43,8	44,2	44,6	45,0	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-9,0	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,4	-9,7	-10,1	-10,6	-11,0	-11,4	-11,8	-12,2	-12,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,8	166,0	162,7	158,7	155,1	152,9	152,4	153,7	156,3	159,9	164,1	168,7	173,3	177,8	182,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1639,5	-1638,1	-1635,9	-1633,4	-1630,9	-1628,6	-1626,2	-1623,0	-1618,6	-1612,6	-1605,0	-1596,1	-1586,2	-1575,7	-1564,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-126,8	-127,9	-127,0	-124,3	-120,4	-115,8	-110,7	-105,2	-99,5	-93,8	-88,0	-82,5	-77,1	-72,0	-67,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-25,2	-25,6	-24,2	-21,2	-16,7	-11,4	-5,5	0,7	7,0	13,3	19,5	25,4	31,0	36,2	41,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-371,1	-374,5	-380,4	-389,3	-400,7	-413,9	-428,0	-442,6	-457,4	-472,6	-488,1	-504,2	-520,8	-538,0	-555,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,3	121,8	120,3	118,9	117,9	117,3	117,2	117,5	118,2	119,2	120,5	121,8	123,2	124,6	125,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-11,7	-11,4	-11,3	-11,4	-11,6	-12,0	-12,4	-12,8	-13,2	-13,7	-14,1	-14,5	-14,9	-15,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	193,8	192,3	191,2	190,6	190,3	190,5	191,1	192,3	193,9	196,1	198,6	201,4	204,4	207,6	210,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,5	251,7	248,9	246,3	244,3	243,2	243,0	243,6	244,9	246,8	249,0	251,6	254,2	256,9	259,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,4	55,5	55,8	56,1	56,3	56,4	56,3	56,2	55,8	55,4	54,8	54,2	53,6	52,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,3	10,0	9,8	9,6	9,6	9,8	10,0	10,4	10,9	11,4	12,0	12,7	13,3	13,9	14,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,1	64,0	63,4	63,0	62,9	63,0	63,5	64,3	65,5	67,1	69,0	71,2	73,5	76,0	78,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,7	155,9	154,1	152,5	151,4	151,0	151,1	151,8	153,0	154,5	156,3	158,3	160,4	162,5	164,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,0	-0,9	-0,9	-1,0	-1,2	-1,6	-2,0	-2,6	-3,2	-3,9	-4,7	-5,5	-6,3	-7,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	4,2	4,3	4,2	4,0	3,7	3,4	2,9	2,4	1,9	1,4	0,8	0,3	-0,1	-0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,1	12,1	12,1	12,1	12,2	12,3	12,5	12,7	13,0	13,3	13,6	13,9	14,2	14,6	14,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,9	18,7	18,5	18,3	18,2	18,3	18,4	18,6	18,8	19,2	19,6	20,0	20,5	21,0	21,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	29,5	29,2	29,2	29,3	29,5	29,8	30,3	31,0	31,9	32,8	33,9	35,0	36,1	37,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	124,0	122,5	121,0	119,6	118,6	118,1	118,1	118,5	119,3	120,4	121,7	123,1	124,6	126,0	127,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,4	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,7	-3,9	-4,1	-4,3	-4,6	-4,8	-5,1	-5,3	-5,5	-4,7
Total	DM	-13,92	-14,43	-14,86	-15,26	-15,54	-15,66	-15,58	-15,24	-14,69	-13,93	-13,05	-12,08	-11,09	-10,11	-9,19	—
	DMA	17,33	17,44	17,63	17,89	18,12	18,18	18,02	17,63	17,38	17,16	17,47	18,29	19,45	20,75	22,16	—
	PDMA	23,57	24,62	25,14	24,41	22,76	20,37	17,20	13,65	10,83	10,75	13,76	18,51	23,70	28,98	34,61	—
CPI	DM	-35,48	-35,73	-35,90	-36,12	-36,27	-36,34	-36,19	-35,74	-35,04	-34,10	-32,99	-31,82	-30,64	-29,55	-28,54	—
	DMA	36,52	36,78	37,01	37,21	37,31	37,26	36,95	36,35	36,22	36,08	36,72	37,91	39,76	41,64	43,57	—
	PDMA	36,14	36,95	36,75	35,07	32,18	28,47	24,13	19,77	16,41	12,87	14,93	19,31	24,34	29,60	35,03	—
SPI	DM	1,90	1,19	0,57	0,03	-0,34	-0,49	-0,46	-0,21	0,23	0,85	1,57	2,39	3,24	4,14	5,00	—
	DMA	3,26	3,26	3,43	3,73	4,05	4,19	4,13	3,91	3,57	3,28	3,35	3,91	4,56	5,43	6,45	—
	PDMA	14,36	15,58	16,62	16,59	15,86	14,44	12,12	9,16	6,74	9,19	12,90	17,91	23,23	28,52	34,29	—
ΔCS	DM	-37,38	-36,92	-36,47	-36,15	-35,93	-35,84	-35,73	-35,52	-35,27	-34,95	-34,56	-34,20	-33,88	-33,69	-33,54	—
	DMA	33,26	33,52	33,58	33,48	33,26	33,08	32,83	32,45	32,65	32,80	33,37	34,00	35,20	36,20	37,12	—
	PDMA	21,78	21,38	20,13	18,48	16,33	14,03	12,01	10,61	9,67	3,68	2,03	1,40	1,11	1,08	0,74	—

Tabela 8.362: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	500,8	502,8	505,0	507,2	509,6	512,3	515,5	519,2	523,4	527,9	532,6	537,5	542,5	547,5	552,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,4	16,5	16,5	16,5	16,5	16,6	16,6	16,5	16,4	16,2	15,8	15,4	14,8	14,2	13,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,4	-80,5	-80,5	-80,6	-80,7	-80,9	-81,2	-81,6	-82,0	-82,6	-83,2	-83,8	-84,5	-85,2	-85,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-7,8	-7,7	-7,7	-7,7	-7,9	-8,1	-8,4	-8,7	-9,0	-9,3	-9,7	-10,0	-10,3	-10,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	44,5	44,4	44,2	44,0	44,0	43,9	44,0	44,2	44,4	44,6	44,9	45,2	45,6	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,1	-9,9	-9,7	-9,7	-9,8	-10,0	-10,2	-10,5	-10,9	-11,3	-11,6	-12,0	-12,4	-12,7	-13,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,1	173,4	170,6	167,2	164,1	162,2	161,8	162,8	165,0	168,1	171,7	175,6	179,6	183,5	187,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1607,4	-1606,7	-1604,8	-1602,2	-1599,3	-1596,4	-1593,4	-1589,8	-1585,3	-1579,6	-1572,6	-1564,7	-1556,1	-1546,9	-1537,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-109,9	-110,9	-110,3	-108,2	-105,0	-101,1	-96,7	-92,0	-87,2	-82,3	-77,4	-72,6	-68,0	-63,6	-59,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-7,0	-7,4	-6,4	-3,9	-0,3	4,1	9,1	14,3	19,7	25,1	30,3	35,4	40,2	44,7	48,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-406,3	-409,1	-414,3	-422,2	-432,6	-444,8	-458,1	-472,1	-486,6	-501,6	-517,1	-533,3	-550,0	-567,3	-585,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	123,5	122,2	121,0	120,1	119,6	119,6	119,9	120,5	121,4	122,4	123,6	124,8	126,0	127,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,7	-12,4	-12,2	-12,1	-12,2	-12,4	-12,7	-13,0	-13,4	-13,8	-14,1	-14,5	-14,9	-15,2	-15,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,4	196,0	195,0	194,5	194,3	194,6	195,3	196,4	198,1	200,1	202,5	205,2	208,0	210,8	213,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	256,9	254,5	251,9	249,7	248,0	247,1	247,0	247,6	248,8	250,5	252,5	254,8	257,1	259,5	261,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,1	55,1	55,3	55,5	55,7	55,8	55,9	55,8	55,5	55,1	54,6	54,1	53,5	52,8	52,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	10,7	10,5	10,4	10,4	10,6	10,8	11,2	11,7	12,2	12,8	13,4	13,9	14,5	15,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,2	67,2	66,6	66,3	66,2	66,4	67,0	67,8	69,0	70,6	72,4	74,4	76,6	78,9	81,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	159,9	158,3	156,7	155,4	154,5	154,1	154,2	154,9	156,0	157,4	159,0	160,8	162,7	164,6	166,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,0	-1,9	-1,9	-2,0	-2,2	-2,5	-3,0	-3,6	-4,2	-4,9	-5,6	-6,4	-7,1	-7,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	3,5	3,5	3,5	3,3	3,0	2,7	2,3	1,8	1,3	0,8	0,3	-0,1	-0,5	-1,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,4	12,4	12,3	12,4	12,5	12,6	12,8	13,0	13,3	13,6	13,9	14,2	14,5	14,8	15,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,3	19,1	18,9	18,8	18,7	18,8	18,9	19,1	19,4	19,7	20,1	20,6	21,0	21,4	21,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,2	31,6	31,4	31,3	31,4	31,6	31,9	32,3	32,9	33,7	34,5	35,5	36,4	37,4	38,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,7	124,4	123,1	121,9	121,1	120,6	120,6	121,0	121,7	122,7	123,8	125,0	126,3	127,5	128,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,9	-3,9	-3,8	-3,8	-3,9	-3,9	-4,1	-4,3	-4,5	-4,7	-4,9	-5,1	-5,3	-5,5	-5,7	-4,7
Total	DM	-11,13	-11,62	-12,03	-12,37	-12,62	-12,72	-12,63	-12,37	-11,92	-11,31	-10,61	-9,83	-9,06	-8,29	-7,60	—
	DMA	14,84	14,97	15,15	15,42	15,68	15,96	16,13	16,25	16,85	17,68	18,79	20,00	21,27	22,59	23,96	—
	PDMA	14,85	15,16	15,11	14,66	13,32	11,68	9,74	8,78	12,16	16,15	20,94	26,06	31,10	35,94	41,08	—
CPI	DM	-30,27	-30,55	-30,74	-30,94	-31,10	-31,16	-31,06	-30,77	-30,26	-29,60	-28,83	-28,02	-27,24	-26,49	-25,88	—
	DMA	30,62	31,22	31,79	32,34	32,90	33,47	33,94	34,32	35,45	36,93	38,88	40,82	42,71	44,56	46,43	—
	PDMA	22,61	22,72	22,04	20,67	18,70	16,62	14,02	11,45	14,52	18,95	23,96	29,14	34,13	38,85	43,54	—
SPI	DM	2,91	2,26	1,69	1,25	0,93	0,81	0,89	1,13	1,54	2,10	2,75	3,51	4,27	5,05	5,81	—
	DMA	3,27	3,05	2,95	3,01	3,05	3,12	3,07	2,99	3,21	3,57	4,06	4,73	5,55	6,48	7,48	—
	PDMA	9,17	9,61	10,03	10,25	9,38	8,05	6,60	6,82	10,43	14,10	18,72	23,81	28,88	33,81	39,28	—
ΔCS	DM	-33,18	-32,81	-32,43	-32,19	-32,03	-31,98	-31,95	-31,90	-31,80	-31,70	-31,58	-31,52	-31,50	-31,54	-31,70	—
	DMA	27,35	28,17	28,84	29,32	29,85	30,35	30,86	31,32	32,24	33,36	34,82	36,08	37,16	38,08	38,95	—
	PDMA	13,44	13,11	12,01	10,42	9,31	8,56	7,42	6,63	4,09	4,86	5,24	5,34	5,24	5,04	4,27	—

Tabela 8.363: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	524,7	526,3	528,1	529,9	531,8	534,1	536,7	539,8	543,2	546,9	550,8	554,9	559,0	563,2	567,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,3	14,4	14,4	14,4	14,4	14,5	14,5	14,5	14,4	14,2	13,9	13,5	13,0	12,5	11,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,0	-83,1	-83,2	-83,3	-83,6	-83,9	-84,3	-84,7	-85,2	-85,8	-86,3	-86,9	-87,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,0	-8,9	-8,8	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,3	-9,6	-9,9	-10,2	-10,4	-10,7	-11,0	-11,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,3	45,2	45,0	44,9	44,8	44,8	44,9	45,0	45,2	45,4	45,6	45,9	46,2	46,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,0	-10,8	-10,7	-10,7	-10,7	-10,9	-11,1	-11,4	-11,6	-12,0	-12,3	-12,6	-12,9	-13,2	-13,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	182,4	180,9	178,5	175,6	173,0	171,4	171,1	171,9	173,7	176,3	179,3	182,6	185,9	189,1	192,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1572,5	-1572,3	-1570,7	-1568,2	-1565,3	-1562,3	-1559,2	-1555,6	-1551,3	-1546,1	-1540,0	-1533,2	-1525,8	-1518,1	-1510,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-93,1	-94,0	-93,6	-92,0	-89,4	-86,2	-82,6	-78,8	-74,8	-70,7	-66,6	-62,7	-58,8	-55,2	-51,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	11,1	10,6	11,3	13,3	16,2	19,8	23,9	28,2	32,6	37,1	41,4	45,6	49,6	53,4	57,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-445,1	-447,4	-451,9	-459,0	-468,6	-480,0	-492,7	-506,3	-520,7	-535,7	-551,3	-567,6	-584,4	-601,8	-619,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,5	125,3	124,2	123,2	122,5	122,0	122,0	122,3	122,8	123,5	124,4	125,4	126,4	127,4	128,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,4	-13,2	-13,0	-12,9	-13,0	-13,1	-13,4	-13,6	-14,0	-14,3	-14,6	-14,9	-15,2	-15,5	-15,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,5	200,3	199,4	198,9	198,9	199,2	200,0	201,1	202,7	204,6	206,8	209,2	211,7	214,3	216,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,5	257,4	255,2	253,3	251,9	251,2	251,1	251,7	253,2	254,3	256,1	258,1	260,1	262,2	264,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,7	54,8	55,0	55,1	55,2	55,1	55,0	55,0	54,3	53,8	53,2	52,6	52,0	51,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,5	11,4	11,3	11,3	11,5	11,8	12,1	9,3	13,1	13,6	14,1	14,6	15,1	15,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	71,7	70,8	70,2	70,0	70,0	70,3	70,8	71,7	72,9	74,4	76,1	78,0	80,0	82,0	84,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,3	160,9	159,5	158,4	157,7	157,4	157,6	158,2	159,2	160,4	161,9	163,4	165,1	166,7	168,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,1	-3,0	-3,0	-3,1	-3,3	-3,7	-4,1	-4,7	-5,3	-5,9	-6,6	-7,3	-8,0	-8,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,6	2,7	2,7	2,7	2,5	2,3	2,0	1,6	1,2	0,7	0,3	-0,1	-0,5	-1,0	-1,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,8	12,7	12,7	12,7	12,8	13,0	13,2	13,4	13,6	13,9	14,2	14,5	14,8	15,1	15,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,7	19,5	19,4	19,3	19,3	19,3	19,5	19,7	20,0	20,3	20,7	21,1	21,5	21,9	22,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,3	33,8	33,6	33,6	33,6	33,8	34,0	34,4	34,9	35,6	36,3	37,1	37,9	38,7	39,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,5	126,4	125,3	124,3	123,6	123,2	123,2	123,5	124,1	124,9	125,9	126,9	127,9	129,0	130,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,5	-4,7	-4,8	-5,0	-5,2	-5,4	-5,6	-5,7	-5,9	-4,7
Total	DM	-8,34	-8,79	-9,16	-9,47	-9,69	-9,78	-9,75	-9,57	-9,35	-8,81	-8,28	-7,73	-7,17	-6,64	-6,14	—
	DMA	15,09	15,01	15,03	15,17	15,46	15,98	16,72	17,68	18,66	19,84	20,99	22,19	23,47	24,82	26,35	—
	PDMA	11,37	11,12	10,57	10,03	9,86	11,03	13,82	16,98	19,97	25,51	29,84	34,32	38,90	43,56	47,98	—
CPI	DM	-25,15	-25,44	-25,65	-25,86	-26,05	-26,17	-26,20	-26,08	-25,85	-25,48	-25,06	-24,64	-24,22	-23,88	-23,63	—
	DMA	29,95	30,49	31,01	31,52	32,25	33,43	34,93	36,86	38,79	40,70	42,55	44,38	46,20	48,19	50,61	—
	PDMA	14,53	14,69	14,26	13,22	13,06	15,59	18,89	22,90	27,07	31,55	35,88	40,08	44,36	48,60	53,00	—
SPI	DM	3,98	3,42	2,93	2,56	2,31	2,23	2,31	2,55	2,75	3,42	4,02	4,66	5,33	6,01	6,69	—
	DMA	4,19	3,66	3,31	3,17	3,14	3,19	3,37	3,61	3,90	4,54	5,18	5,91	6,79	7,69	8,55	—
	PDMA	9,05	8,50	7,86	7,69	7,51	7,68	10,11	12,64	14,77	21,09	25,42	30,10	34,90	39,86	44,30	—
ΔCS	DM	-29,13	-28,86	-28,58	-28,42	-28,37	-28,41	-28,51	-28,63	-28,60	-28,90	-29,08	-29,30	-29,54	-29,89	-30,31	—
	DMA	25,75	26,83	27,70	28,34	29,11	30,23	31,55	33,25	34,89	36,16	37,37	38,47	39,41	40,50	42,06	—
	PDMA	5,48	6,19	6,40	5,53	5,54	7,90	8,78	10,26	12,30	10,46	10,46	9,98	9,45	8,74	8,71	—

Tabela 8.364: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	406,6	410,3	414,1	417,6	421,2	425,2	430,0	435,7	442,1	449,2	456,6	464,2	471,9	479,5	487,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,8	23,8	23,8	23,7	23,7	23,8	23,8	23,8	23,6	23,3	22,8	22,3	21,6	20,8	19,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,5	-70,7	-70,8	-71,0	-71,2	-71,5	-71,9	-72,5	-73,3	-74,1	-75,0	-76,0	-77,0	-78,0	-79,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-3,7	-3,6	-3,6	-3,8	-4,0	-4,3	-4,7	-5,1	-5,6	-6,0	-6,5	-7,0	-7,4	-7,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,8	41,6	41,3	41,1	40,9	40,7	40,7	40,8	41,0	41,3	41,7	42,1	42,6	43,1	43,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-6,4	-6,2	-6,2	-6,4	-6,6	-7,0	-7,4	-7,9	-8,4	-9,0	-9,5	-10,0	-10,5	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,4	143,5	139,4	134,2	129,5	126,7	126,2	127,9	131,4	136,0	141,5	147,4	153,4	159,2	164,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1713,0	-1709,2	-1707,1	-1707,0	-1708,7	-1711,5	-1714,3	-1715,8	-1715,0	-1711,3	-1704,8	-1695,8	-1685,0	-1672,9	-1660,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,4	-178,1	-176,2	-172,2	-166,8	-160,5	-153,7	-146,6	-139,2	-131,7	-124,2	-117,0	-110,0	-103,4	-97,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,5	-80,4	-78,0	-73,3	-67,0	-59,5	-51,4	-43,0	-34,5	-26,2	-18,1	-10,3	-3,1	3,7	10,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-270,0	-274,6	-282,6	-294,3	-309,0	-325,2	-341,7	-357,8	-373,2	-387,8	-402,0	-416,1	-430,1	-444,2	-458,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,0	117,2	115,3	113,6	112,2	111,4	111,3	111,7	112,5	113,8	115,3	116,9	118,6	120,4	122,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,5	-9,2	-9,2	-9,3	-9,6	-10,0	-10,5	-11,0	-11,6	-12,1	-12,7	-13,2	-13,6	-14,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,7	184,0	182,8	182,0	181,5	181,3	181,6	182,5	183,9	185,8	188,2	190,9	193,9	197,0	200,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	248,1	244,9	241,4	238,2	235,8	234,3	233,9	234,5	236,0	238,0	240,6	243,4	246,4	249,5	252,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,2	55,0	55,2	55,6	56,0	56,5	56,8	57,0	57,1	57,0	56,8	56,5	56,1	55,6	55,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,6	8,3	8,1	8,0	8,0	8,2	8,5	8,9	9,4	9,9	10,5	11,1	11,7	12,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,4	56,3	55,7	55,3	55,1	55,0	55,3	55,9	56,9	58,3	60,0	62,1	64,3	66,7	69,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,7	149,6	147,4	145,5	144,1	143,4	143,5	144,2	145,5	147,2	149,2	151,4	153,8	156,1	158,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,1	1,2	1,2	1,2	1,1	1,0	0,7	0,3	-0,1	-0,7	-1,4	-2,0	-2,8	-3,5	-4,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	6,2	6,2	6,1	5,8	5,5	5,1	4,7	4,2	3,7	3,1	2,6	2,1	1,6	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,5	11,6	11,6	11,7	11,9	12,0	12,2	12,4	12,7	13,0	13,3	13,5	13,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,3	18,0	17,8	17,5	17,4	17,3	17,3	17,4	17,6	17,8	18,2	18,6	19,0	19,4	19,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,2	23,6	23,4	23,4	23,5	23,7	24,1	24,7	25,5	26,5	27,7	29,0	30,3	31,6	32,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,1	117,4	115,5	113,8	112,5	111,8	111,8	112,3	113,2	114,6	116,2	117,9	119,7	121,5	123,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,0	-2,1	-2,1	-2,3	-2,5	-2,7	-3,0	-3,3	-3,6	-3,9	-4,2	-4,4	-4,7	-4,7
Total	DM	-21,35	-21,81	-22,32	-22,90	-23,44	-23,78	-23,83	-23,54	-22,91	-21,98	-20,80	-19,46	-18,05	-16,62	-15,21	—
	DMA	27,74	27,73	27,60	27,21	27,22	27,47	27,39	26,97	26,20	25,10	23,79	22,36	20,96	19,78	19,05	—
	PDMA	55,03	56,21	56,21	54,83	52,45	49,49	45,49	40,88	35,70	29,95	24,03	18,63	15,52	15,15	15,67	—
CPI	DM	-49,57	-49,53	-49,71	-50,17	-50,77	-51,21	-51,32	-50,95	-50,09	-48,75	-47,04	-45,10	-43,05	-41,00	-39,01	—
	DMA	59,35	58,53	57,29	55,57	55,03	55,35	55,26	54,65	53,44	51,71	49,56	47,17	44,71	42,27	39,94	—
	PDMA	86,98	87,44	86,02	82,54	77,99	72,95	66,97	60,45	53,46	46,27	39,01	31,89	25,75	20,41	16,15	—
SPI	DM	-0,66	-1,48	-2,24	-2,90	-3,39	-3,67	-3,67	-3,44	-2,98	-2,35	-1,55	-0,66	0,29	1,27	2,25	—
	DMA	4,55	5,15	5,83	6,41	6,82	7,02	6,95	6,68	6,22	5,59	4,89	4,17	3,54	3,29	3,73	—
	PDMA	31,60	33,30	34,34	34,51	33,72	32,29	29,74	26,53	22,67	17,97	13,05	8,90	8,01	11,30	15,32	—
Δ CS	DM	-48,91	-48,05	-47,47	-47,27	-47,38	-47,54	-47,64	-47,51	-47,11	-46,40	-45,48	-44,44	-43,34	-42,27	-41,26	—
	DMA	54,80	53,38	51,46	49,17	48,21	48,33	48,31	47,97	47,22	46,12	44,68	43,01	41,17	38,98	36,21	—
	PDMA	55,39	54,14	51,68	48,03	44,27	40,67	37,23	33,93	30,79	28,30	25,96	22,98	17,73	9,11	0,83	—

Tabela 8.365: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	429,8	433,0	436,2	439,3	442,6	446,2	450,5	455,5	461,1	467,2	473,7	480,4	487,2	494,0	500,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,1	22,1	22,1	22,1	22,1	22,1	22,1	22,1	21,9	21,6	21,2	20,7	20,0	19,3	18,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,9	-73,1	-73,2	-73,3	-73,5	-73,8	-74,2	-74,7	-75,3	-76,1	-76,9	-77,7	-78,6	-79,5	-80,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,9	-4,7	-4,6	-4,6	-4,7	-4,9	-5,2	-5,5	-5,9	-6,3	-6,8	-7,2	-7,6	-8,1	-8,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	42,3	42,1	41,9	41,7	41,6	41,5	41,6	41,8	42,1	42,4	42,8	43,2	43,6	44,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,3	-7,1	-7,1	-7,2	-7,4	-7,8	-8,2	-8,6	-9,1	-9,6	-10,0	-10,5	-10,9	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,0	151,2	147,5	142,9	138,8	136,2	135,8	137,2	140,3	144,4	149,3	154,5	159,8	165,1	170,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1693,1	-1690,3	-1688,1	-1686,9	-1686,6	-1687,2	-1687,8	-1687,4	-1685,2	-1680,8	-1674,2	-1665,6	-1655,6	-1644,6	-1633,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-160,4	-161,2	-159,8	-156,4	-151,7	-146,2	-140,2	-133,8	-127,2	-120,6	-114,0	-107,5	-101,3	-95,4	-89,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,9	-62,0	-60,0	-56,1	-50,6	-44,1	-37,1	-29,7	-22,2	-14,8	-7,7	-0,8	5,5	11,6	17,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-304,1	-308,0	-314,9	-325,0	-337,8	-352,0	-366,7	-381,2	-395,3	-409,1	-422,6	-436,1	-449,7	-463,4	-477,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,5	118,8	117,1	115,6	114,4	113,7	113,5	113,9	114,7	115,8	117,2	118,6	120,2	121,7	123,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,6	-10,2	-10,0	-9,9	-10,0	-10,3	-10,7	-11,1	-11,6	-12,1	-12,6	-13,1	-13,5	-13,9	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,2	186,6	185,5	184,8	184,3	184,3	184,7	185,6	187,0	188,9	191,2	193,8	196,6	199,6	202,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,3	247,3	244,2	241,3	239,1	237,8	237,5	238,0	239,4	241,3	243,6	246,2	249,0	251,8	254,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,3	55,4	55,8	56,2	56,5	56,8	56,9	56,7	56,5	56,1	55,7	55,2	54,6	50,1	
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,0	8,7	8,5	8,5	8,5	8,7	9,1	9,5	9,9	10,5	11,0	11,6	12,1	12,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	59,8	58,8	58,2	57,8	57,6	57,6	57,9	58,6	59,6	61,0	62,6	64,6	66,7	69,0	71,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,7	151,8	149,8	148,1	146,8	146,2	146,3	147,0	148,1	149,7	151,6	153,6	155,8	158,0	160,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,4	0,5	0,5	0,5	0,5	0,3	0,0	-0,3	-0,8	-1,4	-2,0	-2,7	-3,4	-4,1	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,6	5,6	5,5	5,3	5,0	4,6	4,2	3,7	3,2	2,7	2,2	1,7	1,2	0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,7	11,7	11,7	11,7	11,8	11,9	12,0	12,2	12,4	12,6	12,9	13,1	13,4	13,7	14,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,4	18,2	18,0	17,8	17,6	17,6	17,6	17,7	17,9	18,2	18,6	18,9	19,3	19,7	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,1	25,6	25,3	25,3	25,4	25,6	26,0	26,5	27,3	28,2	29,3	30,4	31,6	32,8	34,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	119,2	117,5	116,0	114,8	114,2	114,2	114,6	115,5	116,7	118,1	119,7	121,3	123,0	124,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,7	-2,8	-3,1	-3,3	-3,6	-3,9	-4,1	-4,4	-4,7	-4,9	-4,7
Total	DM	-19,06	-19,51	-19,99	-20,46	-20,85	-21,09	-21,07	-20,74	-20,13	-19,28	-18,23	-17,05	-15,81	-14,55	-13,31	—
	DMA	22,87	23,06	23,49	23,93	24,27	24,40	24,27	23,83	23,09	22,12	20,97	19,79	18,78	18,12	17,85	—
	PDMA	44,06	45,24	45,41	44,67	43,05	40,18	36,52	32,35	27,43	22,32	17,30	14,00	13,99	14,43	16,57	—
CPI	DM	-45,30	-45,35	-45,52	-45,83	-46,16	-46,40	-46,36	-45,91	-45,05	-43,85	-42,37	-40,67	-38,95	-37,20	-35,52	—
	DMA	48,55	48,65	48,85	49,14	49,40	49,51	49,27	48,60	47,45	45,89	44,01	42,00	39,97	37,93	36,54	—
	PDMA	68,84	69,58	68,87	66,63	63,12	58,62	53,35	47,62	41,42	35,01	28,54	23,07	18,70	14,76	13,86	—
SPI	DM	0,19	-0,56	-1,27	-1,85	-2,29	-2,53	-2,52	-2,29	-1,85	-1,27	-0,52	0,28	1,17	2,07	2,98	—
	DMA	4,04	4,29	4,90	5,44	5,83	5,99	5,93	5,67	5,23	4,68	4,08	3,51	3,25	3,59	4,14	—
	PDMA	25,88	27,39	28,21	28,56	28,33	26,65	24,19	21,16	17,17	13,01	9,05	7,35	10,53	14,19	18,55	—
ΔCS	DM	-45,49	-44,79	-44,24	-43,97	-43,88	-43,87	-43,84	-43,62	-43,19	-42,59	-41,85	-40,95	-40,12	-39,27	-38,50	—
	DMA	44,51	44,35	43,95	43,70	43,57	43,52	43,34	42,93	42,22	41,21	39,93	38,49	36,73	34,34	32,40	—
	PDMA	42,96	42,19	40,66	38,08	34,79	31,97	29,16	26,46	24,25	22,01	19,49	15,72	8,16	0,57	-4,69	—

Tabela 8.366: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	453,2	455,8	458,6	461,3	464,1	467,3	471,0	475,4	480,3	485,5	491,2	497,0	502,9	508,8	514,7	500
CO	$^1J_{CO}$	20,3	20,3	20,3	20,3	20,3	20,3	20,4	20,3	20,2	19,9	19,5	19,0	18,5	17,8	17,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,4	-75,5	-75,6	-75,7	-75,9	-76,1	-76,4	-76,9	-77,4	-78,1	-78,8	-79,5	-80,3	-81,1	-81,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-6,0	-5,8	-5,7	-5,6	-5,7	-5,9	-6,1	-6,5	-6,8	-7,2	-7,5	-7,9	-8,3	-8,7	-9,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	43,2	43,1	42,9	42,7	42,5	42,4	42,4	42,5	42,6	42,8	43,1	43,5	43,8	44,2	44,6	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-8,4	-8,1	-8,0	-8,0	-8,1	-8,3	-8,6	-8,9	-9,3	-9,7	-10,2	-10,6	-11,0	-11,4	-11,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	160,5	158,8	155,6	151,5	147,9	145,7	145,3	146,5	149,1	152,8	157,0	161,6	166,3	170,8	175,2	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1668,3	-1666,4	-1664,3	-1662,4	-1660,9	-1659,9	-1658,9	-1657,2	-1654,2	-1649,5	-1643,0	-1635,1	-1626,0	-1616,2	-1605,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-143,5	-144,3	-143,2	-140,4	-136,4	-131,6	-126,4	-120,9	-115,1	-109,3	-103,6	-97,9	-92,5	-87,4	-82,5	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-43,4	-43,6	-42,1	-38,8	-34,2	-28,7	-22,6	-16,2	-9,7	-3,3	2,8	8,8	14,5	19,8	24,7	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-337,3	-340,7	-346,7	-355,4	-366,5	-379,0	-392,2	-405,5	-418,6	-431,6	-444,5	-457,6	-470,8	-484,1	-497,6	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	122,0	120,5	119,0	117,6	116,6	116,0	115,9	116,2	116,9	117,9	119,1	120,4	121,8	123,1	124,5	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-11,3	-11,0	-10,8	-10,7	-10,8	-11,0	-11,3	-11,7	-12,2	-12,6	-13,0	-13,5	-13,9	-14,2	-14,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	191,0	189,5	188,5	187,8	187,5	187,6	188,0	189,0	190,4	192,2	194,4	196,9	199,5	202,3	205,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	252,5	249,8	247,0	244,4	242,5	241,4	241,1	241,7	242,9	244,6	246,8	249,2	251,7	254,2	256,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	55,5	55,4	55,6	55,8	56,2	56,4	56,6	56,6	56,5	56,3	56,0	55,6	55,2	54,7	54,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	9,7	9,5	9,2	9,1	9,1	9,2	9,4	9,7	10,1	10,6	11,1	11,6	12,1	12,6	13,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	62,4	61,5	60,9	60,5	60,4	60,4	60,8	61,5	62,5	63,8	65,4	67,3	69,3	71,4	73,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	155,7	154,0	152,3	150,7	149,6	149,1	149,2	149,8	150,9	152,4	154,1	155,9	157,9	159,8	161,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,3	-0,2	-0,1	-0,1	-0,2	-0,4	-0,7	-1,1	-1,6	-2,1	-2,7	-3,4	-4,0	-4,7	-5,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,8	4,9	4,9	4,8	4,7	4,4	4,1	3,7	3,2	2,8	2,3	1,8	1,3	0,9	0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,9	11,8	11,9	11,9	12,0	12,1	12,2	12,4	12,6	12,8	13,1	13,3	13,6	13,9	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	18,6	18,4	18,2	18,1	18,0	17,9	18,0	18,1	18,4	18,7	19,0	19,3	19,7	20,1	20,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	28,1	27,6	27,4	27,4	27,4	27,6	28,0	28,5	29,1	30,0	30,9	31,9	33,0	34,1	35,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	122,5	121,0	119,5	118,2	117,2	116,7	116,6	117,0	117,8	118,9	120,2	121,5	123,0	124,4	125,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-3,0	-3,0	-2,9	-2,9	-3,0	-3,1	-3,2	-3,4	-3,7	-3,9	-4,1	-4,4	-4,6	-4,9	-5,1	-4,7
Total	DM	-16,54	-16,99	-17,41	-17,80	-18,10	-18,25	-18,17	-17,86	-17,31	-16,55	-15,63	-14,63	-13,55	-12,49	-11,45	—
	DMA	20,09	20,27	20,50	20,86	21,11	21,18	21,02	20,61	19,97	19,13	18,24	17,48	17,22	17,70	18,44	—
	PDMA	33,72	34,68	35,12	34,48	32,99	30,46	27,33	23,45	19,15	15,04	12,26	12,53	13,16	16,74	20,92	—
CPI	DM	-40,55	-40,66	-40,83	-41,04	-41,25	-41,34	-41,18	-40,75	-39,98	-38,96	-37,72	-36,33	-34,89	-33,49	-32,13	—
	DMA	42,65	42,85	43,03	43,24	43,38	43,35	43,07	42,41	41,40	40,07	38,61	37,00	35,85	36,29	37,11	—
	PDMA	52,21	53,09	52,58	50,84	47,87	43,99	39,57	34,43	29,14	23,75	19,72	15,92	12,45	15,33	18,99	—
SPI	DM	1,07	0,37	-0,23	-0,77	-1,13	-1,32	-1,29	-1,07	-0,69	-0,11	0,57	1,29	2,10	2,91	3,71	—
	DMA	3,55	3,71	3,98	4,45	4,78	4,92	4,85	4,62	4,25	3,78	3,30	3,17	3,55	4,07	4,75	—
	PDMA	20,16	21,17	22,30	22,49	22,08	20,53	18,35	15,39	11,82	8,66	6,78	10,05	13,68	17,78	22,33	—
Δ CS	DM	-41,61	-41,04	-40,59	-40,27	-40,13	-40,02	-39,89	-39,68	-39,30	-38,85	-38,28	-37,61	-36,99	-36,40	-35,84	—
	DMA	39,11	39,14	39,05	38,79	38,60	38,43	38,22	37,79	37,15	36,29	35,31	33,83	32,30	32,22	32,36	—
	PDMA	32,06	31,92	30,28	28,34	25,79	23,46	21,21	19,04	17,32	15,10	12,93	5,88	-1,24	-2,46	-3,34	—

Tabela 8.367: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	476,8	478,9	481,2	483,5	485,9	488,6	491,8	495,5	499,7	504,2	508,9	513,9	518,9	523,9	528,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	18,4	18,4	18,4	18,4	18,5	18,5	18,4	18,3	18,1	17,7	17,3	16,8	16,2	15,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-78,0	-78,0	-78,1	-78,2	-78,4	-78,7	-79,1	-79,6	-80,1	-80,7	-81,4	-82,1	-82,7	-83,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,8	-6,7	-6,7	-6,8	-6,9	-7,1	-7,4	-7,7	-8,0	-8,3	-8,7	-9,0	-9,3	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	43,8	43,6	43,5	43,3	43,2	43,2	43,3	43,4	43,6	43,9	44,2	44,5	44,8	45,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,0	-8,9	-8,9	-9,0	-9,2	-9,4	-9,7	-10,1	-10,4	-10,8	-11,2	-11,5	-11,9	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,0	166,4	163,6	160,1	157,0	155,1	154,7	155,8	158,0	161,1	164,8	168,7	172,7	176,6	180,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1639,5	-1638,3	-1636,4	-1634,1	-1632,0	-1630,1	-1628,1	-1625,7	-1622,2	-1617,5	-1611,4	-1604,3	-1596,2	-1587,6	-1578,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-126,5	-127,4	-126,6	-124,3	-120,9	-116,9	-112,5	-107,8	-102,9	-97,9	-93,0	-88,2	-83,5	-79,1	-74,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-25,0	-25,3	-24,1	-21,5	-17,7	-13,0	-7,9	-2,5	2,8	8,3	13,6	18,7	23,6	28,1	32,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-370,8	-373,7	-378,7	-386,3	-396,1	-407,3	-419,2	-431,4	-443,7	-456,1	-468,5	-481,1	-493,9	-506,8	-519,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,5	122,2	120,9	119,7	118,8	118,3	118,2	118,5	119,1	120,0	121,0	122,2	123,4	124,5	125,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,0	-11,8	-11,6	-11,5	-11,6	-11,7	-12,0	-12,4	-12,7	-13,1	-13,5	-13,9	-14,2	-14,5	-14,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,1	192,8	191,9	191,3	191,1	191,2	191,8	192,7	194,1	195,8	197,9	200,2	202,6	205,1	207,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,8	252,4	250,0	247,7	246,0	245,1	244,9	245,4	246,6	248,1	250,1	252,2	254,4	256,6	258,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,4	55,5	55,7	56,0	56,2	56,3	56,2	56,1	55,8	55,5	55,1	54,6	54,1	53,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,3	10,1	9,9	9,8	9,7	9,9	10,1	10,4	10,8	11,3	11,7	12,2	12,7	13,2	13,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,3	64,4	63,8	63,5	63,4	63,6	63,9	64,6	65,6	66,9	68,5	70,2	72,1	74,0	76,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,9	156,3	154,8	153,5	152,5	152,1	152,2	152,8	153,8	155,1	156,6	158,3	160,0	161,8	163,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,1	-1,0	-1,0	-1,1	-1,2	-1,5	-1,9	-2,4	-2,9	-3,5	-4,1	-4,7	-5,4	-6,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	4,2	4,2	4,2	4,0	3,8	3,4	3,1	2,7	2,2	1,8	1,4	1,0	0,6	0,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,1	12,1	12,1	12,1	12,2	12,3	12,5	12,6	12,8	13,1	13,3	13,6	13,8	14,1	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,9	18,7	18,6	18,4	18,4	18,4	18,5	18,6	18,8	19,1	19,4	19,8	20,1	20,5	20,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,2	29,7	29,5	29,5	29,5	29,7	30,0	30,4	31,0	31,7	32,6	33,5	34,4	35,3	36,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	124,2	122,9	121,6	120,4	119,6	119,1	119,1	119,5	120,2	121,1	122,2	123,4	124,6	125,9	127,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,5	-3,7	-3,8	-4,0	-4,2	-4,4	-4,7	-4,9	-5,1	-5,3	-4,7
Total	DM	-13,84	-14,27	-14,65	-14,98	-15,23	-15,31	-15,23	-14,96	-14,48	-13,83	-13,06	-12,22	-11,34	-10,47	-9,62	—
	DMA	17,29	17,37	17,52	17,63	17,83	17,89	17,75	17,40	16,92	16,70	16,67	17,13	17,70	18,70	19,81	—
	PDMA	23,37	24,27	24,42	23,92	22,47	20,67	17,79	14,82	11,84	10,75	11,22	13,93	17,57	22,03	26,49	—
CPI	DM	-35,44	-35,63	-35,77	-35,94	-36,09	-36,12	-35,96	-35,59	-34,99	-34,15	-33,15	-32,09	-30,96	-29,88	-28,85	—
	DMA	36,42	36,66	36,85	36,99	37,09	37,05	36,76	36,23	35,52	35,31	35,03	35,53	36,25	37,68	39,18	—
	PDMA	35,69	36,63	36,31	34,84	32,37	29,19	25,46	21,58	18,62	15,46	12,43	14,34	17,67	21,88	26,48	—
SPI	DM	2,00	1,39	0,85	0,39	0,07	-0,05	-0,03	0,17	0,56	1,06	1,67	2,35	3,05	3,77	4,49	—
	DMA	3,27	3,21	3,34	3,44	3,71	3,84	3,80	3,60	3,28	3,06	3,21	3,63	4,09	4,79	5,60	—
	PDMA	14,33	15,22	15,71	15,92	15,21	14,42	12,16	9,86	6,87	7,29	10,33	13,63	17,50	22,14	26,50	—
Δ CS	DM	-37,44	-37,01	-36,62	-36,32	-36,16	-36,06	-35,94	-35,76	-35,55	-35,21	-34,83	-34,44	-34,02	-33,66	-33,35	—
	DMA	33,15	33,45	33,51	33,55	33,38	33,21	32,96	32,63	32,24	32,25	31,82	31,89	32,16	32,90	33,58	—
	PDMA	21,37	21,41	20,60	18,92	17,16	14,77	13,30	11,72	11,75	8,17	2,10	0,71	0,16	-0,26	-0,02	—

Tabela 8.368: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	500,5	502,2	504,1	505,9	507,9	510,2	512,9	515,9	519,3	523,0	527,0	531,0	535,2	539,4	543,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,3	16,4	16,4	16,4	16,4	16,5	16,5	16,5	16,4	16,2	15,9	15,5	15,0	14,5	14,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,4	-80,5	-80,5	-80,6	-80,7	-80,8	-81,1	-81,4	-81,8	-82,2	-82,7	-83,3	-83,8	-84,4	-85,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-7,9	-7,8	-7,8	-7,8	-7,9	-8,1	-8,3	-8,6	-8,9	-9,1	-9,4	-9,7	-10,0	-10,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	44,6	44,4	44,3	44,2	44,1	44,1	44,2	44,3	44,4	44,7	44,9	45,2	45,5	45,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-10,0	-9,9	-9,8	-9,9	-10,0	-10,3	-10,5	-10,8	-11,1	-11,4	-11,7	-12,0	-12,3	-12,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,3	173,9	171,6	168,7	166,1	164,5	164,1	165,0	166,8	169,4	172,5	175,7	179,1	182,3	185,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1607,3	-1606,6	-1605,0	-1602,8	-1600,4	-1598,0	-1595,6	-1592,8	-1589,3	-1584,8	-1579,4	-1573,2	-1566,3	-1559,0	-1551,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-109,5	-110,4	-109,8	-108,1	-105,4	-102,1	-98,4	-94,5	-90,5	-86,3	-82,2	-78,2	-74,4	-70,7	-67,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-6,7	-7,1	-6,2	-4,1	-1,1	2,6	6,7	11,2	15,7	20,2	24,6	28,9	32,9	36,7	40,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-405,9	-408,3	-412,6	-419,2	-427,8	-437,8	-448,7	-460,0	-471,6	-483,4	-495,3	-507,4	-519,7	-532,2	-544,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,1	124,0	122,9	121,9	121,1	120,7	120,6	120,9	121,4	122,1	123,0	124,0	125,0	126,0	127,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,5	-12,3	-12,3	-12,3	-12,5	-12,7	-13,0	-13,3	-13,6	-14,0	-14,3	-14,6	-14,8	-15,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	197,7	196,5	195,7	195,3	195,1	195,3	195,9	196,9	198,2	199,8	201,7	203,8	206,0	208,2	210,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	257,2	255,2	253,1	251,2	249,8	249,0	248,9	249,4	250,4	251,8	253,5	255,3	257,2	259,2	261,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,1	55,2	55,3	55,4	55,6	55,7	55,8	55,7	55,5	55,2	54,8	54,4	53,9	53,5	53,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,0	10,8	10,6	10,5	10,5	10,7	10,9	11,2	11,6	12,0	12,4	12,9	13,3	13,7	14,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,4	67,6	67,1	66,8	66,8	67,0	67,4	68,1	69,1	70,3	71,7	73,3	75,0	76,7	78,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,1	158,8	157,5	156,4	155,6	155,3	155,4	155,9	156,8	158,0	159,3	160,8	162,3	163,7	165,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,0	-1,9	-1,9	-2,0	-2,2	-2,5	-2,9	-3,3	-3,8	-4,4	-4,9	-5,5	-6,1	-6,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	3,5	3,5	3,4	3,3	3,1	2,8	2,4	2,1	1,7	1,3	0,9	0,5	0,2	0,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,4	12,4	12,4	12,4	12,5	12,6	12,7	12,9	13,1	13,3	13,6	13,8	14,0	14,3	14,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,3	19,1	19,0	18,9	18,8	18,9	19,0	19,1	19,4	19,6	19,9	20,2	20,6	20,9	21,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,3	31,9	31,7	31,6	31,7	31,8	32,1	32,5	33,0	33,6	34,3	35,1	35,8	36,6	37,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,9	124,8	123,7	122,8	122,0	121,7	121,7	122,0	122,5	123,3	124,3	125,3	126,3	127,4	128,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,9	-3,8	-3,9	-4,0	-4,1	-4,2	-4,4	-4,6	-4,8	-4,9	-5,1	-5,3	-5,4	-4,7
Total	DM	-11,05	-11,43	-11,77	-12,06	-12,27	-12,33	-12,27	-12,03	-11,65	-11,15	-10,53	-9,87	-9,18	-8,50	-7,83	—
	DMA	14,80	14,87	15,02	15,17	15,40	15,57	15,72	15,87	16,13	16,70	17,42	18,35	19,35	20,39	21,42	—
	PDMA	14,56	15,08	14,99	14,39	13,40	11,88	10,32	9,42	9,88	12,99	16,63	20,57	24,76	28,78	32,34	—
CPI	DM	-30,19	-30,42	-30,56	-30,73	-30,85	-30,87	-30,80	-30,51	-30,09	-29,49	-28,75	-28,01	-27,22	-26,46	-25,74	—
	DMA	30,48	30,98	31,44	31,89	32,36	32,80	33,22	33,49	33,82	34,73	35,90	37,43	38,87	40,30	41,68	—
	PDMA	22,51	22,61	22,01	20,78	19,16	17,24	15,30	12,98	11,64	15,02	18,70	22,97	27,10	31,13	35,01	—
SPI	DM	2,99	2,49	2,02	1,63	1,37	1,27	1,32	1,52	1,87	2,31	2,83	3,44	4,04	4,67	5,30	—
	DMA	3,31	3,06	2,98	2,91	2,95	2,93	2,89	2,95	3,16	3,48	3,86	4,36	5,03	5,79	6,57	—
	PDMA	8,72	9,56	9,84	9,71	9,16	7,95	6,66	6,82	8,59	11,50	15,12	18,81	23,04	27,06	30,39	—
ΔCS	DM	-33,18	-32,90	-32,58	-32,36	-32,22	-32,14	-32,12	-32,03	-31,96	-31,80	-31,59	-31,45	-31,26	-31,14	-31,04	—
	DMA	27,18	27,92	28,46	28,98	29,41	29,87	30,32	30,54	30,66	31,25	32,04	33,07	33,85	34,51	35,12	—
	PDMA	13,78	13,05	12,16	11,07	10,00	9,28	8,64	6,17	3,05	3,52	3,59	4,17	4,06	4,06	4,62	—

Tabela 8.369: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	524,5	525,8	527,2	528,6	530,2	532,0	534,1	536,6	539,3	542,2	545,3	548,6	551,9	555,2	558,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,2	14,3	14,3	14,3	14,3	14,4	14,4	14,4	14,3	14,1	13,9	13,6	13,2	12,8	12,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,0	-83,1	-83,1	-83,3	-83,4	-83,7	-84,0	-84,4	-84,8	-85,2	-85,7	-86,1	-86,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-8,9	-8,9	-8,9	-9,0	-9,1	-9,3	-9,5	-9,7	-10,0	-10,2	-10,4	-10,7	-10,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,4	45,3	45,1	45,0	45,0	45,0	45,0	45,1	45,3	45,4	45,6	45,9	46,1	46,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-10,9	-10,8	-10,8	-10,8	-11,0	-11,1	-11,3	-11,6	-11,8	-12,1	-12,3	-12,6	-12,8	-13,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	182,6	181,4	179,5	177,2	175,1	173,8	173,5	174,2	175,6	177,7	180,1	182,8	185,4	188,1	190,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1572,2	-1572,0	-1570,7	-1568,7	-1566,4	-1564,0	-1561,5	-1558,8	-1555,5	-1551,6	-1547,0	-1541,8	-1536,1	-1530,2	-1524,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-92,7	-93,4	-93,1	-91,8	-89,7	-87,1	-84,2	-81,1	-77,9	-74,6	-71,3	-68,2	-65,1	-62,1	-59,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	11,4	11,0	11,6	13,1	15,5	18,4	21,7	25,1	28,7	32,3	35,8	39,2	42,4	45,5	48,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-444,8	-446,6	-450,2	-455,9	-463,5	-472,5	-482,4	-492,9	-503,8	-515,0	-526,3	-537,9	-549,5	-561,3	-573,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,7	125,8	124,9	124,1	123,5	123,1	123,1	123,3	123,7	124,3	125,0	125,8	126,6	127,4	128,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-13,3	-13,1	-13,1	-13,1	-13,2	-13,4	-13,7	-13,9	-14,2	-14,4	-14,7	-14,9	-15,1	-15,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,9	200,8	200,1	199,8	199,7	200,0	200,6	201,5	202,7	204,2	205,8	207,6	209,5	211,4	213,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,8	258,1	256,4	254,9	253,8	253,2	253,1	253,6	254,4	255,6	257,0	258,6	260,2	261,8	263,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,7	54,8	54,9	55,0	55,1	55,0	54,9	54,7	54,4	54,0	53,6	53,2	52,8	52,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,6	11,5	11,4	11,5	11,6	11,8	12,1	12,4	12,8	13,2	13,6	14,0	14,3	14,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,0	71,2	70,8	70,6	70,6	70,8	71,2	71,9	72,8	74,0	75,2	76,6	78,1	79,6	81,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,5	161,4	160,3	159,4	158,8	158,6	158,7	159,2	160,0	161,0	162,1	163,3	164,6	165,8	167,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,1	-3,1	-3,1	-3,2	-3,3	-3,6	-4,0	-4,4	-4,8	-5,3	-5,8	-6,3	-6,8	-7,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,6	2,7	2,7	2,6	2,5	2,3	2,1	1,8	1,4	1,1	0,8	0,4	0,1	-0,1	-0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,8	12,7	12,7	12,8	12,8	13,0	13,1	13,3	13,5	13,7	13,9	14,1	14,3	14,5	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,7	19,6	19,5	19,4	19,4	19,4	19,6	19,7	19,9	20,2	20,5	20,7	21,0	21,3	21,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,5	34,1	33,9	33,9	33,9	34,0	34,2	34,5	35,0	35,5	36,0	36,7	37,3	38,0	38,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,7	126,8	125,9	125,1	124,5	124,2	124,2	124,5	125,0	125,6	126,4	127,2	128,0	128,9	129,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,3	-4,3	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,8	-4,9	-5,1	-5,2	-5,4	-5,5	-5,6	-4,7
Total	DM	-8,24	-8,59	-8,88	-9,13	-9,31	-9,38	-9,34	-9,18	-8,92	-8,54	-8,11	-7,63	-7,13	-6,62	-6,16	—
	DMA	15,10	15,02	15,00	15,07	15,25	15,68	16,15	16,91	17,73	18,62	19,50	20,43	21,39	22,32	23,39	—
	PDMA	11,60	11,15	10,84	10,27	9,91	10,79	12,70	15,40	18,59	21,81	25,31	28,89	32,41	35,62	38,98	—
CPI	DM	-25,05	-25,26	-25,43	-25,62	-25,75	-25,84	-25,81	-25,70	-25,47	-25,13	-24,72	-24,25	-23,77	-23,31	-22,89	—
	DMA	29,82	30,25	30,65	31,05	31,55	32,49	33,45	34,94	36,45	37,93	39,34	40,68	42,01	43,29	44,96	—
	PDMA	14,56	14,62	14,21	13,42	12,67	14,78	17,04	20,17	23,64	27,08	30,64	33,98	37,38	40,70	44,00	—
SPI	DM	4,09	3,64	3,26	2,95	2,75	2,69	2,74	2,93	3,22	3,63	4,07	4,56	5,08	5,61	6,11	—
	DMA	4,30	3,85	3,53	3,34	3,31	3,35	3,47	3,69	4,01	4,45	4,96	5,59	6,27	6,93	7,57	—
	PDMA	9,43	8,61	8,38	7,96	7,89	7,86	9,52	11,91	14,89	17,95	21,40	25,15	28,76	31,89	35,29	—
ΔCS	DM	-29,14	-28,90	-28,69	-28,57	-28,49	-28,52	-28,55	-28,63	-28,69	-28,75	-28,78	-28,81	-28,85	-28,92	-29,00	—
	DMA	25,52	26,39	27,12	27,71	28,24	29,14	29,97	31,25	32,45	33,47	34,38	35,10	35,74	36,36	37,39	—
	PDMA	5,13	6,02	5,82	5,46	4,78	6,92	7,52	8,27	8,75	9,13	9,24	8,83	8,62	8,81	8,71	—

Tabela 8.370: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	406,3	409,6	412,9	416,1	419,3	422,9	427,1	432,1	437,7	443,9	450,5	457,2	464,0	470,8	477,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,7	23,8	23,8	23,7	23,7	23,7	23,8	23,7	23,6	23,3	22,9	22,4	21,8	21,1	20,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,4	-70,6	-70,8	-70,9	-71,1	-71,4	-71,8	-72,3	-72,9	-73,7	-74,5	-75,3	-76,2	-77,1	-78,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-3,8	-3,7	-3,7	-3,8	-4,0	-4,3	-4,6	-5,0	-5,4	-5,8	-6,3	-6,7	-7,1	-7,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,8	41,6	41,4	41,2	41,0	40,9	40,9	40,9	41,1	41,4	41,7	42,1	42,5	42,9	43,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-6,4	-6,3	-6,3	-6,4	-6,7	-7,0	-7,4	-7,8	-8,3	-8,8	-9,2	-9,7	-10,1	-10,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,6	143,8	140,2	135,5	131,4	128,8	128,3	129,8	132,9	137,1	142,0	147,2	152,6	157,8	162,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1713,4	-1710,0	-1708,1	-1707,9	-1709,4	-1712,0	-1714,9	-1716,8	-1716,7	-1714,3	-1709,3	-1702,2	-1693,4	-1683,4	-1672,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-177,1	-177,7	-176,0	-172,5	-167,6	-162,0	-155,9	-149,5	-142,9	-136,2	-129,6	-123,1	-116,9	-110,9	-105,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,3	-80,3	-78,1	-73,9	-68,2	-61,5	-54,3	-46,8	-39,2	-31,7	-24,4	-17,5	-10,9	-4,8	0,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-269,7	-273,7	-280,8	-291,2	-304,3	-318,7	-333,4	-347,7	-361,2	-374,0	-386,3	-398,2	-410,0	-421,7	-433,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,2	117,6	115,9	114,3	113,1	112,4	112,3	112,6	113,4	114,5	115,8	117,3	118,8	120,3	121,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,6	-9,4	-9,3	-9,4	-9,7	-10,0	-10,5	-11,0	-11,5	-11,9	-12,4	-12,9	-13,3	-13,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	185,9	184,4	183,4	182,7	182,2	182,1	182,3	183,1	184,3	185,9	187,9	190,2	192,7	195,4	198,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	248,4	245,6	242,5	239,6	237,4	236,1	235,7	236,3	237,5	239,4	241,6	244,1	246,8	249,5	252,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,2	55,1	55,2	55,6	56,0	56,4	56,7	56,9	56,9	56,9	56,7	56,5	56,2	55,8	55,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,6	8,4	8,2	8,1	8,1	8,3	8,5	8,9	9,3	9,7	10,2	10,7	11,2	11,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,5	56,6	56,0	55,7	55,5	55,5	55,7	56,2	57,1	58,3	59,8	61,5	63,4	65,4	67,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,9	150,0	148,1	146,4	145,1	144,5	144,6	145,2	146,3	147,8	149,6	151,6	153,6	155,7	157,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,1	1,1	1,2	1,2	1,1	1,0	0,7	0,3	0,0	-0,5	-1,0	-1,6	-2,2	-2,9	-3,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	6,2	6,1	6,1	5,9	5,6	5,2	4,8	4,4	3,9	3,5	3,0	2,6	2,2	1,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,5	11,6	11,6	11,7	11,8	12,0	12,1	12,3	12,5	12,7	13,0	13,2	13,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,3	18,1	17,8	17,6	17,5	17,4	17,4	17,5	17,6	17,9	18,1	18,4	18,8	19,1	19,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,3	23,7	23,6	23,6	23,7	23,9	24,2	24,8	25,5	26,4	27,4	28,5	29,7	30,9	32,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	117,7	116,1	114,5	113,4	112,8	112,7	113,2	114,0	115,2	116,6	118,2	119,8	121,4	123,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,1	-2,1	-2,1	-2,3	-2,4	-2,7	-2,9	-3,2	-3,4	-3,7	-4,0	-4,2	-4,4	-4,7
Total	DM	-21,30	-21,70	-22,16	-22,66	-23,13	-23,44	-23,51	-23,28	-22,74	-21,93	-20,91	-19,75	-18,50	-17,22	-15,97	—
	DMA	27,73	27,72	27,58	27,25	26,97	27,17	27,13	26,78	26,11	25,15	24,01	22,75	21,42	20,32	19,46	—
	PDMA	54,89	55,86	55,69	54,72	52,65	49,81	46,21	41,90	37,46	32,25	27,36	22,30	17,60	15,43	15,23	—
CPI	DM	-49,55	-49,51	-49,67	-50,07	-50,57	-50,99	-51,13	-50,86	-50,12	-48,98	-47,50	-45,80	-43,98	-42,13	-40,31	—
	DMA	59,37	58,67	57,55	56,02	54,85	55,12	55,09	54,59	53,57	52,07	50,21	48,11	45,87	43,65	41,49	—
	PDMA	86,70	87,26	85,86	82,77	78,59	73,89	68,63	62,81	56,61	50,11	43,61	37,21	31,16	26,04	21,74	—
SPI	DM	-0,57	-1,31	-1,99	-2,56	-3,00	-3,24	-3,26	-3,06	-2,67	-2,10	-1,41	-0,64	0,19	1,04	1,88	—
	DMA	4,53	5,01	5,60	6,15	6,52	6,68	6,63	6,38	5,97	5,41	4,80	4,15	3,49	3,21	3,31	—
	PDMA	31,56	32,84	33,57	34,15	33,62	32,15	29,76	26,55	23,42	19,16	15,45	11,37	7,65	7,65	10,45	—
Δ CS	DM	-48,98	-48,20	-47,69	-47,51	-47,57	-47,75	-47,87	-47,80	-47,45	-46,88	-46,09	-45,16	-44,18	-43,17	-42,19	—
	DMA	54,84	53,66	51,95	49,87	48,33	48,44	48,46	48,21	47,60	46,67	45,41	43,96	42,39	40,44	38,18	—
	PDMA	55,14	54,42	52,29	48,62	44,98	41,75	38,87	36,26	33,19	30,95	28,16	25,84	23,51	18,39	11,29	—

Tabela 8.371: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	429,5	432,3	435,1	437,9	440,7	443,9	447,6	451,9	456,8	462,1	467,8	473,6	479,5	485,4	491,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,0	22,1	22,1	22,0	22,0	22,1	22,1	22,0	21,9	21,7	21,3	20,8	20,3	19,6	19,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,9	-73,0	-73,2	-73,3	-73,4	-73,7	-74,0	-74,5	-75,0	-75,7	-76,4	-77,1	-77,9	-78,7	-79,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-4,8	-4,7	-4,7	-4,8	-5,0	-5,2	-5,5	-5,8	-6,2	-6,6	-7,0	-7,3	-7,7	-8,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	42,3	42,2	42,0	41,8	41,7	41,7	41,8	41,9	42,1	42,4	42,8	43,1	43,5	43,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,3	-7,2	-7,2	-7,3	-7,5	-7,8	-8,1	-8,5	-8,9	-9,4	-9,8	-10,2	-10,5	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,2	151,6	148,4	144,3	140,6	138,4	137,9	139,2	141,9	145,5	149,8	154,4	159,1	163,7	168,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1693,3	-1690,9	-1688,9	-1687,7	-1687,5	-1688,1	-1688,9	-1688,9	-1687,6	-1684,4	-1679,3	-1672,5	-1664,4	-1655,4	-1645,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-160,1	-160,8	-159,5	-156,5	-152,4	-147,5	-142,2	-136,6	-130,9	-125,0	-119,2	-113,5	-108,1	-102,9	-98,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,7	-61,8	-60,0	-56,5	-51,7	-46,0	-39,8	-33,3	-26,7	-20,2	-13,9	-7,8	-2,1	3,1	8,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-303,7	-307,2	-313,2	-322,1	-333,2	-345,6	-358,4	-371,0	-383,2	-394,9	-406,2	-417,4	-428,5	-439,5	-450,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	119,2	117,7	116,4	115,3	114,7	114,6	114,9	115,6	116,5	117,7	119,0	120,4	121,7	123,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,7	-10,3	-10,1	-10,1	-10,2	-10,4	-10,7	-11,1	-11,5	-12,0	-12,4	-12,8	-13,2	-13,6	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,4	187,0	186,1	185,4	185,1	185,0	185,4	186,1	187,3	188,9	190,8	193,0	195,3	197,8	200,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,5	248,0	245,2	242,7	240,7	239,6	239,3	239,8	241,0	242,6	244,7	246,9	249,3	251,8	254,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,4	55,5	55,8	56,1	56,4	56,6	56,7	56,7	56,6	56,4	56,2	55,8	55,5	55,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,1	8,8	8,7	8,6	8,7	8,8	9,1	9,4	9,8	10,3	10,7	11,2	11,6	12,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,0	59,1	58,6	58,2	58,1	58,1	58,3	58,9	59,8	60,9	62,3	64,0	65,7	67,6	69,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,9	152,2	150,5	149,0	147,9	147,3	147,4	148,0	149,0	150,4	152,0	153,8	155,6	157,5	159,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	0,4	0,5	0,5	0,4	0,3	0,0	-0,2	-0,7	-1,1	-1,7	-2,2	-2,8	-3,4	-3,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,5	5,3	5,0	4,7	4,3	3,9	3,5	3,1	2,7	2,3	1,9	1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,7	11,7	11,7	11,7	11,8	11,9	12,0	12,1	12,3	12,5	12,7	12,9	13,1	13,3	13,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,4	18,2	18,0	17,9	17,7	17,7	17,7	17,8	18,0	18,2	18,5	18,8	19,1	19,4	19,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,2	25,7	25,6	25,5	25,6	25,8	26,1	26,6	27,3	28,1	29,0	30,0	31,1	32,1	33,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,0	119,6	118,1	116,7	115,7	115,2	115,1	115,5	116,3	117,4	118,6	120,0	121,4	122,8	124,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,5	-2,5	-2,5	-2,6	-2,7	-2,8	-3,0	-3,2	-3,5	-3,7	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,7
Total	DM	-19,00	-19,39	-19,80	-20,21	-20,57	-20,76	-20,75	-20,48	-19,96	-19,23	-18,32	-17,29	-16,21	-15,11	-14,02	—
	DMA	22,82	22,98	23,32	23,68	23,99	24,10	24,01	23,63	23,00	22,17	21,16	20,07	19,14	18,43	17,91	—
	PDMA	43,69	44,67	44,93	44,31	42,65	40,23	37,13	33,49	29,18	24,87	20,42	16,18	13,81	13,96	14,28	—
CPI	DM	-45,26	-45,31	-45,44	-45,70	-46,01	-46,20	-46,17	-45,81	-45,10	-44,07	-42,78	-41,31	-39,76	-38,21	-36,65	—
	DMA	48,48	48,60	48,73	48,95	49,21	49,29	49,12	48,54	47,59	46,25	44,60	42,80	40,96	39,14	37,34	—
	PDMA	68,49	69,27	68,53	66,47	63,39	59,43	54,89	49,79	44,43	38,81	33,03	27,75	23,23	19,69	16,43	—
SPI	DM	0,26	-0,39	-0,99	-1,51	-1,91	-2,10	-2,11	-1,91	-1,53	-1,02	-0,39	0,33	1,07	1,83	2,58	—
	DMA	3,99	4,20	4,69	5,15	5,49	5,63	5,60	5,36	4,97	4,50	3,97	3,39	3,13	3,25	3,66	—
	PDMA	25,49	26,62	27,62	28,07	27,44	26,15	24,11	21,53	17,99	14,65	11,17	7,69	6,90	9,76	12,71	—
Δ CS	DM	-45,52	-44,92	-44,44	-44,19	-44,10	-44,10	-44,07	-43,90	-43,57	-43,05	-42,40	-41,64	-40,83	-40,04	-39,23	—
	DMA	44,49	44,40	44,04	43,80	43,72	43,66	43,52	43,18	42,62	41,75	40,63	39,41	37,83	35,89	33,68	—
	PDMA	43,00	42,65	40,91	38,40	35,94	33,29	30,77	28,26	26,44	24,16	21,86	20,05	16,34	9,92	3,72	—

Tabela 8.372: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	452,9	455,2	457,6	459,9	462,3	465,0	468,2	471,9	476,0	480,6	485,3	490,3	495,3	500,4	505,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,2	20,3	20,3	20,2	20,3	20,3	20,3	20,3	20,1	19,9	19,6	19,2	18,7	18,1	17,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,4	-75,5	-75,6	-75,7	-75,8	-76,0	-76,3	-76,7	-77,1	-77,7	-78,3	-78,9	-79,6	-80,3	-81,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,8	-5,7	-5,7	-5,8	-5,9	-6,2	-6,4	-6,7	-7,0	-7,4	-7,7	-8,0	-8,3	-8,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,1	42,9	42,8	42,6	42,5	42,5	42,6	42,7	42,9	43,2	43,5	43,8	44,1	44,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,4	-8,2	-8,1	-8,1	-8,2	-8,3	-8,6	-8,9	-9,2	-9,6	-10,0	-10,3	-10,7	-11,0	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,7	159,2	156,5	153,0	149,9	147,9	147,5	148,6	150,8	154,0	157,6	161,6	165,6	169,6	173,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1668,4	-1666,8	-1664,9	-1663,2	-1661,9	-1661,1	-1660,5	-1659,3	-1657,2	-1653,6	-1648,6	-1642,4	-1635,1	-1627,2	-1618,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-143,1	-143,8	-142,9	-140,5	-137,0	-132,9	-128,4	-123,6	-118,7	-113,7	-108,7	-103,8	-99,2	-94,7	-90,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-43,1	-43,3	-42,0	-39,2	-35,2	-30,4	-25,2	-19,7	-14,1	-8,5	-3,2	1,9	6,8	11,4	15,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-337,0	-339,9	-345,0	-352,4	-361,9	-372,6	-383,8	-395,0	-406,0	-416,7	-427,3	-437,7	-448,1	-458,4	-468,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,2	120,9	119,6	118,4	117,5	117,0	116,9	117,2	117,8	118,6	119,6	120,8	121,9	123,1	124,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,4	-11,1	-10,9	-10,8	-10,9	-11,1	-11,4	-11,7	-12,1	-12,5	-12,9	-13,2	-13,6	-13,9	-14,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,2	190,0	189,1	188,6	188,3	188,3	188,7	189,5	190,7	192,2	194,0	196,0	198,1	200,3	202,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	252,8	250,5	248,1	245,9	244,2	243,2	243,0	243,5	244,5	246,0	247,8	249,8	252,0	254,1	256,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,5	55,6	55,8	56,1	56,3	56,5	56,5	56,5	56,3	56,1	55,8	55,4	55,0	54,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,8	9,6	9,4	9,2	9,2	9,3	9,4	9,7	10,0	10,4	10,8	11,3	11,7	12,1	12,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,6	61,8	61,3	61,0	60,9	60,9	61,2	61,8	62,6	63,7	65,1	66,6	68,2	69,9	71,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	156,0	154,5	153,0	151,6	150,7	150,3	150,3	150,9	151,8	153,0	154,5	156,0	157,6	159,3	160,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-0,2	-0,2	-0,2	-0,2	-0,4	-0,6	-1,0	-1,4	-1,8	-2,3	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,9	4,9	4,8	4,7	4,4	4,1	3,8	3,4	3,0	2,7	2,3	1,9	1,6	1,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,9	11,9	11,9	11,9	12,0	12,1	12,2	12,3	12,5	12,7	12,9	13,1	13,3	13,5	13,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,7	18,5	18,3	18,2	18,1	18,1	18,1	18,2	18,4	18,6	18,9	19,2	19,5	19,7	20,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,3	27,8	27,6	27,6	27,7	27,8	28,1	28,5	29,1	29,8	30,6	31,5	32,4	33,3	34,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,7	121,4	120,1	119,0	118,1	117,6	117,6	118,0	118,6	119,5	120,6	121,8	123,1	124,3	125,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,1	-3,2	-3,4	-3,6	-3,8	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,8	-4,7
Total	DM	-16,45	-16,83	-17,20	-17,53	-17,78	-17,92	-17,87	-17,59	-17,14	-16,49	-15,71	-14,82	-13,92	-12,98	-12,07	—
	DMA	20,02	20,20	20,34	20,60	20,83	20,89	20,76	20,40	19,88	19,15	18,36	17,70	17,20	16,83	16,95	—
	PDMA	33,45	34,42	34,55	33,95	32,84	30,57	27,85	24,52	20,96	17,27	14,00	12,53	12,79	13,04	14,28	—
CPI	DM	-40,47	-40,58	-40,71	-40,89	-41,05	-41,13	-41,04	-40,65	-40,03	-39,12	-38,06	-36,84	-35,58	-34,29	-33,05	—
	DMA	42,56	42,75	42,89	43,04	43,16	43,16	42,91	42,35	41,52	40,34	39,06	37,65	36,18	34,78	34,48	—
	PDMA	51,90	52,73	52,32	50,66	48,11	44,90	40,87	36,63	32,01	27,17	23,28	19,95	16,81	13,83	12,33	—
SPI	DM	1,17	0,59	0,05	-0,41	-0,71	-0,89	-0,88	-0,69	-0,35	0,11	0,69	1,32	1,97	2,65	3,32	—
	DMA	3,49	3,66	3,81	4,15	4,45	4,56	4,52	4,30	4,01	3,61	3,18	3,07	3,28	3,66	4,09	—
	PDMA	19,92	20,99	21,51	21,70	21,64	20,07	18,29	15,64	12,86	10,02	7,20	7,09	9,85	12,47	15,70	—
Δ CS	DM	-41,65	-41,18	-40,76	-40,48	-40,34	-40,23	-40,16	-39,96	-39,67	-39,22	-38,75	-38,16	-37,56	-36,94	-36,37	—
	DMA	39,07	39,09	39,08	38,88	38,72	38,60	38,39	38,05	37,51	36,72	35,88	34,59	32,90	31,12	30,39	—
	PDMA	31,98	31,74	30,82	28,97	26,47	24,84	22,58	20,99	19,16	17,15	16,08	12,86	6,96	1,36	-3,37	—

Tabela 8.373: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	476,5	478,3	480,2	482,1	484,1	486,4	489,1	492,1	495,5	499,3	503,2	507,3	511,5	515,7	519,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,3	18,4	18,4	18,3	18,4	18,4	18,4	18,4	18,3	18,1	17,8	17,4	17,0	16,5	16,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-78,0	-78,0	-78,1	-78,2	-78,3	-78,6	-78,9	-79,3	-79,8	-80,3	-80,8	-81,4	-81,9	-82,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,9	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,1	-7,3	-7,6	-7,9	-8,1	-8,4	-8,7	-9,0	-9,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	43,9	43,7	43,6	43,5	43,4	43,4	43,4	43,6	43,7	43,9	44,2	44,4	44,7	45,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,1	-9,0	-9,0	-9,1	-9,2	-9,4	-9,7	-10,0	-10,3	-10,6	-10,9	-11,2	-11,5	-11,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,2	166,9	164,5	161,6	159,0	157,4	157,0	157,9	159,8	162,4	165,4	168,7	172,1	175,4	178,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1639,4	-1638,4	-1636,8	-1634,9	-1633,1	-1631,5	-1630,0	-1628,2	-1625,6	-1622,1	-1617,4	-1611,9	-1605,6	-1598,8	-1591,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-126,1	-126,8	-126,2	-124,3	-121,4	-118,1	-114,3	-110,4	-106,3	-102,1	-98,0	-94,0	-90,1	-86,4	-82,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-24,7	-25,0	-24,0	-21,8	-18,6	-14,7	-10,4	-5,9	-1,3	3,2	7,7	12,0	16,0	19,9	23,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-370,4	-372,8	-377,1	-383,4	-391,5	-400,7	-410,5	-420,5	-430,4	-440,2	-449,9	-459,6	-469,2	-478,8	-488,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,7	122,6	121,5	120,5	119,8	119,4	119,3	119,5	120,0	120,7	121,6	122,6	123,5	124,5	125,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-11,9	-11,7	-11,6	-11,7	-11,8	-12,1	-12,4	-12,7	-13,0	-13,3	-13,6	-13,9	-14,2	-14,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,4	193,3	192,5	192,1	191,9	192,0	192,4	193,2	194,3	195,7	197,3	199,1	201,1	203,0	205,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,1	253,1	251,1	249,2	247,8	247,0	246,8	247,3	248,2	249,5	251,1	252,8	254,7	256,5	258,3	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,4	55,5	55,7	55,9	56,1	56,1	56,1	56,0	55,8	55,6	55,3	54,9	54,6	54,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,2	10,0	9,9	9,9	10,0	10,2	10,4	10,7	11,1	11,5	11,8	12,2	12,6	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,5	64,7	64,3	64,0	64,0	64,1	64,4	64,9	65,7	66,8	68,0	69,4	70,8	72,3	73,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,1	156,8	155,5	154,4	153,6	153,3	153,4	153,9	154,7	155,8	157,0	158,4	159,8	161,2	162,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,1	-1,0	-1,0	-1,1	-1,3	-1,5	-1,8	-2,2	-2,6	-3,1	-3,6	-4,0	-4,5	-5,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	4,2	4,2	4,1	4,0	3,8	3,5	3,2	2,9	2,6	2,2	1,9	1,5	1,2	1,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,1	12,1	12,1	12,1	12,2	12,3	12,4	12,6	12,7	12,9	13,1	13,3	13,5	13,6	13,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,9	18,8	18,6	18,5	18,5	18,5	18,5	18,7	18,9	19,1	19,3	19,6	19,8	20,1	20,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,3	29,9	29,7	29,7	29,8	29,9	30,2	30,5	31,0	31,6	32,3	33,1	33,8	34,6	35,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	123,3	122,2	121,2	120,5	120,1	120,1	120,4	121,0	121,8	122,7	123,7	124,7	125,8	126,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,4	-3,4	-3,4	-3,5	-3,5	-3,6	-3,8	-4,0	-4,1	-4,3	-4,5	-4,7	-4,8	-5,0	-4,7
Total	DM	-13,74	-14,10	-14,42	-14,70	-14,89	-14,96	-14,90	-14,67	-14,27	-13,73	-13,09	-12,37	-11,63	-10,87	-10,13	—
	DMA	17,25	17,31	17,41	17,50	17,55	17,58	17,45	17,18	16,80	16,40	16,29	16,37	16,54	16,99	17,63	—
	PDMA	23,26	24,03	24,18	23,56	22,36	20,68	18,39	15,77	13,26	11,65	11,07	11,54	12,67	15,59	18,68	—
CPI	DM	-35,34	-35,49	-35,64	-35,78	-35,87	-35,88	-35,75	-35,45	-34,93	-34,24	-33,38	-32,45	-31,46	-30,46	-29,48	—
	DMA	36,32	36,51	36,67	36,78	36,85	36,81	36,55	36,13	35,51	34,69	34,29	34,03	33,95	34,39	35,06	—
	PDMA	35,45	36,14	35,89	34,59	32,63	30,01	26,77	23,44	20,86	18,22	15,53	13,15	12,22	14,85	17,80	—
SPI	DM	2,10	1,59	1,13	0,75	0,50	0,39	0,40	0,57	0,87	1,31	1,79	2,35	2,91	3,49	4,07	—
	DMA	3,27	3,23	3,28	3,37	3,39	3,48	3,44	3,28	3,09	2,99	3,09	3,41	3,77	4,23	4,84	—
	PDMA	14,31	15,15	15,60	15,47	14,83	13,84	12,25	10,15	7,69	6,83	7,79	10,36	13,00	16,12	19,32	—
ΔCS	DM	-37,44	-37,08	-36,77	-36,54	-36,37	-36,27	-36,15	-36,03	-35,80	-35,54	-35,18	-34,79	-34,37	-33,96	-33,55	—
	DMA	33,04	33,28	33,39	33,42	33,46	33,33	33,11	32,85	32,42	31,70	31,20	30,61	30,18	30,16	30,22	—
	PDMA	21,14	21,00	20,30	19,13	17,80	16,17	14,53	13,29	13,16	11,39	7,73	2,79	-0,78	-1,27	-1,53	—

Tabela 8.374: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	500,3	501,7	503,1	504,6	506,2	508,0	510,2	512,6	515,3	518,2	521,4	524,6	527,9	531,3	534,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,3	16,3	16,3	16,3	16,4	16,4	16,4	16,4	16,3	16,1	15,9	15,6	15,2	14,8	14,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,4	-80,5	-80,5	-80,5	-80,6	-80,7	-80,9	-81,2	-81,5	-81,9	-82,3	-82,7	-83,2	-83,6	-84,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,1	-7,9	-7,9	-7,8	-7,9	-8,0	-8,1	-8,3	-8,5	-8,7	-9,0	-9,2	-9,4	-9,6	-9,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,8	44,7	44,5	44,4	44,3	44,3	44,3	44,3	44,4	44,5	44,7	44,9	45,1	45,4	45,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-10,1	-10,0	-9,9	-10,0	-10,1	-10,3	-10,5	-10,7	-11,0	-11,2	-11,5	-11,7	-11,9	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,6	174,4	172,6	170,2	168,1	166,8	166,5	167,2	168,7	170,8	173,2	175,9	178,5	181,2	183,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1607,1	-1606,6	-1605,3	-1603,4	-1601,5	-1599,6	-1597,7	-1595,7	-1593,1	-1589,8	-1585,8	-1581,1	-1575,9	-1570,3	-1564,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-109,1	-109,8	-109,4	-107,9	-105,8	-103,1	-100,2	-97,0	-93,8	-90,4	-87,1	-83,9	-80,8	-77,8	-75,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-6,4	-6,7	-6,0	-4,4	-1,9	1,0	4,4	8,0	11,6	15,3	18,8	22,2	25,5	28,6	31,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-405,6	-407,5	-410,9	-416,2	-423,0	-431,0	-439,5	-448,3	-457,2	-466,1	-474,9	-483,7	-492,5	-501,2	-509,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,3	124,4	123,5	122,7	122,1	121,8	121,7	121,9	122,3	122,9	123,6	124,4	125,2	126,0	126,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,8	-12,6	-12,5	-12,4	-12,5	-12,6	-12,8	-13,0	-13,3	-13,5	-13,8	-14,0	-14,3	-14,5	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,0	197,1	196,4	196,1	196,0	196,1	196,6	197,3	198,3	199,6	201,0	202,6	204,2	205,9	207,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	257,5	255,9	254,2	252,7	251,6	251,0	250,9	251,3	252,1	253,2	254,5	255,9	257,4	259,0	260,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,2	55,2	55,3	55,4	55,5	55,6	55,6	55,6	55,4	55,2	55,0	54,7	54,3	54,0	53,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	10,9	10,7	10,7	10,7	10,8	11,0	11,2	11,5	11,8	12,1	12,5	12,8	13,1	13,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,7	68,0	67,6	67,4	67,4	67,5	67,8	68,4	69,1	70,1	71,1	72,3	73,6	74,8	76,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,4	159,3	158,2	157,3	156,7	156,5	156,6	157,0	157,7	158,6	159,6	160,8	161,9	163,1	164,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,0	-2,0	-2,1	-2,2	-2,5	-2,8	-3,1	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,1	-5,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,4	3,4	3,4	3,4	3,3	3,1	2,9	2,6	2,3	2,0	1,7	1,4	1,2	0,9	0,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,4	12,4	12,4	12,4	12,5	12,6	12,7	12,8	13,0	13,1	13,3	13,5	13,6	13,8	13,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,3	19,2	19,1	19,0	18,9	19,0	19,1	19,2	19,4	19,6	19,8	20,0	20,2	20,4	20,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,5	32,1	31,9	31,9	31,9	32,1	32,3	32,6	33,0	33,5	34,0	34,6	35,3	35,9	36,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,1	125,3	124,4	123,6	123,0	122,7	122,7	122,9	123,4	124,0	124,8	125,6	126,4	127,3	128,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,9	-3,9	-3,9	-4,0	-4,1	-4,2	-4,3	-4,5	-4,6	-4,8	-4,9	-5,0	-5,2	-4,7
Total	DM	-10,92	-11,25	-11,53	-11,74	-11,91	-11,96	-11,90	-11,72	-11,41	-11,00	-10,50	-9,95	-9,39	-8,79	-8,23	—
	DMA	14,79	14,82	14,89	15,01	15,14	15,26	15,40	15,57	15,73	15,91	16,34	16,80	17,56	18,35	19,11	—
	PDMA	14,57	14,72	14,63	14,20	13,36	12,16	10,92	10,27	9,75	10,43	12,97	15,64	18,57	21,65	24,65	—
CPI	DM	-30,07	-30,26	-30,40	-30,50	-30,60	-30,63	-30,53	-30,31	-29,95	-29,45	-28,84	-28,16	-27,47	-26,73	-26,05	—
	DMA	30,35	30,75	31,11	31,46	31,82	32,17	32,47	32,69	32,84	32,94	33,58	34,16	35,27	36,31	37,30	—
	PDMA	22,40	22,42	22,02	20,94	19,65	18,16	16,42	14,63	12,88	11,55	14,25	16,94	20,20	23,33	26,53	—
SPI	DM	3,12	2,70	2,31	2,01	1,80	1,73	1,76	1,91	2,18	2,53	2,94	3,41	3,87	4,37	4,83	—
	DMA	3,39	3,14	3,00	2,95	2,91	2,86	2,88	3,01	3,18	3,43	3,70	4,07	4,57	5,18	5,77	—
	PDMA	8,83	9,07	9,20	9,25	8,74	7,75	6,88	7,07	7,45	9,61	12,03	14,68	17,37	20,42	23,27	—
ΔCS	DM	-33,19	-32,96	-32,71	-32,51	-32,40	-32,35	-32,29	-32,22	-32,13	-31,98	-31,78	-31,57	-31,35	-31,09	-30,87	—
	DMA	26,96	27,61	28,11	28,52	28,91	29,31	29,59	29,68	29,66	29,51	29,88	30,09	30,71	31,13	31,53	—
	PDMA	13,57	13,35	12,82	11,69	10,92	10,41	9,54	7,56	5,43	1,93	2,23	2,26	2,84	2,91	3,26	—

Tabela 8.375: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	524,3	525,2	526,3	527,4	528,6	530,5	531,5	533,3	535,3	537,5	539,9	542,3	544,7	547,2	549,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,2	14,2	14,2	14,2	14,3	14,3	14,3	14,3	14,2	14,1	13,9	13,7	13,4	13,1	12,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,0	-83,0	-83,1	-83,2	-83,3	-83,5	-83,8	-84,0	-84,3	-84,7	-85,0	-85,4	-85,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,1	-9,0	-9,0	-8,9	-9,0	-9,0	-9,2	-9,3	-9,4	-9,6	-9,8	-10,0	-10,1	-10,3	-10,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,5	45,4	45,3	45,2	45,2	45,2	45,2	45,3	45,4	45,5	45,6	45,8	46,0	46,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,0	-10,9	-10,9	-10,9	-11,0	-11,2	-11,3	-11,5	-11,7	-11,9	-12,1	-12,3	-12,4	-12,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	182,9	182,0	180,5	178,8	177,2	176,2	176,0	176,5	177,6	179,1	181,0	183,0	185,0	186,9	188,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1571,9	-1571,8	-1570,8	-1569,3	-1567,5	-1565,7	-1563,9	-1561,9	-1559,6	-1556,9	-1553,6	-1549,9	-1545,9	-1541,7	-1537,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-92,2	-92,8	-92,6	-91,6	-90,0	-88,0	-85,9	-83,5	-81,1	-78,6	-76,1	-73,7	-71,4	-69,2	-67,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	11,7	11,4	11,8	13,0	14,8	17,0	19,4	22,1	24,8	27,5	30,1	32,7	35,1	37,4	39,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-444,5	-445,9	-448,6	-452,8	-458,5	-465,1	-472,4	-480,0	-487,8	-495,5	-503,3	-511,0	-518,7	-526,2	-533,6	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	126,9	126,2	125,5	124,9	124,5	124,2	124,2	124,3	124,7	125,1	125,6	126,2	126,8	127,4	128,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,5	-13,4	-13,3	-13,2	-13,3	-13,4	-13,5	-13,7	-13,9	-14,1	-14,3	-14,4	-14,6	-14,8	-14,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,2	201,4	200,9	200,6	200,6	200,8	201,2	201,9	202,7	203,8	205,0	206,3	207,6	208,9	210,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	260,1	258,9	257,6	256,4	255,6	255,2	255,1	255,5	256,1	257,0	258,0	259,2	260,3	261,5	262,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,7	54,7	54,8	54,9	55,0	54,9	54,8	54,7	54,5	54,2	54,0	53,7	53,4	53,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,9	11,7	11,6	11,6	11,6	11,7	11,9	12,1	12,3	12,6	12,9	13,1	13,4	13,6	13,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,2	71,6	71,3	71,2	71,2	71,3	71,7	72,2	72,8	73,6	74,5	75,5	76,5	77,5	78,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	162,8	161,9	161,1	160,4	160,0	159,8	159,9	160,3	160,8	161,6	162,4	163,3	164,2	165,1	165,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,4	-3,6	-3,8	-4,1	-4,5	-4,8	-5,2	-5,5	-5,8	-6,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,5	2,6	2,6	2,6	2,5	2,3	2,2	1,9	1,7	1,5	1,2	1,0	0,8	0,6	0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,8	12,8	12,8	12,8	12,8	12,9	13,0	13,2	13,3	13,4	13,6	13,7	13,9	14,0	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,8	19,7	19,6	19,5	19,5	19,5	19,6	19,8	19,9	20,1	20,3	20,4	20,6	20,8	21,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,6	34,3	34,2	34,1	34,2	34,3	34,4	34,7	35,0	35,4	35,8	36,3	36,7	37,2	37,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	127,9	127,2	126,5	126,0	125,5	125,3	125,3	125,5	125,8	126,3	126,9	127,5	128,1	128,8	129,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,8	-4,9	-5,0	-5,1	-5,2	-5,3	-4,7
Total	DM	-8,12	-8,39	-8,62	-8,80	-8,92	-8,95	-8,95	-8,81	-8,61	-8,32	-7,97	-7,58	-7,19	-6,79	-6,39	—
	DMA	15,09	15,04	15,00	15,02	15,10	15,40	15,73	16,19	16,80	17,46	18,13	18,81	19,46	20,11	20,78	—
	PDMA	11,43	11,25	10,97	10,56	9,99	10,61	12,00	13,88	15,97	18,53	21,15	23,67	26,06	28,38	30,75	—
CPI	DM	-24,92	-25,10	-25,24	-25,34	-25,44	-25,43	-25,49	-25,36	-25,17	-24,87	-24,50	-24,09	-23,66	-23,23	-22,78	—
	DMA	29,65	29,99	30,31	30,59	30,89	31,59	32,27	33,05	34,17	35,24	36,25	37,20	38,10	38,97	39,93	—
	PDMA	14,29	14,42	14,21	13,45	12,51	13,76	15,67	17,63	20,15	22,78	25,40	28,01	30,42	32,80	35,31	—
SPI	DM	4,20	3,86	3,56	3,33	3,19	3,13	3,18	3,33	3,53	3,83	4,15	4,52	4,89	5,26	5,63	—
	DMA	4,41	4,07	3,77	3,60	3,51	3,52	3,61	3,83	4,07	4,43	4,85	5,32	5,79	6,27	6,73	—
	PDMA	9,33	8,92	8,59	8,43	8,15	8,30	9,31	11,13	12,91	15,41	18,03	20,49	22,86	25,13	27,41	—
ΔCS	DM	-29,12	-28,96	-28,80	-28,67	-28,63	-28,56	-28,67	-28,70	-28,71	-28,70	-28,65	-28,61	-28,55	-28,49	-28,41	—
	DMA	25,23	25,92	26,54	26,99	27,38	28,07	28,67	29,23	30,11	30,81	31,40	31,88	32,31	32,70	33,19	—
	PDMA	4,96	5,51	5,62	5,02	4,36	5,46	6,37	6,49	7,25	7,37	7,37	7,51	7,56	7,67	7,90	—

Tabela 8.376: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	406,0	408,9	411,8	414,6	417,4	420,5	424,1	428,4	433,3	438,7	444,4	450,2	456,2	462,2	468,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	23,7	23,8	23,7	23,7	23,7	23,7	23,7	23,7	23,6	23,4	23,0	22,6	22,0	21,4	20,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,4	-70,6	-70,7	-70,8	-71,0	-71,2	-71,6	-72,0	-72,6	-73,3	-74,0	-74,7	-75,5	-76,3	-77,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,0	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-4,0	-4,3	-4,6	-4,9	-5,3	-5,6	-6,0	-6,4	-6,8	-7,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,8	41,6	41,5	41,3	41,1	41,0	41,0	41,1	41,2	41,5	41,7	42,1	42,4	42,8	43,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,7	-6,5	-6,4	-6,4	-6,5	-6,7	-7,0	-7,3	-7,7	-8,1	-8,5	-8,9	-9,3	-9,7	-10,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	145,7	144,2	141,0	136,9	133,2	130,9	130,5	131,8	134,4	138,1	142,4	147,1	151,8	156,4	160,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1713,8	-1710,8	-1709,1	-1708,9	-1710,2	-1712,6	-1715,4	-1717,5	-1718,1	-1716,7	-1713,2	-1707,8	-1700,9	-1692,8	-1684,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-176,8	-177,3	-175,9	-172,7	-168,4	-163,5	-158,1	-152,5	-146,7	-140,8	-135,0	-129,3	-123,8	-118,6	-113,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-80,1	-80,1	-78,1	-74,5	-69,5	-63,6	-57,2	-50,6	-43,9	-37,3	-30,8	-24,7	-19,0	-13,5	-8,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-269,3	-272,9	-279,1	-288,2	-299,6	-312,2	-325,1	-337,6	-349,3	-360,4	-370,9	-381,0	-390,8	-400,4	-409,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,4	118,0	116,5	115,1	114,1	113,4	113,3	113,6	114,2	115,2	116,4	117,6	119,0	120,3	121,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,0	-9,7	-9,5	-9,4	-9,5	-9,7	-10,1	-10,5	-10,9	-11,3	-11,8	-12,2	-12,6	-12,9	-13,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	186,2	184,8	183,9	183,3	182,9	182,8	183,0	183,6	184,7	186,0	187,7	189,6	191,7	193,9	196,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	248,7	246,2	243,5	240,9	239,0	237,9	237,6	238,0	239,1	240,7	242,7	244,9	247,2	249,5	251,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,3	55,1	55,3	55,5	55,9	56,3	56,5	56,7	56,8	56,8	56,7	56,5	56,2	56,0	55,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,7	8,5	8,3	8,2	8,2	8,4	8,6	8,9	9,2	9,6	10,0	10,4	10,7	11,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,7	56,9	56,4	56,1	55,9	55,9	56,1	56,6	57,3	58,3	59,6	61,0	62,6	64,3	66,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,1	150,5	148,8	147,2	146,2	145,6	145,6	146,2	147,2	148,5	150,0	151,7	153,5	155,3	157,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	1,0	1,1	1,2	1,2	1,1	1,0	0,7	0,4	0,0	-0,3	-0,8	-1,2	-1,7	-2,2	-2,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	6,1	6,1	6,1	6,0	5,9	5,6	5,3	5,0	4,6	4,2	3,8	3,4	3,1	2,7	2,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,5	11,6	11,6	11,7	11,8	11,9	12,1	12,2	12,4	12,5	12,7	12,9	13,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,3	18,1	17,9	17,7	17,6	17,5	17,5	17,6	17,7	17,9	18,1	18,4	18,6	18,9	19,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,4	23,9	23,8	23,8	23,9	24,0	24,3	24,8	25,5	26,2	27,1	28,1	29,1	30,2	31,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,5	118,1	116,6	115,3	114,3	113,7	113,7	114,0	114,8	115,8	117,1	118,4	119,8	121,2	122,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,4	-2,6	-2,8	-3,1	-3,3	-3,5	-3,8	-4,0	-4,2	-4,7
Total	DM	-21,23	-21,59	-21,99	-22,43	-22,84	-23,12	-23,20	-23,01	-22,56	-21,88	-21,01	-20,01	-18,94	-17,83	-16,73	—
	DMA	27,74	27,67	27,56	27,27	26,73	26,91	26,87	26,58	26,02	25,21	24,22	23,13	21,97	20,93	20,07	—
	PDMA	54,62	55,45	55,40	54,42	52,53	50,11	46,83	43,25	39,11	34,83	30,22	26,05	21,90	17,88	15,70	—
CPI	DM	-49,53	-49,49	-49,64	-49,97	-50,42	-50,78	-50,94	-50,73	-50,15	-49,19	-47,95	-46,48	-44,93	-43,29	-41,67	—
	DMA	59,42	58,78	57,78	56,45	54,75	54,95	54,92	54,53	53,69	52,43	50,85	49,05	47,09	45,07	43,15	—
	PDMA	86,56	87,02	85,61	82,98	79,07	75,08	70,28	65,20	59,76	54,04	48,36	42,73	37,23	32,05	27,90	—
SPI	DM	-0,48	-1,13	-1,71	-2,24	-2,61	-2,83	-2,85	-2,68	-2,33	-1,85	-1,25	-0,59	0,11	0,85	1,57	—
	DMA	4,51	4,86	5,39	5,87	6,19	6,35	6,29	6,08	5,73	5,25	4,68	4,13	3,54	3,22	3,15	—
	PDMA	31,19	32,30	33,25	33,48	33,06	31,80	29,64	27,16	23,97	20,74	16,91	13,82	10,66	7,49	6,75	—
Δ CS	DM	-49,05	-48,36	-47,92	-47,73	-47,80	-47,95	-48,08	-48,05	-47,82	-47,34	-46,69	-45,89	-45,04	-44,14	-43,24	—
	DMA	54,91	53,92	52,39	50,58	48,56	48,59	48,62	48,45	47,96	47,17	46,17	44,92	43,55	41,85	39,99	—
	PDMA	55,37	54,72	52,36	49,50	46,01	43,28	40,64	38,04	35,78	33,30	31,46	28,90	26,58	24,57	21,16	—

Tabela 8.377: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	429,2	431,6	434,1	436,4	438,8	441,5	444,7	448,3	452,5	457,0	461,8	466,8	471,8	476,9	482,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,0	22,0	22,0	22,0	22,0	22,0	22,0	22,0	21,9	21,7	21,4	21,0	20,5	20,0	19,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,9	-73,0	-73,1	-73,2	-73,3	-73,5	-73,8	-74,2	-74,7	-75,3	-75,9	-76,5	-77,2	-77,9	-78,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,0	-4,9	-4,8	-4,8	-4,8	-5,0	-5,2	-5,5	-5,8	-6,1	-6,4	-6,7	-7,0	-7,4	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,5	42,4	42,2	42,1	41,9	41,8	41,8	41,9	42,0	42,2	42,5	42,8	43,1	43,4	43,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-7,4	-7,3	-7,3	-7,4	-7,5	-7,8	-8,1	-8,4	-8,8	-9,1	-9,5	-9,8	-10,2	-10,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,3	152,0	149,2	145,7	142,5	140,6	140,2	141,2	143,5	146,7	150,4	154,3	158,4	162,4	166,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1693,6	-1691,4	-1689,7	-1688,7	-1688,5	-1689,0	-1689,9	-1690,3	-1689,7	-1687,5	-1683,8	-1678,6	-1672,3	-1665,1	-1657,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-159,8	-160,4	-159,3	-156,7	-153,1	-148,9	-144,3	-139,5	-134,5	-129,5	-124,5	-119,6	-114,9	-110,5	-106,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-61,4	-61,5	-60,0	-57,0	-52,9	-48,0	-42,6	-37,0	-31,3	-25,7	-20,2	-15,0	-10,0	-5,4	-1,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-303,4	-306,3	-311,5	-319,1	-328,6	-339,2	-350,1	-360,9	-371,1	-381,0	-390,4	-399,5	-408,4	-417,2	-425,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,9	119,6	118,3	117,2	116,2	115,7	115,6	115,9	116,4	117,3	118,3	119,4	120,5	121,7	122,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,7	-10,4	-10,3	-10,2	-10,3	-10,5	-10,7	-11,1	-11,5	-11,8	-12,2	-12,6	-12,9	-13,2	-13,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	188,7	187,5	186,7	186,1	185,8	185,8	186,0	186,7	187,7	189,0	190,6	192,3	194,2	196,2	198,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	250,8	248,6	246,2	244,1	242,4	241,4	241,2	241,6	242,6	244,0	245,8	247,7	249,7	251,7	253,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,4	55,5	55,7	56,0	56,3	56,5	56,6	56,6	56,5	56,4	56,2	56,0	55,7	55,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,1	8,9	8,8	8,7	8,8	8,9	9,1	9,4	9,7	10,1	10,4	10,8	11,2	11,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	60,2	59,4	58,9	58,7	58,5	58,5	58,8	59,2	60,0	60,9	62,1	63,4	64,9	66,4	67,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,1	152,7	151,2	149,9	148,9	148,5	148,5	149,0	149,9	151,0	152,4	153,9	155,5	157,0	158,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,3	0,4	0,5	0,5	0,4	0,3	0,0	-0,2	-0,5	-0,9	-1,3	-1,8	-2,3	-2,7	-3,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,4	5,3	5,1	4,8	4,5	4,1	3,8	3,4	3,1	2,8	2,4	2,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,7	11,7	11,7	11,7	11,8	11,8	11,9	12,1	12,2	12,4	12,5	12,7	12,8	13,0	13,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,4	18,3	18,1	18,0	17,9	17,8	17,8	17,9	18,0	18,2	18,4	18,7	18,9	19,2	19,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	26,4	25,9	25,8	25,8	25,8	26,0	26,3	26,7	27,3	27,9	28,7	29,6	30,5	31,4	32,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,1	119,9	118,7	117,5	116,6	116,2	116,1	116,4	117,1	118,0	119,1	120,3	121,5	122,7	123,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,6	-2,5	-2,5	-2,6	-2,7	-2,8	-3,0	-3,2	-3,4	-3,6	-3,8	-4,0	-4,2	-4,3	-4,7
Total	DM	-18,93	-19,27	-19,62	-19,96	-20,27	-20,43	-20,43	-20,22	-19,79	-19,18	-18,40	-17,54	-16,61	-15,67	-14,73	—
	DMA	22,79	22,90	23,15	23,46	23,73	23,83	23,73	23,44	22,90	22,20	21,36	20,42	19,60	18,89	18,31	—
	PDMA	43,52	44,25	44,56	43,90	42,61	40,57	37,71	34,61	30,93	27,27	23,52	19,74	16,34	14,42	13,89	—
CPI	DM	-45,24	-45,25	-45,37	-45,59	-45,85	-46,01	-45,99	-45,73	-45,14	-44,29	-43,19	-41,95	-40,61	-39,26	-37,91	—
	DMA	48,44	48,49	48,63	48,83	49,05	49,12	48,95	48,51	47,70	46,58	45,21	43,65	42,03	40,41	38,82	—
	PDMA	68,18	68,72	68,18	66,44	63,90	60,49	56,45	52,03	47,36	42,51	37,67	32,85	28,56	24,94	21,94	—
SPI	DM	0,37	-0,21	-0,73	-1,16	-1,51	-1,67	-1,68	-1,51	-1,20	-0,77	-0,23	0,36	0,99	1,63	2,27	—
	DMA	3,98	4,14	4,47	4,85	5,17	5,29	5,24	5,06	4,72	4,33	3,87	3,37	3,15	3,11	3,27	—
	PDMA	25,44	26,30	27,24	27,37	27,00	25,96	23,96	21,84	18,88	16,09	13,15	10,12	7,37	6,71	7,99	—
Δ CS	DM	-45,60	-45,05	-44,65	-44,43	-44,33	-44,34	-44,31	-44,21	-43,94	-43,52	-42,96	-42,31	-41,60	-40,89	-40,18	—
	DMA	44,46	44,35	44,15	43,97	43,88	43,83	43,71	43,45	42,98	42,26	41,34	40,28	38,88	37,30	35,55	—
	PDMA	42,73	42,42	40,94	39,07	36,89	34,54	32,49	30,19	28,48	26,42	24,53	22,73	21,18	18,23	13,95	—

Tabela 8.378: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	452,6	454,5	456,5	458,5	460,5	462,7	465,4	468,4	471,8	475,6	479,5	483,6	487,8	492,0	496,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,2	20,2	20,2	20,2	20,2	20,2	20,2	20,2	20,1	19,9	19,7	19,3	18,9	18,4	17,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,4	-75,5	-75,5	-75,6	-75,7	-75,9	-76,1	-76,4	-76,8	-77,3	-77,8	-78,3	-78,9	-79,5	-80,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,0	-5,9	-5,8	-5,8	-5,9	-6,0	-6,2	-6,4	-6,6	-6,9	-7,2	-7,4	-7,7	-8,0	-8,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	43,3	43,2	43,0	42,9	42,8	42,7	42,7	42,7	42,8	43,0	43,2	43,5	43,7	44,0	44,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,5	-8,3	-8,2	-8,2	-8,2	-8,4	-8,6	-8,9	-9,2	-9,5	-9,8	-10,1	-10,3	-10,6	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	160,9	159,7	157,4	154,4	151,8	150,2	149,8	150,7	152,6	155,2	158,3	161,6	165,0	168,3	171,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1668,5	-1667,1	-1665,5	-1664,1	-1663,0	-1662,4	-1662,0	-1661,3	-1659,9	-1657,4	-1653,7	-1649,0	-1643,4	-1637,2	-1630,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-142,8	-143,4	-142,6	-140,5	-137,6	-134,2	-130,4	-126,4	-122,2	-118,0	-113,9	-109,8	-105,9	-102,2	-98,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,9	-43,1	-41,9	-39,6	-36,2	-32,3	-27,8	-23,2	-18,5	-13,9	-9,3	-5,0	-0,9	2,9	6,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-336,6	-339,0	-343,3	-349,5	-357,4	-366,2	-375,5	-384,7	-393,7	-402,3	-410,7	-418,9	-426,9	-434,8	-442,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,4	121,3	120,2	119,2	118,5	118,0	117,9	118,2	118,7	119,4	120,2	121,2	122,1	123,1	124,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,4	-11,2	-11,0	-11,0	-11,0	-11,2	-11,4	-11,7	-12,0	-12,4	-12,7	-13,0	-13,3	-13,5	-13,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,5	190,4	189,7	189,3	189,0	189,1	189,4	190,0	191,0	192,2	193,6	195,2	196,9	198,6	200,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,0	251,2	249,1	247,3	245,9	245,1	244,9	245,3	246,1	247,4	248,9	250,6	252,3	254,0	255,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,5	55,6	55,8	56,0	56,2	56,3	56,4	56,3	56,2	56,1	55,8	55,6	55,3	55,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,8	9,6	9,5	9,3	9,3	9,4	9,5	9,7	10,0	10,3	10,6	11,0	11,3	11,6	11,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	62,8	62,1	61,7	61,5	61,4	61,4	61,7	62,1	62,8	63,7	64,8	66,0	67,2	68,6	69,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	156,2	154,9	153,7	152,6	151,8	151,4	151,5	151,9	152,7	153,7	154,9	156,2	157,5	158,8	160,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,3	-0,3	-0,2	-0,2	-0,3	-0,4	-0,6	-0,9	-1,2	-1,6	-2,0	-2,4	-2,8	-3,2	-3,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,8	4,8	4,9	4,8	4,7	4,5	4,2	4,0	3,7	3,3	3,0	2,7	2,4	2,2	1,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,9	11,9	11,9	11,9	12,0	12,0	12,1	12,3	12,4	12,5	12,7	12,8	13,0	13,1	13,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,7	18,5	18,4	18,3	18,2	18,2	18,2	18,3	18,4	18,6	18,8	19,0	19,2	19,5	19,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	28,4	28,0	27,8	27,8	27,9	28,0	28,3	28,6	29,1	29,7	30,4	31,1	31,9	32,6	33,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	121,8	120,7	119,7	119,0	118,6	118,6	118,9	119,4	120,2	121,1	122,1	123,1	124,2	125,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,1	-3,2	-3,4	-3,5	-3,7	-3,9	-4,0	-4,2	-4,4	-4,5	-4,7
Total	DM	-16,37	-16,70	-16,99	-17,27	-17,47	-17,59	-17,54	-17,33	-16,95	-16,43	-15,78	-15,05	-14,28	-13,51	-12,73	—
	DMA	19,98	20,11	20,23	20,37	20,54	20,60	20,48	20,21	19,77	19,16	18,57	17,96	17,48	17,08	16,73	—
	PDMA	33,32	33,80	34,19	33,66	32,55	30,77	28,35	25,73	22,93	19,54	16,54	13,98	12,99	12,68	13,06	—
CPI	DM	-40,42	-40,51	-40,60	-40,75	-40,87	-40,95	-40,85	-40,56	-40,05	-39,32	-38,42	-37,40	-36,32	-35,24	-34,15	—
	DMA	42,49	42,62	42,75	42,87	42,96	42,95	42,75	42,31	41,61	40,65	39,55	38,35	37,08	35,84	34,60	—
	PDMA	51,64	52,23	51,88	50,55	48,38	45,64	42,29	38,67	34,83	30,77	27,06	23,94	21,23	18,83	16,48	—
SPI	DM	1,27	0,76	0,33	-0,05	-0,31	-0,46	-0,45	-0,29	-0,01	0,36	0,83	1,35	1,87	2,43	2,97	—
	DMA	3,48	3,60	3,73	3,87	4,10	4,21	4,15	4,00	3,76	3,40	3,19	3,01	3,10	3,32	3,62	—
	PDMA	19,89	20,28	21,23	21,27	20,94	19,87	18,13	16,23	14,21	11,31	8,83	6,68	6,94	8,18	10,56	—
ΔCS	DM	-41,68	-41,27	-40,93	-40,69	-40,56	-40,49	-40,41	-40,27	-40,03	-39,68	-39,24	-38,75	-38,19	-37,66	-37,11	—
	DMA	39,01	39,02	39,02	39,01	38,86	38,75	38,59	38,31	37,85	37,25	36,36	35,33	33,98	32,52	30,98	—
	PDMA	31,75	31,96	30,65	29,29	27,44	25,77	24,16	22,44	20,62	19,46	18,23	17,26	14,29	10,65	5,92	—

Tabela 8.379: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	476,2	477,7	479,2	480,8	482,4	484,2	486,3	488,7	491,4	494,4	497,5	500,8	504,1	507,4	510,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,2	18,3	18,3	18,3	18,3	18,3	18,3	18,3	18,2	18,1	17,9	17,6	17,2	16,8	16,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-77,9	-78,0	-78,0	-78,1	-78,2	-78,4	-78,7	-79,0	-79,4	-79,8	-80,2	-80,7	-81,1	-81,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-6,9	-6,9	-6,8	-6,9	-7,0	-7,1	-7,3	-7,5	-7,7	-8,0	-8,2	-8,4	-8,6	-8,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	43,9	43,8	43,7	43,6	43,5	43,5	43,6	43,7	43,8	44,0	44,2	44,4	44,6	44,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,2	-9,1	-9,1	-9,2	-9,3	-9,4	-9,7	-9,9	-10,1	-10,4	-10,6	-10,9	-11,1	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	168,4	167,3	165,5	163,1	161,0	159,7	159,4	160,1	161,6	163,7	166,1	168,8	171,5	174,1	176,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1639,4	-1638,6	-1637,3	-1635,7	-1634,2	-1633,0	-1631,9	-1630,6	-1628,8	-1626,3	-1623,0	-1618,9	-1614,2	-1609,1	-1603,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-125,7	-126,3	-125,8	-124,2	-122,0	-119,3	-116,2	-113,1	-109,8	-106,4	-103,1	-99,8	-96,7	-93,7	-90,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-24,4	-24,7	-23,9	-22,1	-19,5	-16,4	-12,9	-9,3	-5,6	-1,9	1,6	5,1	8,4	11,5	14,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-370,1	-372,0	-375,4	-380,4	-386,9	-394,2	-401,9	-409,7	-417,4	-424,9	-432,3	-439,5	-446,5	-453,4	-460,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	123,9	123,0	122,2	121,4	120,8	120,4	120,3	120,5	120,9	121,5	122,2	123,0	123,8	124,5	125,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,2	-12,0	-11,8	-11,8	-11,8	-12,0	-12,1	-12,4	-12,6	-12,9	-13,1	-13,4	-13,6	-13,8	-14,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,7	193,8	193,2	192,8	192,7	192,8	193,1	193,7	194,5	195,6	196,9	198,2	199,7	201,2	202,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	255,4	253,8	252,2	250,7	249,5	248,9	248,8	249,1	249,9	250,9	252,2	253,5	255,0	256,4	257,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,4	55,5	55,7	55,8	56,0	56,0	56,0	55,9	55,8	55,6	55,4	55,2	54,9	54,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,2	10,1	10,0	10,0	10,1	10,2	10,4	10,7	10,9	11,2	11,5	11,8	12,1	12,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,7	65,1	64,7	64,5	64,5	64,6	64,8	65,3	65,9	66,7	67,6	68,6	69,7	70,8	72,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	158,3	157,3	156,3	155,4	154,8	154,5	154,9	155,6	156,4	157,4	158,5	159,6	160,6	161,7	161,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,2	-1,1	-1,1	-1,1	-1,1	-1,3	-1,5	-1,7	-2,0	-2,3	-2,7	-3,1	-3,4	-3,8	-4,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,1	4,1	4,2	4,1	4,0	3,8	3,6	3,4	3,1	2,9	2,6	2,3	2,1	1,9	1,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,1	12,1	12,1	12,1	12,2	12,3	12,4	12,5	12,6	12,7	12,9	13,0	13,1	13,3	13,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,0	18,8	18,7	18,6	18,6	18,6	18,6	18,7	18,9	19,0	19,2	19,4	19,6	19,8	19,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,5	30,1	30,0	30,0	30,0	30,1	30,3	30,6	31,0	31,5	32,1	32,6	33,3	33,9	34,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	124,6	123,7	122,8	122,1	121,5	121,2	121,1	121,4	121,8	122,4	123,2	124,0	124,8	125,6	126,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-3,4	-3,4	-3,5	-3,5	-3,6	-3,7	-3,9	-4,0	-4,2	-4,3	-4,4	-4,6	-4,7	-4,7
Total	DM	-13,64	-13,95	-14,19	-14,40	-14,56	-14,62	-14,57	-14,38	-14,07	-13,64	-13,13	-12,56	-11,94	-11,34	-10,72	—
	DMA	17,21	17,26	17,28	17,35	17,39	17,38	17,28	17,07	16,79	16,45	16,18	15,99	16,00	16,07	16,17	—
	PDMA	23,06	23,54	23,73	23,23	22,30	20,78	19,00	17,03	14,92	13,02	12,05	11,48	11,67	12,04	12,38	—
CPI	DM	-35,26	-35,39	-35,50	-35,57	-35,67	-35,69	-35,56	-35,33	-34,91	-34,33	-33,67	-32,87	-32,06	-31,23	-30,39	—
	DMA	36,23	36,39	36,48	36,57	36,62	36,58	36,38	36,02	35,53	34,85	34,13	33,38	33,06	32,79	32,54	—
	PDMA	35,16	35,74	35,42	34,53	32,76	30,62	28,13	25,36	23,19	20,96	19,05	16,87	14,97	13,18	11,54	—
SPI	DM	2,21	1,78	1,44	1,13	0,93	0,83	0,83	0,97	1,21	1,53	1,93	2,34	2,81	3,25	3,70	—
	DMA	3,27	3,23	3,20	3,25	3,29	3,29	3,27	3,17	3,05	2,95	3,01	3,23	3,49	3,81	4,17	—
	PDMA	14,19	14,60	15,16	14,94	14,63	13,55	12,31	10,92	8,85	7,20	6,91	7,53	9,24	11,20	12,99	—
ΔCS	DM	-37,48	-37,17	-36,94	-36,71	-36,60	-36,52	-36,39	-36,30	-36,12	-35,86	-35,61	-35,21	-34,88	-34,47	-34,09	—
	DMA	32,96	33,16	33,28	33,32	33,33	33,29	33,12	32,84	32,47	31,91	31,11	30,15	29,57	28,98	28,37	—
	PDMA	20,97	21,14	20,26	19,58	18,13	17,07	15,82	14,44	14,34	13,76	12,14	9,35	5,72	1,98	-1,45	—

Tabela 8.380: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	500,0	501,1	502,2	503,3	504,5	505,9	507,4	509,2	511,3	513,5	515,8	518,2	520,7	523,2	525,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,3	16,3	16,3	16,3	16,3	16,3	16,3	16,2	16,1	15,9	15,7	15,4	15,1	14,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,4	-80,4	-80,5	-80,5	-80,6	-80,7	-80,8	-81,0	-81,2	-81,5	-81,8	-82,1	-82,5	-82,8	-83,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,1	-8,0	-7,9	-7,9	-8,0	-8,0	-8,1	-8,3	-8,4	-8,6	-8,8	-8,9	-9,1	-9,3	-9,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,8	44,7	44,6	44,5	44,5	44,4	44,4	44,5	44,5	44,6	44,8	44,9	45,1	45,2	45,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-10,1	-10,1	-10,0	-10,1	-10,2	-10,3	-10,5	-10,6	-10,8	-11,0	-11,2	-11,4	-11,6	-11,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	175,8	174,9	173,5	171,8	170,2	169,2	168,9	169,4	170,6	172,1	174,0	176,0	178,0	180,0	181,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1606,9	-1606,5	-1605,5	-1604,1	-1602,6	-1601,2	-1599,9	-1598,5	-1596,7	-1594,5	-1591,7	-1588,4	-1584,7	-1580,8	-1576,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-108,7	-109,2	-108,9	-107,8	-106,2	-104,2	-102,0	-99,6	-97,1	-94,6	-92,1	-89,7	-87,4	-85,1	-83,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-6,1	-6,4	-5,8	-4,6	-2,7	-0,5	2,0	4,7	7,5	10,2	12,9	15,5	18,0	20,3	22,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-405,3	-406,7	-409,3	-413,2	-418,3	-424,2	-430,5	-436,9	-443,3	-449,6	-455,8	-461,8	-467,7	-473,5	-479,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	125,5	124,8	124,2	123,6	123,1	122,8	122,8	122,9	123,3	123,7	124,2	124,8	125,4	126,0	126,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-12,7	-12,6	-12,6	-12,6	-12,7	-12,8	-13,0	-13,2	-13,4	-13,6	-13,8	-14,0	-14,1	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,3	197,6	197,1	196,9	196,8	196,9	197,2	197,8	198,5	199,4	200,4	201,5	202,7	203,9	205,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	257,8	256,6	255,4	254,2	253,4	252,9	252,8	253,1	253,7	254,5	255,5	256,6	257,7	258,8	259,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,2	55,2	55,2	55,3	55,4	55,5	55,5	55,5	55,4	55,2	55,1	54,9	54,7	54,4	54,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,1	11,0	10,8	10,8	10,8	10,9	11,0	11,2	11,4	11,6	11,8	12,1	12,3	12,5	12,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,9	68,4	68,1	67,9	67,9	68,0	68,3	68,7	69,2	69,9	70,7	71,5	72,4	73,3	74,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	159,8	159,0	158,3	157,9	157,7	157,7	158,1	158,6	159,2	160,0	160,8	161,7	162,5	163,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,1	-2,1	-2,1	-2,3	-2,4	-2,6	-2,9	-3,2	-3,5	-3,8	-4,0	-4,3	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,3	3,4	3,4	3,4	3,3	3,1	3,0	2,8	2,6	2,3	2,1	1,9	1,7	1,6	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,4	12,4	12,4	12,4	12,5	12,5	12,6	12,7	12,8	13,0	13,1	13,2	13,3	13,4	13,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,3	19,2	19,1	19,1	19,1	19,1	19,1	19,2	19,3	19,5	19,6	19,8	19,9	20,1	20,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,6	32,3	32,2	32,2	32,2	32,3	32,5	32,7	33,0	33,4	33,8	34,2	34,7	35,2	35,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	126,3	125,7	125,0	124,4	124,0	123,7	123,7	123,9	124,3	124,7	125,3	125,9	126,5	127,1	127,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-3,9	-3,9	-3,9	-3,9	-4,0	-4,1	-4,2	-4,3	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,8	-4,9	-4,7
Total	DM	-10,83	-11,06	-11,27	-11,43	-11,55	-11,61	-11,57	-11,42	-11,17	-10,87	-10,49	-10,07	-9,63	-9,18	-8,74	—
	DMA	14,78	14,79	14,80	14,87	14,98	15,07	15,17	15,30	15,40	15,50	15,62	15,78	16,13	16,52	16,97	—
	PDMA	14,38	14,69	14,41	14,08	13,59	12,36	11,44	11,04	10,66	10,29	10,75	11,51	13,25	15,15	17,22	—
CPI	DM	-29,98	-30,11	-30,21	-30,28	-30,35	-30,37	-30,32	-30,15	-29,83	-29,45	-28,97	-28,43	-27,86	-27,29	-26,70	—
	DMA	30,20	30,51	30,77	31,03	31,30	31,55	31,77	31,95	32,01	32,05	32,03	32,03	32,41	32,73	33,21	—
	PDMA	22,20	22,25	21,85	21,10	20,23	19,01	17,71	16,49	14,98	13,77	12,61	11,97	14,03	15,93	17,82	—
SPI	DM	3,21	2,91	2,61	2,39	2,25	2,15	2,19	2,31	2,51	2,75	3,06	3,39	3,75	4,10	4,43	—
	DMA	3,47	3,27	3,09	3,03	3,01	2,98	2,99	3,10	3,21	3,37	3,58	3,87	4,20	4,63	5,07	—
	PDMA	8,64	9,15	8,95	8,93	8,72	7,48	6,84	7,04	7,49	7,74	9,39	11,18	12,68	14,58	16,77	—
ΔCS	DM	-33,19	-33,02	-32,82	-32,67	-32,60	-32,53	-32,50	-32,46	-32,33	-32,21	-32,03	-31,82	-31,61	-31,39	-31,13	—
	DMA	26,73	27,24	27,68	28,00	28,29	28,57	28,79	28,85	28,80	28,69	28,45	28,15	28,21	28,09	28,14	—
	PDMA	13,56	13,10	12,91	12,17	11,51	11,53	10,87	9,45	7,49	6,03	3,22	0,79	1,35	1,35	1,05	—

Tabela 8.381: Constantes de acoplamento LC-BB95 com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	524,0	524,7	525,4	526,1	526,9	527,8	528,9	530,1	531,4	532,9	534,4	536,0	537,6	539,3	541,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,1	14,1	14,2	14,2	14,2	14,2	14,2	14,2	14,1	14,1	13,9	13,8	13,6	13,4	13,2	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,0	-83,0	-83,1	-83,1	-83,2	-83,3	-83,5	-83,7	-83,9	-84,1	-84,3	-84,6	-84,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-9,1	-9,1	-9,0	-9,1	-9,1	-9,2	-9,3	-9,4	-9,5	-9,6	-9,7	-9,8	-10,0	-10,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,6	45,5	45,5	45,4	45,3	45,3	45,3	45,3	45,4	45,5	45,5	45,6	45,8	45,9	46,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,2	-11,1	-11,0	-11,0	-11,0	-11,1	-11,2	-11,3	-11,4	-11,5	-11,7	-11,8	-11,9	-12,0	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,1	182,5	181,5	180,4	179,3	178,6	178,5	178,8	179,5	180,6	181,8	183,2	184,5	185,8	187,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1571,6	-1571,5	-1570,9	-1569,8	-1568,6	-1567,4	-1566,3	-1565,0	-1563,6	-1561,9	-1559,9	-1557,6	-1555,0	-1552,3	-1549,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-91,8	-92,2	-92,0	-91,4	-90,3	-89,0	-87,5	-86,0	-84,3	-82,7	-81,0	-79,4	-77,8	-76,3	-74,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	12,0	11,8	12,1	12,8	14,0	15,5	17,2	18,9	20,8	22,6	24,4	26,1	27,7	29,3	30,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-444,2	-445,1	-446,9	-449,8	-453,5	-457,9	-462,6	-467,5	-472,4	-477,3	-482,0	-486,7	-491,2	-495,5	-499,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	127,1	126,7	126,2	125,8	125,5	125,3	125,3	125,4	125,6	125,9	126,3	126,6	127,1	127,5	127,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,6	-13,5	-13,4	-13,4	-13,4	-13,5	-13,6	-13,7	-13,8	-13,9	-14,1	-14,2	-14,3	-14,4	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,5	202,0	201,6	201,5	201,4	201,6	201,9	202,3	202,8	203,5	204,3	205,1	205,9	206,7	207,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	260,5	259,6	258,8	258,0	257,5	257,2	257,1	257,3	257,8	258,4	259,0	259,8	260,5	261,3	262,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	54,6	54,6	54,7	54,8	54,8	54,9	54,8	54,8	54,7	54,5	54,4	54,2	54,1	53,9	53,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,9	11,8	11,8	11,7	11,7	11,8	11,9	12,0	12,2	12,4	12,5	12,7	12,9	13,0	13,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,5	72,1	71,9	71,8	71,8	71,9	72,1	72,4	72,8	73,4	73,9	74,5	75,2	75,8	76,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	163,0	162,5	161,9	161,5	161,2	161,0	161,1	161,3	161,7	162,2	162,7	163,3	163,9	164,5	165,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,3	-3,2	-3,2	-3,3	-3,4	-3,5	-3,7	-3,9	-4,1	-4,3	-4,5	-4,7	-4,9	-5,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,5	2,6	2,6	2,5	2,5	2,4	2,3	2,1	2,0	1,8	1,6	1,5	1,4	1,2	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,8	12,8	12,8	12,8	12,8	12,9	13,0	13,1	13,1	13,2	13,3	13,4	13,5	13,6	13,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,8	19,7	19,7	19,6	19,6	19,7	19,7	19,8	19,9	20,0	20,1	20,2	20,3	20,4	20,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,8	34,6	34,5	34,4	34,5	34,5	34,6	34,8	35,0	35,3	35,6	35,9	36,2	36,5	36,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	128,1	127,7	127,2	126,8	126,5	126,4	126,4	126,5	126,7	127,0	127,4	127,8	128,2	128,7	129,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,5	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,5	-4,6	-4,6	-4,7	-4,8	-4,9	-4,9	-5,0	-5,1	-4,7
Total	DM	-8,02	-8,19	-8,33	-8,46	-8,55	-8,58	-8,55	-8,47	-8,32	-8,12	-7,89	-7,62	-7,33	-7,05	-6,78	—
	DMA	15,11	15,07	15,03	15,02	15,05	15,16	15,40	15,67	15,98	16,39	16,84	17,26	17,68	18,09	18,47	—
	PDMA	11,63	11,52	11,14	10,67	10,55	10,51	11,16	12,45	13,74	15,25	17,03	18,56	20,04	21,75	23,25	—
CPI	DM	-24,83	-24,94	-25,01	-25,09	-25,16	-25,19	-25,16	-25,09	-24,94	-24,71	-24,45	-24,14	-23,79	-23,45	-23,10	—
	DMA	29,52	29,74	29,94	30,13	30,33	30,61	31,09	31,55	31,99	32,62	33,27	33,86	34,43	34,97	35,48	—
	PDMA	14,34	14,33	14,09	13,60	13,04	12,87	14,13	15,38	16,79	18,36	20,19	21,80	23,42	25,14	26,75	—
SPI	DM	4,30	4,09	3,91	3,74	3,64	3,61	3,63	3,71	3,86	4,05	4,25	4,49	4,75	4,98	5,19	—
	DMA	4,54	4,31	4,09	3,94	3,84	3,83	3,89	4,03	4,23	4,49	4,79	5,09	5,40	5,71	5,99	—
	PDMA	9,64	9,45	8,98	8,53	8,72	8,78	8,99	10,30	11,51	12,97	14,72	16,19	17,56	19,27	20,68	—
ΔCS	DM	-29,13	-29,03	-28,92	-28,83	-28,80	-28,80	-28,80	-28,80	-28,80	-28,76	-28,71	-28,62	-28,54	-28,43	-28,29	—
	DMA	24,98	25,43	25,84	26,19	26,49	26,78	27,20	27,51	27,76	28,12	28,49	28,78	29,03	29,26	29,49	—
	PDMA	4,70	4,88	5,11	5,08	4,32	4,09	5,14	5,07	5,28	5,39	5,47	5,60	5,86	5,88	6,07	—

8.6.1.2 BHandH (LC-SLYP)

Tabela 8.382: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,2	422,6	424,2	426,0	428,3	431,6	436,1	441,9	448,8	456,7	465,1	473,9	483,0	492,1	501,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	24,4	24,1	23,8	23,5	23,4	23,2	22,9	22,5	21,9	21,2	20,4	19,4	18,3	17,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,0	-70,1	-70,2	-70,4	-70,6	-71,1	-71,7	-72,6	-73,6	-74,7	-76,0	-77,3	-78,6	-80,0	-81,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,6	-3,9	-4,3	-4,8	-5,3	-5,9	-6,6	-7,2	-7,9	-8,5	-9,2	-9,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	39,4	39,4	39,3	39,3	39,5	39,7	40,1	40,6	41,2	41,8	42,6	43,3	44,1	44,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,4	-5,5	-5,8	-6,2	-6,7	-7,2	-7,9	-8,6	-9,4	-10,1	-10,9	-11,6	-12,3	-13,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,9	135,0	131,6	127,0	123,2	121,7	122,8	126,3	131,8	138,6	146,3	154,4	162,5	170,4	177,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1812,9	-1811,2	-1811,5	-1813,2	-1815,6	-1817,6	-1818,3	-1816,4	-1811,1	-1802,1	-1789,9	-1775,0	-1758,4	-1740,8	-1722,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,0	-184,7	-180,0	-173,2	-165,0	-156,0	-146,6	-137,0	-127,3	-117,7	-108,3	-99,3	-90,8	-82,8	-75,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,4	-77,3	-72,8	-66,0	-57,5	-47,9	-37,7	-27,3	-16,9	-6,8	2,8	11,9	20,5	28,4	35,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,4	-275,3	-282,7	-294,8	-310,7	-328,7	-347,3	-365,8	-383,9	-401,7	-419,7	-438,1	-457,4	-477,6	-499,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,9	105,6	105,1	104,7	104,7	105,2	106,4	108,1	110,3	112,8	115,6	118,5	121,4	124,3	127,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,8	-7,9	-8,2	-8,6	-9,2	-9,9	-10,7	-11,5	-12,3	-13,1	-13,9	-14,7	-15,4	-16,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	175,7	176,2	176,9	177,7	178,9	180,5	182,7	185,6	189,2	193,3	197,9	203,0	208,3	213,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,1	225,2	224,0	223,1	223,0	223,9	226,0	229,0	232,9	237,5	242,6	248,0	253,6	259,2	264,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	51,4	51,9	52,6	53,5	54,2	54,8	55,1	55,3	55,2	54,8	54,2	53,4	52,3	51,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	7,0	6,9	6,9	7,1	7,3	7,8	8,4	9,1	9,9	10,9	11,9	13,0	14,1	15,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,5	50,8	51,4	52,1	52,9	53,8	55,0	56,7	58,9	61,6	64,8	68,6	72,8	77,4	82,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,1	135,6	135,0	134,6	134,8	135,7	137,3	139,7	142,6	146,1	149,8	153,9	158,0	162,3	166,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,9	1,0	0,9	0,8	0,5	0,1	-0,4	-1,1	-2,0	-3,0	-4,1	-5,5	-6,9	-8,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,3	5,1	4,7	4,2	3,6	3,0	2,3	1,5	0,7	-0,1	-1,0	-2,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,2	11,3	11,3	11,4	11,6	11,8	12,0	12,3	12,7	13,2	13,7	14,4	15,0	15,8	16,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,2	16,1	16,0	16,0	16,0	16,1	16,4	16,8	17,3	17,9	18,7	19,5	20,4	21,4	22,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,8	19,2	19,9	20,6	21,5	22,3	23,4	24,6	26,0	27,7	29,5	31,3	33,2	35,1	37,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,6	105,0	104,6	104,7	105,3	106,6	108,4	110,7	113,4	116,3	119,2	122,3	125,2	128,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,7	-1,7	-1,8	-1,9	-2,1	-2,4	-2,8	-3,1	-3,5	-3,9	-4,3	-4,7	-5,1	-5,5	-4,7
Total	DM	-28,95	-28,87	-28,93	-29,08	-29,13	-28,95	-28,41	-27,48	-26,15	-24,48	-22,60	-20,56	-18,48	-16,44	-14,48	—
	DMA	34,41	34,10	33,63	32,83	32,45	32,20	31,55	30,48	29,03	27,23	25,43	23,77	23,33	23,52	24,93	—
	PDMA	59,71	59,02	57,64	54,52	50,80	45,96	40,16	33,51	26,33	18,57	16,18	16,75	21,46	28,94	37,95	—
CPI	DM	-59,10	-58,80	-58,88	-59,25	-59,65	-59,73	-59,34	-58,36	-56,77	-54,68	-52,26	-49,65	-47,05	-44,57	-42,33	—
	DMA	69,05	68,15	66,77	64,76	63,99	63,80	63,08	61,67	59,59	56,92	53,99	50,98	48,95	47,74	48,22	—
	PDMA	91,17	89,39	85,67	79,94	73,29	65,94	57,86	49,15	40,08	30,72	22,70	16,75	17,77	22,63	28,92	—
SPI	DM	-6,85	-6,91	-6,97	-6,96	-6,75	-6,38	-5,73	-4,84	-3,69	-2,34	-0,84	0,78	2,47	4,19	5,95	—
	DMA	9,01	9,14	9,33	9,41	9,32	9,02	8,43	7,61	6,61	5,46	4,48	3,82	4,53	5,77	7,85	—
	PDMA	36,64	36,75	37,09	35,88	34,30	31,31	27,18	22,03	16,25	9,66	11,40	16,75	24,16	33,56	44,57	—
ΔCS	DM	-52,25	-51,89	-51,92	-52,29	-52,90	-53,35	-53,61	-53,52	-53,08	-52,34	-51,42	-50,43	-49,51	-48,77	-48,27	—
	DMA	60,04	59,01	57,45	55,35	54,67	54,78	54,65	54,06	52,98	51,46	49,51	47,16	44,42	41,97	40,36	—
	PDMA	54,53	52,64	48,58	44,07	38,99	34,63	30,68	27,12	23,82	21,06	11,30	0,00	-6,39	-10,93	-15,65	—

Tabela 8.383: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	441,7	443,0	444,5	446,2	448,4	451,5	455,7	461,0	467,3	474,4	482,0	490,0	498,2	506,4	514,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,8	22,5	22,2	22,0	21,7	21,6	21,4	21,1	20,7	20,2	19,5	18,7	17,8	16,7	15,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-72,7	-72,9	-73,2	-73,6	-74,2	-74,9	-75,9	-76,9	-78,1	-79,3	-80,5	-81,8	-83,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-4,4	-4,5	-4,7	-4,9	-5,3	-5,8	-6,3	-6,9	-7,5	-8,1	-8,7	-9,3	-9,9	-10,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	40,5	40,5	40,5	40,5	40,6	40,8	41,2	41,7	42,2	42,8	43,5	44,2	45,0	45,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-6,4	-6,5	-6,8	-7,1	-7,6	-8,2	-8,8	-9,4	-10,1	-10,8	-11,5	-12,2	-12,9	-13,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,7	143,9	141,0	137,0	133,8	132,5	133,6	136,9	141,9	148,2	155,2	162,5	169,9	177,0	183,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1795,6	-1793,4	-1792,1	-1791,2	-1790,6	-1789,6	-1787,7	-1783,8	-1777,3	-1768,0	-1756,1	-1742,2	-1726,9	-1710,9	-1694,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-169,1	-167,1	-162,9	-156,8	-149,5	-141,4	-132,9	-124,3	-115,5	-106,9	-98,4	-90,3	-82,7	-75,5	-68,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-60,8	-59,0	-55,0	-49,0	-41,4	-32,9	-23,8	-14,5	-5,2	3,8	12,5	20,7	28,4	35,6	42,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-308,5	-310,9	-317,4	-328,1	-342,2	-358,4	-375,5	-392,9	-410,3	-427,9	-445,9	-464,7	-484,4	-505,3	-527,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,3	109,0	108,6	108,3	108,3	108,9	110,0	111,6	113,7	116,0	118,6	121,3	123,9	126,6	129,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,5	-10,1	-10,7	-11,4	-12,2	-13,0	-13,7	-14,4	-15,1	-15,8	-16,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	179,6	179,8	180,3	181,0	181,9	183,1	184,8	187,1	190,1	193,6	197,7	202,3	207,3	212,5	217,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	232,0	231,1	230,0	229,3	229,3	230,2	232,2	235,1	238,8	243,2	248,0	253,1	258,4	263,7	268,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,1	52,2	52,7	53,3	54,0	54,6	55,0	55,2	55,2	54,9	54,4	53,7	52,8	51,7	50,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	7,6	7,6	7,6	7,8	8,1	8,6	9,2	9,9	10,8	11,8	12,8	13,9	15,0	16,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,9	54,2	54,8	55,5	56,3	57,2	58,5	60,3	62,6	65,3	68,6	72,4	76,6	81,1	86,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,3	139,9	139,4	139,1	139,3	140,2	141,8	144,1	146,9	150,2	153,8	157,6	161,6	165,6	169,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	0,3	0,3	0,2	0,1	-0,1	-0,6	-1,2	-1,9	-2,8	-3,9	-5,1	-6,4	-7,9	-9,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	5,0	5,0	4,8	4,6	4,2	3,7	3,1	2,5	1,8	1,0	0,1	-0,6	-1,5	-2,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,6	11,7	11,8	12,1	12,3	12,7	13,1	13,6	14,2	14,8	15,5	16,2	17,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,7	16,6	16,5	16,5	16,6	16,7	17,0	17,4	18,0	18,6	19,4	20,3	21,2	22,2	23,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,4	21,7	22,3	23,1	23,9	24,7	25,7	26,9	28,2	29,8	31,4	33,1	34,9	36,7	38,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,6	109,2	108,7	108,4	108,5	109,1	110,3	112,1	114,2	116,7	119,3	122,1	124,8	127,6	130,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,4	-2,6	-2,8	-3,2	-3,5	-3,9	-4,3	-4,6	-5,0	-5,4	-5,7	-4,7
Total	DM	-26,32	-26,22	-26,20	-26,20	-26,12	-25,82	-25,22	-24,28	-23,01	-21,49	-19,77	-17,95	-16,10	-14,32	-12,61	—
	DMA	29,34	29,24	29,24	29,23	29,12	28,77	28,07	27,01	25,64	24,18	22,83	22,55	22,84	24,64	26,77	—
	PDMA	48,12	47,75	46,46	43,86	40,58	36,26	30,66	24,28	17,70	14,54	15,31	20,17	26,92	35,72	44,75	—
CPI	DM	-55,32	-54,98	-54,89	-54,97	-55,04	-54,86	-54,32	-53,29	-51,80	-49,95	-47,85	-45,65	-43,49	-41,50	-39,68	—
	DMA	59,06	58,65	58,45	58,37	58,24	57,81	56,92	55,51	53,55	51,31	48,86	47,35	46,51	48,23	50,43	—
	PDMA	72,59	71,18	68,21	63,73	58,13	51,50	44,04	36,20	27,98	21,18	15,74	17,48	22,39	28,90	35,90	—
SPI	DM	-5,05	-5,13	-5,15	-5,11	-4,91	-4,52	-3,89	-3,01	-1,90	-0,62	0,81	2,36	3,98	5,61	7,25	—
	DMA	7,54	7,67	7,82	7,87	7,77	7,48	6,91	6,11	5,18	4,29	3,73	4,36	5,49	7,35	9,42	—
	PDMA	30,18	30,57	30,51	29,29	27,71	25,08	20,86	15,54	10,15	9,67	14,99	22,15	30,24	40,72	51,24	—
ΔCS	DM	-50,27	-49,86	-49,74	-49,87	-50,13	-50,34	-50,43	-50,28	-49,90	-49,33	-48,66	-48,01	-47,47	-47,11	-46,93	—
	DMA	51,52	50,98	50,63	50,51	50,46	50,33	50,00	49,40	48,37	47,02	45,13	42,99	41,02	40,88	41,01	—
	PDMA	42,42	40,61	37,70	34,43	30,43	26,43	23,18	20,66	17,83	11,51	0,75	-4,67	-7,85	-11,82	-15,33	—

Tabela 8.384: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	462,9	464,0	465,4	467,0	469,2	472,1	475,9	480,7	486,3	492,7	499,5	506,6	513,9	521,3	528,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,8	20,5	20,2	20,0	19,8	19,6	19,4	19,2	18,8	18,3	17,7	16,9	16,1	15,1	14,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,1	-75,2	-75,3	-75,5	-75,8	-76,1	-76,7	-77,4	-78,3	-79,2	-80,2	-81,3	-82,5	-83,6	-84,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,5	-5,6	-5,8	-6,0	-6,4	-6,8	-7,3	-7,8	-8,4	-8,9	-9,5	-10,1	-10,6	-11,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	41,7	41,7	41,7	41,7	41,8	42,0	42,4	42,8	43,3	43,9	44,5	45,1	45,8	46,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,5	-7,6	-7,8	-8,1	-8,6	-9,1	-9,7	-10,3	-10,9	-11,6	-12,2	-12,8	-13,4	-14,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,8	153,1	150,7	147,3	144,5	143,5	144,6	147,6	152,1	157,8	164,1	170,7	177,3	183,8	189,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1771,8	-1769,3	-1766,8	-1764,3	-1761,5	-1758,5	-1754,7	-1749,5	-1742,4	-1733,1	-1721,9	-1709,1	-1695,3	-1680,8	-1666,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-150,9	-149,2	-145,5	-140,2	-133,7	-126,5	-119,0	-111,3	-103,5	-95,8	-88,3	-81,1	-74,3	-67,9	-61,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,0	-40,4	-37,0	-31,7	-25,2	-17,7	-9,6	-1,4	6,7	14,8	22,5	29,8	36,7	43,1	49,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-344,2	-346,3	-352,0	-361,5	-374,2	-389,1	-405,2	-421,8	-439,0	-456,6	-475,0	-494,4	-514,9	-536,7	-559,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,9	112,6	112,3	112,1	112,1	112,7	113,8	115,3	117,1	119,3	121,7	124,1	126,5	128,9	131,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,8	-9,9	-10,1	-10,5	-11,0	-11,6	-12,3	-12,9	-13,6	-14,3	-15,0	-15,6	-16,2	-16,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,2	184,4	184,9	185,6	186,5	187,8	189,6	192,0	195,0	198,5	202,6	207,1	211,9	216,9	222,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	238,1	237,4	236,4	235,8	235,9	236,8	238,7	241,5	245,0	249,1	253,7	258,5	263,4	268,3	273,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,7	52,9	53,3	53,8	54,3	54,8	55,0	55,1	54,9	54,5	53,9	53,0	52,0	50,9	49,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,4	8,4	8,3	8,4	8,6	8,9	9,5	10,1	10,9	11,8	12,8	13,8	14,8	15,9	16,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,7	57,9	58,5	59,2	60,0	61,1	62,5	64,3	66,6	69,5	72,8	76,6	80,8	85,3	90,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	144,9	144,5	144,1	143,8	144,1	145,0	146,6	148,7	151,4	154,5	157,9	161,5	165,3	169,1	172,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,7	-1,0	-1,5	-2,1	-2,9	-3,9	-5,0	-6,2	-7,6	-9,0	-10,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	4,4	4,4	4,2	4,0	3,6	3,1	2,6	1,9	1,2	0,4	-0,3	-1,2	-2,1	-2,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,8	11,8	11,9	12,0	12,2	12,4	12,7	13,1	13,5	14,0	14,6	15,3	16,0	16,7	17,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,2	17,1	17,1	17,1	17,2	17,4	17,7	18,2	18,8	19,4	20,2	21,1	22,0	23,0	23,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,1	24,4	25,0	25,7	26,4	27,2	28,1	29,2	30,5	31,9	33,4	35,0	36,6	38,3	39,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	113,3	113,0	112,6	112,3	112,5	113,1	114,2	115,8	117,8	120,0	122,5	125,0	127,5	130,0	132,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,9	-3,0	-3,3	-3,6	-3,9	-4,3	-4,6	-5,0	-5,3	-5,6	-5,9	-4,7
Total	DM	-23,31	-23,20	-23,11	-23,04	-22,87	-22,50	-21,89	-20,98	-19,84	-18,47	-16,95	-15,37	-13,80	-12,25	-10,82	—
	DMA	26,00	25,90	25,83	25,76	25,55	25,13	24,42	23,47	22,43	21,55	21,65	22,77	24,70	26,80	29,06	—
	PDMA	36,87	36,40	35,33	32,98	29,87	25,68	20,38	15,06	13,02	13,91	19,59	26,43	34,95	43,74	52,44	—
CPI	DM	-50,79	-50,45	-50,25	-50,15	-50,02	-49,71	-49,10	-48,13	-46,86	-45,27	-43,55	-41,82	-40,15	-38,62	-37,30	—
	DMA	53,30	52,89	52,57	52,34	52,02	51,45	50,54	49,22	47,72	45,87	45,25	46,45	48,63	50,89	53,54	—
	PDMA	55,27	54,00	51,39	47,44	42,59	36,55	29,98	23,14	18,33	13,50	17,93	23,53	30,26	37,24	44,16	—
SPI	DM	-3,15	-3,21	-3,21	-3,16	-2,96	-2,55	-1,93	-1,08	-0,03	1,19	2,57	4,03	5,53	7,09	8,60	—
	DMA	5,98	6,10	6,23	6,27	6,15	5,83	5,27	4,59	3,88	3,72	4,35	5,40	7,15	9,13	11,11	—
	PDMA	23,38	23,49	23,54	22,37	20,55	17,71	13,33	9,14	9,12	14,21	20,81	28,56	38,38	48,50	58,51	—
ΔCS	DM	-47,64	-47,25	-47,03	-46,99	-47,06	-47,16	-47,17	-47,05	-46,84	-46,46	-46,12	-45,84	-45,69	-45,70	-45,90	—
	DMA	47,32	46,79	46,35	46,07	45,87	45,62	45,27	44,63	43,84	42,15	40,89	41,05	41,48	41,76	42,43	—
	PDMA	31,89	30,51	27,85	25,07	22,04	18,84	16,65	14,00	9,21	-0,71	-2,88	-5,03	-8,12	-11,26	-14,35	—

Tabela 8.385: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	484,8	485,8	487,0	488,6	490,5	493,2	496,6	500,9	505,9	511,5	517,5	523,8	530,3	536,8	543,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,6	18,3	18,1	17,9	17,7	17,5	17,4	17,1	16,8	16,3	15,7	15,0	14,2	13,4	12,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-78,0	-78,1	-78,2	-78,5	-78,8	-79,3	-80,0	-80,7	-81,6	-82,5	-83,5	-84,5	-85,6	-86,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-7,0	-7,2	-7,5	-7,9	-8,4	-8,8	-9,3	-9,8	-10,4	-10,9	-11,3	-11,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	42,9	42,9	42,9	42,9	43,1	43,3	43,6	44,0	44,4	44,9	45,5	46,1	46,7	47,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-8,7	-8,7	-8,9	-9,2	-9,6	-10,1	-10,6	-11,2	-11,8	-12,4	-12,9	-13,5	-14,0	-14,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	163,2	162,7	160,7	157,8	155,5	154,7	155,7	158,4	162,5	167,5	173,2	179,0	184,9	190,5	195,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1742,3	-1739,8	-1736,6	-1732,9	-1728,9	-1724,6	-1719,7	-1713,9	-1706,6	-1697,7	-1687,3	-1675,8	-1663,4	-1650,7	-1637,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,5	-131,0	-127,9	-123,2	-117,6	-111,4	-104,8	-98,1	-91,3	-84,6	-78,0	-71,7	-65,7	-60,1	-54,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-23,0	-21,7	-18,8	-14,3	-8,6	-2,1	4,7	11,9	19,1	26,1	32,8	39,2	45,3	50,9	56,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-380,7	-382,6	-387,7	-396,4	-408,1	-422,1	-437,5	-453,9	-471,1	-489,2	-508,3	-528,5	-550,1	-573,0	-597,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,7	116,5	116,2	116,0	116,1	116,7	117,6	119,0	120,7	122,7	124,8	127,0	129,2	131,3	133,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-10,9	-11,0	-11,2	-11,5	-12,0	-12,5	-13,1	-13,7	-14,3	-15,0	-15,5	-16,1	-16,6	-17,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	189,6	190,0	190,7	191,8	193,1	195,0	197,5	200,5	204,0	208,0	212,3	216,9	221,7	226,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,7	244,0	243,2	242,7	242,8	243,8	245,6	248,3	251,6	255,4	259,6	264,0	268,6	273,1	277,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,6	54,0	54,4	54,7	54,8	54,7	54,4	53,8	53,1	52,2	51,1	50,0	48,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,3	9,3	9,4	9,6	10,0	10,5	11,2	12,0	12,9	13,8	14,8	15,9	16,9	17,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,9	62,1	62,6	63,3	64,2	65,4	66,9	68,8	71,2	74,1	77,5	81,3	85,4	89,8	94,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	149,4	149,0	148,9	149,2	150,1	151,6	153,6	156,2	159,1	162,3	165,7	169,2	172,7	176,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,3	-1,3	-1,4	-1,6	-2,0	-2,5	-3,2	-4,1	-5,1	-6,2	-7,5	-8,8	-10,3	-11,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	3,8	3,8	3,6	3,3	3,0	2,5	1,9	1,3	0,5	-0,1	-1,0	-1,8	-2,6	-3,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,2	12,2	12,3	12,4	12,6	12,8	13,2	13,6	14,0	14,6	15,2	15,8	16,5	17,2	18,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,9	17,8	17,8	17,8	17,9	18,2	18,5	19,0	19,6	20,3	21,1	22,0	22,9	23,8	24,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,0	27,3	27,8	28,4	29,1	29,9	30,7	31,7	32,9	34,2	35,5	37,0	38,4	39,9	41,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,2	117,0	116,6	116,5	116,6	117,2	118,3	119,7	121,5	123,5	125,7	128,0	130,2	132,4	134,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-3,2	-3,2	-3,4	-3,5	-3,8	-4,0	-4,3	-4,6	-5,0	-5,3	-5,6	-5,9	-6,1	-4,7
Total	DM	-19,98	-19,88	-19,78	-19,65	-19,44	-19,05	-18,47	-17,67	-16,64	-15,47	-14,19	-12,87	-11,55	-10,31	-9,16	—
	DMA	22,35	22,23	22,15	22,02	21,78	21,38	20,85	20,40	20,78	21,69	23,25	25,20	27,23	29,46	32,04	—
	PDMA	24,91	24,44	23,50	21,44	18,41	15,04	11,79	11,50	14,84	20,61	27,67	35,97	44,17	52,55	61,30	—
CPI	DM	-45,75	-45,44	-45,16	-44,96	-44,76	-44,41	-43,86	-43,08	-42,03	-40,85	-39,55	-38,29	-37,11	-36,12	-35,32	—
	DMA	46,91	46,51	46,18	45,85	45,47	44,94	44,28	43,48	43,95	45,06	47,26	49,56	51,87	54,63	58,03	—
	PDMA	37,39	36,22	34,21	30,76	26,43	21,77	18,08	14,06	15,14	20,22	26,94	33,72	40,35	46,70	53,34	—
SPI	DM	-1,09	-1,14	-1,16	-1,08	-0,87	-0,45	0,15	0,97	1,98	3,13	4,41	5,78	7,19	8,62	10,02	—
	DMA	4,33	4,42	4,52	4,53	4,41	4,11	3,67	3,48	3,79	4,55	5,64	7,34	9,15	11,01	12,98	—
	PDMA	15,77	15,80	15,64	14,60	12,52	10,11	7,18	9,62	14,61	20,90	28,20	37,62	46,97	56,84	67,13	—
Δ CS	DM	-44,65	-44,30	-44,00	-43,88	-43,90	-43,96	-44,02	-44,06	-44,01	-43,98	-43,97	-44,07	-44,30	-44,74	-45,34	—
	DMA	42,58	42,09	41,66	41,32	41,06	40,82	40,61	40,00	40,16	40,52	41,62	42,22	42,72	43,62	45,05	—
	PDMA	21,62	20,42	18,56	16,16	13,91	11,66	10,90	4,44	0,53	-0,68	-1,26	-3,89	-6,62	-10,14	-13,79	—

Tabela 8.386: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	507,5	508,4	509,4	510,8	512,6	515,0	518,0	521,8	526,1	531,0	536,2	541,6	547,2	552,8	558,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,0	15,8	15,6	15,4	15,3	15,1	14,9	14,6	14,2	13,7	13,0	12,3	11,5	10,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,8	-80,8	-80,9	-81,1	-81,3	-81,6	-82,1	-82,6	-83,3	-84,1	-84,9	-85,7	-86,6	-87,5	-88,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,0	-8,1	-8,2	-8,4	-8,7	-9,1	-9,5	-9,9	-10,3	-10,8	-11,2	-11,7	-12,1	-12,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	44,2	44,2	44,2	44,3	44,4	44,6	44,8	45,2	45,6	46,0	46,5	47,1	47,6	48,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,1	-10,4	-10,7	-11,1	-11,6	-12,1	-12,6	-13,2	-13,7	-14,2	-14,6	-15,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	173,1	172,7	171,0	168,6	166,8	166,1	167,1	169,4	173,0	177,4	182,3	187,4	192,5	197,4	202,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1708,0	-1705,5	-1702,1	-1697,9	-1693,2	-1688,3	-1683,0	-1677,0	-1669,9	-1661,7	-1652,4	-1642,2	-1631,5	-1620,4	-1609,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-113,8	-112,6	-109,9	-106,1	-101,3	-96,0	-90,4	-84,6	-78,8	-73,1	-67,5	-62,1	-56,9	-52,1	-47,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-3,9	-2,8	-0,3	3,3	8,1	13,6	19,5	25,6	31,7	37,7	43,5	49,0	54,2	59,0	63,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-420,0	-421,7	-426,4	-434,6	-445,7	-459,2	-474,5	-491,1	-508,8	-527,6	-547,7	-569,2	-592,2	-616,6	-642,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	120,5	120,3	120,1	120,3	120,8	121,7	122,9	124,5	126,2	128,0	130,0	131,9	133,7	135,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,0	-12,1	-12,3	-12,6	-13,0	-13,4	-14,0	-14,5	-15,1	-15,6	-16,1	-16,6	-17,0	-17,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	195,5	196,0	196,7	197,8	199,2	201,2	203,6	206,6	210,1	213,9	218,1	222,4	226,9	231,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,7	251,1	250,5	250,1	250,3	251,3	253,0	255,4	258,5	262,0	265,9	269,9	274,0	278,1	282,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	53,4	53,7	54,0	54,2	54,3	54,3	54,0	53,6	52,9	52,1	51,1	50,0	48,9	47,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,4	10,4	10,5	10,8	11,2	11,7	12,4	13,2	14,1	15,0	16,0	17,0	17,9	18,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,7	66,9	67,4	68,1	69,1	70,3	71,9	73,9	76,4	79,4	82,8	86,6	90,6	94,8	99,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,9	154,6	154,3	154,3	154,6	155,5	157,0	158,9	161,3	164,0	167,0	170,1	173,4	176,6	179,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,4	-2,4	-2,6	-2,8	-3,2	-3,8	-4,6	-5,4	-6,5	-7,7	-8,9	-10,3	-11,7	-13,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	3,1	3,0	2,9	2,6	2,2	1,7	1,2	0,5	-0,1	-0,9	-1,7	-2,5	-3,3	-4,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,7	12,7	12,8	12,9	13,1	13,4	13,7	14,2	14,6	15,2	15,8	16,5	17,2	17,9	18,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,6	18,6	18,6	18,7	18,8	19,1	19,5	20,0	20,6	21,4	22,2	23,0	23,9	24,8	25,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	30,3	30,7	31,3	31,9	32,6	33,4	34,3	35,4	36,5	37,7	39,0	40,3	41,6	42,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	121,2	120,9	120,8	120,9	121,5	122,4	123,7	125,3	127,1	129,0	131,0	133,0	134,9	136,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-3,7	-3,8	-3,9	-4,1	-4,3	-4,5	-4,8	-5,0	-5,3	-5,6	-5,9	-6,1	-6,4	-4,7
Total	DM	-16,45	-16,34	-16,22	-16,11	-15,88	-15,54	-15,03	-14,37	-13,52	-12,55	-11,53	-10,48	-9,48	-8,54	-7,72	—
	DMA	19,53	19,47	19,44	19,50	19,60	19,74	20,37	21,23	22,63	24,37	26,23	28,16	30,49	32,95	35,44	—
	PDMA	14,10	13,86	13,10	12,40	11,25	10,49	13,82	18,53	24,38	31,25	38,84	46,43	54,56	62,54	70,62	—
CPI	DM	-40,39	-40,08	-39,83	-39,67	-39,45	-39,18	-38,80	-38,25	-37,55	-36,76	-35,97	-35,23	-34,61	-34,17	-33,95	—
	DMA	41,83	41,68	41,61	41,71	41,84	42,02	43,04	44,33	46,54	48,84	51,14	53,45	56,63	59,94	63,35	—
	PDMA	22,24	21,62	20,28	18,50	16,19	13,50	16,30	20,97	26,86	32,88	39,05	44,96	51,28	57,24	63,19	—
SPI	DM	1,11	1,07	1,09	1,17	1,40	1,80	2,39	3,15	4,11	5,21	6,39	7,66	8,95	10,26	11,51	—
	DMA	3,18	3,18	3,18	3,21	3,29	3,40	3,74	4,30	5,10	6,42	7,97	9,62	11,33	13,15	14,97	—
	PDMA	8,14	8,16	7,83	7,93	7,63	8,28	12,00	16,73	22,57	30,06	38,69	47,50	56,96	66,42	76,07	—
ΔCS	DM	-41,50	-41,16	-40,91	-40,85	-40,85	-40,98	-41,19	-41,41	-41,67	-41,97	-42,36	-42,89	-43,56	-44,43	-45,47	—
	DMA	38,65	38,50	38,43	38,50	38,54	38,62	39,30	40,03	41,44	42,42	43,16	43,83	45,30	46,78	48,39	—
	PDMA	14,10	13,46	12,45	10,57	8,55	5,23	4,30	4,24	4,30	2,81	0,36	-2,55	-5,67	-9,18	-12,87	—

Tabela 8.387: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	531,1	531,7	532,7	533,8	535,4	537,5	540,1	543,3	547,0	551,1	555,4	560,0	564,7	569,5	574,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,6	13,5	13,3	13,1	13,0	12,9	12,7	12,6	12,3	11,9	11,5	10,9	10,3	9,6	8,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,8	-83,8	-83,9	-84,0	-84,2	-84,5	-84,9	-85,4	-86,0	-86,6	-87,3	-88,0	-88,8	-89,6	-90,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-9,4	-9,4	-9,5	-9,7	-10,0	-10,3	-10,6	-11,0	-11,4	-11,8	-12,2	-12,5	-12,9	-13,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,5	45,5	45,6	45,6	45,7	45,9	46,1	46,4	46,8	47,2	47,6	48,0	48,5	48,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,1	-11,2	-11,3	-11,6	-11,9	-12,2	-12,7	-13,1	-13,5	-14,0	-14,4	-14,9	-15,3	-15,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,3	182,9	181,6	179,7	178,3	177,8	178,6	180,6	183,7	187,4	191,5	195,8	200,1	204,2	208,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1669,5	-1667,2	-1663,9	-1659,7	-1655,0	-1649,9	-1644,7	-1639,0	-1632,5	-1625,2	-1617,2	-1608,5	-1599,4	-1590,1	-1580,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,0	-94,0	-91,8	-88,6	-84,7	-80,3	-75,7	-70,9	-66,1	-61,3	-56,7	-52,2	-47,9	-43,9	-40,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,3	16,2	18,2	21,2	25,2	29,7	34,5	39,5	44,6	49,6	54,4	59,0	63,3	67,4	71,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,1	-466,7	-471,3	-479,1	-490,1	-503,6	-519,2	-536,4	-555,0	-575,2	-596,8	-620,0	-644,8	-671,2	-699,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,7	124,5	124,5	124,6	125,1	125,9	127,0	128,3	129,8	131,4	133,0	134,6	136,2	137,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,4	-13,6	-14,0	-14,4	-14,8	-15,3	-15,8	-16,3	-16,7	-17,1	-17,5	-17,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	202,5	202,9	203,7	204,8	206,3	208,3	210,7	213,6	216,9	220,6	224,4	228,4	232,4	236,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,3	258,8	258,3	258,0	258,3	259,3	260,9	263,1	265,9	269,1	272,6	276,2	279,8	283,3	286,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	53,2	53,3	53,5	53,6	53,6	53,4	53,0	52,4	51,7	50,8	49,8	48,7	47,7	46,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,7	11,7	11,9	12,2	12,6	13,2	13,9	14,7	15,5	16,4	17,3	18,2	19,0	19,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	72,5	72,9	73,7	74,7	76,1	77,8	79,9	82,5	85,5	88,8	92,5	96,3	100,3	104,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,5	160,3	160,1	160,1	160,5	161,4	162,8	164,6	166,8	169,3	172,0	174,9	177,8	180,6	183,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-4,0	-4,3	-4,8	-5,4	-6,2	-7,1	-8,2	-9,4	-10,6	-12,0	-13,3	-14,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	2,2	2,1	2,0	1,7	1,3	0,8	0,3	-0,3	-1,0	-1,7	-2,5	-3,3	-4,0	-4,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,3	13,3	13,4	13,5	13,7	14,0	14,4	14,9	15,4	16,0	16,6	17,2	17,9	18,6	19,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,6	19,6	19,6	19,7	19,9	20,2	20,6	21,2	21,8	22,5	23,3	24,1	25,0	25,8	26,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,5	33,9	34,4	34,9	35,6	36,3	37,1	38,0	39,0	40,0	41,1	42,2	43,3	44,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,7	125,5	125,3	125,3	125,4	125,9	126,8	127,9	129,3	130,8	132,4	134,1	135,8	137,4	139,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,5	-4,6	-4,8	-5,0	-5,2	-5,5	-5,7	-5,9	-6,2	-6,4	-6,6	-4,7
Total	DM	-12,81	-12,73	-12,63	-12,51	-12,34	-12,06	-11,68	-11,17	-10,53	-9,84	-9,12	-8,39	-7,72	-7,13	-6,65	—
	DMA	19,70	19,69	19,83	20,17	20,74	21,79	23,12	24,61	26,23	27,98	30,04	32,27	34,62	36,98	39,36	—
	PDMA	12,25	12,43	13,20	14,73	17,33	21,19	25,86	31,32	37,34	44,06	51,07	58,31	66,06	73,33	80,75	—
CPI	DM	-35,09	-34,85	-34,65	-34,52	-34,43	-34,32	-34,19	-33,98	-33,69	-33,39	-33,15	-32,99	-32,98	-33,15	-33,54	—
	DMA	41,11	41,14	41,48	42,12	43,05	44,83	46,92	49,11	51,35	53,65	56,57	59,75	63,02	66,37	69,79	—
	PDMA	14,92	15,48	16,87	19,02	22,04	26,30	31,01	36,00	41,23	46,49	52,05	57,64	63,05	68,45	73,58	—
SPI	DM	3,53	3,49	3,51	3,63	3,85	4,26	4,83	5,57	6,45	7,43	8,51	9,65	10,80	11,95	13,07	—
	DMA	4,00	3,96	3,96	4,08	4,39	4,90	5,66	6,65	7,82	9,15	10,58	12,11	13,79	15,42	17,05	—
	PDMA	10,29	10,20	10,52	11,59	13,88	17,45	22,08	27,88	34,49	42,27	50,35	58,80	68,27	76,91	86,00	—
ΔCS	DM	-38,62	-38,34	-38,15	-38,14	-38,28	-38,58	-39,02	-39,55	-40,14	-40,82	-41,67	-42,64	-43,78	-45,11	-46,61	—
	DMA	37,11	37,18	37,52	38,04	38,66	39,93	41,26	42,46	43,53	44,49	45,99	47,65	49,23	50,95	52,74	—
	PDMA	4,63	5,28	6,35	7,44	8,16	8,85	8,93	8,13	6,74	4,22	1,71	-1,16	-5,22	-8,46	-12,43	—

Tabela 8.388: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,2	422,4	423,9	425,5	427,5	430,4	434,4	439,5	445,6	452,6	460,1	467,9	475,9	484,1	492,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	24,5	24,1	23,9	23,7	23,5	23,3	23,1	22,8	22,3	21,6	20,9	20,0	19,0	18,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,0	-70,1	-70,2	-70,3	-70,6	-71,0	-71,5	-72,3	-73,2	-74,2	-75,3	-76,5	-77,7	-78,9	-80,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,8	-4,2	-4,6	-5,1	-5,7	-6,2	-6,8	-7,4	-8,0	-8,5	-9,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	39,4	39,4	39,3	39,3	39,4	39,7	40,0	40,4	41,0	41,6	42,2	42,9	43,6	44,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,4	-5,5	-5,7	-6,1	-6,5	-7,1	-7,7	-8,3	-9,0	-9,6	-10,3	-10,9	-11,5	-12,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,9	135,1	132,0	127,8	124,4	122,9	123,8	126,9	131,7	137,8	144,7	151,8	159,1	166,1	172,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,1	-1811,5	-1811,8	-1813,5	-1816,0	-1818,5	-1820,0	-1819,4	-1815,9	-1809,2	-1799,5	-1787,4	-1773,6	-1758,7	-1743,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,0	-185,0	-180,7	-174,6	-167,2	-159,1	-150,6	-142,0	-133,2	-124,6	-116,1	-108,0	-100,3	-93,1	-86,4	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,4	-77,5	-73,5	-67,3	-59,7	-51,0	-41,8	-32,4	-23,0	-13,9	-5,2	3,0	10,7	17,9	24,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,4	-275,0	-281,6	-292,6	-306,9	-323,0	-339,8	-356,3	-372,3	-387,9	-403,3	-418,8	-434,7	-450,9	-467,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	105,9	105,7	105,2	104,8	104,8	105,3	106,3	107,8	109,8	112,0	114,4	117,0	119,6	122,1	124,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,8	-7,9	-8,1	-8,5	-9,0	-9,7	-10,4	-11,1	-11,8	-12,6	-13,3	-13,9	-14,5	-15,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	175,7	176,1	176,8	177,5	178,5	179,9	181,9	184,4	187,3	190,8	194,6	198,7	203,1	207,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,1	225,3	224,2	223,4	223,3	224,1	226,0	228,7	232,1	236,2	240,6	245,3	250,1	254,9	259,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	51,4	51,8	52,5	53,2	53,9	54,5	54,8	55,0	54,9	54,7	54,3	53,8	53,1	52,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	7,0	7,0	7,0	7,1	7,3	7,7	8,2	8,8	9,5	10,3	11,1	11,9	12,8	13,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,5	50,8	51,3	52,0	52,7	53,5	54,5	56,0	57,8	60,1	62,7	65,7	69,0	72,5	76,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,1	135,6	135,1	134,8	134,9	135,7	137,2	139,3	141,8	144,8	148,1	151,6	155,1	158,7	162,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,9	0,9	0,9	0,8	0,5	0,2	-0,2	-0,8	-1,5	-2,4	-3,3	-4,2	-5,3	-6,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,3	5,1	4,8	4,3	3,9	3,3	2,7	2,1	1,4	0,7	0,1	-0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,2	11,3	11,3	11,4	11,5	11,7	11,9	12,2	12,5	12,9	13,3	13,8	14,3	14,8	15,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,2	16,1	16,0	16,0	16,0	16,1	16,3	16,7	17,1	17,6	18,2	18,8	19,5	20,3	21,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,8	19,1	19,7	20,5	21,2	22,0	22,9	24,0	25,3	26,7	28,3	29,9	31,6	33,3	34,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,7	105,2	104,8	104,8	105,4	106,5	108,1	110,2	112,5	115,0	117,7	120,3	123,0	125,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,7	-1,7	-1,8	-1,9	-2,1	-2,3	-2,6	-3,0	-3,3	-3,7	-4,0	-4,4	-4,7	-5,0	-4,7
Total	DM	-28,96	-28,88	-28,95	-29,07	-29,15	-29,02	-28,58	-27,78	-26,65	-25,22	-23,58	-21,81	-19,98	-18,14	-16,41	—
	DMA	34,42	34,15	33,71	33,00	32,47	32,26	31,73	30,83	29,57	28,00	26,28	24,65	23,34	22,81	22,85	—
	PDMA	59,71	59,12	57,67	55,03	51,60	47,19	42,02	36,43	29,82	23,00	16,87	16,36	16,82	19,62	25,33	—
CPI	DM	-59,12	-58,85	-58,93	-59,26	-59,66	-59,82	-59,55	-58,78	-57,45	-55,65	-53,52	-51,23	-48,86	-46,53	-44,36	—
	DMA	69,06	68,26	67,02	65,25	64,08	63,98	63,41	62,25	60,49	58,20	55,52	52,79	50,05	47,84	46,56	—
	PDMA	91,17	89,61	86,19	81,21	75,03	68,35	60,96	53,14	44,94	36,70	28,49	22,07	17,01	15,64	19,60	—
SPI	DM	-6,85	-6,90	-6,96	-6,92	-6,77	-6,43	-5,86	-5,05	-4,06	-2,90	-1,62	-0,23	1,20	2,67	4,09	—
	DMA	9,01	9,13	9,28	9,36	9,29	9,00	8,50	7,79	6,90	5,86	4,83	4,01	3,76	4,46	5,45	—
	PDMA	36,64	36,76	36,75	35,84	34,42	31,67	28,14	24,19	18,74	12,95	8,35	12,16	16,68	22,54	29,54	—
ΔCS	DM	-52,27	-51,95	-51,97	-52,34	-52,89	-53,39	-53,69	-53,74	-53,39	-52,75	-51,90	-50,99	-50,06	-49,20	-48,46	—
	DMA	60,06	59,14	57,74	55,89	54,79	54,98	54,91	54,46	53,59	52,34	50,68	48,78	46,29	43,38	41,11	—
	PDMA	54,53	52,85	49,44	45,37	40,62	36,69	32,83	28,95	26,20	23,75	20,15	9,91	0,33	-6,90	-9,93	—

Tabela 8.389: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	441,6	442,8	444,1	445,6	447,6	450,3	454,0	458,6	464,1	470,3	477,0	484,0	491,2	498,4	505,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,8	22,6	22,3	22,1	21,9	21,7	21,6	21,3	21,0	20,5	19,9	19,2	18,4	17,5	16,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-72,7	-72,8	-73,1	-73,4	-74,0	-74,6	-75,5	-76,4	-77,4	-78,4	-79,5	-80,7	-81,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,9	-5,2	-5,6	-6,1	-6,6	-7,1	-7,6	-8,2	-8,7	-9,2	-9,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	40,5	40,5	40,5	40,5	40,6	40,8	41,1	41,5	42,0	42,5	43,1	43,8	44,4	45,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-6,4	-6,5	-6,7	-7,0	-7,5	-8,0	-8,5	-9,1	-9,7	-10,3	-10,9	-11,5	-12,1	-12,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,6	144,0	141,4	137,8	134,9	133,6	134,5	137,4	141,8	147,3	153,5	159,9	166,4	172,7	178,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1795,8	-1793,8	-1792,6	-1792,0	-1791,7	-1791,4	-1790,4	-1787,8	-1783,1	-1775,9	-1766,5	-1755,2	-1742,5	-1729,1	-1715,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-169,1	-167,4	-163,7	-158,2	-151,7	-144,5	-136,9	-129,2	-121,5	-113,7	-106,2	-99,0	-92,2	-85,8	-79,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-60,8	-59,2	-55,7	-50,3	-43,6	-36,0	-27,9	-19,6	-11,3	-3,2	4,5	11,9	18,8	25,2	31,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-308,5	-310,6	-316,4	-325,9	-338,4	-352,7	-367,9	-383,1	-398,2	-413,1	-428,2	-443,5	-459,3	-475,5	-492,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,3	109,1	108,7	108,4	108,4	108,9	109,9	111,3	113,1	115,2	117,4	119,7	122,0	124,3	126,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,4	-9,9	-10,5	-11,1	-11,8	-12,5	-13,1	-13,8	-14,4	-14,9	-15,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	179,6	179,8	180,2	180,8	181,6	182,7	184,2	186,1	188,6	191,6	194,9	198,7	202,6	206,7	210,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	232,0	231,2	230,3	229,6	229,6	230,4	232,1	234,7	237,9	241,7	245,9	250,2	254,7	259,1	263,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,1	52,2	52,6	53,2	53,8	54,3	54,7	54,9	55,0	54,8	54,5	54,0	53,3	52,6	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	7,7	7,6	7,6	7,8	8,0	8,4	8,9	9,6	10,3	11,1	11,9	12,7	13,5	14,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,9	54,2	54,7	55,3	56,0	56,9	58,0	59,4	61,3	63,6	66,2	69,2	72,3	75,7	79,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,4	140,0	139,5	139,2	139,4	140,2	141,6	143,6	146,0	148,8	151,9	155,1	158,4	161,7	164,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	0,3	0,3	0,2	0,1	-0,1	-0,5	-1,0	-1,6	-2,3	-3,2	-4,1	-5,1	-6,1	-7,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	5,0	5,0	4,8	4,6	4,3	3,9	3,4	2,8	2,3	1,6	1,0	0,3	-0,2	-0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,6	11,7	11,8	12,0	12,2	12,5	12,9	13,2	13,7	14,1	14,6	15,1	15,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,7	16,6	16,5	16,5	16,6	16,7	16,9	17,3	17,7	18,3	18,9	19,5	20,2	20,9	21,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,4	21,7	22,2	22,9	23,6	24,3	25,2	26,2	27,4	28,7	30,2	31,7	33,2	34,7	36,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,6	109,3	108,8	108,5	108,6	109,2	110,2	111,7	113,6	115,8	118,1	120,5	122,9	125,3	127,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,5	-2,8	-3,0	-3,3	-3,7	-4,0	-4,3	-4,7	-5,0	-5,2	-4,7
Total	DM	-26,33	-26,22	-26,22	-26,23	-26,17	-25,93	-25,43	-24,64	-23,57	-22,24	-20,76	-19,18	-17,58	-15,99	-14,46	—
	DMA	29,35	29,25	29,26	29,27	29,18	28,89	28,30	27,41	26,22	24,82	23,48	22,46	22,12	22,21	23,51	—
	PDMA	48,12	47,79	46,67	44,35	41,40	37,58	32,73	27,27	21,14	15,36	14,96	15,63	18,92	24,14	30,39	—
CPI	DM	-55,35	-55,04	-54,97	-55,04	-55,13	-55,04	-54,61	-53,76	-52,53	-50,90	-49,06	-47,09	-45,09	-43,19	-41,38	—
	DMA	59,10	58,73	58,55	58,51	58,40	58,07	57,35	56,16	54,51	52,45	50,28	48,00	46,35	45,35	46,38	—
	PDMA	72,60	71,38	68,74	64,86	59,78	53,82	47,30	40,26	32,97	25,76	20,41	15,79	15,91	19,77	24,72	—
SPI	DM	-5,04	-5,09	-5,14	-5,11	-4,93	-4,58	-4,04	-3,28	-2,33	-1,22	0,00	1,29	2,59	3,95	5,29	—
	DMA	7,53	7,64	7,78	7,83	7,75	7,49	7,00	6,32	5,47	4,57	3,83	3,73	4,35	5,23	6,74	—
	PDMA	30,17	30,48	30,49	29,31	27,93	25,67	22,04	17,75	12,46	7,74	10,97	15,52	21,14	27,34	34,56	—
ΔCS	DM	-50,31	-49,94	-49,83	-49,92	-50,20	-50,46	-50,57	-50,48	-50,20	-49,68	-49,06	-48,38	-47,68	-47,14	-46,67	—
	DMA	51,57	51,09	50,77	50,68	50,65	50,59	50,35	49,84	49,04	47,88	46,46	44,27	41,99	40,12	39,64	—
	PDMA	42,43	40,90	38,24	35,56	31,85	28,16	25,26	22,52	20,52	18,03	9,44	0,27	-5,23	-7,57	-9,84	—

Tabela 8.390: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{HF}$	462,8	463,8	465,0	466,5	468,3	470,8	474,1	478,2	483,1	488,5	494,4	500,6	506,9	513,3	519,7	500
CO	$^1J_{CO}$	20,8	20,6	20,3	20,1	19,9	19,8	19,6	19,4	19,1	18,7	18,1	17,5	16,7	15,9	15,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{OH}$	-75,1	-75,2	-75,3	-75,4	-75,7	-76,0	-76,5	-77,1	-77,8	-78,7	-79,6	-80,5	-81,5	-82,5	-83,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{HH}$	-5,5	-5,5	-5,6	-5,8	-6,0	-6,3	-6,7	-7,1	-7,5	-8,0	-8,5	-9,0	-9,5	-9,9	-10,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{NH}$	41,7	41,7	41,7	41,7	41,7	41,8	42,0	42,3	42,6	43,1	43,6	44,1	44,7	45,2	45,8	43,8
NH ₃	$^2J_{HH}$	-7,5	-7,5	-7,6	-7,8	-8,1	-8,4	-8,9	-9,4	-9,9	-10,5	-11,0	-11,6	-12,1	-12,6	-13,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{PH}$	153,7	153,2	151,0	148,0	145,6	144,6	145,5	148,0	152,0	156,9	162,4	168,1	173,8	179,4	184,6	188,2
PF ₃	$^1J_{PF}$	-1772,0	-1769,8	-1767,6	-1765,5	-1763,3	-1761,0	-1758,3	-1754,5	-1749,1	-1741,9	-1732,9	-1722,6	-1711,2	-1699,3	-1687,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{BF}$	-151,0	-149,5	-146,3	-141,6	-135,9	-129,6	-123,0	-116,2	-109,4	-102,7	-96,1	-89,8	-83,8	-78,2	-72,9	-84
BF ₃	$^1J_{BF}$	-42,0	-40,7	-37,6	-33,1	-27,3	-20,7	-13,7	-6,4	0,7	7,8	14,6	21,0	27,1	32,7	38,0	15
F ₂ O	$^1J_{OF}$	-344,1	-346,0	-351,0	-359,3	-370,4	-383,3	-397,2	-411,4	-425,8	-440,4	-455,3	-470,6	-486,4	-502,7	-519,5	-300
CH ₄	$^1J_{CH}$	112,9	112,7	112,4	112,2	112,2	112,7	113,6	114,9	116,5	118,4	120,4	122,5	124,6	126,6	128,6	125,3
CH ₄	$^2J_{HH}$	-9,9	-9,8	-9,9	-10,1	-10,4	-10,9	-11,4	-12,0	-12,6	-13,2	-13,7	-14,3	-14,8	-15,3	-15,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CC}$	184,2	184,4	184,8	185,4	186,2	187,3	188,9	190,8	193,3	196,2	199,5	203,1	206,8	210,7	214,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{CH}$	238,2	237,5	236,7	236,1	236,2	237,0	238,6	241,0	244,0	247,5	251,3	255,4	259,4	263,5	267,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{CH}$	52,7	52,9	53,2	53,7	54,1	54,5	54,8	54,9	54,8	54,5	54,1	53,5	52,8	52,1	51,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{HH}$	8,5	8,4	8,4	8,4	8,6	8,9	9,3	9,8	10,5	11,2	11,9	12,7	13,5	14,3	15,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CC}$	57,7	57,9	58,4	59,0	59,7	60,6	61,8	63,3	65,2	67,4	70,0	72,9	76,0	79,2	82,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{CH}$	144,9	144,6	144,2	144,0	144,2	145,0	146,3	148,2	150,4	153,0	155,9	158,9	161,9	164,9	167,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{CH}$	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,6	-0,9	-1,3	-1,8	-2,5	-3,2	-4,1	-5,0	-6,0	-7,0	-8,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{HH}$	4,4	4,4	4,4	4,3	4,0	3,7	3,3	2,9	2,3	1,7	1,1	0,5	0,0	-0,6	-1,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{HHc}$	11,8	11,8	11,9	12,0	12,1	12,3	12,6	12,9	13,2	13,6	14,1	14,5	15,0	15,5	15,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{HHt}$	17,2	17,2	17,1	17,1	17,2	17,4	17,6	18,0	18,4	19,0	19,6	20,2	20,9	21,5	22,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{CC}$	24,1	24,3	24,8	25,5	26,1	26,8	27,6	28,6	29,6	30,9	32,2	33,5	34,9	36,3	37,6	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{CH}$	113,3	113,0	112,7	112,5	112,6	113,1	114,1	115,5	117,2	119,1	121,2	123,3	125,5	127,6	129,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{CH}$	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	-3,0	-3,2	-3,5	-3,7	-4,0	-4,3	-4,6	-4,9	-5,2	-5,4	-4,7
Total	DM	-23,32	-23,22	-23,15	-23,09	-22,95	-22,65	-22,13	-21,37	-20,40	-19,23	-17,93	-16,57	-15,18	-13,83	-12,55	—
	DMA	26,01	25,92	25,87	25,80	25,63	25,28	24,70	23,86	22,88	21,87	21,25	21,39	22,16	23,73	25,37	—
	PDMA	36,84	36,50	35,49	33,57	30,73	27,06	22,65	17,81	13,41	13,40	14,40	18,89	24,12	30,67	37,30	—
CPI	DM	-50,83	-50,53	-50,35	-50,28	-50,19	-49,93	-49,45	-48,65	-47,54	-46,19	-44,65	-43,06	-41,47	-39,96	-38,57	—
	DMA	53,34	52,98	52,70	52,50	52,23	51,78	51,02	49,90	48,54	46,95	45,15	44,54	45,18	46,91	48,72	—
	PDMA	55,29	54,27	51,87	48,43	44,02	38,95	33,12	26,95	21,82	17,62	13,36	16,89	21,09	26,65	32,57	—
SPI	DM	-3,14	-3,19	-3,20	-3,15	-2,98	-2,64	-2,10	-1,37	-0,50	0,53	1,67	2,87	4,10	5,33	6,54	—
	DMA	5,97	6,08	6,19	6,23	6,13	5,84	5,39	4,76	4,07	3,47	3,73	4,41	5,27	6,73	8,25	—
	PDMA	23,31	23,46	23,48	22,67	20,99	18,34	14,97	11,10	7,25	10,31	15,16	20,35	26,34	33,62	40,77	—
Δ CS	DM	-47,69	-47,34	-47,15	-47,14	-47,21	-47,29	-47,35	-47,27	-47,04	-46,72	-46,33	-45,93	-45,57	-45,30	-45,11	—
	DMA	47,37	46,90	46,51	46,27	46,10	45,94	45,62	45,14	44,46	43,49	41,42	40,12	39,91	40,18	40,47	—
	PDMA	31,98	30,80	28,38	25,76	23,04	20,61	18,14	15,85	14,57	7,31	-1,79	-3,46	-5,25	-6,97	-8,20	—

Tabela 8.391: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	484,8	485,6	486,7	488,0	489,7	491,9	494,8	498,4	502,6	507,4	512,4	517,8	523,2	528,8	534,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,6	18,4	18,2	18,0	17,8	17,7	17,6	17,4	17,1	16,7	16,2	15,6	14,9	14,2	13,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-77,9	-78,0	-78,2	-78,4	-78,7	-79,1	-79,7	-80,3	-81,0	-81,8	-82,6	-83,5	-84,4	-85,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,1	-7,4	-7,7	-8,1	-8,5	-9,0	-9,4	-9,8	-10,2	-10,7	-11,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	42,9	42,9	42,9	42,9	43,0	43,2	43,5	43,8	44,2	44,6	45,1	45,6	46,1	46,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,7	-8,7	-8,9	-9,1	-9,5	-9,9	-10,3	-10,8	-11,3	-11,8	-12,3	-12,7	-13,2	-13,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	163,2	162,8	161,0	158,6	156,6	155,8	156,6	158,9	162,3	166,6	171,4	176,3	181,3	186,1	190,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1742,5	-1740,3	-1737,6	-1734,5	-1731,2	-1727,8	-1724,1	-1719,6	-1714,0	-1707,1	-1698,9	-1689,7	-1679,8	-1669,4	-1658,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,5	-131,3	-128,6	-124,6	-119,7	-114,4	-108,7	-102,9	-97,1	-91,4	-85,7	-80,3	-75,2	-70,3	-65,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-23,1	-21,9	-19,4	-15,6	-10,7	-5,1	0,8	6,9	13,1	19,1	25,0	30,5	35,7	40,6	45,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-380,7	-382,3	-386,7	-394,1	-404,1	-415,9	-428,9	-442,4	-456,4	-470,8	-485,6	-501,0	-516,9	-533,3	-550,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,7	116,5	116,3	116,1	116,2	116,7	117,5	118,7	120,1	121,7	123,5	125,3	127,2	129,0	130,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-10,9	-11,0	-11,1	-11,4	-11,8	-12,3	-12,8	-13,3	-13,8	-14,4	-14,9	-15,3	-15,8	-16,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	189,6	189,9	190,6	191,4	192,6	194,1	196,1	198,5	201,3	204,5	207,8	211,4	215,0	218,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,7	244,2	243,5	243,0	243,1	243,9	245,5	247,7	250,4	253,6	257,1	260,7	264,4	268,0	271,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,6	53,9	54,3	54,5	54,6	54,6	54,4	54,0	53,5	52,8	52,1	51,4	50,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,3	9,3	9,4	9,5	9,9	10,3	10,9	11,5	12,2	12,9	13,7	14,4	15,1	15,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,9	62,1	62,5	63,1	63,9	64,8	66,0	67,6	69,5	71,7	74,3	77,0	80,0	83,0	86,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,7	149,4	149,1	149,0	149,3	150,0	151,3	153,0	155,1	157,5	160,1	162,8	165,5	168,2	170,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,3	-1,3	-1,4	-1,6	-1,9	-2,3	-2,9	-3,5	-4,3	-5,1	-6,0	-7,0	-7,9	-8,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	3,8	3,8	3,6	3,4	3,1	2,7	2,2	1,7	1,2	0,6	0,0	-0,5	-1,0	-1,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,2	12,2	12,3	12,4	12,5	12,7	13,0	13,3	13,7	14,1	14,5	15,0	15,4	15,9	16,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,9	17,8	17,8	17,8	17,9	18,1	18,4	18,8	19,3	19,8	20,4	21,0	21,6	22,2	22,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,0	27,2	27,6	28,2	28,8	29,4	30,2	31,0	32,0	33,1	34,2	35,4	36,6	37,8	39,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,3	117,0	116,7	116,6	116,7	117,2	118,1	119,3	120,8	122,5	124,4	126,3	128,2	130,0	131,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-3,2	-3,2	-3,3	-3,5	-3,7	-3,9	-4,2	-4,4	-4,7	-4,9	-5,2	-5,4	-5,7	-4,7
Total	DM	-20,00	-19,90	-19,81	-19,70	-19,52	-19,22	-18,73	-18,05	-17,20	-16,21	-15,11	-13,98	-12,84	-11,73	-10,70	—
	DMA	22,35	22,26	22,19	22,08	21,88	21,55	21,08	20,47	20,35	20,82	21,55	22,78	24,35	25,91	27,63	—
	PDMA	24,90	24,53	23,71	21,92	19,41	16,31	13,18	11,51	12,07	15,50	20,14	26,07	32,28	38,33	44,55	—
CPI	DM	-45,78	-45,49	-45,26	-45,11	-44,93	-44,66	-44,21	-43,53	-42,65	-41,59	-40,41	-39,21	-38,05	-36,95	-35,96	—
	DMA	46,93	46,60	46,32	46,04	45,71	45,26	44,70	43,87	43,30	43,81	44,63	46,17	47,95	49,75	51,95	—
	PDMA	37,36	36,43	34,68	31,80	28,07	23,83	20,33	16,85	13,38	15,34	19,64	24,96	30,41	35,90	41,08	—
SPI	DM	-1,09	-1,13	-1,15	-1,07	-0,89	-0,56	-0,05	0,63	1,46	2,41	3,45	4,53	5,65	6,76	7,83	—
	DMA	4,33	4,41	4,49	4,51	4,40	4,16	3,75	3,31	3,53	3,97	4,63	5,62	7,03	8,43	9,79	—
	PDMA	15,76	15,81	15,67	14,67	13,05	10,80	7,94	7,59	11,11	15,62	20,50	26,88	33,66	40,11	47,09	—
Δ CS	DM	-44,70	-44,36	-44,12	-44,04	-44,03	-44,10	-44,16	-44,16	-44,11	-44,00	-43,86	-43,74	-43,69	-43,71	-43,80	—
	DMA	42,60	42,19	41,82	41,52	41,31	41,10	40,95	40,56	39,77	39,84	39,99	40,55	40,92	41,32	42,15	—
	PDMA	21,60	20,62	19,02	17,13	15,02	13,02	12,39	9,25	2,27	-0,28	-0,86	-1,92	-3,24	-4,20	-6,00	—

Tabela 8.392: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 40\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	507,5	508,2	509,1	510,2	511,7	513,6	516,2	519,2	522,8	526,8	531,0	535,5	540,1	544,8	549,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,0	15,9	15,7	15,6	15,4	15,3	15,1	14,9	14,6	14,1	13,6	13,0	12,4	11,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,8	-80,8	-80,9	-81,0	-81,2	-81,5	-81,8	-82,3	-82,9	-83,5	-84,1	-84,9	-85,6	-86,3	-87,1	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,0	-8,1	-8,2	-8,4	-8,6	-8,9	-9,2	-9,6	-9,9	-10,3	-10,7	-11,0	-11,4	-11,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	44,2	44,2	44,2	44,2	44,3	44,5	44,7	45,0	45,3	45,7	46,1	46,5	47,0	47,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,1	-10,3	-10,6	-10,9	-11,3	-11,7	-12,2	-12,6	-13,0	-13,4	-13,8	-14,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	173,1	172,7	171,3	169,3	167,8	167,2	167,9	169,8	172,8	176,4	180,4	184,7	188,8	192,9	196,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1708,1	-1706,1	-1703,2	-1699,8	-1696,0	-1692,1	-1688,0	-1683,4	-1678,1	-1671,7	-1664,5	-1656,6	-1648,1	-1639,3	-1630,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-113,8	-112,8	-110,6	-107,4	-103,4	-98,9	-94,3	-89,4	-84,6	-79,8	-75,1	-70,6	-66,3	-62,3	-58,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-4,0	-3,0	-1,0	2,1	6,1	10,6	15,6	20,7	25,8	30,8	35,7	40,3	44,6	48,7	52,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-419,9	-421,4	-425,3	-432,1	-441,3	-452,3	-464,7	-477,8	-491,6	-506,0	-520,9	-536,4	-552,4	-568,9	-585,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	120,5	120,3	120,2	120,4	120,8	121,5	122,5	123,8	125,2	126,7	128,3	129,8	131,3	132,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,0	-12,1	-12,2	-12,5	-12,8	-13,2	-13,6	-14,1	-14,5	-15,0	-15,4	-15,8	-16,2	-16,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	195,5	195,9	196,5	197,4	198,6	200,1	202,1	204,4	207,0	210,0	213,1	216,3	219,5	222,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,8	251,3	250,7	250,4	250,6	251,3	252,8	254,8	257,2	260,1	263,1	266,3	269,5	272,7	275,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	53,4	53,6	53,9	54,1	54,2	54,2	54,0	53,7	53,2	52,7	52,0	51,3	50,6	49,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,4	10,4	10,5	10,7	11,0	11,5	12,0	12,6	13,3	14,0	14,7	15,4	16,0	16,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,7	66,9	67,3	67,9	68,7	69,6	70,9	72,5	74,4	76,5	79,0	81,6	84,3	87,1	89,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,9	154,7	154,4	154,4	154,7	155,4	156,6	158,1	160,0	162,2	164,5	166,9	169,3	171,7	174,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,4	-2,4	-2,5	-2,8	-3,1	-3,5	-4,1	-4,8	-5,5	-6,3	-7,2	-8,1	-9,0	-9,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	3,1	3,0	2,9	2,7	2,4	2,0	1,5	1,1	0,5	0,0	-0,5	-1,0	-1,5	-2,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,7	12,7	12,8	12,9	13,0	13,3	13,5	13,8	14,2	14,6	15,0	15,4	15,9	16,3	16,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,7	18,6	18,6	18,7	18,8	19,0	19,3	19,7	20,2	20,7	21,2	21,8	22,4	23,0	23,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	30,2	30,6	31,1	31,6	32,2	32,9	33,6	34,4	35,4	36,4	37,4	38,5	39,5	40,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	121,2	121,0	120,9	121,0	121,5	122,2	123,3	124,6	126,1	127,7	129,3	130,9	132,4	133,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-3,7	-3,8	-3,9	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,8	-5,0	-5,3	-5,5	-5,7	-5,9	-4,7
Total	DM	-16,44	-16,37	-16,27	-16,17	-15,99	-15,71	-15,29	-14,73	-14,04	-13,24	-12,37	-11,48	-10,60	-9,75	-8,96	—
	DMA	19,53	19,50	19,47	19,50	19,58	19,67	19,92	20,61	21,34	22,55	23,99	25,45	26,95	28,71	30,45	—
	PDMA	14,11	13,93	13,28	12,56	11,80	10,86	11,42	15,23	19,22	24,33	29,89	35,62	41,23	46,91	52,44	—
CPI	DM	-40,40	-40,16	-39,95	-39,82	-39,65	-39,44	-39,09	-38,62	-38,01	-37,28	-36,50	-35,72	-34,97	-34,28	-33,71	—
	DMA	41,84	41,73	41,67	41,75	41,85	42,00	42,27	43,31	44,34	46,06	47,86	49,63	51,46	53,94	56,36	—
	PDMA	22,30	21,76	20,68	19,20	17,21	15,07	13,42	17,27	21,26	26,12	31,19	36,09	40,78	45,82	50,48	—
SPI	DM	1,13	1,09	1,09	1,18	1,36	1,69	2,17	2,78	3,53	4,39	5,33	6,29	7,27	8,24	9,19	—
	DMA	3,18	3,19	3,18	3,19	3,25	3,30	3,53	3,97	4,48	5,30	6,49	7,73	8,98	10,21	11,45	—
	PDMA	8,10	8,18	7,84	7,70	7,83	7,78	9,95	13,73	17,72	23,01	28,93	35,28	41,56	47,70	53,88	—
ΔCS	DM	-41,53	-41,25	-41,03	-41,00	-41,01	-41,12	-41,26	-41,40	-41,54	-41,68	-41,83	-42,00	-42,25	-42,52	-42,90	—
	DMA	38,66	38,53	38,49	38,55	38,59	38,70	38,75	39,34	39,86	40,76	41,38	41,90	42,48	43,72	44,91	—
	PDMA	14,19	13,57	12,84	11,50	9,38	7,29	3,46	3,54	3,54	3,11	2,26	0,82	-0,78	-1,88	-3,40	—

Tabela 8.393: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	531,0	531,6	532,3	533,2	534,5	536,1	538,2	540,7	543,6	546,8	550,3	553,9	557,6	561,4	565,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	13,5	13,4	13,2	13,1	13,0	12,9	12,8	12,6	12,3	11,9	11,5	11,0	10,5	9,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,8	-83,8	-83,9	-84,0	-84,1	-84,4	-84,7	-85,1	-85,5	-86,0	-86,6	-87,2	-87,8	-88,4	-89,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-9,4	-9,4	-9,5	-9,7	-9,9	-10,1	-10,4	-10,7	-11,0	-11,3	-11,6	-11,9	-12,2	-12,5	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,5	45,5	45,6	45,6	45,7	45,8	46,0	46,3	46,5	46,8	47,2	47,5	47,9	48,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,1	-11,2	-11,3	-11,5	-11,7	-12,0	-12,3	-12,7	-13,0	-13,4	-13,7	-14,1	-14,4	-14,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,2	183,0	181,9	180,4	179,2	178,8	179,4	181,0	183,4	186,4	189,6	193,0	196,4	199,7	202,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1669,7	-1667,9	-1665,2	-1661,9	-1658,2	-1654,3	-1650,3	-1646,0	-1641,2	-1635,8	-1629,7	-1623,2	-1616,3	-1609,2	-1602,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,0	-94,2	-92,5	-89,9	-86,8	-83,3	-79,5	-75,7	-71,8	-68,0	-64,3	-60,7	-57,2	-54,0	-51,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,2	16,0	17,6	20,0	23,2	26,8	30,7	34,7	38,8	42,8	46,7	50,4	53,9	57,1	60,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,1	-466,4	-470,0	-476,3	-484,9	-495,5	-507,4	-520,3	-534,1	-548,5	-563,5	-579,0	-595,1	-611,6	-628,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,8	124,6	124,6	124,7	125,1	125,7	126,5	127,6	128,7	130,0	131,3	132,5	133,8	135,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,4	-13,6	-13,8	-14,2	-14,5	-14,9	-15,3	-15,6	-16,0	-16,3	-16,6	-16,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	202,5	202,8	203,4	204,3	205,5	207,0	208,8	211,0	213,4	216,1	218,8	221,6	224,4	227,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,3	259,0	258,5	258,3	258,5	259,3	260,5	262,3	264,5	266,9	269,5	272,2	274,9	277,6	280,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	53,1	53,3	53,4	53,5	53,5	53,4	53,1	52,7	52,2	51,6	51,0	50,3	49,6	49,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,7	11,7	11,9	12,1	12,4	12,9	13,4	13,9	14,6	15,2	15,8	16,4	17,0	17,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	72,4	72,8	73,4	74,2	75,2	76,5	78,1	79,9	82,0	84,2	86,6	89,1	91,6	94,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,5	160,3	160,2	160,2	160,5	161,2	162,2	163,6	165,3	167,2	169,2	171,2	173,3	175,3	177,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-4,0	-4,2	-4,6	-5,0	-5,6	-6,3	-7,0	-7,8	-8,6	-9,4	-10,2	-11,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	2,2	2,2	2,0	1,8	1,5	1,2	0,7	0,3	-0,1	-0,6	-1,1	-1,6	-2,0	-2,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,3	13,3	13,4	13,5	13,7	13,9	14,2	14,5	14,8	15,2	15,6	16,0	16,4	16,8	17,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,6	19,6	19,6	19,7	19,8	20,1	20,4	20,8	21,2	21,7	22,2	22,7	23,2	23,7	24,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,5	33,8	34,2	34,6	35,1	35,7	36,3	37,0	37,8	38,6	39,5	40,3	41,2	42,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	125,6	125,4	125,4	125,5	125,9	126,6	127,4	128,5	129,7	131,0	132,4	133,7	134,9	136,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,5	-4,7	-4,9	-5,0	-5,2	-5,4	-5,6	-5,8	-5,9	-6,1	-4,7
Total	DM	-12,82	-12,75	-12,67	-12,58	-12,45	-12,23	-11,91	-11,50	-10,99	-10,41	-9,80	-9,16	-8,55	-7,96	-7,44	—
	DMA	19,70	19,70	19,81	20,10	20,53	21,18	22,20	23,35	24,59	25,87	27,30	28,90	30,49	32,10	33,69	—
	PDMA	12,21	12,38	12,88	14,49	16,38	19,12	22,41	26,80	31,30	35,99	41,06	46,19	51,28	56,08	61,07	—
CPI	DM	-35,13	-34,92	-34,76	-34,67	-34,59	-34,51	-34,35	-34,14	-33,84	-33,49	-33,13	-32,75	-32,45	-32,19	-32,03	—
	DMA	41,11	41,15	41,42	41,95	42,68	43,69	45,34	47,03	48,76	50,45	52,42	54,72	57,03	59,30	61,55	—
	PDMA	14,81	15,37	16,47	18,27	20,69	23,54	27,30	31,27	35,47	39,55	43,88	48,20	52,53	56,59	60,59	—
SPI	DM	3,54	3,51	3,53	3,61	3,79	4,11	4,55	5,09	5,76	6,51	7,31	8,14	8,97	9,81	10,59	—
	DMA	4,01	3,96	3,97	4,08	4,29	4,67	5,23	5,99	6,87	7,85	8,89	9,97	11,03	12,15	13,26	—
	PDMA	10,30	10,18	10,24	11,72	13,22	15,88	18,82	23,53	28,23	33,37	38,99	44,71	50,35	55,71	61,43	—
ΔCS	DM	-38,67	-38,42	-38,29	-38,29	-38,38	-38,62	-38,91	-39,23	-39,60	-40,00	-40,44	-40,89	-41,41	-42,00	-42,62	—
	DMA	37,10	37,19	37,45	37,87	38,40	39,02	40,10	41,04	41,90	42,61	43,53	44,75	45,99	47,15	48,29	—
	PDMA	4,51	5,18	6,23	6,54	7,48	7,66	8,49	7,74	7,24	6,17	4,88	3,48	2,18	0,87	-0,84	—

Tabela 8.394: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,1	422,2	423,5	424,9	426,7	429,3	432,7	437,2	442,5	448,6	455,1	462,0	469,1	476,2	483,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	24,5	24,2	24,0	23,8	23,7	23,5	23,3	23,0	22,6	22,0	21,4	20,6	19,8	18,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,0	-70,1	-70,2	-70,3	-70,5	-70,8	-71,3	-72,0	-72,8	-73,7	-74,6	-75,7	-76,7	-77,8	-78,9	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,8	-4,1	-4,5	-4,9	-5,4	-5,9	-6,4	-6,9	-7,4	-7,9	-8,4	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	39,4	39,4	39,3	39,3	39,4	39,6	39,9	40,3	40,8	41,3	41,8	42,4	43,1	43,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,4	-5,5	-5,7	-6,0	-6,4	-6,9	-7,4	-8,0	-8,5	-9,1	-9,7	-10,2	-10,8	-11,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,8	135,1	132,4	128,7	125,5	124,1	124,8	127,5	131,8	137,1	143,1	149,5	155,8	162,0	167,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,2	-1811,9	-1812,1	-1813,8	-1816,3	-1819,1	-1821,3	-1821,8	-1819,8	-1815,1	-1807,8	-1798,3	-1787,1	-1774,9	-1762,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,0	-185,2	-181,5	-176,0	-169,4	-162,2	-154,7	-147,0	-139,2	-131,5	-124,0	-116,8	-110,0	-103,5	-97,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,5	-77,8	-74,2	-68,7	-61,9	-54,2	-46,0	-37,6	-29,2	-21,1	-13,3	-5,9	1,0	7,4	13,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,3	-274,7	-280,6	-290,3	-303,0	-317,4	-332,3	-346,9	-361,0	-374,5	-387,6	-400,7	-413,7	-426,8	-440,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,7	105,3	105,0	104,9	105,3	106,2	107,5	109,2	111,2	113,3	115,6	117,8	120,0	122,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,8	-7,9	-8,1	-8,4	-8,9	-9,5	-10,1	-10,7	-11,4	-12,0	-12,6	-13,2	-13,7	-14,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	175,7	176,1	176,6	177,3	178,2	179,4	181,0	183,1	185,7	188,5	191,7	195,0	198,5	202,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,2	225,4	224,5	223,7	223,6	224,4	226,0	228,3	231,4	234,9	238,7	242,8	246,9	251,0	254,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	51,4	51,8	52,4	53,0	53,6	54,1	54,5	54,7	54,6	54,6	54,3	53,9	53,5	53,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	7,1	7,0	7,0	7,1	7,3	7,6	8,0	8,5	9,1	9,7	10,4	11,0	11,7	12,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,5	50,7	51,2	51,8	52,4	53,1	54,0	55,3	56,8	58,7	60,8	63,3	65,8	68,5	71,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,1	135,7	135,2	134,9	135,0	135,7	137,0	138,8	141,1	143,7	146,5	149,5	152,5	155,4	158,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,9	0,9	0,9	0,8	0,6	0,3	0,0	-0,6	-1,1	-1,8	-2,5	-3,3	-4,1	-4,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,4	5,2	4,9	4,5	4,1	3,6	3,1	2,6	2,1	1,6	1,1	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,2	11,3	11,3	11,4	11,5	11,7	11,8	12,1	12,3	12,6	13,0	13,3	13,7	14,0	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,2	16,1	16,1	16,0	16,0	16,1	16,3	16,6	16,9	17,3	17,8	18,3	18,8	19,4	19,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,8	19,1	19,6	20,3	20,9	21,6	22,4	23,4	24,5	25,7	27,1	28,5	30,0	31,4	32,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,7	105,3	104,9	104,9	105,4	106,4	107,8	109,6	111,7	113,9	116,2	118,5	120,8	122,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,7	-1,7	-1,8	-1,9	-2,0	-2,3	-2,5	-2,8	-3,1	-3,4	-3,7	-4,0	-4,3	-4,6	-4,7
Total	DM	-28,97	-28,90	-28,95	-29,08	-29,17	-29,07	-28,74	-28,07	-27,12	-25,90	-24,50	-22,97	-21,39	-19,81	-18,28	—
	DMA	34,43	34,19	33,80	33,18	32,50	32,34	31,91	31,17	30,08	28,75	27,24	25,66	24,18	23,10	22,42	—
	PDMA	59,74	59,17	57,90	55,67	52,48	48,69	44,00	39,18	33,29	27,48	21,38	16,81	16,09	16,43	17,09	—
CPI	DM	-59,15	-58,92	-58,99	-59,30	-59,68	-59,87	-59,75	-59,15	-58,06	-56,55	-54,75	-52,75	-50,65	-48,55	-46,56	—
	DMA	69,11	68,39	67,28	65,72	64,15	64,15	63,74	62,80	61,32	59,39	57,11	54,62	52,12	49,68	47,33	—
	PDMA	91,24	89,83	86,78	82,30	76,61	70,78	64,19	57,27	49,92	42,66	35,34	28,41	22,81	18,59	14,64	—
SPI	DM	-6,83	-6,89	-6,93	-6,91	-6,79	-6,47	-5,99	-5,29	-4,43	-3,42	-2,32	-1,13	0,06	1,27	2,45	—
	DMA	8,99	9,11	9,25	9,33	9,28	9,02	8,57	7,97	7,18	6,29	5,33	4,42	3,69	3,61	4,15	—
	PDMA	36,63	36,69	36,72	36,14	34,79	32,49	29,20	25,91	21,10	16,34	11,15	8,29	11,17	14,84	18,89	—
Δ CS	DM	-52,31	-52,03	-52,06	-52,39	-52,90	-53,40	-53,76	-53,86	-53,63	-53,13	-52,43	-51,62	-50,71	-49,83	-49,02	—
	DMA	60,12	59,28	58,04	56,39	54,87	55,13	55,17	54,83	54,14	53,10	51,78	50,20	48,43	46,08	43,18	—
	PDMA	54,61	53,14	50,06	46,17	41,82	38,29	34,98	31,36	28,82	26,32	24,19	20,12	11,63	3,76	-4,25	—

Tabela 8.395: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	441,6	442,6	443,7	445,1	446,8	449,1	452,3	456,2	461,0	466,3	472,0	478,1	484,3	490,6	496,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,8	22,6	22,4	22,2	22,0	21,9	21,7	21,5	21,3	20,9	20,3	19,7	19,0	18,3	17,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,6	-72,7	-72,8	-73,0	-73,3	-73,8	-74,3	-75,0	-75,8	-76,7	-77,6	-78,6	-79,6	-80,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,8	-5,1	-5,5	-5,9	-6,3	-6,8	-7,2	-7,7	-8,1	-8,6	-9,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	40,5	40,5	40,5	40,5	40,6	40,8	41,0	41,4	41,8	42,3	42,8	43,3	43,9	44,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-6,4	-6,5	-6,7	-7,0	-7,3	-7,8	-8,2	-8,8	-9,3	-9,8	-10,3	-10,8	-11,3	-11,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,6	144,0	141,7	138,6	136,0	134,8	135,5	138,0	141,8	146,5	151,9	157,5	163,1	168,5	173,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1796,0	-1794,3	-1793,2	-1792,8	-1792,8	-1792,9	-1792,7	-1791,3	-1788,1	-1782,8	-1775,6	-1766,7	-1756,6	-1745,6	-1734,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-169,2	-167,6	-164,4	-159,6	-153,9	-147,6	-141,0	-134,2	-127,4	-120,7	-114,1	-107,8	-101,8	-96,1	-90,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-60,9	-59,4	-56,3	-51,7	-45,8	-39,1	-32,0	-24,7	-17,4	-10,3	-3,4	2,9	9,0	14,7	19,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-308,4	-310,3	-315,4	-323,7	-334,6	-347,1	-360,3	-373,4	-386,3	-398,9	-411,4	-423,9	-436,4	-449,1	-461,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,3	109,1	108,8	108,5	108,5	109,0	109,8	111,0	112,5	114,3	116,2	118,2	120,2	122,2	124,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,4	-9,8	-10,3	-10,9	-11,4	-12,0	-12,6	-13,1	-13,6	-14,1	-14,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	179,6	179,8	180,1	180,7	181,4	182,3	183,5	185,2	187,2	189,7	192,4	195,4	198,6	201,8	205,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	232,0	231,4	230,5	229,9	229,9	230,6	232,1	234,3	237,1	240,3	243,8	247,5	251,3	255,0	258,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,1	52,2	52,5	53,0	53,6	54,1	54,4	54,6	54,7	54,6	54,4	54,1	53,7	53,2	52,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	7,7	7,6	7,6	7,7	8,0	8,3	8,7	9,2	9,8	10,4	11,1	11,7	12,3	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,9	54,1	54,6	55,1	55,7	56,5	57,4	58,6	60,2	62,0	64,1	66,4	68,9	71,4	74,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,4	140,0	139,6	139,4	139,6	140,2	141,4	143,1	145,2	147,6	150,2	152,9	155,6	158,3	160,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	0,3	0,3	0,2	0,1	0,0	-0,3	-0,8	-1,3	-1,9	-2,5	-3,2	-4,0	-4,7	-5,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	5,0	5,0	4,9	4,7	4,4	4,0	3,6	3,2	2,7	2,2	1,7	1,2	0,8	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,6	11,6	11,8	11,9	12,1	12,4	12,6	12,9	13,3	13,6	13,9	14,3	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,7	16,6	16,6	16,5	16,6	16,7	16,9	17,2	17,5	17,9	18,4	18,9	19,4	19,9	20,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,4	21,6	22,1	22,7	23,3	24,0	24,7	25,6	26,6	27,7	29,0	30,3	31,6	32,9	34,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,6	109,3	108,9	108,7	108,7	109,2	110,1	111,4	113,0	114,9	116,9	118,9	121,0	123,0	125,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,5	-2,7	-2,9	-3,2	-3,5	-3,7	-4,0	-4,3	-4,6	-4,8	-4,7
Total	DM	-26,34	-26,25	-26,25	-26,27	-26,22	-26,02	-25,63	-24,97	-24,07	-22,97	-21,70	-20,36	-18,98	-17,60	-16,27	—
	DMA	29,36	29,28	29,28	29,30	29,23	28,99	28,51	27,77	26,77	25,57	24,27	23,05	22,22	21,65	21,58	—
	PDMA	48,15	47,86	46,84	44,95	42,31	38,97	34,73	29,97	24,86	19,42	15,19	14,93	15,40	16,04	19,68	—
CPI	DM	-55,38	-55,11	-55,05	-55,13	-55,23	-55,17	-54,88	-54,20	-53,15	-51,82	-50,24	-48,54	-46,77	-45,02	-43,35	—
	DMA	59,13	58,80	58,65	58,62	58,55	58,32	57,74	56,78	55,39	53,65	51,67	49,68	47,61	45,56	44,55	—
	PDMA	72,67	71,52	69,20	65,83	61,39	56,28	50,39	44,34	37,94	31,44	25,39	21,14	17,09	13,47	16,02	—
SPI	DM	-5,04	-5,09	-5,13	-5,11	-4,95	-4,63	-4,18	-3,53	-2,73	-1,81	-0,77	0,31	1,41	2,51	3,59	—
	DMA	7,53	7,64	7,74	7,80	7,73	7,49	7,07	6,49	5,77	4,97	4,17	3,52	3,59	4,11	4,73	—
	PDMA	30,17	30,51	30,45	29,65	28,31	26,27	23,25	19,43	15,27	10,61	7,71	10,38	14,17	17,92	22,37	—
Δ CS	DM	-50,34	-50,02	-49,93	-50,02	-50,28	-50,54	-50,70	-50,67	-50,42	-50,01	-49,46	-48,84	-48,18	-47,52	-46,93	—
	DMA	51,59	51,16	50,91	50,82	50,82	50,83	50,66	50,29	49,62	48,69	47,50	46,16	44,02	41,46	39,81	—
	PDMA	42,50	41,02	38,74	36,18	33,08	30,00	27,13	24,91	22,67	20,83	17,68	10,76	2,92	-4,45	-6,34	—

Tabela 8.396: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	462,8	463,6	464,7	465,9	467,5	469,6	472,3	475,8	479,9	484,5	489,5	494,7	500,0	505,5	510,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,8	20,6	20,4	20,2	20,1	19,9	19,8	19,6	19,4	19,0	18,5	18,0	17,4	16,7	15,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,1	-75,2	-75,3	-75,4	-75,6	-75,9	-76,3	-76,8	-77,4	-78,1	-78,9	-79,7	-80,5	-81,4	-82,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,5	-5,6	-5,7	-5,9	-6,2	-6,5	-6,9	-7,2	-7,6	-8,1	-8,5	-8,9	-9,3	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	41,7	41,7	41,7	41,7	41,8	41,9	42,2	42,5	42,9	43,3	43,7	44,2	44,7	45,2	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,5	-7,6	-7,7	-8,0	-8,3	-8,7	-9,1	-9,6	-10,1	-10,5	-11,0	-11,4	-11,8	-12,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,7	153,2	151,4	148,8	146,7	145,8	146,4	148,6	151,9	156,1	160,7	165,6	170,5	175,2	179,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1772,1	-1770,3	-1768,4	-1766,7	-1765,0	-1763,4	-1761,5	-1758,9	-1755,0	-1749,7	-1742,8	-1734,8	-1725,8	-1716,2	-1706,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-151,0	-149,7	-147,0	-142,9	-138,0	-132,6	-127,0	-121,2	-115,3	-109,5	-103,9	-98,5	-93,3	-88,5	-84,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,1	-40,9	-38,3	-34,4	-29,4	-23,7	-17,7	-11,5	-5,2	0,7	6,6	12,2	17,4	22,2	26,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-344,1	-345,7	-350,0	-357,1	-366,6	-377,6	-389,3	-401,2	-413,2	-425,0	-436,9	-448,9	-460,9	-473,1	-485,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,9	112,7	112,5	112,3	112,3	112,7	113,5	114,6	115,9	117,5	119,2	121,0	122,7	124,4	126,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,1	-10,3	-10,7	-11,2	-11,7	-12,2	-12,7	-13,2	-13,6	-14,1	-14,5	-14,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,2	184,3	184,7	185,2	185,9	186,9	188,1	189,8	191,8	194,1	196,7	199,5	202,4	205,4	208,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	238,2	237,6	236,9	236,5	236,5	237,2	238,5	240,5	243,1	246,0	249,2	252,5	255,8	259,1	262,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,7	52,9	53,1	53,5	53,9	54,3	54,5	54,6	54,6	54,4	54,1	53,8	53,3	52,8	52,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,5	8,4	8,4	8,4	8,6	8,8	9,1	9,6	10,1	10,6	11,2	11,8	12,4	13,0	13,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,7	57,9	58,3	58,8	59,4	60,2	61,1	62,3	63,9	65,6	67,6	69,8	72,1	74,5	76,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	144,9	144,6	144,3	144,1	144,3	145,0	146,1	147,6	149,5	151,7	154,0	156,4	158,9	161,3	163,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,6	-0,8	-1,2	-1,6	-2,1	-2,7	-3,3	-4,0	-4,7	-5,4	-6,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	4,4	4,4	4,3	4,1	3,8	3,5	3,1	2,7	2,2	1,8	1,3	0,9	0,4	0,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,8	11,8	11,9	12,0	12,1	12,3	12,5	12,7	13,0	13,3	13,6	13,9	14,2	14,6	14,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,2	17,2	17,1	17,1	17,2	17,3	17,6	17,8	18,2	18,6	19,0	19,5	20,0	20,4	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,1	24,3	24,7	25,3	25,8	26,4	27,1	27,9	28,8	29,8	30,9	32,1	33,2	34,3	35,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	113,3	113,1	112,8	112,6	112,7	113,1	113,9	115,1	116,5	118,2	119,9	121,8	123,6	125,3	127,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	-2,9	-3,1	-3,3	-3,6	-3,8	-4,1	-4,3	-4,6	-4,8	-5,0	-4,7
Total	DM	-23,32	-23,25	-23,18	-23,13	-23,02	-22,77	-22,37	-21,75	-20,92	-19,96	-18,88	-17,72	-16,55	-15,39	-14,28	—
	DMA	26,02	25,94	25,89	25,84	25,71	25,42	24,95	24,25	23,38	22,45	21,60	21,06	20,88	21,42	22,24	—
	PDMA	36,86	36,52	35,71	34,04	31,66	28,57	24,77	20,47	16,20	13,61	13,45	14,24	16,28	20,24	24,65	—
CPI	DM	-50,85	-50,60	-50,45	-50,38	-50,31	-50,14	-49,77	-49,12	-48,19	-47,06	-45,76	-44,37	-42,93	-41,54	-40,20	—
	DMA	53,35	53,05	52,81	52,65	52,44	52,06	51,48	50,55	49,34	47,99	46,45	44,83	43,64	44,06	44,58	—
	PDMA	55,35	54,41	52,38	49,54	45,72	41,19	36,34	31,02	25,58	21,75	18,12	14,65	14,33	17,58	21,13	—
SPI	DM	-3,14	-3,19	-3,19	-3,15	-3,00	-2,70	-2,27	-1,67	-0,93	-0,09	0,83	1,83	2,80	3,78	4,73	—
	DMA	5,97	6,05	6,15	6,18	6,11	5,89	5,49	4,95	4,35	3,71	3,38	3,63	4,20	4,82	5,85	—
	PDMA	23,31	23,40	23,47	22,67	21,36	19,33	16,28	12,73	9,32	7,64	10,01	13,94	17,71	22,19	27,23	—
Δ CS	DM	-47,71	-47,41	-47,25	-47,23	-47,31	-47,44	-47,50	-47,44	-47,26	-46,98	-46,60	-46,20	-45,73	-45,32	-44,93	—
	DMA	47,39	47,00	46,66	46,47	46,33	46,18	46,00	45,60	44,98	44,28	43,07	41,20	39,44	39,24	38,73	—
	PDMA	32,04	31,01	28,91	26,88	24,37	21,86	20,05	18,29	16,26	14,11	8,11	0,70	-3,38	-4,62	-6,09	—

Tabela 8.397: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	484,7	485,4	486,3	487,4	488,8	490,6	493,0	496,0	499,4	503,3	507,5	511,8	516,3	520,9	525,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,6	18,4	18,3	18,1	18,0	17,9	17,7	17,6	17,3	17,0	16,6	16,1	15,6	15,0	14,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-77,9	-78,0	-78,1	-78,3	-78,5	-78,9	-79,3	-79,9	-80,5	-81,1	-81,8	-82,5	-83,2	-84,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,1	-7,3	-7,6	-7,9	-8,2	-8,6	-8,9	-9,3	-9,6	-10,0	-10,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	42,9	42,9	42,9	42,9	43,0	43,2	43,4	43,6	44,0	44,3	44,7	45,1	45,5	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,7	-8,7	-8,9	-9,1	-9,3	-9,7	-10,1	-10,4	-10,9	-11,3	-11,6	-12,0	-12,4	-12,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	163,2	162,8	161,3	159,3	157,6	156,9	157,5	159,4	162,2	165,7	169,7	173,8	177,9	181,8	185,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1742,7	-1740,8	-1738,6	-1736,1	-1733,5	-1730,9	-1728,2	-1724,9	-1720,8	-1715,7	-1709,5	-1702,4	-1694,7	-1686,6	-1678,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,6	-131,5	-129,3	-125,9	-121,9	-117,4	-112,7	-107,9	-103,0	-98,2	-93,5	-89,0	-84,7	-80,6	-76,8	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-23,1	-22,2	-20,1	-16,8	-12,8	-8,1	-3,1	1,9	7,1	12,2	17,0	21,7	26,0	30,1	33,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-380,6	-382,0	-385,6	-391,8	-400,1	-409,8	-420,4	-431,3	-442,4	-453,7	-465,0	-476,4	-488,0	-499,7	-511,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,7	116,5	116,3	116,2	116,3	116,7	117,3	118,3	119,5	120,8	122,3	123,8	125,3	126,7	128,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,0	-10,9	-11,0	-11,1	-11,3	-11,7	-12,1	-12,5	-12,9	-13,3	-13,8	-14,2	-14,6	-14,9	-15,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	189,5	189,9	190,4	191,1	192,0	193,3	194,9	196,8	198,9	201,3	203,9	206,5	209,2	211,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,8	244,3	243,7	243,4	243,4	244,1	245,3	247,1	249,4	252,0	254,7	257,6	260,5	263,4	266,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,5	53,8	54,1	54,3	54,4	54,4	54,3	54,0	53,7	53,3	52,8	52,3	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,3	9,3	9,3	9,4	9,5	9,8	10,1	10,5	11,0	11,6	12,1	12,7	13,2	13,7	14,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,9	62,1	62,4	62,9	63,5	64,3	65,3	66,5	67,9	69,6	71,5	73,5	75,6	77,8	79,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,8	149,5	149,3	149,2	149,4	150,0	151,0	152,4	154,1	156,0	158,0	160,2	162,3	164,4	166,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,3	-1,3	-1,4	-1,5	-1,8	-2,1	-2,6	-3,1	-3,6	-4,2	-4,9	-5,5	-6,2	-6,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	3,8	3,8	3,7	3,5	3,2	2,9	2,5	2,1	1,7	1,3	0,9	0,5	0,1	-0,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,2	12,2	12,3	12,4	12,5	12,7	12,9	13,1	13,4	13,7	14,0	14,3	14,6	14,9	15,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,9	17,8	17,8	17,8	17,9	18,1	18,3	18,6	18,9	19,3	19,7	20,2	20,6	21,0	21,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,0	27,2	27,5	28,0	28,5	29,0	29,6	30,3	31,1	32,0	32,9	33,9	34,9	35,9	36,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,3	117,1	116,8	116,7	116,8	117,2	117,9	118,9	120,2	121,6	123,1	124,6	126,2	127,7	129,1	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-3,2	-3,2	-3,3	-3,4	-3,6	-3,8	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,8	-5,0	-5,2	-4,7
Total	DM	-20,00	-19,93	-19,85	-19,75	-19,62	-19,36	-18,99	-18,44	-17,75	-16,93	-16,04	-15,08	-14,13	-13,20	-12,31	—
	DMA	22,35	22,28	22,23	22,13	21,98	21,70	21,31	20,80	20,34	20,27	20,56	21,12	21,78	22,92	24,05	—
	PDMA	24,87	24,61	23,93	22,45	20,42	17,66	14,96	12,61	11,88	12,48	14,43	18,15	21,95	26,65	30,88	—
CPI	DM	-45,81	-45,57	-45,38	-45,25	-45,13	-44,89	-44,55	-44,00	-43,27	-42,39	-41,37	-40,30	-39,23	-38,19	-37,20	—
	DMA	46,95	46,68	46,45	46,21	45,96	45,60	45,10	44,45	43,56	43,15	43,23	43,83	44,43	45,66	46,96	—
	PDMA	37,37	36,63	35,20	32,65	29,57	25,97	22,65	19,88	16,69	14,01	13,84	17,38	20,90	25,25	29,38	—
SPI	DM	-1,08	-1,12	-1,13	-1,06	-0,91	-0,64	-0,24	0,30	0,97	1,73	2,54	3,41	4,27	5,13	5,95	—
	DMA	4,31	4,39	4,47	4,47	4,39	4,17	3,87	3,45	3,31	3,49	3,94	4,47	5,17	6,25	7,25	—
	PDMA	15,70	15,79	15,66	14,97	13,71	11,57	9,33	7,28	8,35	11,36	14,86	18,71	22,71	27,68	31,98	—
Δ CS	DM	-44,73	-44,45	-44,25	-44,19	-44,21	-44,25	-44,31	-44,30	-44,25	-44,12	-43,91	-43,71	-43,49	-43,32	-43,15	—
	DMA	42,65	42,30	41,99	41,74	41,57	41,43	41,23	41,01	40,26	39,66	39,29	39,35	39,25	39,42	39,71	—
	PDMA	21,67	20,84	19,54	17,68	15,86	14,41	13,32	12,60	8,34	2,65	-1,02	-1,33	-1,81	-2,44	-2,60	—

Tabela 8.398: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	507,4	508,0	508,7	509,6	510,8	512,3	514,3	516,7	519,6	522,7	526,0	529,6	533,2	536,9	540,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,1	15,9	15,8	15,7	15,6	15,5	15,4	15,2	14,9	14,6	14,2	13,7	13,2	12,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,7	-80,8	-80,9	-81,0	-81,1	-81,3	-81,6	-82,0	-82,4	-82,9	-83,4	-84,0	-84,6	-85,2	-85,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,0	-8,1	-8,2	-8,3	-8,5	-8,7	-9,0	-9,3	-9,5	-9,8	-10,1	-10,4	-10,7	-11,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	44,2	44,2	44,2	44,2	44,3	44,4	44,6	44,8	45,1	45,4	45,7	46,0	46,4	46,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,0	-10,2	-10,4	-10,7	-11,0	-11,4	-11,7	-12,0	-12,3	-12,7	-13,0	-13,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	173,0	172,7	171,6	170,0	168,7	168,3	168,8	170,3	172,6	175,5	178,7	182,0	185,4	188,6	191,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1708,3	-1706,7	-1704,4	-1701,7	-1698,8	-1695,8	-1692,8	-1689,5	-1685,6	-1681,0	-1675,7	-1669,8	-1663,4	-1656,8	-1650,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-113,9	-113,1	-111,3	-108,7	-105,5	-101,9	-98,2	-94,3	-90,4	-86,6	-82,8	-79,2	-75,8	-72,5	-69,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-4,0	-3,2	-1,6	0,8	4,0	7,7	11,7	15,7	19,9	23,9	27,8	31,5	35,0	38,3	41,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-419,9	-421,1	-424,2	-429,6	-436,9	-445,6	-455,2	-465,2	-475,6	-486,1	-496,8	-507,7	-518,6	-529,6	-540,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	120,6	120,4	120,3	120,4	120,8	121,3	122,1	123,1	124,2	125,4	126,6	127,9	129,1	130,2	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,1	-12,1	-12,2	-12,4	-12,7	-13,0	-13,3	-13,7	-14,0	-14,4	-14,7	-15,0	-15,3	-15,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	195,5	195,8	196,3	197,0	197,9	199,1	200,6	202,3	204,3	206,4	208,7	211,0	213,3	215,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,8	251,4	251,0	250,7	250,8	251,4	252,5	254,1	256,0	258,2	260,6	263,0	265,5	267,8	270,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	53,4	53,6	53,7	53,9	54,0	54,0	53,9	53,7	53,4	53,1	52,7	52,2	51,8	51,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,4	10,4	10,5	10,6	10,9	11,2	11,6	12,1	12,6	13,1	13,6	14,0	14,5	14,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,7	66,8	67,2	67,6	68,2	69,0	70,0	71,1	72,5	74,1	75,8	77,6	79,4	81,3	83,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	154,9	154,7	154,5	154,5	154,7	155,3	156,2	157,4	158,9	160,5	162,3	164,0	165,8	167,6	169,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,4	-2,4	-2,5	-2,7	-2,9	-3,3	-3,7	-4,2	-4,7	-5,3	-5,9	-6,5	-7,0	-7,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	3,1	3,0	2,9	2,8	2,5	2,2	1,9	1,5	1,2	0,8	0,4	0,1	-0,2	-0,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,7	12,7	12,7	12,8	13,0	13,1	13,3	13,6	13,8	14,1	14,4	14,7	14,9	15,2	15,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,7	18,6	18,6	18,7	18,8	18,9	19,2	19,4	19,8	20,1	20,5	20,9	21,3	21,6	22,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,1	30,2	30,5	30,9	31,3	31,8	32,3	32,9	33,5	34,3	35,0	35,9	36,7	37,5	38,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	121,3	121,1	121,0	121,1	121,5	122,1	122,9	123,9	125,1	126,3	127,6	128,9	130,1	131,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-3,7	-3,8	-3,8	-3,9	-4,1	-4,2	-4,4	-4,6	-4,8	-4,9	-5,1	-5,3	-5,4	-4,7
Total	DM	-16,46	-16,40	-16,32	-16,25	-16,10	-15,87	-15,56	-15,12	-14,57	-13,92	-13,22	-12,50	-11,77	-11,05	-10,39	—
	DMA	19,54	19,51	19,49	19,50	19,57	19,63	19,74	20,02	20,58	21,12	21,90	22,99	24,04	25,12	26,33	—
	PDMA	14,11	13,94	13,42	12,79	12,30	11,30	11,04	12,11	15,32	18,22	22,00	26,19	30,20	34,05	37,88	—
CPI	DM	-40,44	-40,25	-40,08	-39,97	-39,85	-39,65	-39,40	-39,02	-38,50	-37,87	-37,17	-36,45	-35,74	-35,03	-34,36	—
	DMA	41,85	41,77	41,74	41,79	41,88	41,98	42,11	42,33	43,14	43,85	44,74	46,05	47,30	48,61	50,33	—
	PDMA	22,30	21,85	21,07	19,87	18,25	16,44	14,55	13,60	16,91	19,94	23,30	27,14	30,98	34,66	38,33	—
SPI	DM	1,13	1,09	1,10	1,15	1,31	1,57	1,93	2,41	2,98	3,65	4,34	5,07	5,80	6,53	7,19	—
	DMA	3,18	3,19	3,18	3,15	3,21	3,23	3,34	3,65	4,05	4,45	5,15	6,07	6,99	7,89	8,73	—
	PDMA	8,10	8,13	7,80	7,61	7,94	7,53	8,46	11,01	14,15	16,95	21,05	25,49	29,64	33,60	37,54	—
Δ CS	DM	-41,56	-41,34	-41,18	-41,13	-41,15	-41,22	-41,33	-41,43	-41,48	-41,52	-41,51	-41,53	-41,54	-41,55	-41,56	—
	DMA	38,67	38,59	38,56	38,64	38,67	38,75	38,77	38,67	39,09	39,41	39,58	39,98	40,31	40,72	41,60	—
	PDMA	14,20	13,71	13,27	12,26	10,31	8,91	6,09	2,59	2,75	2,99	2,24	1,64	1,34	1,06	0,79	—

Tabela 8.399: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	531,0	531,4	531,9	532,6	533,6	534,8	536,3	538,2	540,3	542,7	545,2	547,9	550,7	553,5	556,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	13,6	13,5	13,4	13,3	13,2	13,1	13,0	12,9	12,7	12,4	12,1	11,7	11,3	10,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,8	-83,8	-83,8	-83,9	-84,0	-84,2	-84,4	-84,7	-85,1	-85,4	-85,8	-86,3	-86,7	-87,2	-87,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-9,4	-9,4	-9,5	-9,6	-9,7	-9,9	-10,1	-10,3	-10,6	-10,8	-11,0	-11,2	-11,5	-11,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,5	45,5	45,6	45,6	45,7	45,8	45,9	46,1	46,3	46,5	46,7	47,0	47,3	47,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,1	-11,2	-11,3	-11,4	-11,6	-11,8	-12,0	-12,3	-12,6	-12,8	-13,1	-13,3	-13,5	-13,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,2	183,0	182,2	181,1	180,2	179,8	180,3	181,4	183,2	185,4	187,8	190,4	192,9	195,3	197,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1669,8	-1668,5	-1666,5	-1664,0	-1661,3	-1658,5	-1655,7	-1652,7	-1649,4	-1645,6	-1641,4	-1636,8	-1631,9	-1626,9	-1621,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,0	-94,4	-93,2	-91,2	-88,9	-86,2	-83,4	-80,5	-77,6	-74,7	-71,9	-69,2	-66,6	-64,2	-61,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,2	15,8	17,0	18,8	21,2	23,9	26,8	29,9	32,9	35,9	38,9	41,6	44,3	46,8	49,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,1	-466,0	-468,8	-473,4	-479,8	-487,5	-496,1	-505,3	-514,8	-524,5	-534,4	-544,3	-554,3	-564,3	-574,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,8	124,7	124,7	124,8	125,0	125,5	126,1	126,9	127,7	128,7	129,6	130,5	131,4	132,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,3	-13,5	-13,7	-13,9	-14,2	-14,5	-14,8	-15,0	-15,3	-15,5	-15,7	-15,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	202,4	202,7	203,1	203,8	204,7	205,7	207,1	208,6	210,3	212,1	213,9	215,8	217,7	219,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,4	259,1	258,8	258,6	258,8	259,3	260,2	261,5	263,1	264,9	266,7	268,7	270,6	272,4	274,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	53,1	53,2	53,3	53,4	53,4	53,3	53,2	52,9	52,6	52,2	51,9	51,5	51,1	50,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,7	11,8	11,8	12,0	12,2	12,6	12,9	13,3	13,7	14,2	14,6	15,0	15,3	15,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	72,4	72,7	73,1	73,7	74,4	75,3	76,4	77,6	79,0	80,5	82,0	83,5	85,1	86,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,5	160,4	160,3	160,3	160,5	161,0	161,8	162,8	164,0	165,3	166,7	168,1	169,5	170,9	172,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-4,1	-4,4	-4,7	-5,1	-5,5	-6,0	-6,5	-7,0	-7,5	-8,0	-8,4	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	2,2	2,2	2,1	1,9	1,7	1,4	1,1	0,8	0,5	0,2	0,0	-0,3	-0,6	-0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,3	13,3	13,4	13,4	13,6	13,7	13,9	14,1	14,4	14,6	14,9	15,1	15,3	15,5	15,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,6	19,6	19,6	19,7	19,8	19,9	20,2	20,4	20,7	21,0	21,3	21,7	22,0	22,3	22,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,4	33,6	33,9	34,3	34,7	35,1	35,5	36,1	36,6	37,2	37,9	38,5	39,1	39,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	125,7	125,5	125,5	125,6	125,9	126,4	127,0	127,8	128,7	129,7	130,6	131,6	132,5	133,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,8	-5,0	-5,1	-5,3	-5,4	-5,5	-5,6	-4,7
Total	DM	-12,82	-12,77	-12,72	-12,65	-12,53	-12,38	-12,15	-11,84	-11,45	-11,01	-10,52	-10,02	-9,51	-9,03	-8,57	—
	DMA	19,71	19,70	19,80	19,99	20,32	20,74	21,31	22,15	23,03	23,94	24,86	25,93	27,00	28,06	29,05	—
	PDMA	12,21	12,32	12,76	13,72	15,27	17,13	19,54	22,39	25,55	29,01	32,37	35,69	39,03	42,33	45,20	—
CPI	DM	-35,14	-34,98	-34,88	-34,79	-34,73	-34,65	-34,54	-34,35	-34,09	-33,75	-33,38	-32,99	-32,57	-32,21	-31,85	—
	DMA	41,12	41,15	41,35	41,74	42,29	42,95	43,75	44,62	45,56	46,54	47,64	48,84	50,15	51,57	53,02	—
	PDMA	14,81	15,20	16,07	17,44	19,17	21,18	23,55	26,53	29,56	32,74	35,76	38,89	42,02	45,13	47,95	—
SPI	DM	3,55	3,51	3,54	3,59	3,74	3,95	4,27	4,67	5,15	5,67	6,25	6,83	7,40	7,96	8,51	—
	DMA	4,01	3,98	3,99	4,05	4,21	4,45	4,85	5,37	6,01	6,69	7,42	8,16	8,88	9,59	10,25	—
	PDMA	10,30	10,21	10,33	10,99	12,42	14,17	16,60	19,35	22,62	26,27	29,89	33,35	36,85	40,28	43,17	—
ΔCS	DM	-38,68	-38,50	-38,42	-38,38	-38,47	-38,60	-38,81	-39,01	-39,24	-39,42	-39,63	-39,82	-39,97	-40,17	-40,35	—
	DMA	37,10	37,17	37,36	37,69	38,08	38,49	38,91	39,64	40,25	40,77	41,22	41,99	42,84	43,66	44,43	—
	PDMA	4,51	4,99	5,73	6,44	6,75	7,02	6,95	7,18	6,94	6,47	5,87	5,54	5,17	4,86	4,78	—

Tabela 8.400: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 0\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	421,0	422,0	423,1	424,4	425,9	428,1	431,1	434,9	439,5	444,7	450,3	456,3	462,4	468,5	474,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	24,7	24,5	24,3	24,1	23,9	23,8	23,7	23,5	23,3	22,9	22,4	21,9	21,2	20,5	19,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-70,0	-70,0	-70,1	-70,2	-70,4	-70,7	-71,1	-71,7	-72,4	-73,2	-74,0	-74,9	-75,8	-76,8	-77,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,7	-4,0	-4,3	-4,7	-5,1	-5,6	-6,0	-6,4	-6,9	-7,3	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	39,4	39,4	39,4	39,4	39,4	39,4	39,6	39,8	40,2	40,6	41,0	41,5	42,0	42,5	43,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-5,4	-5,4	-5,5	-5,7	-5,9	-6,3	-6,7	-7,1	-7,6	-8,1	-8,6	-9,1	-9,6	-10,0	-10,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	135,8	135,2	132,8	129,5	126,7	125,4	126,0	128,2	131,9	136,5	141,7	147,2	152,7	158,0	163,0	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1813,4	-1812,2	-1812,5	-1814,0	-1816,5	-1819,5	-1822,1	-1823,5	-1822,9	-1819,9	-1814,7	-1807,5	-1798,8	-1789,1	-1778,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-187,1	-185,5	-182,2	-177,4	-171,6	-165,3	-158,7	-152,0	-145,2	-138,5	-131,9	-125,6	-119,6	-114,0	-108,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-79,5	-78,0	-74,9	-70,1	-64,1	-57,3	-50,1	-42,8	-35,4	-28,3	-21,4	-14,9	-8,8	-3,2	2,0	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-272,3	-274,3	-279,5	-288,0	-299,2	-311,8	-324,8	-337,6	-349,7	-361,3	-372,5	-383,3	-394,0	-404,6	-415,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,7	105,4	105,1	105,0	105,4	106,1	107,3	108,7	110,4	112,3	114,2	116,1	118,0	119,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,8	-7,9	-8,1	-8,4	-8,8	-9,3	-9,8	-10,4	-10,9	-11,5	-12,0	-12,5	-12,9	-13,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	175,5	175,6	176,0	176,5	177,1	177,8	178,9	180,3	182,0	184,1	186,4	189,0	191,7	194,4	197,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	226,2	225,5	224,7	224,1	224,0	224,6	226,0	228,0	230,6	233,6	236,9	240,4	243,9	247,3	250,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,2	51,3	51,7	52,2	52,8	53,3	53,8	54,1	54,3	54,4	54,3	54,2	54,0	53,7	53,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,1	7,1	7,0	7,0	7,1	7,2	7,5	7,8	8,2	8,7	9,2	9,7	10,2	10,7	11,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	50,5	50,7	51,1	51,6	52,2	52,8	53,6	54,6	55,9	57,4	59,2	61,1	63,1	65,3	67,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	136,1	135,8	135,3	135,1	135,2	135,8	136,9	138,4	140,4	142,6	145,0	147,5	150,0	152,5	154,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,9	0,9	0,9	0,9	0,8	0,6	0,4	0,0	-0,3	-0,8	-1,3	-1,9	-2,5	-3,1	-3,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,5	5,5	5,5	5,4	5,2	4,9	4,6	4,3	3,9	3,5	3,1	2,6	2,2	1,9	1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,2	11,3	11,3	11,4	11,5	11,6	11,8	12,0	12,2	12,4	12,7	12,9	13,2	13,4	13,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,2	16,2	16,1	16,0	16,1	16,1	16,3	16,5	16,8	17,1	17,5	17,9	18,3	18,7	19,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	18,8	19,0	19,5	20,1	20,7	21,3	22,0	22,8	23,7	24,8	26,0	27,2	28,4	29,6	30,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	106,0	105,8	105,4	105,1	105,1	105,5	106,3	107,5	109,1	110,8	112,8	114,7	116,7	118,7	120,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,7	-1,7	-1,7	-1,8	-2,0	-2,2	-2,4	-2,7	-2,9	-3,2	-3,5	-3,7	-4,0	-4,2	-4,7
Total	DM	-28,98	-28,91	-28,97	-29,07	-29,15	-29,12	-28,83	-28,33	-27,54	-26,54	-25,36	-24,07	-22,73	-21,40	-20,08	—
	DMA	34,44	34,23	33,90	33,35	32,55	32,38	32,04	31,45	30,56	29,45	28,16	26,76	25,37	24,06	23,08	—
	PDMA	59,74	59,22	58,14	56,21	53,27	49,77	45,92	41,59	36,86	31,77	26,58	21,22	17,11	15,95	15,80	—
CPI	DM	-59,18	-58,95	-59,04	-59,31	-59,67	-59,92	-59,85	-59,45	-58,57	-57,37	-55,87	-54,15	-52,37	-50,58	-48,80	—
	DMA	69,15	68,52	67,56	66,18	64,36	64,26	63,97	63,28	62,08	60,48	58,58	56,45	54,19	52,02	49,93	—
	PDMA	91,26	90,00	87,37	83,39	78,34	73,07	67,42	61,40	55,03	48,53	42,17	36,00	29,86	25,02	21,50	—
SPI	DM	-6,83	-6,88	-6,92	-6,89	-6,77	-6,53	-6,09	-5,51	-4,78	-3,93	-2,98	-2,01	-1,00	0,01	0,99	—
	DMA	8,99	9,08	9,21	9,28	9,22	9,00	8,63	8,11	7,45	6,70	5,85	4,99	4,23	3,55	3,40	—
	PDMA	36,63	36,65	36,71	36,27	34,89	32,68	30,16	27,06	23,54	19,48	15,15	10,37	7,76	9,29	11,62	—
ΔCS	DM	-52,35	-52,07	-52,12	-52,42	-52,91	-53,38	-53,75	-53,93	-53,79	-53,45	-52,89	-52,15	-51,37	-50,59	-49,79	—
	DMA	60,15	59,44	58,35	56,90	55,14	55,26	55,35	55,17	54,64	53,78	52,74	51,45	49,96	48,46	46,53	—
	PDMA	54,62	53,36	50,66	47,12	43,45	40,39	37,27	34,34	31,50	29,05	27,02	25,62	22,10	15,73	9,87	—

Tabela 8.401: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 10\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	441,5	442,4	443,4	444,5	446,0	447,9	450,6	453,9	457,9	462,4	467,2	472,3	477,6	482,9	488,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	22,9	22,7	22,5	22,3	22,1	22,0	21,9	21,8	21,5	21,2	20,8	20,2	19,6	19,0	18,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-72,5	-72,5	-72,6	-72,7	-72,9	-73,2	-73,6	-74,1	-74,6	-75,3	-76,1	-76,8	-77,6	-78,5	-79,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-4,4	-4,4	-4,4	-4,6	-4,8	-5,0	-5,3	-5,7	-6,0	-6,4	-6,8	-7,2	-7,6	-7,9	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	40,5	40,5	40,5	40,5	40,5	40,6	40,7	40,9	41,2	41,6	42,0	42,4	42,9	43,3	43,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-6,4	-6,4	-6,5	-6,7	-6,9	-7,2	-7,6	-8,0	-8,4	-8,9	-9,3	-9,7	-10,1	-10,5	-10,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	144,5	144,0	142,1	139,4	137,1	136,1	136,6	138,6	141,8	145,9	150,4	155,2	159,9	164,5	168,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1796,1	-1794,7	-1793,8	-1793,5	-1793,7	-1794,2	-1794,6	-1794,1	-1792,3	-1788,7	-1783,5	-1776,7	-1768,9	-1760,3	-1751,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-169,2	-167,9	-165,1	-161,0	-156,1	-150,7	-145,0	-139,2	-133,4	-127,6	-121,9	-116,5	-111,4	-106,5	-102,0	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-60,9	-59,7	-57,0	-53,0	-48,0	-42,2	-36,1	-29,8	-23,5	-17,4	-11,5	-6,0	-0,7	4,0	8,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-308,4	-310,1	-314,3	-321,5	-330,8	-341,5	-352,8	-363,9	-374,7	-385,2	-395,4	-405,4	-415,3	-425,2	-434,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	109,4	109,2	108,9	108,7	108,7	109,0	109,7	110,7	112,0	113,5	115,1	116,8	118,5	120,1	121,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-8,9	-8,8	-8,9	-9,0	-9,3	-9,7	-10,1	-10,6	-11,1	-11,5	-12,0	-12,5	-12,9	-13,3	-13,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	179,6	179,7	180,1	180,5	181,1	181,9	182,9	184,3	186,0	187,9	190,1	192,5	195,0	197,5	200,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	232,1	231,5	230,8	230,3	230,2	230,8	232,1	233,9	236,3	239,0	241,9	245,0	248,1	251,1	254,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,1	52,2	52,5	52,9	53,4	53,8	54,1	54,3	54,4	54,4	54,3	54,1	53,8	53,5	53,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	7,7	7,7	7,6	7,6	7,7	7,9	8,2	8,5	8,9	9,4	9,9	10,4	10,8	11,3	11,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	53,9	54,1	54,5	54,9	55,5	56,1	56,9	57,9	59,1	60,6	62,2	64,0	65,9	67,8	69,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	140,4	140,1	139,8	139,6	139,7	140,3	141,3	142,7	144,4	146,4	148,6	150,8	153,0	155,2	157,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	0,2	0,3	0,3	0,2	0,1	0,0	-0,2	-0,6	-1,0	-1,5	-2,0	-2,5	-3,0	-3,6	-4,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	5,0	5,0	5,0	4,9	4,7	4,5	4,2	3,8	3,5	3,1	2,7	2,3	2,0	1,6	1,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,5	11,5	11,6	11,6	11,7	11,9	12,0	12,2	12,4	12,7	12,9	13,2	13,4	13,6	13,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	16,7	16,6	16,6	16,6	16,6	16,7	16,8	17,1	17,3	17,7	18,0	18,4	18,8	19,1	19,5	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	21,4	21,6	22,0	22,5	23,0	23,6	24,2	25,0	25,8	26,8	27,8	28,9	30,0	31,0	32,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	109,6	109,4	109,0	108,8	108,9	109,2	110,0	111,1	112,5	114,0	115,7	117,4	119,2	120,9	122,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,4	-2,6	-2,8	-3,0	-3,3	-3,5	-3,7	-4,0	-4,2	-4,4	-4,7
Total	DM	-26,34	-26,27	-26,25	-26,28	-26,26	-26,11	-25,80	-25,27	-24,54	-23,62	-22,59	-21,47	-20,31	-19,18	-18,04	—
	DMA	29,37	29,31	29,30	29,32	29,26	29,08	28,70	28,10	27,29	26,28	25,17	24,00	22,94	22,15	21,60	—
	PDMA	48,14	47,97	47,12	45,35	42,98	40,29	36,84	32,63	28,48	23,75	19,33	15,50	14,67	14,87	15,14	—
CPI	DM	-55,40	-55,18	-55,10	-55,20	-55,31	-55,30	-55,10	-54,59	-53,76	-52,66	-51,36	-49,92	-48,41	-46,92	-45,44	—
	DMA	59,16	58,91	58,75	58,73	58,69	58,52	58,10	57,34	56,24	54,79	53,13	51,32	49,54	47,77	46,02	—
	PDMA	72,73	71,81	69,84	66,74	62,98	58,58	53,66	48,36	42,97	37,36	31,86	26,70	22,96	19,75	16,70	—
SPI	DM	-5,03	-5,07	-5,09	-5,08	-4,96	-4,70	-4,31	-3,77	-3,11	-2,33	-1,49	-0,60	0,30	1,17	2,05	—
	DMA	7,51	7,61	7,71	7,75	7,68	7,50	7,15	6,65	6,07	5,37	4,67	3,97	3,43	3,37	3,69	—
	PDMA	30,11	30,49	30,45	29,67	28,31	26,88	24,50	21,09	17,86	13,77	10,13	7,29	8,59	11,29	14,01	—
ΔCS	DM	-50,37	-50,11	-50,01	-50,12	-50,35	-50,60	-50,79	-50,82	-50,66	-50,34	-49,87	-49,32	-48,71	-48,08	-47,48	—
	DMA	51,65	51,30	51,05	50,98	51,01	51,02	50,95	50,68	50,17	49,42	48,46	47,34	46,10	44,41	42,33	—
	PDMA	42,62	41,32	39,39	37,07	34,66	31,70	29,16	27,27	25,11	23,58	21,73	19,41	14,37	8,46	2,69	—

Tabela 8.402: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 20\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	462,7	463,4	464,3	465,3	466,6	468,3	470,6	473,5	476,8	480,6	484,6	488,9	493,3	497,8	502,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	20,8	20,7	20,5	20,3	20,2	20,1	20,0	19,9	19,6	19,3	19,0	18,5	18,0	17,4	16,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-75,1	-75,2	-75,2	-75,3	-75,5	-75,7	-76,1	-76,5	-77,0	-77,6	-78,2	-78,9	-79,6	-80,3	-81,0	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,5	-5,5	-5,6	-5,7	-5,9	-6,1	-6,3	-6,6	-7,0	-7,3	-7,6	-8,0	-8,3	-8,6	-8,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	41,7	41,7	41,7	41,7	41,7	41,8	41,9	42,1	42,3	42,6	43,0	43,4	43,7	44,1	44,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,5	-7,6	-7,7	-7,9	-8,2	-8,5	-8,9	-9,2	-9,6	-10,0	-10,4	-10,7	-11,1	-11,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	153,7	153,3	151,7	149,6	147,7	147,0	147,5	149,2	151,9	155,4	159,2	163,2	167,2	171,1	174,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1772,3	-1770,8	-1769,2	-1767,8	-1766,6	-1765,5	-1764,4	-1762,8	-1760,2	-1756,5	-1751,5	-1745,5	-1738,7	-1731,3	-1723,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-151,0	-150,0	-147,7	-144,3	-140,2	-135,7	-131,0	-126,1	-121,3	-116,4	-111,7	-107,2	-102,9	-98,9	-95,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-42,1	-41,1	-39,0	-35,7	-31,5	-26,8	-21,8	-16,5	-11,3	-6,3	-1,4	3,2	7,6	11,7	15,5	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-344,1	-345,4	-349,0	-354,9	-362,8	-371,9	-381,5	-391,3	-400,9	-410,4	-419,6	-428,8	-437,9	-447,0	-455,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	112,9	112,8	112,6	112,4	112,4	112,8	113,4	114,3	115,4	116,7	118,1	119,5	120,9	122,3	123,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,0	-10,3	-10,6	-10,9	-11,4	-11,8	-12,2	-12,6	-13,0	-13,4	-13,7	-14,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	184,2	184,3	184,6	185,1	185,6	186,4	187,4	188,7	190,3	192,1	194,1	196,3	198,5	200,7	202,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	238,2	237,8	237,2	236,8	236,8	237,3	238,5	240,1	242,2	244,6	247,1	249,8	252,5	255,1	257,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	52,7	52,8	53,1	53,4	53,7	54,0	54,3	54,4	54,4	54,3	54,1	53,9	53,6	53,3	52,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,5	8,4	8,4	8,4	8,5	8,7	9,0	9,3	9,7	10,2	10,6	11,0	11,5	11,9	12,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	57,6	57,8	58,2	58,6	59,1	59,7	60,5	61,5	62,6	64,0	65,5	67,2	68,9	70,6	72,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	144,9	144,7	144,4	144,3	144,4	145,0	145,9	147,1	148,7	150,4	152,3	154,2	156,2	158,0	159,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,6	-0,8	-1,0	-1,4	-1,8	-2,2	-2,7	-3,2	-3,7	-4,2	-4,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	4,4	4,4	4,4	4,3	4,2	3,9	3,7	3,4	3,0	2,7	2,3	2,0	1,7	1,4	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	11,8	11,8	11,9	11,9	12,0	12,2	12,3	12,5	12,7	13,0	13,2	13,4	13,6	13,9	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,2	17,2	17,2	17,2	17,2	17,3	17,5	17,7	18,0	18,3	18,6	18,9	19,3	19,6	19,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	24,1	24,3	24,6	25,1	25,5	26,0	26,6	27,2	28,0	28,8	29,7	30,6	31,6	32,5	33,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	113,4	113,2	112,9	112,7	112,8	113,2	113,8	114,8	116,0	117,3	118,7	120,2	121,7	123,1	124,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	-2,9	-3,0	-3,2	-3,4	-3,6	-3,8	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,7
Total	DM	-23,33	-23,26	-23,21	-23,17	-23,10	-22,90	-22,56	-22,08	-21,43	-20,65	-19,77	-18,84	-17,87	-16,92	-16,00	—
	DMA	26,03	25,95	25,93	25,88	25,78	25,55	25,18	24,62	23,90	23,08	22,22	21,54	20,99	20,64	20,54	—
	PDMA	36,87	36,59	35,91	34,41	32,50	29,81	27,03	23,38	19,49	16,07	13,82	13,64	13,84	14,31	14,99	—
CPI	DM	-50,87	-50,66	-50,55	-50,49	-50,46	-50,33	-50,05	-49,54	-48,84	-47,92	-46,83	-45,68	-44,47	-43,27	-42,09	—
	DMA	53,38	53,14	52,95	52,80	52,65	52,36	51,90	51,17	50,20	48,99	47,74	46,37	44,95	43,56	42,80	—
	PDMA	55,35	54,61	52,92	50,46	47,26	43,56	39,58	35,10	30,47	25,88	22,83	19,96	17,03	14,45	12,81	—
SPI	DM	-3,14	-3,17	-3,17	-3,14	-3,04	-2,79	-2,41	-1,94	-1,34	-0,65	0,07	0,85	1,64	2,40	3,14	—
	DMA	5,97	6,02	6,11	6,14	6,08	5,89	5,58	5,14	4,61	4,07	3,51	3,33	3,43	3,83	4,22	—
	PDMA	23,31	23,38	23,44	22,64	21,68	19,73	17,83	14,79	11,45	8,88	7,22	9,01	11,49	14,21	16,58	—
Δ CS	DM	-47,73	-47,50	-47,38	-47,35	-47,42	-47,53	-47,64	-47,60	-47,50	-47,27	-46,90	-46,53	-46,11	-45,67	-45,23	—
	DMA	47,42	47,12	46,83	46,66	46,57	46,48	46,32	46,03	45,59	44,92	44,22	43,05	41,52	39,74	38,58	—
	PDMA	32,04	31,23	29,48	27,82	25,57	23,83	21,76	20,31	19,02	17,01	15,61	10,96	5,54	0,25	-3,77	—

Tabela 8.403: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	484,7	485,2	485,9	486,8	487,9	489,4	491,2	493,6	496,3	499,3	502,6	506,0	509,6	513,2	516,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,6	18,5	18,3	18,2	18,1	18,0	17,9	17,8	17,6	17,4	17,1	16,7	16,2	15,8	15,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-77,9	-77,9	-78,0	-78,1	-78,2	-78,4	-78,7	-79,0	-79,4	-79,9	-80,4	-81,0	-81,5	-82,1	-82,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,0	-7,2	-7,4	-7,7	-7,9	-8,2	-8,5	-8,8	-9,0	-9,3	-9,6	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	42,9	42,9	42,9	42,9	42,9	43,0	43,1	43,3	43,5	43,7	44,0	44,3	44,6	45,0	45,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,7	-8,7	-8,8	-9,0	-9,2	-9,5	-9,8	-10,1	-10,4	-10,7	-11,0	-11,3	-11,6	-11,9	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	163,1	162,8	161,7	160,0	158,6	158,1	158,5	159,9	162,2	165,0	168,1	171,3	174,6	177,7	180,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1742,8	-1741,4	-1739,6	-1737,6	-1735,7	-1733,8	-1731,9	-1729,7	-1726,9	-1723,4	-1718,9	-1713,8	-1708,1	-1702,1	-1695,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-132,6	-131,8	-130,0	-127,3	-124,1	-120,5	-116,7	-112,8	-108,9	-105,0	-101,3	-97,7	-94,2	-91,0	-87,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-23,2	-22,4	-20,7	-18,1	-14,9	-11,1	-7,1	-3,0	1,1	5,1	9,1	12,8	16,3	19,6	22,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-380,6	-381,7	-384,6	-389,5	-396,1	-403,8	-412,1	-420,6	-429,1	-437,5	-445,9	-454,2	-462,4	-470,5	-478,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	116,7	116,6	116,4	116,3	116,4	116,7	117,2	117,9	118,9	119,9	121,1	122,2	123,4	124,6	125,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,0	-10,9	-11,0	-11,1	-11,3	-11,5	-11,8	-12,2	-12,5	-12,9	-13,2	-13,5	-13,8	-14,1	-14,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	189,4	189,5	189,8	190,2	190,7	191,5	192,5	193,7	195,1	196,7	198,5	200,4	202,3	204,2	206,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,8	244,4	244,0	243,7	243,7	244,2	245,2	246,6	248,4	250,4	252,6	254,8	257,0	259,2	261,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,2	53,3	53,4	53,7	53,9	54,1	54,2	54,2	54,1	54,0	53,8	53,5	53,2	52,9	52,6	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,4	9,3	9,3	9,4	9,5	9,7	9,9	10,3	10,6	11,0	11,4	11,8	12,2	12,5	12,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	61,9	62,0	62,3	62,7	63,2	63,8	64,5	65,4	66,5	67,8	69,1	70,6	72,0	73,5	75,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,8	149,6	149,4	149,3	149,5	149,9	150,7	151,8	153,1	154,6	156,2	157,8	159,4	161,0	162,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,3	-1,3	-1,3	-1,4	-1,5	-1,7	-2,0	-2,3	-2,6	-3,1	-3,5	-3,9	-4,4	-4,8	-5,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,8	3,8	3,8	3,7	3,5	3,3	3,1	2,8	2,5	2,2	1,9	1,6	1,3	1,1	0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,2	12,2	12,3	12,3	12,4	12,6	12,7	12,9	13,1	13,3	13,5	13,7	13,9	14,1	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	17,9	17,9	17,8	17,9	17,9	18,0	18,2	18,4	18,7	18,9	19,2	19,5	19,8	20,1	20,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	27,0	27,1	27,4	27,8	28,2	28,6	29,1	29,6	30,3	31,0	31,7	32,4	33,2	34,0	34,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,3	117,1	116,9	116,8	116,9	117,2	117,8	118,6	119,6	120,7	121,9	123,1	124,3	125,5	126,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-3,1	-3,2	-3,3	-3,4	-3,5	-3,6	-3,8	-4,0	-4,1	-4,3	-4,5	-4,6	-4,8	-4,7
Total	DM	-20,01	-19,95	-19,89	-19,82	-19,72	-19,52	-19,23	-18,80	-18,25	-17,63	-16,91	-16,18	-15,42	-14,66	-13,94	—
	DMA	22,36	22,32	22,26	22,18	22,06	21,85	21,53	21,13	20,66	20,26	20,14	20,23	20,42	20,83	21,33	—
	PDMA	24,86	24,69	24,18	22,83	21,10	18,99	16,65	14,45	12,71	12,14	12,52	13,06	14,50	16,95	19,73	—
CPI	DM	-45,84	-45,65	-45,50	-45,39	-45,31	-45,13	-44,87	-44,45	-43,86	-43,16	-42,34	-41,48	-40,55	-39,65	-38,79	—
	DMA	46,98	46,78	46,57	46,39	46,22	45,91	45,51	44,99	44,30	43,47	43,01	42,72	42,68	43,11	43,50	—
	PDMA	37,43	36,84	35,61	33,65	31,22	28,21	25,17	22,73	20,24	17,89	15,63	13,64	13,43	16,24	18,91	—
SPI	DM	-1,07	-1,11	-1,11	-1,07	-0,96	-0,74	-0,42	0,00	0,53	1,09	1,73	2,37	3,01	3,67	4,28	—
	DMA	4,30	4,37	4,43	4,43	4,35	4,21	3,95	3,63	3,33	3,24	3,37	3,73	4,09	4,49	5,07	—
	PDMA	15,63	15,78	15,79	14,89	13,67	12,23	10,41	8,37	7,19	7,92	10,24	12,64	15,28	17,47	20,32	—
ΔCS	DM	-44,76	-44,55	-44,39	-44,32	-44,35	-44,39	-44,45	-44,45	-44,39	-44,26	-44,07	-43,86	-43,57	-43,33	-43,07	—
	DMA	42,68	42,41	42,14	41,96	41,87	41,70	41,56	41,36	40,97	40,23	39,64	38,98	38,59	38,62	38,43	—
	PDMA	21,80	21,06	19,81	18,76	17,55	15,98	14,76	14,36	13,05	9,96	5,39	1,01	-1,84	-1,23	-1,41	—

Tabela 8.404: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	507,4	507,8	508,3	509,0	509,9	511,0	512,5	514,3	516,4	518,7	521,2	523,8	526,4	529,2	531,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	16,2	16,1	16,0	15,9	15,8	15,8	15,7	15,6	15,5	15,3	15,0	14,7	14,4	14,0	13,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,7	-80,8	-80,8	-80,9	-81,0	-81,2	-81,4	-81,7	-82,0	-82,3	-82,7	-83,1	-83,6	-84,0	-84,5	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-8,0	-8,0	-8,1	-8,1	-8,2	-8,4	-8,5	-8,7	-9,0	-9,2	-9,4	-9,6	-9,8	-10,0	-10,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,2	44,2	44,2	44,2	44,2	44,3	44,4	44,5	44,7	44,9	45,1	45,3	45,6	45,8	46,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,9	-9,9	-9,9	-10,0	-10,1	-10,3	-10,5	-10,7	-11,0	-11,2	-11,5	-11,7	-11,9	-12,1	-12,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	173,0	172,8	171,9	170,7	169,8	169,4	169,7	170,9	172,6	174,7	177,1	179,5	182,0	184,4	186,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1708,5	-1707,2	-1705,6	-1703,6	-1701,4	-1699,4	-1697,3	-1695,1	-1692,5	-1689,4	-1685,8	-1681,8	-1677,3	-1672,7	-1668,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-113,9	-113,3	-112,0	-110,0	-107,6	-104,9	-102,1	-99,2	-96,3	-93,4	-90,6	-87,9	-85,3	-82,8	-80,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-4,0	-3,5	-2,2	-0,3	2,0	4,7	7,7	10,8	13,9	16,9	19,9	22,7	25,3	27,8	30,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-419,9	-420,8	-423,1	-427,1	-432,5	-439,0	-445,9	-453,2	-460,5	-467,8	-475,1	-482,3	-489,4	-496,4	-503,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	120,6	120,5	120,4	120,5	120,7	121,2	121,8	122,5	123,3	124,2	125,1	126,0	126,8	127,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,1	-12,1	-12,2	-12,3	-12,5	-12,8	-13,0	-13,3	-13,5	-13,8	-14,0	-14,3	-14,5	-14,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	195,5	195,7	196,1	196,6	197,3	198,1	199,2	200,4	201,8	203,3	204,8	206,4	207,9	209,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,8	251,5	251,2	251,0	251,1	251,6	252,4	253,5	254,9	256,5	258,2	260,0	261,7	263,4	265,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,3	53,4	53,5	53,6	53,8	53,9	53,9	53,8	53,7	53,5	53,3	53,1	52,8	52,5	52,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,4	10,4	10,5	10,6	10,8	11,0	11,3	11,6	12,0	12,3	12,6	12,9	13,2	13,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,7	66,8	67,0	67,4	67,8	68,4	69,1	69,9	70,8	71,9	73,0	74,2	75,4	76,6	77,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,0	154,8	154,7	154,6	154,8	155,2	155,9	156,8	157,8	159,0	160,2	161,5	162,8	164,0	165,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,4	-2,4	-2,4	-2,5	-2,6	-2,8	-3,1	-3,3	-3,7	-4,0	-4,4	-4,8	-5,1	-5,5	-5,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	3,1	3,0	3,0	2,8	2,7	2,5	2,2	2,0	1,7	1,5	1,2	1,0	0,8	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	12,7	12,7	12,7	12,8	12,9	13,0	13,2	13,3	13,5	13,7	13,8	14,0	14,2	14,3	14,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	18,7	18,6	18,6	18,7	18,7	18,9	19,0	19,2	19,4	19,7	19,9	20,2	20,4	20,6	20,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,0	30,2	30,4	30,7	31,0	31,3	31,7	32,1	32,6	33,2	33,7	34,3	34,9	35,5	36,1	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,4	121,3	121,2	121,1	121,2	121,5	121,9	122,5	123,3	124,1	125,1	126,0	126,9	127,8	128,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,7	-3,7	-3,7	-3,7	-3,8	-3,9	-4,0	-4,1	-4,2	-4,3	-4,5	-4,6	-4,7	-4,8	-5,0	-4,7
Total	DM	-16,47	-16,42	-16,37	-16,30	-16,19	-16,03	-15,80	-15,47	-15,07	-14,58	-14,08	-13,53	-12,97	-12,43	-11,90	—
	DMA	19,55	19,53	19,51	19,52	19,55	19,62	19,67	19,77	19,93	20,24	20,61	21,04	21,53	22,13	22,82	—
	PDMA	14,12	14,02	13,56	13,28	12,56	12,13	11,57	11,28	11,98	13,64	15,79	18,17	20,32	22,89	25,48	—
CPI	DM	-40,45	-40,32	-40,20	-40,10	-40,00	-39,90	-39,69	-39,40	-39,01	-38,52	-37,97	-37,39	-36,77	-36,15	-35,58	—
	DMA	41,87	41,81	41,78	41,81	41,87	41,99	42,07	42,13	42,15	42,46	42,95	43,39	43,77	44,37	45,16	—
	PDMA	22,30	22,04	21,40	20,37	19,21	17,99	16,49	15,03	13,79	14,72	17,15	19,37	21,50	23,87	26,39	—
SPI	DM	1,13	1,11	1,11	1,16	1,27	1,47	1,73	2,07	2,48	2,97	3,45	3,97	4,48	4,97	5,46	—
	DMA	3,18	3,19	3,17	3,17	3,17	3,21	3,23	3,38	3,64	3,94	4,22	4,65	5,21	5,82	6,43	—
	PDMA	8,12	8,13	7,81	8,07	7,67	7,83	7,97	8,53	10,65	12,84	14,78	17,28	19,45	22,16	24,81	—
Δ CS	DM	-41,58	-41,42	-41,31	-41,26	-41,27	-41,37	-41,42	-41,47	-41,49	-41,48	-41,42	-41,36	-41,25	-41,12	-41,04	—
	DMA	38,69	38,62	38,61	38,64	38,70	38,78	38,84	38,75	38,51	38,52	38,73	38,74	38,56	38,55	38,73	—
	PDMA	14,18	13,90	13,59	12,30	11,54	10,16	8,52	6,50	3,13	1,88	2,37	2,10	2,05	1,71	1,59	—

Tabela 8.405: Constantes de acoplamento LC-SLYP com $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	530,9	531,2	531,5	532,0	532,6	533,4	534,5	535,7	537,1	538,6	540,3	542,1	543,9	545,7	547,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	13,7	13,6	13,5	13,5	13,4	13,4	13,3	13,3	13,2	13,0	12,8	12,6	12,4	12,1	11,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,8	-83,8	-83,8	-83,9	-83,9	-84,1	-84,2	-84,4	-84,6	-84,9	-85,1	-85,4	-85,7	-86,0	-86,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,4	-9,4	-9,4	-9,5	-9,5	-9,6	-9,7	-9,9	-10,0	-10,2	-10,3	-10,5	-10,6	-10,8	-10,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,5	45,5	45,5	45,6	45,6	45,6	45,7	45,8	45,9	46,0	46,2	46,3	46,5	46,7	46,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,1	-11,1	-11,2	-11,2	-11,3	-11,4	-11,6	-11,7	-11,9	-12,1	-12,2	-12,4	-12,6	-12,7	-12,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	183,2	183,0	182,5	181,8	181,1	180,9	181,2	181,9	183,1	184,5	186,2	187,8	189,5	191,1	192,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1670,0	-1669,1	-1667,8	-1666,1	-1664,4	-1662,6	-1660,9	-1659,0	-1657,0	-1654,7	-1652,2	-1649,3	-1646,3	-1643,1	-1639,9	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,1	-94,7	-93,8	-92,5	-90,9	-89,2	-87,3	-85,4	-83,4	-81,5	-79,6	-77,8	-76,1	-74,5	-72,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,2	15,5	16,3	17,6	19,1	21,0	22,9	25,0	27,0	29,0	31,0	32,9	34,6	36,3	37,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-465,0	-465,7	-467,5	-470,6	-474,8	-479,8	-485,3	-491,1	-497,0	-502,9	-508,7	-514,4	-520,1	-525,5	-530,8	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,9	124,9	124,8	124,8	124,8	125,0	125,3	125,7	126,2	126,8	127,4	128,0	128,6	129,2	129,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,3	-13,4	-13,5	-13,7	-13,9	-14,1	-14,2	-14,4	-14,6	-14,7	-14,9	-15,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	202,4	202,4	202,6	202,9	203,3	203,9	204,6	205,4	206,3	207,4	208,5	209,6	210,7	211,8	212,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	259,4	259,2	259,0	258,9	259,0	259,4	260,0	260,8	261,8	262,9	264,2	265,4	266,6	267,7	268,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,1	53,1	53,2	53,2	53,3	53,3	53,3	53,2	53,0	52,9	52,7	52,5	52,2	52,0	51,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,8	11,8	11,8	11,8	11,9	12,1	12,3	12,5	12,7	13,0	13,3	13,5	13,7	13,9	14,1	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,3	72,3	72,5	72,8	73,2	73,7	74,2	74,9	75,7	76,5	77,3	78,2	79,1	80,0	80,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	160,6	160,5	160,4	160,4	160,5	160,9	161,4	162,0	162,8	163,6	164,5	165,4	166,3	167,1	167,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-4,0	-4,2	-4,4	-4,6	-4,9	-5,2	-5,4	-5,7	-6,0	-6,3	-6,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	2,2	2,2	2,1	2,0	1,9	1,7	1,5	1,3	1,1	1,0	0,8	0,6	0,5	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHc}}$	13,3	13,3	13,3	13,4	13,5	13,6	13,7	13,8	14,0	14,1	14,3	14,4	14,5	14,6	14,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HHt}}$	19,6	19,6	19,6	19,6	19,7	19,8	20,0	20,1	20,3	20,5	20,7	20,8	21,0	21,2	21,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,4	33,5	33,7	34,0	34,2	34,5	34,8	35,1	35,5	35,9	36,3	36,7	37,1	37,5	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	125,8	125,7	125,6	125,6	125,7	125,8	126,2	126,6	127,1	127,7	128,3	129,0	129,6	130,2	130,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,7	-4,8	-4,9	-5,0	-5,1	-5,2	-4,7
Total	DM	-12,83	-12,80	-12,77	-12,72	-12,65	-12,53	-12,38	-12,18	-11,92	-11,63	-11,27	-10,94	-10,60	-10,26	-9,93	—
	DMA	19,72	19,71	19,77	19,91	20,11	20,39	20,71	21,09	21,55	22,13	22,70	23,25	23,88	24,52	25,12	—
	PDMA	12,21	12,29	12,56	13,34	14,16	15,43	16,89	18,47	20,31	22,43	24,28	26,43	28,51	30,49	32,31	—
CPI	DM	-35,16	-35,08	-35,01	-34,93	-34,90	-34,85	-34,75	-34,61	-34,41	-34,19	-33,86	-33,55	-33,22	-32,87	-32,54	—
	DMA	41,13	41,15	41,28	41,55	41,90	42,34	42,81	43,28	43,83	44,61	45,34	46,04	46,93	47,84	48,70	—
	PDMA	14,82	15,04	15,65	16,58	17,63	19,01	20,51	22,12	23,79	25,94	27,86	29,92	31,86	33,91	35,68	—
SPI	DM	3,55	3,53	3,54	3,57	3,67	3,83	4,03	4,27	4,57	4,92	5,29	5,64	5,99	6,33	6,65	—
	DMA	4,02	3,99	3,99	4,04	4,13	4,29	4,50	4,82	5,21	5,64	6,09	6,55	6,99	7,42	7,83	—
	PDMA	10,31	10,27	10,28	10,96	11,62	12,81	14,23	15,79	17,75	19,86	21,66	23,87	26,04	27,99	29,84	—
ΔCS	DM	-38,72	-38,62	-38,55	-38,50	-38,57	-38,67	-38,79	-38,88	-38,98	-39,11	-39,16	-39,19	-39,20	-39,20	-39,19	—
	DMA	37,11	37,17	37,29	37,51	37,77	38,04	38,31	38,46	38,62	38,97	39,24	39,49	39,94	40,42	40,87	—
	PDMA	4,51	4,77	5,37	5,62	6,01	6,20	6,28	6,33	6,04	6,07	6,20	6,05	5,82	5,92	5,83	—

8.6.2 Geometrias Otimizadas

Tabela 8.406: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	487,8	491,5	496,7	503,4	511,3	520,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,2	14,8	14,4	13,9	13,3	12,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,1	-80,6	-81,3	-82,2	-83,2	-84,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	-6,0	-6,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,6	44,7	45,0	45,3	45,6	46,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,1	-8,1	-8,0	-8,2	-8,3	-8,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,5	165,1	164,3	165,4	168,2	172,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1514,1	-1511,1	-1508,6	-1506,1	-1503,0	-1498,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-113,0	-107,9	-102,0	-95,5	-88,7	-81,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-11,0	-5,0	1,9	9,6	17,6	25,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-201,7	-193,6	-185,0	-176,0	-166,7	-157,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	118,5	117,4	116,7	116,4	116,5	116,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,3	-11,4	-11,6	-12,0	-12,4	-12,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,2	190,9	191,0	191,4	192,2	193,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,6	240,2	238,4	237,4	237,1	237,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	56,0	56,3	56,6	56,8	56,9	56,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,1	9,0	9,0	9,2	9,4	9,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,0	65,9	66,0	66,4	67,0	67,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	148,8	147,6	146,8	146,5	146,7	147,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,7	-0,8	-1,0	-1,3	-1,6	-2,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,2	3,0	2,8	2,4	2,0	1,5	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,1	13,3	13,5	13,7	13,9	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,0	18,9	18,9	19,0	19,1	19,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,7	31,8	31,9	32,2	32,3	32,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	117,1	116,0	115,4	115,1	115,4	115,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,5	-3,6	-3,7	-3,9	-4,1	-4,7
Total	DM	-2,42	-1,78	-0,87	0,32	1,76	3,45	—
	DMA	12,55	12,48	12,25	12,00	12,10	12,69	—
	PDMA	20,07	18,16	15,76	12,31	11,00	12,83	—
CPI	DM	-5,42	-3,35	-0,85	2,08	5,38	9,05	—
	DMA	24,07	23,41	22,54	21,88	22,18	23,76	—
	PDMA	27,73	24,01	19,83	14,92	12,92	17,95	—
SPI	DM	-0,21	-0,63	-0,89	-0,97	-0,90	-0,67	—
	DMA	4,09	4,47	4,71	4,75	4,70	4,57	—
	PDMA	14,46	13,88	12,78	10,39	9,60	9,09	—
ΔCS	DM	-5,20	-2,72	0,04	3,06	6,28	9,72	—
	DMA	19,98	18,94	17,82	17,14	17,48	19,19	—
	PDMA	13,28	10,13	7,06	4,53	3,32	8,86	—

Tabela 8.407: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	486,5	489,7	494,2	499,9	506,8	514,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,3	14,9	14,6	14,1	13,7	13,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,0	-80,4	-81,0	-81,8	-82,7	-83,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,9	-5,9	-5,9	-5,9	-6,1	-6,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	44,7	45,0	45,3	45,6	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,3	-8,2	-8,2	-8,3	-8,5	-8,7	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	169,0	166,9	166,2	167,2	169,6	173,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1516,2	-1513,8	-1511,9	-1510,2	-1508,0	-1504,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-114,2	-109,8	-104,6	-99,0	-93,0	-86,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-12,7	-7,5	-1,4	5,1	12,1	19,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-207,4	-200,2	-192,7	-184,7	-176,4	-168,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	119,3	118,4	117,7	117,5	117,5	117,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,5	-11,6	-11,8	-12,0	-12,4	-12,7	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	191,9	191,7	191,7	192,1	192,8	193,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,1	242,0	240,5	239,6	239,3	239,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,9	56,2	56,5	56,6	56,7	56,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,2	9,1	9,2	9,3	9,5	9,7	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	66,5	66,4	66,5	66,8	67,4	68,1	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	149,8	148,7	148,0	147,8	147,9	148,4	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,8	-0,9	-1,0	-1,3	-1,6	-2,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,1	3,0	2,7	2,4	2,1	1,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,1	13,2	13,4	13,6	13,8	14,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,1	19,0	19,0	19,1	19,2	19,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	31,9	32,0	32,1	32,3	32,4	32,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,0	117,0	116,4	116,2	116,4	116,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,4	-3,5	-3,6	-3,7	-3,9	-4,1	-4,7
Total	DM	-2,62	-2,07	-1,28	-0,27	0,97	2,40	—
	DMA	12,32	12,29	12,07	11,68	11,60	11,80	—
	PDMA	19,78	18,21	15,90	13,08	10,47	10,66	—
CPI	DM	-6,37	-4,59	-2,42	0,07	2,93	6,04	—
	DMA	23,97	23,45	22,65	21,65	21,53	22,09	—
	PDMA	28,35	25,24	21,40	17,27	12,57	13,10	—
SPI	DM	0,14	-0,23	-0,45	-0,52	-0,47	-0,27	—
	DMA	3,78	4,11	4,31	4,36	4,32	4,25	—
	PDMA	13,50	13,06	11,86	10,01	8,94	8,88	—
ΔCS	DM	-6,51	-4,36	-1,96	0,59	3,39	6,30	—
	DMA	20,19	19,34	18,35	17,29	17,21	17,84	—
	PDMA	14,84	12,18	9,53	7,26	3,63	4,22	—

Tabela 8.408: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func. $\alpha + \beta$ γ	LCB95 30%	LCB95 30%	LCB95 30%	LCB95 30%	LCB95 30%	LCB95 30%	Exp. —
		0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	¹ J _{HF}	485,2	487,9	491,6	496,4	502,1	508,7	500
CO	¹ J _{CO}	15,4	15,1	14,8	14,4	14,0	13,5	16,4
H ₂ O	¹ J _{OH}	-79,9	-80,3	-80,8	-81,4	-82,2	-83,1	-80,6
H ₂ O	² J _{HH}	-6,0	-6,0	-6,0	-6,1	-6,1	-6,3	-7,3
NH ₃	¹ J _{NH}	44,7	44,8	45,0	45,2	45,5	45,8	43,8
NH ₃	² J _{HH}	-8,4	-8,4	-8,4	-8,4	-8,6	-8,7	-9,6
PH ₃	¹ J _{PH}	170,5	168,7	168,1	168,9	170,9	173,9	188,2
PF ₃	¹ J _{PF}	-1518,2	-1516,3	-1515,0	-1513,9	-1512,6	-1510,5	-1441
BHF ₂	¹ J _{BF}	-115,3	-111,6	-107,3	-102,5	-97,5	-92,3	-84
BF ₃	¹ J _{BF}	-14,4	-10,0	-4,9	0,6	6,5	12,5	15
F ₂ O	¹ J _{OF}	-213,2	-207,1	-200,6	-193,7	-186,6	-179,4	-300
CH ₄	¹ J _{CH}	120,1	119,3	118,8	118,6	118,6	118,9	125,3
CH ₄	² J _{HH}	-11,6	-11,7	-11,9	-12,1	-12,4	-12,7	-12,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CC}	192,6	192,4	192,4	192,7	193,3	194,2	174,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CH}	245,6	243,9	242,6	241,8	241,6	241,8	247,6
C ₂ H ₂	² J _{CH}	55,9	56,1	56,3	56,5	56,5	56,5	50,1
C ₂ H ₂	³ J _{HH}	9,4	9,3	9,3	9,4	9,5	9,7	9,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CC}	67,0	66,9	67,0	67,3	67,7	68,4	67,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CH}	150,7	149,8	149,2	149,0	149,2	149,6	156,3
C ₂ H ₄	² J _{CH}	-0,8	-0,9	-1,0	-1,2	-1,5	-1,8	-2,4
C ₂ H ₄	² J _{HH}	3,0	2,9	2,7	2,5	2,1	1,8	2,3
C ₂ H ₄	³ J _{HH_c}	13,1	13,2	13,3	13,5	13,7	13,8	11,7
C ₂ H ₄	³ J _{HH_t}	19,2	19,1	19,1	19,2	19,3	19,4	19
C ₂ H ₆	¹ J _{CC}	32,1	32,2	32,0	32,2	32,5	32,9	34,5
C ₂ H ₆	¹ J _{CH}	118,8	118,0	117,6	117,4	117,5	117,9	125,2
C ₂ H ₆	² J _{CH}	-3,5	-3,5	-3,6	-3,7	-3,8	-4,0	-4,7
Total	DM	-2,81	-2,35	-1,72	-0,86	0,16	1,37	—
	DMA	12,10	12,07	11,90	11,59	11,29	11,23	—
	PDMA	19,60	18,25	16,38	14,13	11,86	10,00	—
CPI	DM	-7,32	-5,83	-4,04	-1,95	0,41	3,02	—
	DMA	23,85	23,41	22,78	21,96	21,30	21,20	—
	PDMA	29,02	26,31	23,10	19,53	15,68	11,76	—
SPI	DM	0,50	0,19	-0,02	-0,07	-0,02	0,15	—
	DMA	3,49	3,75	3,93	3,99	3,95	3,93	—
	PDMA	12,69	12,34	11,46	10,18	9,06	8,72	—
Δ CS	DM	-7,82	-6,02	-4,02	-1,88	0,43	2,86	—
	DMA	20,36	19,66	18,86	17,98	17,35	17,27	—
	PDMA	16,33	13,97	11,64	9,35	6,62	3,04	—

Tabela 8.409: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	70%	70%	70%	70%	70%	70%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	483,8	486,0	489,0	492,8	497,5	502,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	15,4	15,2	15,0	14,7	14,3	14,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-79,8	-80,1	-80,5	-81,0	-81,7	-82,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,2	-6,1	-6,1	-6,2	-6,2	-6,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,7	44,8	45,0	45,2	45,4	45,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,6	-8,6	-8,5	-8,6	-8,7	-8,8	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	171,9	170,5	170,0	170,7	172,3	174,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1520,2	-1518,8	-1517,9	-1517,4	-1516,8	-1515,6	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-116,5	-113,5	-110,0	-106,1	-102,0	-97,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-16,1	-12,6	-8,5	-3,9	0,8	5,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-219,1	-214,1	-208,8	-203,1	-197,2	-191,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,9	120,3	119,9	119,7	119,7	120,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-11,8	-11,8	-12,0	-12,1	-12,4	-12,6	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	193,3	193,1	193,2	193,4	193,9	194,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,1	245,7	244,7	244,1	243,9	244,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,9	56,0	56,2	56,3	56,4	56,3	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,5	9,5	9,5	9,5	9,6	9,8	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	67,5	67,4	67,5	67,7	68,1	68,6	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,7	151,0	150,5	150,3	150,4	150,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-0,9	-0,9	-1,0	-1,2	-1,4	-1,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,9	2,9	2,7	2,5	2,2	2,0	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,1	13,2	13,3	13,4	13,5	13,7	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,3	19,2	19,2	19,3	19,3	19,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	32,1	32,1	32,2	32,4	32,6	32,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,7	119,1	118,7	118,6	118,6	118,9	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,5	-3,5	-3,6	-3,7	-3,8	-3,9	-4,7
Total	DM	-3,03	-2,65	-2,13	-1,45	-0,64	0,32	—
	DMA	11,88	11,87	11,73	11,48	11,16	10,95	—
	PDMA	19,30	18,53	16,91	14,89	12,96	11,43	—
CPI	DM	-8,33	-7,11	-5,65	-3,98	-2,11	-0,03	—
	DMA	23,73	23,40	22,89	22,24	21,45	20,97	—
	PDMA	29,55	27,49	24,96	21,84	18,80	15,54	—
SPI	DM	0,85	0,61	0,46	0,41	0,43	0,58	—
	DMA	3,19	3,41	3,54	3,59	3,61	3,59	—
	PDMA	11,79	11,96	11,00	9,79	8,67	8,41	—
ΔCS	DM	-9,17	-7,72	-6,11	-4,39	-2,54	-0,61	—
	DMA	20,53	19,99	19,35	18,64	17,85	17,38	—
	PDMA	17,76	15,54	13,95	12,05	10,14	7,13	—

Tabela 8.410: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	523,0	526,0	530,3	535,8	542,5	550,0	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,2	11,9	11,5	11,1	10,7	10,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,9	-84,3	-84,8	-85,6	-86,4	-87,4	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,6	-6,6	-6,6	-6,7	-6,8	-6,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,8	45,9	46,0	46,2	46,5	46,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,9	-8,8	-8,8	-8,9	-9,1	-9,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	178,3	176,1	175,4	176,2	178,5	181,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1486,4	-1482,4	-1478,7	-1475,1	-1470,4	-1465,3	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-92,7	-88,6	-83,7	-78,3	-72,5	-66,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	11,6	16,4	22,1	28,4	35,1	41,8	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-186,3	-179,7	-172,8	-165,4	-157,8	-150,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,1	119,2	118,6	118,3	118,4	118,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,2	-12,4	-12,7	-13,0	-13,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	194,6	194,4	194,5	194,9	195,7	196,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	244,4	242,3	240,8	240,0	239,7	240,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,8	56,1	56,3	56,4	56,5	56,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,6	9,6	9,6	9,8	10,0	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	68,9	68,8	69,0	69,3	69,9	70,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	150,9	149,8	149,1	148,9	149,0	149,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,6	-1,7	-1,9	-2,1	-2,5	-2,9	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,4	2,3	2,1	1,7	1,3	0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,5	13,6	13,7	13,9	14,2	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,3	19,2	19,3	19,3	19,5	19,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,7	33,7	33,6	33,8	34,2	34,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	118,9	118,0	117,5	117,3	117,4	117,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,9	-3,9	-4,0	-4,2	-4,3	-4,5	-4,7
Total	DM	2,91	3,47	4,26	5,28	6,59	8,05	—
	DMA	10,28	10,56	11,11	12,02	12,90	13,79	—
	PDMA	9,73	9,10	10,65	12,97	15,59	19,28	—
CPI	DM	5,93	7,73	9,91	12,44	15,40	18,55	—
	DMA	19,55	19,78	20,75	22,69	24,60	26,51	—
	PDMA	12,28	11,29	14,87	19,67	24,63	29,72	—
SPI	DM	0,69	0,34	0,11	0,03	0,13	0,36	—
	DMA	3,48	3,79	4,05	4,19	4,33	4,47	—
	PDMA	7,87	7,49	7,56	8,05	8,97	11,62	—
ΔCS	DM	5,23	7,39	9,80	12,40	15,27	18,19	—
	DMA	16,07	15,99	16,70	18,50	20,27	22,04	—
	PDMA	4,41	3,80	7,31	11,62	15,67	18,10	—

Tabela 8.411: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	521,8	524,4	527,9	532,6	538,2	544,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,2	12,0	11,7	11,4	11,0	10,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,9	-84,2	-84,6	-85,2	-86,0	-86,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,7	-6,7	-6,8	-6,9	-7,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,9	45,9	46,0	46,2	46,5	46,8	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,0	-9,0	-9,0	-9,1	-9,2	-9,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	179,8	178,0	177,4	178,1	180,0	182,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1488,9	-1485,6	-1482,7	-1479,9	-1476,9	-1473,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-93,7	-90,2	-86,1	-81,6	-76,7	-71,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	10,0	14,1	18,9	24,2	29,9	35,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-191,7	-186,1	-180,1	-173,8	-167,1	-160,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,0	120,2	119,7	119,4	119,5	119,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,3	-12,3	-12,5	-12,7	-13,0	-13,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,4	195,2	195,3	195,6	196,2	197,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	245,9	244,2	243,0	242,2	242,0	242,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,8	56,0	56,2	56,3	56,3	56,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,8	9,7	9,8	9,9	10,1	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	69,5	69,4	69,5	69,8	70,3	71,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,8	150,9	150,3	150,1	150,3	150,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,7	-1,9	-2,1	-2,4	-2,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,3	2,2	2,0	1,7	1,4	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,4	13,5	13,7	13,8	14,0	14,2	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,4	19,4	19,4	19,4	19,6	19,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,6	33,7	33,8	34,0	34,3	34,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,8	119,1	118,6	118,4	118,5	118,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,9	-4,0	-4,0	-4,1	-4,3	-4,4	-4,7
Total	DM	2,71	3,20	3,87	4,72	5,79	7,02	—
	DMA	10,04	10,18	10,57	11,18	11,97	12,75	—
	PDMA	9,59	8,78	9,71	11,35	13,26	16,27	—
CPI	DM	4,98	6,52	8,35	10,47	12,90	15,53	—
	DMA	19,25	19,23	19,85	21,13	22,88	24,55	—
	PDMA	12,79	10,48	12,34	15,87	20,20	24,47	—
SPI	DM	1,05	0,76	0,59	0,51	0,58	0,77	—
	DMA	3,29	3,55	3,76	3,89	3,97	4,09	—
	PDMA	7,25	7,54	7,77	8,04	8,17	10,25	—
ΔCS	DM	3,94	5,76	7,76	9,97	12,32	14,75	—
	DMA	15,97	15,68	16,09	17,23	18,92	20,45	—
	PDMA	5,55	2,95	4,57	7,83	12,04	14,22	—

Tabela 8.412: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func. $\alpha + \beta$ γ	LCB95 40% 80%	LCB95 40% 80%	LCB95 40% 80%	LCB95 40% 80%	LCB95 40% 80%	LCB95 40% 80%	Exp. — — —
HF	$^1J_{\text{HF}}$	520,6	522,7	525,5	529,3	533,8	538,8	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,3	12,1	11,9	11,6	11,3	10,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,8	-84,0	-84,4	-84,9	-85,5	-86,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,9	-6,8	-6,8	-6,9	-7,0	-7,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	45,9	46,0	46,1	46,2	46,4	46,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,2	-9,1	-9,2	-9,2	-9,3	-9,5	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	181,4	179,9	179,4	179,9	181,5	183,8	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1491,3	-1488,8	-1486,6	-1484,6	-1482,4	-1479,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-94,7	-91,9	-88,6	-84,9	-81,0	-76,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	8,5	11,8	15,7	20,0	24,5	29,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-197,4	-192,7	-187,7	-182,5	-177,0	-171,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	121,2	120,7	120,6	120,6	120,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,4	-12,5	-12,6	-12,8	-13,0	-13,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,1	196,0	196,0	196,3	196,8	197,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,5	246,1	245,1	244,5	244,3	244,5	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,7	55,9	56,0	56,1	56,1	56,1	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,9	9,9	9,9	10,0	10,1	10,3	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,0	69,9	70,0	70,3	70,7	71,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,8	152,1	151,6	151,5	151,6	151,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,7	-1,8	-1,9	-2,1	-2,3	-2,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,2	2,1	2,0	1,8	1,5	1,2	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,4	13,5	13,6	13,8	13,9	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	19,5	19,5	19,5	19,6	19,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,8	33,9	34,0	34,1	34,4	35,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,7	120,1	119,7	119,5	119,6	119,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,9	-4,0	-4,0	-4,1	-4,2	-4,4	-4,7
Total	DM	2,53	2,93	3,46	4,15	5,00	5,98	—
	DMA	9,76	9,90	10,03	10,39	10,96	11,63	—
	PDMA	9,86	9,15	8,55	9,63	11,22	13,51	—
CPI	DM	4,05	5,30	6,76	8,46	10,40	12,51	—
	DMA	18,88	18,92	19,00	19,72	20,96	22,38	—
	PDMA	13,17	11,48	9,90	12,42	15,59	19,06	—
SPI	DM	1,42	1,19	1,03	0,99	1,04	1,19	—
	DMA	3,07	3,28	3,45	3,55	3,63	3,75	—
	PDMA	7,44	7,44	7,55	7,59	8,02	9,45	—
ΔCS	DM	2,63	4,11	5,73	7,47	9,36	11,32	—
	DMA	15,81	15,64	15,55	16,16	17,34	18,64	—
	PDMA	5,74	4,04	2,35	4,83	7,56	9,61	—

Tabela 8.413: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	70%	70%	70%	70%	70%	70%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	519,4	520,9	523,1	525,9	529,3	533,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	12,4	12,2	12,1	11,9	11,6	11,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,7	-83,9	-84,2	-84,6	-85,0	-85,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,0	-7,0	-7,0	-7,0	-7,1	-7,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,0	46,0	46,1	46,2	46,4	46,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,3	-9,3	-9,3	-9,4	-9,5	-9,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	182,9	181,8	181,4	181,8	183,0	184,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1493,7	-1491,9	-1490,3	-1489,0	-1487,6	-1486,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-95,8	-93,6	-91,1	-88,3	-85,3	-82,2	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	6,9	9,4	12,4	15,6	19,1	22,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-203,1	-199,5	-195,7	-191,5	-187,3	-182,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,6	122,2	121,8	121,7	121,7	121,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,6	-12,6	-12,7	-12,9	-13,0	-13,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	196,9	196,8	196,8	197,0	197,4	198,0	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	249,0	248,0	247,2	246,8	246,6	246,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,6	55,8	55,9	56,0	56,0	55,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,1	10,0	10,1	10,1	10,2	10,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,5	70,5	70,5	70,7	71,0	71,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,8	153,2	152,9	152,8	152,9	153,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,8	-1,8	-1,9	-2,1	-2,2	-2,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,1	2,1	2,0	1,8	1,6	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,4	13,5	13,6	13,7	13,8	13,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,6	19,6	19,6	19,6	19,7	19,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,1	34,1	34,2	34,3	34,5	34,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,6	121,1	120,8	120,7	120,8	121,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,0	-4,0	-4,0	-4,1	-4,2	-4,3	-4,7
Total	DM	2,34	2,64	3,05	3,57	4,21	4,93	—
	DMA	9,60	9,63	9,67	9,75	10,02	10,44	—
	PDMA	10,02	9,44	8,75	8,20	9,24	10,63	—
CPI	DM	3,10	4,02	5,15	6,43	7,88	9,46	—
	DMA	18,55	18,56	18,55	18,65	19,21	20,12	—
	PDMA	13,74	12,30	10,49	9,21	11,16	13,69	—
SPI	DM	1,79	1,63	1,51	1,47	1,51	1,61	—
	DMA	3,04	3,08	3,15	3,23	3,29	3,35	—
	PDMA	7,29	7,34	7,47	7,46	7,84	8,38	—
ΔCS	DM	1,31	2,39	3,63	4,96	6,37	7,85	—
	DMA	15,51	15,48	15,39	15,42	15,92	16,77	—
	PDMA	6,46	4,96	3,01	1,75	3,32	5,30	—

Tabela 8.414: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	557,9	560,3	563,7	568,1	573,5	579,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	9,1	8,9	8,7	8,4	8,0	7,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,7	-87,9	-88,3	-88,9	-89,6	-90,3	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,5	-7,4	-7,5	-7,5	-7,6	-7,7	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,9	46,9	47,0	47,2	47,4	47,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,7	-9,6	-9,7	-9,7	-9,9	-10,0	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	188,8	186,9	186,2	186,8	188,6	191,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1453,5	-1448,8	-1444,6	-1440,5	-1436,0	-1432,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-72,7	-69,4	-65,5	-61,1	-56,5	-51,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	33,7	37,4	42,0	47,0	52,4	57,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-171,8	-166,7	-161,3	-155,6	-149,6	-143,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	121,8	121,0	120,5	120,3	120,3	120,6	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,9	-13,0	-13,1	-13,4	-13,6	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	198,4	198,2	198,3	198,7	199,4	200,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	246,3	244,6	243,4	242,7	242,5	242,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,5	55,7	55,9	56,0	55,9	55,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,3	10,2	10,3	10,4	10,6	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,1	72,0	72,1	72,5	73,0	73,8	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	152,9	152,0	151,5	151,3	151,5	151,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,6	-2,6	-2,8	-3,0	-3,4	-3,7	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,6	1,5	1,3	1,0	0,7	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,9	14,1	14,2	14,4	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,7	19,6	19,7	19,8	19,9	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,4	35,4	35,8	36,0	36,3	36,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	120,0	119,5	119,3	119,4	119,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,9	-4,7
Total	DM	8,35	8,83	9,53	10,40	11,46	12,65	—
	DMA	11,49	12,07	12,80	13,58	14,70	15,98	—
	PDMA	14,43	15,85	18,34	21,04	24,37	28,16	—
CPI	DM	17,51	19,06	20,89	23,03	25,44	27,99	—
	DMA	22,45	23,43	24,76	26,30	28,71	31,52	—
	PDMA	23,44	26,15	29,99	33,98	38,66	43,62	—
SPI	DM	1,64	1,33	1,19	1,14	1,21	1,41	—
	DMA	3,45	3,73	4,02	4,25	4,42	4,59	—
	PDMA	7,83	8,30	9,79	11,54	13,89	16,83	—
Δ CS	DM	15,87	17,73	19,70	21,89	24,23	26,58	—
	DMA	19,00	19,69	20,74	22,05	24,29	26,92	—
	PDMA	15,61	17,85	20,20	22,43	24,78	26,78	—

Tabela 8.415: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	556,8	558,7	561,5	565,1	569,4	574,3	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	9,2	9,0	8,8	8,6	8,3	7,9	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,6	-87,8	-88,2	-88,6	-89,2	-89,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-7,6	-7,6	-7,6	-7,7	-7,8	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,0	47,0	47,1	47,2	47,4	47,6	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,8	-9,8	-9,8	-9,9	-10,0	-10,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	190,4	188,9	188,3	188,7	190,2	192,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1456,2	-1452,9	-1449,7	-1446,0	-1442,7	-1439,0	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-73,6	-70,9	-67,7	-64,2	-60,4	-56,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	32,3	35,3	39,0	43,1	47,4	51,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-177,0	-172,8	-168,3	-163,5	-158,5	-153,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,6	122,0	121,6	121,4	121,4	121,7	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,1	-13,1	-13,2	-13,4	-13,7	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	199,2	199,0	199,1	199,4	200,0	200,8	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,9	246,5	245,5	245,0	244,8	245,0	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,4	55,6	55,7	55,8	55,8	55,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,4	10,4	10,4	10,5	10,7	10,9	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	72,6	72,6	72,7	73,0	73,4	74,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	153,9	153,2	152,8	152,6	152,8	153,1	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,7	-2,7	-2,8	-3,0	-3,3	-3,6	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,5	1,4	1,3	1,0	0,7	0,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,9	14,0	14,2	14,3	14,5	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,8	19,7	19,8	19,8	20,0	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	35,6	35,7	36,0	36,1	36,4	36,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	121,7	121,0	120,6	120,4	120,5	120,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,8	-4,7
Total	DM	8,20	8,57	9,13	9,85	10,70	11,69	—
	DMA	11,27	11,67	12,22	12,84	13,59	14,52	—
	PDMA	14,49	15,74	17,39	19,78	22,59	25,65	—
CPI	DM	16,64	17,84	19,32	21,09	23,03	25,15	—
	DMA	22,07	22,75	23,75	24,98	26,52	28,55	—
	PDMA	22,58	24,89	27,80	31,14	34,93	38,98	—
SPI	DM	2,01	1,78	1,66	1,61	1,67	1,82	—
	DMA	3,34	3,54	3,75	3,94	4,11	4,23	—
	PDMA	8,55	9,02	9,76	11,45	13,54	15,86	—
ΔCS	DM	14,63	16,06	17,66	19,48	21,36	23,33	—
	DMA	18,73	19,21	20,00	21,04	22,41	24,31	—
	PDMA	14,03	15,87	18,04	19,69	21,39	23,12	—

Tabela 8.416: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func. $\alpha + \beta$ γ	LCB95 50%	LCB95 50%	LCB95 50%	LCB95 50%	LCB95 50%	LCB95 50%	Exp. —
		0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	¹ J _{HF}	555,7	557,2	559,3	562,0	565,2	569,0	500
CO	¹ J _{CO}	9,2	9,1	9,0	8,8	8,5	8,3	16,4
H ₂ O	¹ J _{OH}	-87,6	-87,7	-88,0	-88,3	-88,8	-89,2	-80,6
H ₂ O	² J _{HH}	-7,7	-7,7	-7,7	-7,7	-7,8	-7,9	-7,3
NH ₃	¹ J _{NH}	47,0	47,0	47,1	47,2	47,4	47,5	43,8
NH ₃	² J _{HH}	-10,0	-10,0	-10,0	-10,0	-10,1	-10,2	-9,6
PH ₃	¹ J _{PH}	192,0	190,8	190,4	190,7	191,8	193,5	188,2
PF ₃	¹ J _{PF}	-1458,9	-1456,4	-1454,1	-1451,9	-1449,7	-1446,5	-1441
BHF ₂	¹ J _{BF}	-74,4	-72,4	-70,0	-67,4	-64,5	-61,5	-84
BF ₃	¹ J _{BF}	30,9	33,2	36,0	39,1	42,4	45,8	15
F ₂ O	¹ J _{OF}	-182,4	-179,1	-175,6	-171,8	-167,9	-163,9	-300
CH ₄	¹ J _{CH}	123,5	123,0	122,7	122,5	122,6	122,7	125,3
CH ₄	² J _{HH}	-13,3	-13,3	-13,4	-13,5	-13,7	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CC}	200,0	199,9	199,9	200,2	200,6	201,2	174,8
C ₂ H ₂	¹ J _{CH}	249,5	248,5	247,7	247,3	247,1	247,3	247,6
C ₂ H ₂	² J _{CH}	55,4	55,5	55,6	55,6	55,6	55,5	50,1
C ₂ H ₂	³ J _{HH}	10,5	10,4	10,6	10,7	10,8	11,0	9,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CC}	73,2	73,1	73,2	73,4	73,8	74,3	67,6
C ₂ H ₄	¹ J _{CH}	154,9	154,4	154,1	153,9	154,0	154,3	156,3
C ₂ H ₄	² J _{CH}	-2,7	-2,8	-2,9	-3,0	-3,2	-3,4	-2,4
C ₂ H ₄	² J _{HH}	1,4	1,3	1,2	1,0	0,8	0,6	2,3
C ₂ H ₄	³ J _{HH_c}	13,8	13,9	14,0	14,1	14,2	14,3	11,7
C ₂ H ₄	³ J _{HH_t}	19,9	19,9	19,9	19,9	20,0	20,1	19
C ₂ H ₆	¹ J _{CC}	35,9	35,9	36,2	36,3	36,5	36,8	34,5
C ₂ H ₆	¹ J _{CH}	122,6	122,1	121,7	121,6	121,7	121,9	125,2
C ₂ H ₆	² J _{CH}	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,6	-4,7	-4,7
Total	DM	8,04	8,32	8,75	9,27	9,91	10,69	—
	DMA	11,15	11,38	11,76	12,25	12,83	13,41	—
	PDMA	14,50	15,58	16,96	18,57	20,70	22,80	—
CPI	DM	15,72	16,65	17,77	19,07	20,51	22,18	—
	DMA	21,70	22,21	22,99	23,98	25,20	26,44	—
	PDMA	21,87	23,60	25,78	28,27	31,28	34,31	—
SPI	DM	2,41	2,22	2,13	2,09	2,14	2,26	—
	DMA	3,41	3,45	3,53	3,65	3,77	3,86	—
	PDMA	9,10	9,70	10,49	11,46	12,94	14,36	—
Δ CS	DM	13,31	14,43	15,65	16,99	18,37	19,92	—
	DMA	18,29	18,76	19,46	20,34	21,43	22,58	—
	PDMA	12,77	13,90	15,29	16,81	18,34	19,96	—

Tabela 8.417: Constantes de acoplamento LC-BB95 com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=70\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	LCB95	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	70%	70%	70%	70%	70%	70%	—
	γ	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	554,6	555,6	557,0	558,8	561,0	563,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	9,3	9,2	9,1	9,0	8,8	8,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,5	-87,6	-87,8	-88,0	-88,3	-88,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,8	-7,8	-7,9	-7,9	-7,9	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,1	47,1	47,1	47,2	47,3	47,4	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-10,2	-10,1	-10,2	-10,2	-10,2	-10,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	193,6	192,8	192,5	192,7	193,5	194,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1461,5	-1459,9	-1458,4	-1457,1	-1455,7	-1454,2	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-75,3	-74,0	-72,4	-70,6	-68,6	-66,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	29,5	31,0	32,9	35,0	37,3	39,6	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-187,9	-185,6	-183,2	-180,6	-177,8	-175,1	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,3	124,0	123,8	123,7	123,7	123,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,4	-13,4	-13,5	-13,6	-13,7	-13,8	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	200,8	200,7	200,7	200,9	201,2	201,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	251,1	250,4	249,9	249,6	249,5	249,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	55,3	55,4	55,4	55,5	55,4	55,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,7	10,7	10,8	10,9	11,0	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	73,7	73,7	73,8	73,9	74,2	74,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	156,0	155,6	155,4	155,3	155,4	155,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,8	-2,8	-2,9	-3,0	-3,1	-3,3	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,3	1,3	1,2	1,1	0,9	0,8	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,8	13,9	14,0	14,0	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,0	20,0	20,0	20,0	20,1	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	36,1	36,4	36,4	36,5	36,6	36,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,4	123,1	122,9	122,8	122,8	123,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,5	-4,5	-4,5	-4,5	-4,6	-4,7	-4,7
Total	DM	7,87	8,08	8,35	8,70	9,14	9,63	—
	DMA	11,01	11,17	11,42	11,76	12,15	12,57	—
	PDMA	14,61	15,07	16,14	17,36	18,71	20,12	—
CPI	DM	14,81	15,44	16,17	17,04	18,05	19,09	—
	DMA	21,30	21,64	22,17	22,87	23,72	24,62	—
	PDMA	21,22	22,16	23,73	25,54	27,47	29,52	—
SPI	DM	2,78	2,69	2,61	2,59	2,61	2,69	—
	DMA	3,46	3,50	3,54	3,61	3,67	3,74	—
	PDMA	9,77	9,87	10,57	11,37	12,28	13,23	—
ΔCS	DM	12,03	12,75	13,57	14,44	15,43	16,40	—
	DMA	17,84	18,14	18,63	19,27	20,05	20,88	—
	PDMA	11,46	12,29	13,16	14,16	15,18	16,29	—

Tabela 8.418: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha = 30\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	472,6	472,3	472,7	474,4	477,8	483,1	490,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,8	14,7	14,4	14,0	13,6	13,0	12,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-78,5	-78,4	-78,6	-78,9	-79,5	-80,5	-81,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	-5,9	-6,1	-6,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	44,6	44,7	44,9	45,2	45,5	46,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-7,6	-7,6	-7,7	-7,8	-8,1	-8,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,5	166,9	165,4	163,9	163,6	164,9	168,2	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1621,3	-1619,6	-1617,2	-1614,2	-1611,1	-1607,8	-1604,1	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-116,6	-116,0	-113,7	-109,7	-104,2	-97,8	-90,7	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-7,5	-7,1	-5,1	-1,3	4,2	11,0	18,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-175,0	-177,2	-179,3	-180,3	-179,7	-177,4	-173,5	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,4	117,3	117,1	116,9	116,9	117,3	118,0	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-10,9	-11,0	-11,2	-11,5	-12,0	-12,5	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,4	190,6	191,1	191,8	192,7	193,8	195,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,9	242,4	241,7	240,9	240,5	240,6	241,4	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,6	54,0	54,4	54,9	55,2	55,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,9	8,8	8,9	9,0	9,2	9,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,7	65,9	66,4	67,1	67,9	68,8	70,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	147,0	146,8	146,5	146,3	146,4	146,9	147,9	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	-1,4	-1,7	-2,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,0	3,0	3,0	2,8	2,6	2,2	1,7	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	13,3	13,4	13,5	13,7	14,0	14,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	18,8	18,8	18,8	18,9	19,1	19,4	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	30,8	31,2	31,6	32,1	32,7	33,4	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	115,3	115,1	115,0	114,9	115,0	115,5	116,3	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-3,3	-3,3	-3,5	-3,6	-3,9	-4,7
Total	DM	-6,39	-6,42	-6,29	-5,90	-5,18	-4,12	-2,68	—
	DMA	18,49	18,39	18,15	17,73	17,08	16,23	15,57	—
	PDMA	19,98	19,89	19,29	17,62	15,02	11,79	11,13	—
CPI	DM	-13,98	-14,01	-13,73	-12,87	-11,34	-9,19	-6,35	—
	DMA	37,85	37,52	36,84	35,76	34,25	32,30	30,86	—
	PDMA	28,62	28,36	27,05	24,44	20,46	15,28	14,27	—
SPI	DM	-0,83	-0,85	-0,83	-0,79	-0,66	-0,41	0,01	—
	DMA	4,29	4,36	4,45	4,50	4,50	4,45	4,35	—
	PDMA	13,65	13,68	13,61	12,62	11,04	9,24	8,82	—
ΔCS	DM	-13,16	-13,16	-12,89	-12,08	-10,68	-8,78	-6,37	—
	DMA	33,56	33,16	32,39	31,26	29,75	27,85	26,52	—
	PDMA	14,97	14,67	13,44	11,82	9,42	6,05	5,45	—

Tabela 8.419: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	472,6	472,4	472,7	474,2	477,1	481,6	487,7	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,8	14,7	14,5	14,1	13,7	13,3	12,8	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-78,5	-78,5	-78,6	-78,8	-79,4	-80,2	-81,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	-5,9	-6,0	-6,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	44,6	44,6	44,8	45,1	45,3	45,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-7,6	-7,6	-7,7	-7,8	-8,0	-8,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,5	167,0	165,7	164,4	164,1	165,2	168,1	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1621,4	-1619,9	-1617,9	-1615,4	-1612,8	-1610,3	-1607,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-116,5	-116,0	-114,1	-110,6	-105,9	-100,4	-94,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-7,5	-7,2	-5,4	-2,1	2,6	8,4	15,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-174,8	-176,8	-178,5	-179,4	-178,8	-176,8	-173,3	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,4	117,3	117,1	117,0	117,0	117,3	117,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-10,9	-11,0	-11,1	-11,4	-11,8	-12,3	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,4	190,6	191,0	191,6	192,3	193,3	194,6	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,9	242,5	241,9	241,2	240,8	240,9	241,6	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,6	53,9	54,3	54,7	55,0	55,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,9	8,8	8,9	9,0	9,2	9,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,7	65,9	66,3	66,9	67,5	68,4	69,4	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	147,0	146,9	146,6	146,4	146,5	146,9	147,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	-1,3	-1,6	-2,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,0	3,0	3,0	2,9	2,6	2,3	1,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	13,3	13,4	13,5	13,7	13,9	14,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	18,8	18,8	18,8	18,9	19,1	19,3	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	30,8	31,1	31,4	31,9	32,4	33,0	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	115,3	115,2	115,0	115,0	115,1	115,5	116,2	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,2	-3,2	-3,3	-3,3	-3,4	-3,6	-3,8	-4,7
Total	DM	-6,38	-6,40	-6,30	-5,96	-5,35	-4,45	-3,22	—
	DMA	18,50	18,40	18,20	17,85	17,28	16,56	15,73	—
	PDMA	19,98	19,91	19,37	18,05	15,74	12,62	10,26	—
CPI	DM	-13,96	-14,00	-13,75	-13,02	-11,72	-9,89	-7,45	—
	DMA	37,87	37,56	36,99	36,07	34,79	33,16	31,35	—
	PDMA	28,61	28,41	27,21	24,97	21,57	17,23	12,45	—
SPI	DM	-0,83	-0,83	-0,84	-0,79	-0,68	-0,46	-0,12	—
	DMA	4,29	4,34	4,43	4,48	4,44	4,38	4,28	—
	PDMA	13,65	13,67	13,61	12,97	11,46	9,24	8,65	—
ΔCS	DM	-13,14	-13,17	-12,91	-12,23	-11,04	-9,43	-7,33	—
	DMA	33,58	33,22	32,56	31,59	30,35	28,78	27,07	—
	PDMA	14,97	14,74	13,60	12,00	10,11	8,00	3,80	—

Tabela 8.420: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=30\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	30%	30%	30%	30%	30%	30%	30%	—
	$\alpha + \beta$	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	472,7	472,5	472,8	474,0	476,4	480,1	485,2	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	14,8	14,7	14,5	14,3	13,9	13,5	13,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-78,5	-78,5	-78,5	-78,8	-79,3	-79,9	-80,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-5,8	-5,8	-5,8	-5,8	-5,9	-6,0	-6,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,5	44,6	44,6	44,8	45,0	45,3	45,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-7,6	-7,6	-7,6	-7,7	-7,8	-7,9	-8,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	167,5	167,0	166,0	164,9	164,6	165,6	167,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1621,5	-1620,3	-1618,6	-1616,5	-1614,5	-1612,7	-1610,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-116,5	-116,1	-114,5	-111,6	-107,6	-103,0	-97,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	-7,5	-7,2	-5,8	-3,0	0,9	5,8	11,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-174,7	-176,3	-177,8	-178,4	-177,9	-176,2	-173,2	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	117,4	117,3	117,2	117,0	117,1	117,3	117,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-10,9	-10,9	-11,0	-11,1	-11,3	-11,7	-12,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,4	190,6	190,9	191,4	192,0	192,8	193,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	242,9	242,6	242,0	241,5	241,2	241,2	241,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,5	53,6	53,8	54,1	54,5	54,8	54,9	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	8,9	8,9	8,9	8,9	9,0	9,1	9,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	65,7	65,9	66,2	66,7	67,2	67,9	68,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	147,0	146,9	146,7	146,5	146,6	146,9	147,6	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	-1,3	-1,5	-1,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	3,0	3,0	3,0	2,9	2,7	2,4	2,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,3	13,3	13,4	13,5	13,6	13,8	14,0	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,9	18,8	18,8	18,8	18,9	19,0	19,2	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	30,6	30,7	31,0	31,4	31,8	32,0	32,7	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	115,3	115,2	115,0	115,0	115,0	115,4	116,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,2	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,7	-4,7
Total	DM	-6,38	-6,40	-6,32	-6,03	-5,52	-4,79	-3,77	—
	DMA	18,50	18,43	18,26	17,96	17,49	16,90	16,17	—
	PDMA	19,90	19,93	19,45	18,27	16,38	13,84	11,42	—
CPI	DM	-13,95	-13,99	-13,78	-13,15	-12,10	-10,57	-8,58	—
	DMA	37,88	37,65	37,16	36,39	35,34	34,03	32,47	—
	PDMA	28,62	28,44	27,52	25,53	22,69	19,15	15,01	—
SPI	DM	-0,83	-0,83	-0,84	-0,80	-0,70	-0,55	-0,24	—
	DMA	4,29	4,34	4,40	4,44	4,41	4,33	4,21	—
	PDMA	13,51	13,69	13,54	12,95	11,74	9,95	8,79	—
ΔCS	DM	-13,12	-13,16	-12,94	-12,35	-11,40	-10,03	-8,34	—
	DMA	33,60	33,31	32,76	31,95	30,93	29,69	28,26	—
	PDMA	15,11	14,75	13,97	12,58	10,95	9,19	6,22	—

Tabela 8.421: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	509,4	508,4	509,4	510,8	513,8	518,3	524,4	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	11,4	11,3	11,0	10,7	10,3	9,9	9,4	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,1	-83,4	-83,9	-84,7	-85,7	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,1	-7,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,2	46,2	46,3	46,5	46,7	47,1	47,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,6	-8,7	-8,7	-8,9	-9,1	-9,3	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	181,3	180,8	179,6	178,3	178,0	179,1	181,9	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1590,8	-1589,2	-1586,5	-1582,8	-1578,6	-1574,2	-1569,4	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-94,6	-94,2	-92,3	-89,0	-84,4	-79,0	-73,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,7	16,0	17,6	20,8	25,4	31,0	37,4	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-170,1	-172,0	-173,9	-174,9	-174,7	-173,0	-170,0	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	120,8	120,6	120,5	120,5	120,8	121,5	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,0	-12,1	-12,3	-12,6	-13,0	-13,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,9	196,0	196,5	197,1	197,9	199,0	200,5	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,9	247,5	246,9	246,3	246,0	246,2	246,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,9	54,1	54,5	54,8	55,1	55,2	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,7	9,7	9,7	9,7	9,9	10,2	10,5	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,0	70,2	70,7	71,3	72,1	73,0	74,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,2	151,1	150,8	150,7	150,8	151,3	152,2	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,1	-2,1	-2,1	-2,2	-2,4	-2,8	-3,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,1	2,2	2,1	2,0	1,8	1,4	0,9	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,8	13,9	14,0	14,2	14,5	14,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	19,4	19,4	19,5	19,6	19,8	20,1	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,5	33,9	34,3	34,7	35,2	35,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,0	118,9	118,7	118,7	118,8	119,2	120,0	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-4,0	-4,2	-4,4	-4,7
Total	DM	-0,62	-0,65	-0,50	-0,13	0,53	1,50	2,78	—
	DMA	14,15	14,00	14,00	14,02	14,10	14,68	15,35	—
	PDMA	9,14	9,08	9,65	10,41	11,49	14,66	18,42	—
CPI	DM	-2,81	-2,91	-2,57	-1,76	-0,37	1,58	4,08	—
	DMA	28,95	28,60	28,39	28,27	28,28	29,38	30,77	—
	PDMA	11,97	12,20	13,07	14,93	17,27	21,17	25,76	—
SPI	DM	0,99	1,00	1,01	1,07	1,20	1,44	1,83	—
	DMA	3,29	3,29	3,44	3,57	3,71	3,89	4,05	—
	PDMA	7,06	6,79	7,15	7,09	7,25	9,89	13,03	—
ΔCS	DM	-3,80	-3,91	-3,59	-2,84	-1,57	0,14	2,25	—
	DMA	25,67	25,31	24,95	24,71	24,58	25,49	26,73	—
	PDMA	4,92	5,41	5,92	7,84	10,02	11,28	12,73	—

Tabela 8.422: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	509,4	509,2	509,1	510,2	513,1	516,9	521,9	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	11,4	11,3	11,1	10,8	10,5	10,2	9,7	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,1	-83,3	-83,8	-84,4	-85,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,0	-7,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,2	46,2	46,3	46,4	46,6	46,9	47,3	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,6	-8,7	-8,7	-8,8	-9,0	-9,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	181,3	180,9	179,9	178,8	178,5	179,4	181,7	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1590,9	-1589,5	-1587,3	-1584,3	-1580,9	-1577,4	-1573,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-94,6	-94,2	-92,7	-89,9	-86,1	-81,6	-76,6	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,7	16,0	17,3	20,0	23,8	28,5	33,9	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-169,9	-171,5	-173,1	-173,9	-173,7	-172,2	-169,7	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	120,8	120,6	120,5	120,6	120,8	121,4	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,0	-12,1	-12,2	-12,5	-12,8	-13,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,9	196,0	196,4	196,9	197,6	198,5	199,7	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,9	247,6	247,1	246,6	246,3	246,5	247,1	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,9	54,1	54,4	54,7	54,9	55,0	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,7	9,7	9,7	9,7	9,9	10,1	10,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,0	70,2	70,6	71,1	71,7	72,5	73,5	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,2	151,1	150,9	150,8	150,9	151,3	152,0	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,1	-2,2	-2,4	-2,7	-3,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,1	2,2	2,1	2,0	1,8	1,5	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,8	13,8	14,0	14,1	14,3	14,6	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	19,4	19,4	19,5	19,6	19,7	20,0	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,5	33,8	34,2	34,6	34,8	35,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,0	118,9	118,8	118,7	118,8	119,2	119,8	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-4,0	-4,1	-4,3	-4,7
Total	DM	-0,62	-0,61	-0,53	-0,22	0,35	1,15	2,20	—
	DMA	14,15	14,05	14,01	14,04	14,12	14,45	15,03	—
	PDMA	8,98	9,09	9,54	10,22	11,08	13,36	16,46	—
CPI	DM	-2,80	-2,81	-2,63	-1,96	-0,78	0,85	2,91	—
	DMA	28,98	28,74	28,48	28,38	28,45	29,07	30,27	—
	PDMA	11,98	12,23	12,88	14,46	16,45	19,36	23,22	—
SPI	DM	0,99	1,01	1,01	1,07	1,17	1,36	1,69	—
	DMA	3,28	3,29	3,40	3,52	3,61	3,72	3,86	—
	PDMA	6,78	6,78	7,08	7,11	7,15	8,96	11,51	—
ΔCS	DM	-3,79	-3,82	-3,64	-3,03	-1,96	-0,51	1,22	—
	DMA	25,70	25,45	25,08	24,86	24,84	25,35	26,41	—
	PDMA	5,20	5,44	5,80	7,35	9,30	10,39	11,71	—

Tabela 8.423: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=40\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	40%	40%	40%	40%	40%	40%	40%	—
	$\alpha + \beta$	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	509,4	509,3	509,5	510,4	512,4	515,4	519,5	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	11,4	11,3	11,2	11,0	10,7	10,4	10,1	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-83,0	-83,0	-83,1	-83,3	-83,6	-84,1	-84,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-6,8	-6,8	-6,8	-6,8	-6,9	-7,0	-7,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	46,2	46,2	46,3	46,4	46,5	46,8	47,1	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-8,7	-8,7	-8,7	-8,7	-8,8	-8,9	-9,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	181,3	180,9	180,1	179,3	179,0	179,8	181,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1591,0	-1589,9	-1588,1	-1585,7	-1583,1	-1580,5	-1577,7	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-94,6	-94,3	-93,0	-90,8	-87,8	-84,1	-80,1	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	15,7	15,9	17,0	19,2	22,2	26,0	30,3	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-169,8	-171,1	-172,3	-173,0	-172,7	-171,5	-169,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	120,8	120,8	120,7	120,6	120,6	120,8	121,3	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-12,1	-12,1	-12,1	-12,2	-12,4	-12,7	-13,0	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	195,9	196,0	196,3	196,7	197,3	198,0	198,9	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	247,9	247,7	247,3	246,9	246,6	246,7	247,2	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,8	54,0	54,2	54,5	54,7	54,8	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	9,7	9,7	9,7	9,7	9,8	10,0	10,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,0	70,2	70,5	70,9	71,4	72,0	72,7	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	151,2	151,1	151,0	150,9	151,0	151,3	151,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-2,2	-2,1	-2,2	-2,2	-2,3	-2,6	-2,8	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	2,1	2,2	2,1	2,1	1,9	1,7	1,4	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	13,8	13,8	13,8	13,9	14,1	14,2	14,4	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	19,5	19,5	19,4	19,5	19,6	19,7	19,8	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	33,3	33,5	33,7	34,0	34,3	34,7	34,9	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	119,0	118,9	118,8	118,8	118,8	119,1	119,6	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-3,9	-4,0	-4,2	-4,7
Total	DM	-0,62	-0,62	-0,53	-0,27	0,16	0,80	1,63	—
	DMA	14,16	14,08	14,05	14,07	14,15	14,25	14,69	—
	PDMA	8,98	9,02	9,29	9,79	10,72	12,06	14,24	—
CPI	DM	-2,80	-2,83	-2,62	-2,08	-1,18	0,13	1,77	—
	DMA	29,00	28,81	28,64	28,55	28,60	28,76	29,74	—
	PDMA	11,98	12,10	12,71	13,97	15,51	17,52	20,56	—
SPI	DM	0,99	1,01	1,01	1,05	1,15	1,30	1,53	—
	DMA	3,28	3,29	3,35	3,44	3,55	3,61	3,66	—
	PDMA	6,78	6,76	6,78	6,72	7,20	8,06	9,61	—
ΔCS	DM	-3,79	-3,83	-3,62	-3,14	-2,33	-1,17	0,25	—
	DMA	25,72	25,52	25,28	25,11	25,05	25,16	26,08	—
	PDMA	5,20	5,34	5,92	7,25	8,31	9,46	10,95	—

Tabela 8.424: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha = 50\%$ e $\alpha + \beta = 100\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	546,5	546,3	546,5	547,7	550,2	554,0	559,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	7,9	7,8	7,6	7,3	7,1	6,7	6,3	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,5	-87,5	-87,5	-87,8	-88,2	-88,8	-89,6	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,9	-7,9	-7,9	-8,0	-8,1	-8,3	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,8	47,8	47,9	48,0	48,2	48,4	48,9	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,8	-9,8	-9,8	-9,9	-10,0	-10,2	-10,4	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,1	194,7	193,7	192,7	192,4	193,3	195,5	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1554,1	-1552,6	-1549,9	-1546,1	-1541,7	-1536,9	-1531,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-72,9	-72,5	-71,0	-68,4	-64,7	-60,3	-55,5	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	38,6	38,9	40,2	42,7	46,4	50,9	56,1	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-166,3	-167,9	-169,6	-170,6	-170,6	-169,5	-167,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,3	124,2	124,2	124,2	124,5	125,1	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,4	-13,6	-14,0	-14,4	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,9	202,0	202,4	203,0	203,8	204,8	206,2	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,2	252,9	252,5	252,0	251,8	252,0	252,7	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,9	54,1	54,3	54,5	54,7	54,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,7	10,7	10,8	11,0	11,2	11,6	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,8	75,0	75,4	76,0	76,8	77,7	78,9	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,7	155,5	155,4	155,3	155,5	155,9	156,8	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,5	-3,7	-4,0	-4,5	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,2	1,2	1,2	1,1	0,8	0,5	0,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,4	14,4	14,4	14,6	14,8	15,0	15,3	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	20,2	20,2	20,2	20,4	20,6	20,9	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	36,2	36,4	36,7	36,9	37,3	37,8	38,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	122,7	122,6	122,6	122,7	123,1	123,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,9	-4,7
Total	DM	5,42	5,41	5,54	5,86	6,45	7,29	8,40	—
	DMA	15,85	15,76	15,73	15,85	16,20	16,76	17,59	—
	PDMA	19,05	19,18	19,83	21,18	23,58	26,58	30,80	—
CPI	DM	8,77	8,76	9,03	9,71	10,93	12,60	14,73	—
	DMA	32,28	32,02	31,83	31,95	32,51	33,55	35,04	—
	PDMA	28,70	28,90	29,87	31,90	34,97	38,93	43,69	—
SPI	DM	2,95	2,95	2,98	3,03	3,17	3,40	3,76	—
	DMA	3,79	3,84	3,93	4,05	4,24	4,45	4,80	—
	PDMA	11,96	12,05	12,47	13,32	15,23	17,52	21,34	—
ΔCS	DM	5,82	5,82	6,05	6,68	7,75	9,20	10,97	—
	DMA	28,49	28,18	27,90	27,90	28,27	29,09	30,24	—
	PDMA	16,74	16,86	17,40	18,58	19,74	21,41	22,35	—

Tabela 8.425: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=90\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	90%	90%	90%	90%	90%	90%	90%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	546,6	546,4	546,6	547,5	549,5	552,5	556,6	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	7,9	7,8	7,7	7,5	7,2	7,0	6,6	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,5	-87,5	-87,5	-87,7	-88,1	-88,6	-89,2	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,9	-7,9	-7,9	-8,0	-8,1	-8,2	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,8	47,8	47,8	47,9	48,1	48,3	48,7	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,8	-9,8	-9,8	-9,9	-10,0	-10,1	-10,2	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,1	194,8	194,0	193,2	192,9	193,6	195,4	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1554,2	-1553,0	-1550,8	-1547,8	-1544,3	-1540,7	-1536,8	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-72,9	-72,6	-71,4	-69,3	-66,3	-62,8	-58,9	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	38,7	38,9	39,9	41,9	44,8	48,5	52,7	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-166,1	-167,4	-168,7	-169,6	-169,6	-168,6	-166,9	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,4	124,3	124,2	124,3	124,5	124,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,4	-13,6	-13,8	-14,2	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,9	202,0	202,3	202,8	203,4	204,2	205,3	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,3	253,0	252,6	252,3	252,1	252,3	252,8	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,9	54,0	54,2	54,4	54,5	54,5	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,7	10,7	10,8	10,9	11,1	11,4	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,8	75,0	75,3	75,8	76,4	77,1	78,0	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,7	155,6	155,4	155,4	155,5	155,9	156,5	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,4	-3,6	-3,9	-4,2	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,2	1,2	1,2	1,1	0,9	0,7	0,3	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,4	14,4	14,4	14,5	14,7	14,9	15,1	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	20,2	20,2	20,2	20,3	20,5	20,7	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	36,2	36,3	36,6	36,7	37,0	37,4	37,8	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	122,7	122,7	122,6	122,7	123,0	123,5	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,5	-4,6	-4,8	-4,7
Total	DM	5,43	5,42	5,52	5,77	6,23	6,92	7,78	—
	DMA	15,87	15,79	15,76	15,86	16,14	16,60	17,25	—
	PDMA	19,08	19,17	19,69	20,67	22,67	25,07	28,25	—
CPI	DM	8,80	8,78	9,00	9,54	10,48	11,83	13,54	—
	DMA	32,33	32,11	31,95	32,03	32,50	33,35	34,57	—
	PDMA	28,77	28,92	29,62	31,24	33,80	36,94	40,69	—
SPI	DM	2,96	2,96	2,97	3,01	3,12	3,31	3,57	—
	DMA	3,80	3,83	3,89	4,00	4,15	4,31	4,55	—
	PDMA	11,96	12,02	12,42	12,91	14,52	16,37	19,12	—
ΔCS	DM	5,84	5,82	6,03	6,52	7,36	8,51	9,97	—
	DMA	28,53	28,28	28,05	28,03	28,35	29,04	30,02	—
	PDMA	16,81	16,90	17,21	18,33	19,28	20,57	21,56	—

Tabela 8.426: Constantes de acoplamento LC-SLYP com otimização de geometrias para $\alpha=50\%$ e $\alpha+\beta=80\%$, variando γ , na base aug-pcJ-2.

	Func.	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	LCSLP	Exp.
	α	50%	50%	50%	50%	50%	50%	50%	—
	$\alpha + \beta$	80%	80%	80%	80%	80%	80%	80%	—
	γ	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	—
HF	$^1J_{\text{HF}}$	546,6	546,5	546,6	547,3	548,8	551,1	554,1	500
CO	$^1J_{\text{CO}}$	7,9	7,9	7,7	7,6	7,4	7,2	7,0	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-87,5	-87,5	-87,5	-87,7	-87,9	-88,3	-88,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-7,9	-7,9	-7,9	-7,9	-8,0	-8,0	-8,1	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	47,8	47,8	47,8	47,9	48,0	48,2	48,5	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-9,8	-9,8	-9,8	-9,9	-9,9	-10,1	-10,1	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	195,1	194,9	194,3	193,6	193,4	194,0	195,3	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1554,2	-1553,4	-1551,7	-1549,5	-1547,0	-1544,3	-1541,5	-1441
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-72,9	-72,6	-71,8	-70,1	-67,9	-65,3	-62,3	-84
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	38,7	38,8	39,6	41,1	43,3	46,1	49,2	15
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-166,0	-167,0	-167,9	-168,6	-168,5	-167,8	-166,4	-300
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	124,4	124,4	124,3	124,3	124,3	124,5	124,8	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-13,2	-13,2	-13,2	-13,3	-13,5	-13,7	-13,9	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	201,9	202,0	202,2	202,6	203,0	203,6	204,4	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	253,3	253,1	252,8	252,5	252,4	252,5	252,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	53,8	53,8	53,9	54,1	54,2	54,3	54,4	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	10,7	10,7	10,7	10,8	10,9	11,0	11,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	74,8	74,9	75,2	75,5	76,0	76,5	77,2	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	155,7	155,6	155,5	155,5	155,5	155,8	156,3	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,3	-3,3	-3,4	-3,4	-3,5	-3,7	-4,0	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,2	1,2	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	14,4	14,4	14,4	14,5	14,6	14,8	14,9	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	20,2	20,2	20,2	20,2	20,3	20,4	20,6	19
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	36,2	36,3	36,5	36,7	36,8	37,0	37,3	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	122,8	122,8	122,7	122,7	122,8	123,0	123,4	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,6	-4,7	-4,7
Total	DM	5,43	5,43	5,50	5,70	6,04	6,54	7,20	—
	DMA	15,87	15,82	15,80	15,88	16,08	16,43	16,90	—
	PDMA	19,08	19,12	19,59	20,44	21,68	23,52	25,68	—
CPI	DM	8,81	8,80	8,95	9,35	10,07	11,08	12,36	—
	DMA	32,34	32,18	32,06	32,14	32,49	33,15	34,07	—
	PDMA	28,78	28,82	29,44	30,67	32,53	34,97	37,67	—
SPI	DM	2,96	2,96	2,97	3,02	3,08	3,21	3,42	—
	DMA	3,80	3,81	3,87	3,95	4,05	4,17	4,31	—
	PDMA	11,96	12,00	12,37	12,94	13,72	15,13	16,89	—
ΔCS	DM	5,85	5,84	5,99	6,33	6,99	7,88	8,94	—
	DMA	28,54	28,37	28,19	28,18	28,44	28,99	29,76	—
	PDMA	16,81	16,83	17,07	17,73	18,80	19,84	20,77	—

8.7 Comparação com SOPPA(CC2) e SOPPA(CCSD)

Tabela 8.427: Constantes de acoplamento nos níveis SOPPA(CCSD) e SOPPA(CC2) com base aug-cc-pVTZ-J.

		SOPPA (CCSD)	SOPPA (CC2)	Exp.
HF	$^1J_{\text{HF}}$	528,3	528,3	500,0
CO	$^1J_{\text{CO}}$	18,5	18,5	16,4
H ₂ O	$^1J_{\text{OH}}$	-80,8	-80,8	-80,6
H ₂ O	$^2J_{\text{HH}}$	-9,0	-9,0	-7,3
NH ₃	$^1J_{\text{NH}}$	44,0	44,0	43,8
NH ₃	$^2J_{\text{HH}}$	-11,6	-11,6	-9,6
PH ₃	$^1J_{\text{PH}}$	184,6	184,6	188,2
PF ₃	$^1J_{\text{PF}}$	-1500,2	-1500,2	-1441,0
BHF ₂	$^1J_{\text{BF}}$	-66,9	-66,9	-84,0
BF ₃	$^1J_{\text{BF}}$	24,3	24,3	15,0
F ₂ O	$^1J_{\text{OF}}$	-379,4	-379,4	-300,0
CH ₄	$^1J_{\text{CH}}$	122,9	122,9	125,3
CH ₄	$^2J_{\text{HH}}$	-14,1	-14,1	-12,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CC}}$	190,1	190,1	174,8
C ₂ H ₂	$^1J_{\text{CH}}$	254,9	254,9	247,6
C ₂ H ₂	$^2J_{\text{CH}}$	51,7	51,7	50,1
C ₂ H ₂	$^3J_{\text{HH}}$	11,2	11,2	9,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CC}}$	70,3	70,3	67,6
C ₂ H ₄	$^1J_{\text{CH}}$	157,7	157,7	156,3
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{CH}}$	-3,1	-3,1	-2,4
C ₂ H ₄	$^2J_{\text{HH}}$	1,1	1,1	2,3
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_c}$	11,8	11,8	11,7
C ₂ H ₄	$^3J_{\text{HH}_t}$	18,2	18,2	19,0
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CC}}$	34,2	34,2	34,5
C ₂ H ₆	$^1J_{\text{CH}}$	123,7	123,7	125,2
C ₂ H ₆	$^2J_{\text{CH}}$	-5,0	-5,0	-4,7
Total	DM	-2,61	-2,61	—
	DMA	9,30	9,30	—
	PDMA	12,42	12,42	—
CPI	DM	-8,12	-8,12	—
	DMA	18,48	18,48	—
	PDMA	16,25	16,25	—
SPI	DM	1,43	1,43	—
	DMA	2,58	2,58	—
	PDMA	9,60	9,60	—
ΔCS	DM	-9,54	-9,54	—
	DMA	15,90	15,90	—
	PDMA	6,65	6,65	—
Desconsiderando $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF ₃ , $^2J_{\text{CH}}$ e $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C ₂ H ₄				
Total	DM	-3,27	-3,27	—
	DMA	10,03	10,03	—
	PDMA	7,76	7,76	—
CPI	DM	-9,85	-9,85	—
	DMA	19,40	19,40	—
	PDMA	11,71	11,71	—
SPI	DM	1,80	1,80	—
	DMA	2,82	2,82	—
	PDMA	4,73	4,73	—
ΔCS	DM	-11,65	-11,65	—
	DMA	16,57	16,57	—
	PDMA	6,97	6,97	—

8.8 Análise dos termos FC, SD, PSO e DSO

Tabela 8.428: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{HF}}$ da molécula de HF para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	470,4	265,6	-1,1	206,0	-0,1
B1B95 40%	499,3	296,9	-2,5	205,1	-0,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	519,2	322,5	-3,4	200,5	-0,2
B971	449,1	247,5	-1,3	203,1	-0,1
B971 50%	520,6	317,7	-0,8	203,9	-0,1
B98	431,2	229,3	-1,2	203,2	-0,1
B98 50%	505,9	301,8	-0,4	204,6	-0,1
BHandH	530,8	332,1	-3,1	202,1	-0,2
BHandH 40%	507,2	306,6	-1,7	202,5	-0,2
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	515,0	316,9	-2,5	200,8	-0,3
B972	442,8	243,0	-1,6	201,7	-0,1
B972B95 60%	522,7	321,0	-1,6	203,5	-0,1
wB97X	497,9	300,5	-2,6	200,2	-0,2
wB97X(20% 100% #)	507,3	312,6	-4,5	199,4	-0,2
wB97XD	484,2	283,2	-1,2	202,4	-0,1
wB97XD(## 0,35)	499,4	302,9	-2,6	199,3	-0,2
B3LYP	445,4	241,2	-0,8	205,3	-0,1
PBE0	430,8	231,0	-2,5	202,6	-0,1
SOPPA(CCSD)	528,3	341,0	-1,1	188,3	0,1
Experimental	500	—	—	—	—

Tabela 8.429: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CO}}$ da molécula de CO para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	18,4	9,6	-5,9	14,7	0,1
B1B95 40%	16,1	7,6	-6,1	14,5	0,1
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	16,5	8,4	-6,2	14,3	0,1
B971	17,4	9,2	-6,1	14,2	0,1
B971 50%	9,0	1,9	-6,1	13,2	0,1
B98	18,5	10,4	-6,2	14,2	0,1
B98 50%	9,5	2,5	-6,2	13,1	0,1
BHandH	13,7	6,3	-6,7	14,1	0,1
BHandH 40%	16,3	8,2	-6,4	14,3	0,1
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	15,3	7,9	-6,7	13,9	0,1
B972	18,3	10,1	-6,0	14,1	0,1
B972B95 60%	12,0	4,2	-5,7	13,4	0,1
wB97X	19,1	11,2	-6,3	14,1	0,1
wB97X(20% 100% #)	19,2	11,4	-6,6	14,3	0,1
wB97XD	19,6	11,3	-6,2	14,4	0,1
wB97XD(## 0,35)	18,9	11,2	-6,5	14,1	0,1
B3LYP	18,2	10,4	-6,6	14,3	0,1
PBE0	19,9	12,2	-6,7	14,3	0,1
SOPPA(CCSD)	18,5	8,6	-4,4	14,2	0,1
Experimental	16,4	—	—	—	—

Tabela 8.430: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{OH}}$ da molécula de H₂O para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-77,3	-63,8	-0,6	-12,8	0,0
B1B95 40%	-80,4	-67,0	-0,5	-12,8	0,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-81,6	-68,5	-0,3	-12,6	0,0
B971	-74,4	-61,0	-0,6	-12,6	0,0
B971 50%	-79,7	-66,3	-0,7	-12,6	0,0
B98	-72,5	-59,1	-0,7	-12,6	0,0
B98 50%	-78,4	-64,9	-0,7	-12,6	0,0
BHandH	-83,7	-70,3	-0,5	-12,8	0,0
BHandH 40%	-80,7	-67,2	-0,6	-12,8	0,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-81,6	-68,3	-0,5	-12,7	0,0
B972	-73,5	-60,3	-0,5	-12,5	0,0
B972B95 60%	-79,6	-66,3	-0,6	-12,6	0,0
wB97X	-76,5	-63,6	-0,3	-12,4	0,0
wB97X(20% 100% #)	-78,4	-65,6	-0,2	-12,4	0,0
wB97XD	-74,7	-61,5	-0,5	-12,6	0,0
wB97XD(## 0,35)	-76,3	-63,4	-0,3	-12,5	0,0
B3LYP	-76,8	-63,3	-0,6	-12,8	0,0
PBE0	-73,0	-59,8	-0,5	-12,6	0,0
SOPPA(CCSD)	-80,8	-68,9	-0,5	-11,4	-0,1
Experimental	-80,6	—	—	—	—

Tabela 8.431: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^2J_{\text{HH}}$ da molécula de H_2O para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-7,0	-10,3	0,9	9,6	-7,2
B1B95 40%	-8,2	-11,5	0,9	9,5	-7,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-8,4	-11,5	0,9	9,4	-7,2
B971	-6,5	-9,8	0,9	9,5	-7,2
B971 50%	-6,4	-9,6	0,9	9,4	-7,1
B98	-6,9	-10,2	0,9	9,5	-7,2
B98 50%	-6,4	-9,7	0,9	9,4	-7,1
BHandH	-9,4	-12,6	1,0	9,4	-7,2
BHandH 40%	-8,0	-11,3	1,0	9,4	-7,2
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-8,7	-11,9	0,9	9,4	-7,2
B972	-7,5	-10,7	0,9	9,5	-7,2
B972B95 60%	-8,2	-11,6	1,0	9,5	-7,2
wB97X	-6,4	-9,6	0,9	9,5	-7,2
wB97X(20% 100% #)	-7,9	-11,1	0,9	9,5	-7,2
wB97XD	-6,4	-9,7	0,9	9,5	-7,2
wB97XD(## 0,35)	-7,0	-10,1	0,9	9,4	-7,2
B3LYP	-7,2	-10,6	0,9	9,5	-7,2
PBE0	-7,3	-10,6	0,9	9,5	-7,2
SOPPA(CCSD)	-9,0	-12,0	0,9	9,2	-7,2
Experimental	-7,3	—	—	—	—

Tabela 8.432: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^1J_{\text{NH}}$ da molécula de NH_3 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	44,0	41,4	0,1	2,3	0,0
B1B95 40%	44,9	42,4	0,1	2,3	0,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	44,0	41,6	0,0	2,2	0,0
B971	43,3	40,7	0,2	2,2	0,0
B971 50%	43,1	40,6	0,2	2,2	0,0
B98	42,9	40,3	0,2	2,3	0,0
B98 50%	43,1	40,5	0,2	2,2	0,0
BHandH	45,5	43,0	0,1	2,3	0,0
BHandH 40%	44,2	41,6	0,1	2,3	0,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	44,4	41,9	0,1	2,3	0,0
B972	41,7	39,2	0,1	2,2	0,0
B972B95 60%	42,0	39,5	0,1	2,2	0,0
wB97X	41,5	39,0	0,1	2,2	0,0
wB97X(20% 100% #)	42,8	40,4	0,1	2,2	0,0
wB97XD	41,9	39,4	0,1	2,2	0,0
wB97XD(## 0,35)	42,3	39,8	0,1	2,2	0,0
B3LYP	45,3	42,7	0,1	2,3	0,0
PBE0	42,5	40,0	0,1	2,2	0,0
SOPPA(CCSD)	44,0	41,8	0,1	2,0	0,1
Experimental	43,8	—	—	—	—

Tabela 8.433: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^2J_{\text{HH}}$ da molécula de NH_3 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-9,3	-11,1	0,6	6,4	-5,2
B1B95 40%	-10,4	-12,2	0,6	6,4	-5,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-10,5	-12,3	0,6	6,3	-5,2
B971	-9,1	-10,8	0,6	6,3	-5,2
B971 50%	-8,6	-10,2	0,5	6,2	-5,2
B98	-9,5	-11,3	0,6	6,3	-5,2
B98 50%	-8,8	-10,5	0,5	6,2	-5,1
BHandH	-11,1	-12,8	0,6	6,3	-5,2
BHandH 40%	-9,9	-11,6	0,6	6,3	-5,2
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-10,7	-12,4	0,6	6,3	-5,2
B972	-9,1	-10,8	0,6	6,3	-5,2
B972B95 60%	-9,8	-11,6	0,6	6,3	-5,2
wB97X	-8,7	-10,4	0,6	6,3	-5,2
wB97X(20% 100% #)	-10,1	-11,8	0,6	6,3	-5,3
wB97XD	-9,0	-10,7	0,6	6,3	-5,2
wB97XD(## 0,35)	-9,7	-11,3	0,6	6,3	-5,2
B3LYP	-9,9	-11,7	0,6	6,3	-5,2
PBE0	-10,1	-11,8	0,6	6,3	-5,2
SOPPA(CCSD)	-11,6	-13,1	0,6	6,1	-5,2
Experimental	-9,6	—	—	—	—

Tabela 8.434: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{PH}}$ da molécula de PH_3 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	167,8	162,5	-0,7	5,9	0,0
B1B95 40%	176,5	171,6	-0,9	5,8	0,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	162,8	158,4	-1,3	5,7	0,0
B971	190,7	185,3	-0,5	5,9	0,0
B971 50%	196,6	191,4	-0,7	5,8	0,0
B98	196,4	191,0	-0,6	5,9	0,0
B98 50%	201,7	196,5	-0,7	5,8	0,0
BHandH	183,1	177,9	-0,9	6,1	0,0
BHandH 40%	172,9	167,2	-0,7	6,4	0,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	166,1	161,2	-1,1	6,1	0,0
B972	184,0	178,4	-0,3	5,9	0,0
B972B95 60%	179,9	175,1	-0,8	5,6	0,0
wB97X	165,0	159,9	-0,8	5,8	0,0
wB97X(20% 100% #)	174,7	169,9	-1,0	5,7	0,0
wB97XD	176,7	171,6	-0,8	5,9	0,0
wB97XD(## 0,35)	174,3	169,7	-1,1	5,7	0,0
B3LYP	171,9	166,6	-0,7	6,0	0,0
PBE0	154,6	149,5	-0,9	6,0	0,0
SOPPA(CCSD)	184,6	180,4	-1,2	5,3	0,0
Experimental	188,2	—	—	—	—

Tabela 8.435: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{PF}}$ da molécula de PF_3 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-1645,5	-1370,9	29,2	-304,7	0,8
B1B95 40%	-1606,4	-1337,7	30,0	-299,6	0,8
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-1589,8	-1326,2	31,2	-295,7	0,8
B971	-1656,7	-1389,5	28,7	-296,8	0,8
B971 50%	-1539,1	-1277,3	27,1	-289,8	0,8
B98	-1666,4	-1399,5	29,1	-296,9	0,8
B98 50%	-1549,1	-1287,3	27,2	-289,8	0,8
BHandH	-1670,4	-1401,1	31,6	-301,7	0,8
BHandH 40%	-1709,0	-1432,6	30,6	-307,8	0,8
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-1688,3	-1419,6	31,2	-300,8	0,8
B972	-1661,2	-1398,6	28,9	-292,4	0,8
B972B95 60%	-1466,6	-1209,5	27,3	-285,3	0,8
wB97X	-1643,0	-1378,8	29,9	-295,0	0,8
wB97X(20% 100% #)	-1642,9	-1381,9	31,8	-293,7	0,8
wB97XD	-1637,8	-1369,0	30,0	-299,7	0,8
wB97XD(## 0,35)	-1628,7	-1367,0	30,9	-293,5	0,8
B3LYP	-1755,9	-1481,4	30,4	-305,7	0,8
PBE0	-1732,1	-1465,2	30,9	-298,8	0,8
SOPPA(CCSD)	-1500,2	-1278,1	28,7	-251,7	0,9
Experimental	-1441	—	—	—	—

Tabela 8.436: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BHF_2 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-127,6	-71,4	0,3	-57,1	0,6
B1B95 40%	-107,5	-52,1	0,0	-56,0	0,6
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-92,0	-36,6	-0,2	-55,8	0,6
B971	-123,8	-69,3	0,0	-55,0	0,6
B971 50%	-69,6	-16,1	-0,5	-53,5	0,6
B98	-129,1	-74,8	0,0	-54,8	0,6
B98 50%	-73,8	-20,4	-0,5	-53,4	0,6
BHandH	-95,2	-39,3	-0,5	-55,8	0,6
BHandH 40%	-114,0	-57,2	-0,3	-57,1	0,6
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-96,0	-39,9	-0,5	-56,0	0,6
B972	-129,9	-77,1	0,0	-53,3	0,6
B972B95 60%	-78,0	-25,7	-0,1	-52,7	0,6
wB97X	-97,5	-44,3	-0,3	-53,4	0,6
wB97X(20% 100% #)	-93,0	-40,0	-0,4	-53,0	0,6
wB97XD	-103,1	-49,1	-0,3	-54,3	0,6
wB97XD(## 0,35)	-85,0	-31,4	-0,5	-53,6	0,6
B3LYP	-134,5	-78,3	0,0	-56,7	0,6
PBE0	-131,0	-75,8	-0,3	-55,4	0,6
SOPPA(CCSD)	-66,9	-21,9	-0,6	-45,1	0,6
Experimental	-84	—	—	—	—

Tabela 8.437: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{BF}}$ da molécula de BF_3 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-27,0	13,9	0,8	-43,0	1,2
B1B95 40%	-5,3	35,4	0,6	-42,6	1,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	14,3	55,0	0,4	-42,3	1,1
B971	-27,9	12,2	0,4	-41,8	1,2
B971 50%	29,7	69,2	0,0	-40,7	1,1
B98	-34,1	5,9	0,4	-41,7	1,2
B98 50%	24,5	64,0	0,0	-40,7	1,1
BHandH	15,1	56,4	0,2	-42,7	1,1
BHandH 40%	-4,1	37,4	0,4	-43,2	1,1
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	13,6	54,8	0,2	-42,6	1,1
B972	-36,6	2,5	0,3	-40,7	1,2
B972B95 60%	21,8	60,2	0,3	-39,9	1,2
wB97X	3,3	42,7	0,1	-40,8	1,1
wB97X(20% 100% #)	8,8	48,5	0,0	-40,9	1,1
wB97XD	-3,0	37,1	0,2	-41,6	1,2
wB97XD(## 0,35)	17,9	57,9	0,0	-41,2	1,1
B3LYP	-33,2	8,1	0,6	-43,2	1,1
PBE0	-30,5	9,9	0,3	-42,0	1,2
SOPPA(CCSD)	24,3	57,7	-0,1	-34,5	1,2
Experimental	15	—	—	—	—

Tabela 8.438: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{OF}}$ da molécula de F_2O para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-361,9	132,8	-208,2	-286,1	-0,3
B1B95 40%	-404,3	131,8	-228,9	-306,8	-0,3
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-472,1	111,6	-246,0	-337,2	-0,3
B971	-318,8	137,0	-199,9	-255,6	-0,3
B971 50%	-370,4	145,8	-214,6	-301,3	-0,3
B98	-336,9	126,7	-204,6	-258,6	-0,3
B98 50%	-383,0	137,2	-218,8	-301,1	-0,3
BHandH	-465,0	121,9	-258,1	-328,5	-0,3
BHandH 40%	-419,8	129	-231,7	-316,7	-0,3
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-459,2	116,8	-247,5	-328,2	-0,3
B972	-316,0	134,2	-198,0	-251,8	-0,3
B972B95 60%	-421,6	124,9	-224,2	-321,9	-0,3
wB97X	-326,5	150,6	-204,8	-272,0	-0,3
wB97X(20% 100% #)	-358,9	146,7	-225,5	-279,7	-0,3
wB97XD	-333,4	144,0	-203,2	-273,7	-0,3
wB97XD(## 0,35)	-373,9	138,6	-218,8	-293,2	-0,3
B3LYP	-352,0	129,4	-219,3	-261,7	-0,3
PBE0	-374,9	124,5	-230,5	-268,4	-0,3
SOPPA(CCSD)	-379,4	151,3	-194,3	-336,0	-0,4
Experimental	-300	—	—	—	—

Tabela 8.439: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CH}}$ da molécula de CH_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	124,4	122,3	0,1	1,7	0,2
B1B95 40%	126,1	124,1	0,0	1,6	0,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	119,9	117,9	0,0	1,6	0,2
B971	128,8	126,5	0,3	1,7	0,2
B971 50%	120,6	118,4	0,2	1,6	0,2
B98	128,3	126,0	0,3	1,7	0,2
B98 50%	121,5	119,3	0,2	1,6	0,2
BHandH	124,9	122,8	0,1	1,7	0,2
BHandH 40%	120,7	118,5	0,1	1,7	0,2
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	120,8	118,7	0,0	1,7	0,2
B972	118,8	116,6	0,2	1,6	0,2
B972B95 60%	111,8	109,8	0,0	1,6	0,2
wB97X	112,5	110,4	0,1	1,6	0,2
wB97X(20% 100% #)	118,0	116,0	0,0	1,6	0,2
wB97XD	114,7	112,6	0,1	1,7	0,2
wB97XD(## 0,35)	115,2	113,2	0,1	1,6	0,2
B3LYP	131,7	129,5	0,1	1,7	0,2
PBE0	122,8	120,6	0,1	1,7	0,2
SOPPA(CCSD)	122,9	121,1	0,0	1,5	0,3
Experimental	125,3	—	—	—	—

Tabela 8.440: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^2J_{\text{HH}}$ da molécula de CH_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-12,2	-12,9	0,3	3,8	-3,5
B1B95 40%	-13,0	-13,8	0,3	3,8	-3,5
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-13,0	-13,7	0,3	3,8	-3,5
B971	-12,0	-12,7	0,3	3,8	-3,5
B971 50%	-10,7	-11,3	0,3	3,7	-3,4
B98	-12,5	-13,2	0,3	3,8	-3,5
B98 50%	-11,0	-11,6	0,3	3,7	-3,4
BHandH	-13,3	-13,9	0,3	3,8	-3,5
BHandH 40%	-12,1	-12,8	0,3	3,8	-3,5
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-13,0	-13,6	0,3	3,8	-3,5
B972	-11,3	-12,0	0,3	3,8	-3,5
B972B95 60%	-11,9	-12,6	0,3	3,8	-3,4
wB97X	-11,3	-11,9	0,3	3,8	-3,5
wB97X(20% 100% #)	-12,7	-13,4	0,3	3,8	-3,5
wB97XD	-11,8	-12,4	0,3	3,8	-3,5
wB97XD(## 0,35)	-12,3	-13,0	0,3	3,8	-3,5
B3LYP	-13,0	-13,7	0,3	3,8	-3,5
PBE0	-13,8	-14,4	0,3	3,8	-3,5
SOPPA(CCSD)	-14,1	-14,6	0,4	3,6	-3,5
Experimental	-12,8	—	—	—	—

Tabela 8.441: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CC}}$ da molécula de C_2H_2 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	195,2	175,2	10,9	9,1	0,0
B1B95 40%	199,3	177,7	11,4	10,0	0,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	196,4	171,4	12,4	12,5	0,0
B971	213,8	194,4	11,2	8,0	0,0
B971 50%	211,6	192,1	10,3	9,1	0,0
B98	212,9	193,1	11,5	8,1	0,0
B98 50%	212,2	192,4	10,6	9,1	0,0
BHandH	202,4	179,1	12,8	10,4	0,0
BHandH 40%	195,4	174	11,9	9,4	0,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	199,2	174,8	13,3	11,0	0,0
B972	197,5	178,1	11,3	8,0	0,0
B972B95 60%	189,4	169,0	10,0	10,3	0,0
wB97X	193,0	171,5	12,1	9,3	0,0
wB97X(20% 100% #)	199,6	176,2	13,3	10,0	0,0
wB97XD	191,3	170,7	11,6	8,8	0,0
wB97XD(## 0,35)	194,4	170,9	12,9	10,5	0,0
B3LYP	203,3	182,0	12,8	8,4	0,0
PBE0	196,4	174,5	13,5	8,4	0,0
SOPPA(CCSD)	190,1	175,3	8,5	6,4	0,0
Experimental	174,8	—	—	—	—

Tabela 8.442: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_2 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	256,2	256,6	0,5	-1,2	0,2
B1B95 40%	258,8	259,6	0,5	-1,6	0,2
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	247,6	249,5	0,4	-2,6	0,2
B971	261,3	261,3	0,6	-0,9	0,2
B971 50%	237,9	238,9	0,4	-1,6	0,2
B98	261,1	261,1	0,6	-0,9	0,2
B98 50%	239,0	239,9	0,4	-1,6	0,2
BHandH	259,5	260,6	0,4	-1,8	0,2
BHandH 40%	252,0	252,7	0,5	-1,5	0,2
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	251,3	252,7	0,3	-2,1	0,2
B972	247,3	247,4	0,6	-0,9	0,2
B972B95 60%	228,9	230,3	0,4	-2,1	0,3
wB97X	240,2	241,0	0,4	-1,5	0,2
wB97X(20% 100% #)	253,8	254,7	0,5	-1,7	0,2
wB97XD	245,6	246,0	0,5	-1,3	0,2
wB97XD(## 0,35)	245,8	247,0	0,4	-1,9	0,2
B3LYP	271,8	271,9	0,5	-0,9	0,2
PBE0	256,2	256,5	0,4	-1,1	0,3
SOPPA(CCSD)	254,9	255,0	0,4	-0,8	0,3
Experimental	247,6	—	—	—	—

Tabela 8.443: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_2 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	55,6	49,4	1,0	6,5	-1,3
B1B95 40%	55,2	48,7	1,0	6,8	-1,3
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	55,8	48,4	1,0	7,6	-1,3
B971	53,2	47,2	1,1	6,1	-1,3
B971 50%	53,0	46,6	1,2	6,6	-1,3
B98	52,8	46,8	1,1	6,2	-1,3
B98 50%	53,2	46,6	1,2	6,6	-1,3
BHandH	53,0	46,2	1,1	7,0	-1,3
BHandH 40%	53,3	46,8	1,1	6,7	-1,3
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	54,3	47,3	1,2	7,2	-1,3
B972	50,7	44,9	0,9	6,1	-1,3
B972B95 60%	53,3	46,7	0,9	6,9	-1,3
wB97X	53,4	47,1	1,0	6,5	-1,3
wB97X(20% 100% #)	52,6	46,2	1,0	6,7	-1,3
wB97XD	53,7	47,5	1,0	6,4	-1,3
wB97XD(## 0,35)	54,2	47,4	1,1	6,9	-1,3
B3LYP	56,1	49,9	1,2	6,2	-1,3
PBE0	53,5	47,2	1,3	6,2	-1,3
SOPPA(CCSD)	51,7	46,6	1,0	5,5	-1,3
Experimental	50,1	—	—	—	—

Tabela 8.444: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^3J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_2 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	10,4	8,4	0,6	5,0	-3,5
B1B95 40%	11,2	9,0	0,6	5,1	-3,5
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	11,2	8,8	0,7	5,2	-3,5
B971	10,5	8,5	0,6	4,9	-3,5
B971 50%	9,3	7,2	0,6	5,0	-3,5
B98	10,7	8,7	0,6	4,9	-3,5
B98 50%	9,4	7,2	0,6	5,0	-3,5
BHandH	11,8	9,5	0,7	5,1	-3,5
BHandH 40%	10,5	8,3	0,6	5,0	-3,5
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	11,2	8,8	0,7	5,1	-3,5
B972	10,4	8,3	0,6	4,9	-3,5
B972B95 60%	10,6	8,3	0,6	5,1	-3,5
wB97X	10,0	7,8	0,7	5,0	-3,5
wB97X(20% 100% #)	11,6	9,3	0,8	5,0	-3,6
wB97XD	10,1	8,0	0,6	4,9	-3,5
wB97XD(## 0,35)	10,6	8,3	0,7	5,1	-3,5
B3LYP	11,1	9,1	0,6	4,9	-3,5
PBE0	12,4	10,3	0,7	4,9	-3,5
SOPPA(CCSD)	11,2	9,5	0,6	4,7	-3,6
Experimental	9,6	—	—	—	—

Tabela 8.445: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{CC}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	66,0	72,9	3,5	-10,5	0,0
B1B95 40%	69,6	76,1	4,0	-10,6	0,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	67,8	73,9	5,0	-11,2	0,0
B971	78,1	84,5	3,6	-10,0	0,0
B971 50%	80,8	87,1	3,4	-9,8	0,0
B98	77,3	83,6	3,7	-10,1	0,0
B98 50%	81,3	87,5	3,5	-9,8	0,0
BHandH	72,3	77,9	4,8	-10,6	0,0
BHandH 40%	66,7	73,1	4,1	-10,6	0,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	70,3	75,8	5,3	-10,9	0,0
B972	68,1	74,1	3,8	-9,8	0,0
B972B95 60%	66,4	72,6	3,6	-9,9	0,0
wB97X	64,5	70,3	4,5	-10,4	0,0
wB97X(20% 100% #)	68,5	73,6	5,3	-10,6	0,0
wB97XD	63,7	70,1	4,0	-10,4	0,0
wB97XD(## 0,35)	66,6	72,2	5,1	-10,7	0,0
B3LYP	71,0	77,0	4,2	-10,3	0,0
PBE0	68,7	73,7	4,9	-10,1	0,0
SOPPA(CCSD)	70,3	76,3	3,0	-9,0	0,1
Experimental	67,6	—	—	—	—

Tabela 8.446: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{CH}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	158,8	157,7	0,2	0,4	0,4
B1B95 40%	161,3	160,3	0,2	0,3	0,4
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	154,9	154,2	0,0	0,2	0,4
B971	162,8	161,5	0,4	0,5	0,4
B971 50%	151,2	150,1	0,3	0,3	0,4
B98	162,5	161,1	0,4	0,5	0,4
B98 50%	152,0	150,9	0,3	0,3	0,4
BHandH	160,6	159,7	0,1	0,3	0,4
BHandH 40%	155,0	154	0,2	0,4	0,4
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	155,5	154,7	0,1	0,3	0,4
B972	152,3	151,0	0,3	0,4	0,4
B972B95 60%	143,6	142,8	0,1	0,2	0,4
wB97X	145,4	144,5	0,2	0,3	0,4
wB97X(20% 100% #)	153,6	152,6	0,1	0,3	0,4
wB97XD	148,1	146,9	0,3	0,4	0,4
wB97XD(## 0,35)	149,2	148,3	0,2	0,3	0,4
B3LYP	167,1	165,9	0,3	0,5	0,4
PBE0	157,3	156,2	0,2	0,4	0,4
SOPPA(CCSD)	157,7	156,9	0,1	0,4	0,3
Experimental	156,3	—	—	—	—

Tabela 8.447: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^2J_{CH}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-1,1	0,6	0,0	-1,2	-0,6
B1B95 40%	-2,3	-0,4	0,0	-1,2	-0,6
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-3,0	-1,1	0,1	-1,3	-0,6
B971	-2,1	-0,3	0,0	-1,1	-0,6
B971 50%	-2,1	-0,4	0,1	-1,1	-0,6
B98	-2,4	-0,6	0,0	-1,1	-0,6
B98 50%	-2,1	-0,4	0,1	-1,1	-0,6
BHandH	-3,8	-2,1	0,1	-1,2	-0,6
BHandH 40%	-2,4	-0,6	0,1	-1,2	-0,6
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-3,2	-1,5	0,1	-1,2	-0,6
B972	-2,0	-0,2	0,0	-1,1	-0,6
B972B95 60%	-2,4	-0,6	0,1	-1,2	-0,6
wB97X	-1,3	0,4	0,0	-1,2	-0,6
wB97X(20% 100% #)	-2,9	-1,1	0,0	-1,2	-0,6
wB97XD	-1,0	0,7	0,0	-1,2	-0,6
wB97XD(## 0,35)	-2,0	-0,2	0,0	-1,2	-0,6
B3LYP	-1,4	0,3	0,1	-1,1	-0,6
PBE0	-3,0	-1,3	0,1	-1,1	-0,6
SOPPA(CCSD)	-3,1	-1,5	0,1	-1,0	-0,7
Experimental	-2,4	—	—	—	—

Tabela 8.448: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para ${}^2J_{\text{HH}}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	4,2	3,4	0,3	4,2	-3,8
B1B95 40%	3,3	2,5	0,3	4,2	-3,8
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	2,3	1,6	0,3	4,2	-3,8
B971	3,6	2,9	0,3	4,2	-3,8
B971 50%	3,4	2,7	0,3	4,1	-3,8
B98	3,1	2,4	0,3	4,2	-3,8
B98 50%	3,2	2,5	0,3	4,1	-3,8
BHandH	2,2	1,5	0,3	4,2	-3,8
BHandH 40%	3,1	2,4	0,3	4,2	-3,8
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	2,2	1,5	0,3	4,1	-3,8
B972	3,1	2,4	0,3	4,2	-3,8
B972B95 60%	2,2	1,5	0,3	4,1	-3,8
wB97X	2,9	2,2	0,3	4,1	-3,8
wB97X(20% 100% #)	1,8	1,1	0,3	4,2	-3,8
wB97XD	3,0	2,3	0,3	4,2	-3,8
wB97XD(## 0,35)	2,2	1,5	0,3	4,1	-3,8
B3LYP	4,5	3,7	0,3	4,2	-3,8
PBE0	2,3	1,6	0,3	4,2	-3,8
SOPPA(CCSD)	1,1	0,6	0,3	4,0	-3,9
Experimental	2,3	—	—	—	—

Tabela 8.449: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^3J_{\text{HH}_c}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	12,1	12,4	0,0	0,7	-1,0
B1B95 40%	12,5	12,8	0,0	0,7	-1,0
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	13,0	13,4	0,0	0,7	-1,0
B971	11,7	12,0	0,0	0,7	-1,0
B971 50%	11,0	11,4	0,0	0,7	-1,0
B98	11,8	12,2	0,0	0,7	-1,0
B98 50%	11,1	11,4	0,0	0,7	-1,0
BHandH	13,3	13,7	0,0	0,7	-1,0
BHandH 40%	12,7	13,1	0,0	0,7	-1,0
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	13,4	13,7	0,0	0,7	-1,0
B972	11,2	11,5	0,0	0,7	-1,0
B972B95 60%	11,6	12,0	0,0	0,7	-1,0
wB97X	11,5	11,9	0,0	0,7	-1,0
wB97X(20% 100% #)	12,4	12,8	0,0	0,7	-1,0
wB97XD	11,5	11,9	0,0	0,7	-1,0
wB97XD(## 0,35)	12,1	12,5	0,0	0,7	-1,0
B3LYP	12,8	13,2	0,0	0,7	-1,0
PBE0	12,7	13,1	0,0	0,7	-1,0
SOPPA(CCSD)	11,8	12,1	-0,1	0,7	-1,0
Experimental	11,7	—	—	—	—

Tabela 8.450: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^3J_{\text{HH}_t}$ da molécula de C_2H_4 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	19,0	19,1	0,2	3,1	-3,5
B1B95 40%	19,4	19,5	0,3	3,1	-3,5
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	19,1	19,1	0,3	3,1	-3,5
B971	18,4	18,5	0,2	3,1	-3,5
B971 50%	16,4	16,5	0,2	3,0	-3,4
B98	18,5	18,6	0,2	3,1	-3,5
B98 50%	16,5	16,6	0,2	3,0	-3,4
BHandH	19,6	19,7	0,3	3,1	-3,5
BHandH 40%	18,7	18,8	0,3	3,0	-3,5
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	19,1	19,1	0,4	3,0	-3,5
B972	17,7	17,8	0,3	3,1	-3,5
B972B95 60%	17,4	17,5	0,3	3,0	-3,4
wB97X	17,2	17,3	0,3	3,1	-3,5
wB97X(20% 100% #)	18,7	18,7	0,4	3,1	-3,5
wB97XD	17,5	17,6	0,3	3,1	-3,5
wB97XD(## 0,35)	17,8	17,9	0,4	3,1	-3,5
B3LYP	20,0	20,1	0,2	3,1	-3,5
PBE0	19,8	19,9	0,3	3,1	-3,5
SOPPA(CCSD)	18,2	18,4	0,3	3,0	-3,5
Experimental	19	—	—	—	—

Tabela 8.451: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CC}}$ da molécula de C_2H_6 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	30,6	29,2	1,1	0,0	0,1
B1B95 40%	33,0	31,6	1,1	0,0	0,1
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	32,3	30,8	1,2	0,2	0,1
B971	34,9	33,5	1,1	0,0	0,1
B971 50%	37,8	36,5	1,0	0,1	0,1
B98	34,4	33,0	1,1	0,0	0,1
B98 50%	38,2	36,9	1,1	0,1	0,1
BHandH	33,3	31,8	1,1	0,1	0,1
BHandH 40%	30,0	28,5	1,1	0,2	0,1
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	32,6	31,0	1,2	0,2	0,1
B972	30,6	29,3	1,1	0,0	0,1
B972B95 60%	31,3	30,1	1,0	0,0	0,1
wB97X	29,1	27,6	1,1	0,2	0,1
wB97X(20% 100% #)	31,0	29,5	1,2	0,2	0,1
wB97XD	29,0	27,5	1,2	0,1	0,1
wB97XD(## 0,35)	31,2	29,6	1,2	0,2	0,1
B3LYP	32,4	30,9	1,2	0,0	0,1
PBE0	30,4	28,9	1,2	0,0	0,1
SOPPA(CCSD)	34,2	32,8	1,0	0,2	0,1
Experimental	34,5	—	—	—	—

Tabela 8.452: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^1J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	125,0	123,0	0,0	1,3	0,4
B1B95 40%	126,9	125,0	0,0	1,3	0,4
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	121,0	119,2	0,0	1,3	0,4
B971	129,1	127,0	0,2	1,3	0,4
B971 50%	120,9	118,8	0,2	1,3	0,4
B98	128,8	126,6	0,2	1,3	0,4
B98 50%	121,7	119,6	0,2	1,3	0,4
BHandH	125,8	123,9	0,0	1,4	0,4
BHandH 40%	121,5	119,5	0,0	1,4	0,4
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	121,5	119,6	0,0	1,4	0,4
B972	118,9	116,9	0,1	1,3	0,4
B972B95 60%	112,6	110,8	0,0	1,2	0,4
wB97X	112,4	110,5	0,1	1,3	0,4
wB97X(20% 100% #)	118,2	116,3	0,0	1,3	0,4
wB97XD	115,2	113,2	0,1	1,3	0,4
wB97XD(## 0,35)	115,8	113,9	0,1	1,3	0,4
B3LYP	131,7	129,7	0,1	1,4	0,4
PBE0	123,5	121,5	0,1	1,3	0,4
SOPPA(CCSD)	123,7	122,1	0,0	1,1	0,5
Experimental	125,2	—	—	—	—

Tabela 8.453: Contribuições FC, SD, PSO e DSO para $^2J_{\text{CH}}$ da molécula de C_2H_6 para os melhores funcionais com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

	TOTAL	FC	SD	PSO	DSO
B1B95	-3,5	-3,6	0,0	0,4	-0,3
B1B95 40%	-4,0	-4,2	0,0	0,4	-0,3
LC-B1B95(40% 100% 0,40)	-4,3	-4,4	0,0	0,4	-0,3
B971	-3,6	-3,7	0,0	0,4	-0,3
B971 50%	-3,5	-3,6	0,0	0,4	-0,3
B98	-3,8	-3,9	0,0	0,4	-0,3
B98 50%	-3,6	-3,7	0,0	0,4	-0,3
BHandH	-4,3	-4,4	0,0	0,4	-0,3
BHandH 40%	-3,7	-3,8	0,0	0,4	-0,3
LC-BHandH(40% 100% 0,30)	-4,1	-4,2	0,0	0,4	-0,3
B972	-3,2	-3,3	0,0	0,4	-0,3
B972B95 60%	-3,9	-4,1	0,0	0,4	-0,3
wB97X	-3,2	-3,3	0,0	0,4	-0,3
wB97X(20% 100% #)	-3,8	-3,9	0,0	0,4	-0,3
wB97XD	-3,3	-3,4	0,0	0,4	-0,3
wB97XD(## 0,35)	-3,7	-3,8	0,0	0,4	-0,3
B3LYP	-3,4	-3,5	0,0	0,4	-0,3
PBE0	-4,1	-4,2	0,0	0,4	-0,3
SOPPA(CCSD)	-5,0	-5,1	0,1	0,4	-0,3
Experimental	-4,7	—	—	—	—

8.9 Teste de precisão e Teorema de Janak

Tabela 8.454: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	ε _{LUMO} ε _{cátion}	ε _{HOMO} ε _{neutra}	ε _{LUMO} ε _{neutra}	ε _{HOMO} ε _{ânion}	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-324,08178	-324,64301	-324,61714	-0,66951	-0,45497	-0,00200	0,05285	2,92	0,75
BHF ₂	-224,78381	-225,29723	-225,27532	-0,62459	-0,40150	-0,01286	0,04930	3,04	0,85
C ₂ H ₂	-76,90761	-77,32260	-77,30304	-0,52151	-0,30983	0,00653	0,04407	2,88	0,51
C ₂ H ₄	-78,18647	-78,57139	-78,54651	-0,48108	-0,28881	0,00256	0,04820	2,62	0,62
C ₂ H ₆	-79,35594	-79,80354	-79,78490	-0,54213	-0,35428	0,00190	0,04655	2,56	0,61
CH ₄	-39,98358	-40,50107	-40,48136	-0,63323	-0,40425	0,00168	0,04881	3,12	0,64
CO	-112,81087	-113,32735	-113,28980	-0,62858	-0,39639	-0,02113	0,07934	3,16	1,37
F ₂ O	-274,23342	-274,72258	-274,71521	-0,60889	-0,37118	-0,09105	0,09328	3,23	2,51
H ₂ O	-75,97344	-76,43816	-76,41949	-0,59775	-0,33654	-0,00993	0,05511	3,55	0,88
HF	-99,87679	-100,46997	-100,44927	-0,75302	-0,43982	-0,01013	0,06236	4,26	0,99
NH ₃	-56,15628	-56,55572	-56,53665	-0,51409	-0,28557	-0,00550	0,05164	3,11	0,78
PF ₃	-639,93217	-640,35591	-640,32169	-0,52300	-0,32259	0,00274	0,06745	2,73	0,88
PH ₃	-342,02496	-342,41067	-342,39265	-0,48057	-0,28929	-0,00409	0,04744	2,60	0,70

Tabela 8.455: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B971 com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	ε _{LUMO} ε _{cátion}	ε _{HOMO} ε _{neutra}	ε _{LUMO} ε _{neutra}	ε _{HOMO} ε _{ânion}	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-324,07507	-324,63023	-324,60314	-0,67612	-0,43602	-0,00692	0,06493	3,27	0,98
BHF ₂	-224,78265	-225,29490	-225,27427	-0,63499	-0,38888	-0,01950	0,05192	3,35	0,97
C ₂ H ₂	-76,92243	-77,33721	-77,32092	-0,53393	-0,29906	0,00783	0,04195	3,20	0,46
C ₂ H ₄	-78,20929	-78,59407	-78,57130	-0,49396	-0,27855	-0,00687	0,04662	2,93	0,73
C ₂ H ₆	-79,38421	-79,83241	-79,81399	-0,55260	-0,34481	0,00084	0,04611	2,83	0,62
CH ₄	-39,99968	-40,51801	-40,49915	-0,64530	-0,39398	0,00183	0,04804	3,42	0,63
CO	-112,81377	-113,33261	-113,29752	-0,67074	-0,38454	-0,03321	0,07946	3,89	1,53
F ₂ O	-274,23158	-274,71709	-274,71057	-0,62037	-0,35203	-0,10598	0,10442	3,65	2,86
H ₂ O	-75,97773	-76,44407	-76,42619	-0,61530	-0,32175	-0,01276	0,05594	3,99	0,93
HF	-99,87126	-100,46607	-100,44672	-0,77271	-0,42151	-0,01227	0,06370	4,78	1,03
NH ₃	-56,16757	-56,56843	-56,55035	-0,53465	-0,27351	-0,00772	0,05248	3,55	0,82
PF ₃	-639,83837	-640,26018	-640,22750	-0,53491	-0,31113	-0,00400	0,06765	3,04	0,97
PH ₃	-341,95830	-342,34535	-342,32737	-0,50045	-0,28103	-0,00637	0,04849	2,99	0,75

Tabela 8.456: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972 com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	ε _{LUMO} ε _{cátion}	ε _{HOMO} ε _{neutra}	ε _{LUMO} ε _{neutra}	ε _{HOMO} ε _{ânion}	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-324,06193	-324,61884	-324,58862	-0,67780	-0,43768	-0,00587	0,06693	3,27	0,99
BHF ₂	-224,77413	-225,28749	-225,26610	-0,63659	-0,38966	-0,01697	0,04896	3,36	0,90
C ₂ H ₂	-76,91861	-77,33287	-77,31711	-0,53235	-0,29997	0,00670	0,04188	3,16	0,48
C ₂ H ₄	-78,20867	-78,59251	-78,57039	-0,49235	-0,27882	-0,00557	0,04632	2,91	0,71
C ₂ H ₆	-79,38537	-79,83433	-79,81504	-0,55368	-0,34519	0,00023	0,04655	2,84	0,63
CH ₄	-40,00235	-40,52115	-40,50175	-0,64538	-0,39449	0,00085	0,04844	3,41	0,65
CO	-112,80405	-113,32179	-113,28629	-0,67149	-0,38474	-0,03198	0,07887	3,90	1,51
F ₂ O	-274,21632	-274,70304	-274,69604	-0,62097	-0,35346	-0,10607	0,10717	3,64	2,90
H ₂ O	-75,97638	-76,44251	-76,42288	-0,61345	-0,32228	-0,01267	0,05653	3,96	0,94
HF	-99,87136	-100,46652	-100,44535	-0,77115	-0,42252	-0,01245	0,06513	4,74	1,06
NH ₃	-56,16773	-56,56836	-56,54908	-0,53343	-0,27402	-0,00785	0,05215	3,53	0,82
PF ₃	-639,88218	-640,30379	-640,27019	-0,53468	-0,31154	-0,00269	0,06806	3,04	0,96
PH ₃	-342,01702	-342,40279	-342,38368	-0,49975	-0,28080	-0,00681	0,04862	2,98	0,75

Tabela 8.457: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B98 com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	ε _{LUMO} ε _{cátion}	ε _{HOMO} ε _{neutra}	ε _{LUMO} ε _{neutra}	ε _{HOMO} ε _{ânion}	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-324,05222	-324,61118	-324,58452	-0,67773	-0,44195	-0,00781	0,06425	3,21	0,98
BHF ₂	-224,76783	-225,28300	-225,26278	-0,63615	-0,39349	-0,01983	0,05132	3,30	0,97
C ₂ H ₂	-76,91451	-77,33000	-77,31400	-0,53188	-0,30216	0,00651	0,04145	3,13	0,48
C ₂ H ₄	-78,20451	-78,58983	-78,56726	-0,49189	-0,28138	-0,00694	0,04621	2,86	0,72
C ₂ H ₆	-79,38098	-79,83111	-79,81284	-0,55262	-0,34858	-0,00039	0,04572	2,78	0,63
CH ₄	-39,99982	-40,51945	-40,50070	-0,64393	-0,39784	0,00054	0,04769	3,35	0,64
CO	-112,80074	-113,32150	-113,28710	-0,66848	-0,38926	-0,03343	0,07888	3,80	1,53
F ₂ O	-274,20796	-274,69694	-274,69268	-0,62083	-0,35818	-0,10646	0,10166	3,57	2,83
H ₂ O	-75,97389	-76,44145	-76,42404	-0,61261	-0,32655	-0,01394	0,05537	3,89	0,94
HF	-99,86573	-100,46227	-100,44342	-0,77023	-0,42714	-0,01347	0,06302	4,67	1,04
NH ₃	-56,16575	-56,56744	-56,54968	-0,53120	-0,27751	-0,00895	0,05203	3,45	0,83
PF ₃	-639,82022	-640,24425	-640,21206	-0,53465	-0,31510	-0,00448	0,06693	2,99	0,97
PH ₃	-341,96254	-342,35072	-342,33291	-0,49857	-0,28412	-0,00760	0,04872	2,92	0,77

Tabela 8.458: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,40442	-322,99023	-322,96144	-0,64608	-0,52759	0,00694	0,05550	1,61	0,66
BHF ₂	-223,58328	-224,10535	-224,07819	-0,59015	-0,45483	0,00981	0,04613	1,84	0,49
C ₂ H ₂	-76,33203	-76,73878	-76,71302	-0,47013	-0,34811	0,01446	0,04278	1,66	0,39
C ₂ H ₄	-77,58706	-77,96254	-77,90468	-0,43239	-0,32237	0,01297	0,08234	1,50	0,94
C ₂ H ₆	-78,71933	-79,16941	-79,14616	-0,50503	-0,39632	0,01053	0,04244	1,48	0,43
CH ₄	-39,64934	-40,16297	-40,13929	-0,58039	-0,45031	0,01083	0,04397	1,77	0,45
CO	-112,11823	-112,63370	-112,58919	-0,58563	-0,44961	0,01270	0,07350	1,85	0,83
F ₂ O	-272,82563	-273,32568	-273,31951	-0,55488	-0,44327	-0,04086	0,05026	1,52	1,24
H ₂ O	-75,53822	-75,99342	-75,97213	-0,52518	-0,39581	0,00153	0,04756	1,76	0,63
HF	-99,38204	-99,96508	-99,94173	-0,66678	-0,51135	0,00224	0,05332	2,11	0,69
NH ₃	-55,77732	-56,16765	-56,14572	-0,45536	-0,33431	0,00478	0,04550	1,65	0,55
PF ₃	-637,56404	-637,99032	-637,95092	-0,48975	-0,36588	0,01955	0,06340	1,69	0,60
PH ₃	-341,05441	-341,43296	-341,41154	-0,43883	-0,32208	0,00537	0,04267	1,59	0,51

Tabela 8.459: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ωB97X com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,07580	-324,64647	-324,61094	-0,59956	-0,54330	0,04025	0,03436	0,77	-0,08
BHF ₂	-224,78381	-225,30574	-225,27790	-0,54976	-0,49409	0,03630	0,02634	0,76	-0,14
C ₂ H ₂	-76,92401	-77,33725	-77,31324	-0,42801	-0,40087	0,03237	0,02243	0,37	-0,14
C ₂ H ₄	-78,21298	-78,59560	-78,57033	-0,39034	-0,37747	0,03441	0,02373	0,18	-0,15
C ₂ H ₆	-79,38046	-79,83854	-79,81418	-0,47022	-0,44612	0,03316	0,02272	0,33	-0,14
CH ₄	-39,99994	-40,52114	-40,49798	-0,54363	-0,49931	0,03235	0,02128	0,60	-0,15
CO	-112,81567	-113,33544	-113,29030	-0,56369	-0,49335	0,05015	0,04468	0,96	-0,07
F ₂ O	-274,23489	-274,72626	-274,71854	-0,52199	-0,46069	-0,00695	0,01932	0,83	0,36
H ₂ O	-75,98104	-76,44758	-76,42555	-0,50137	-0,43001	0,03207	0,02008	0,97	-0,16
HF	-99,87776	-100,47187	-100,44909	-0,65516	-0,53106	0,03364	0,02113	1,69	-0,17
NH ₃	-56,17036	-56,57117	-56,54882	-0,42579	-0,37886	0,03240	0,02038	0,64	-0,16
PF ₃	-639,88089	-640,30685	-640,26367	-0,44874	-0,41087	0,05271	0,04149	0,52	-0,15
PH ₃	-341,98603	-342,37324	-342,35068	-0,41030	-0,37689	0,03205	0,02046	0,45	-0,16

Tabela 8.460: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ωB97XD com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,06297	-324,62848	-324,59604	-0,61080	-0,52196	0,03729	0,03070	1,21	-0,09
BHF ₂	-224,77570	-225,29436	-225,26884	-0,56467	-0,47223	0,03245	0,02460	1,26	-0,11
C ₂ H ₂	-76,91822	-77,33262	-77,31048	-0,44851	-0,38031	0,02910	0,02106	0,93	-0,11
C ₂ H ₄	-78,21040	-78,59400	-78,56490	-0,40889	-0,35794	0,03016	0,02784	0,69	-0,03
C ₂ H ₆	-79,38483	-79,83910	-79,81666	-0,48365	-0,42542	0,02878	0,02133	0,79	-0,10
CH ₄	-40,00285	-40,52337	-40,50203	-0,56393	-0,47703	0,02810	0,01981	1,18	-0,11
CO	-112,80659	-113,32539	-113,28511	-0,56463	-0,47015	0,03665	0,04281	1,29	0,08
F ₂ O	-274,21839	-274,70917	-274,70133	-0,54375	-0,43842	-0,02616	0,03499	1,43	0,83
H ₂ O	-75,97956	-76,44592	-76,42655	-0,52403	-0,40685	0,02601	0,01843	1,59	-0,10
HF	-99,87523	-100,46934	-100,44929	-0,67894	-0,50797	0,02723	0,02030	2,33	-0,09
NH ₃	-56,17051	-56,57106	-56,55096	-0,44419	-0,35650	0,02699	0,01868	1,19	-0,11
PF ₃	-639,86682	-640,29238	-640,25287	-0,46251	-0,39122	0,04591	0,03869	0,97	-0,10
PH ₃	-341,99385	-342,38226	-342,36174	-0,42284	-0,35901	0,02683	0,01895	0,87	-0,11

Tabela 8.461: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B3LYP com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,16555	-324,72510	-324,70455	-0,68200	-0,43891	-0,01932	0,06289	3,31	1,12
BHF ₂	-224,84885	-225,36512	-225,34739	-0,63984	-0,39219	-0,02865	0,05225	3,37	1,10
C ₂ H ₂	-76,95204	-77,36945	-77,35464	-0,53596	-0,30108	-0,00241	0,04179	3,20	0,60
C ₂ H ₄	-78,24191	-78,62904	-78,60793	-0,49535	-0,28029	-0,01371	0,04663	2,93	0,82
C ₂ H ₆	-79,41902	-79,87034	-79,85455	-0,55627	-0,34720	-0,00956	0,04592	2,84	0,75
CH ₄	-40,02040	-40,54149	-40,52513	-0,64788	-0,39604	-0,00923	0,04817	3,43	0,78
CO	-112,84477	-113,36642	-113,33579	-0,64994	-0,38701	-0,04179	0,07915	3,58	1,65
F ₂ O	-274,30288	-274,79431	-274,79737	-0,62783	-0,35635	-0,11733	0,09518	3,69	2,89
H ₂ O	-76,00117	-76,47184	-76,45864	-0,62013	-0,32474	-0,02538	0,05558	4,02	1,10
HF	-99,89745	-100,49762	-100,48258	-0,78031	-0,42480	-0,02628	0,06357	4,84	1,22
NH ₃	-56,18866	-56,59288	-56,57865	-0,53326	-0,27582	-0,01929	0,05193	3,50	0,97
PF ₃	-639,97441	-640,40158	-640,37312	-0,53810	-0,31471	-0,01267	0,06664	3,04	1,08
PH ₃	-342,02164	-342,41080	-342,39657	-0,49564	-0,28206	-0,01671	0,04799	2,91	0,88

Tabela 8.462: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para PBE0 com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-323,83793	-324,39895	-324,37623	-0,67301	-0,45059	-0,00715	0,05883	3,03	0,90
BHF ₂	-224,61308	-225,12762	-225,10863	-0,62724	-0,39989	-0,01744	0,04488	3,09	0,85
C ₂ H ₂	-76,84577	-77,26024	-77,24492	-0,51843	-0,31019	0,00606	0,03899	2,83	0,45
C ₂ H ₄	-78,13263	-78,51662	-78,49500	-0,47821	-0,28885	-0,00417	0,04414	2,58	0,66
C ₂ H ₆	-79,30551	-79,75550	-79,73975	-0,54651	-0,35395	-0,00045	0,04184	2,62	0,58
CH ₄	-39,95943	-40,47741	-40,46130	-0,63187	-0,40423	0,00034	0,04373	3,10	0,59
CO	-112,71959	-113,23429	-113,20162	-0,62346	-0,39507	-0,02890	0,07461	3,11	1,41
F ₂ O	-274,03529	-274,52378	-274,52035	-0,61141	-0,36571	-0,09910	0,09338	3,34	2,62
H ₂ O	-75,92180	-76,38535	-76,37118	-0,59282	-0,33407	-0,01317	0,05041	3,52	0,87
HF	-99,80651	-100,39825	-100,38247	-0,74889	-0,43559	-0,01272	0,05790	4,26	0,96
NH ₃	-56,12142	-56,51948	-56,50482	-0,50819	-0,28452	-0,00848	0,04683	3,04	0,75
PF ₃	-639,54374	-639,96610	-639,93622	-0,51943	-0,32095	-0,00254	0,06325	2,70	0,90
PH ₃	-341,86130	-342,24643	-342,23201	-0,47754	-0,28945	-0,00755	0,04314	2,56	0,69

Tabela 8.463: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 0% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,95178	-321,47666	-321,45114	-0,69108	-0,36145	-0,02763	0,08042	4,48	1,47
BHF ₂	-222,52104	-223,00338	-222,97856	-0,64407	-0,32182	-0,05441	0,07250	4,38	1,73
C ₂ H ₂	-75,77585	-76,19297	-76,16898	-0,58423	-0,25570	-0,00996	0,05838	4,47	0,93
C ₂ H ₄	-76,98651	-77,37535	-77,35123	-0,54220	-0,23979	-0,03580	0,06294	4,11	1,34
C ₂ H ₆	-78,12210	-78,54031	-78,51833	-0,55729	-0,28121	-0,01119	0,06135	3,76	0,99
CH ₄	-39,32107	-39,82438	-39,80076	-0,67961	-0,33013	-0,00839	0,06461	4,75	0,99
CO	-111,51244	-112,01156	-111,97298	-0,67931	-0,31763	-0,06823	0,10291	4,92	2,33
F ₂ O	-271,68219	-272,13919	-272,13218	-0,64577	-0,27124	-0,15483	0,12794	5,10	3,85
H ₂ O	-75,12254	-75,58996	-75,56905	-0,69024	-0,25583	-0,02888	0,07447	5,91	1,41
HF	-98,91136	-99,50949	-99,48530	-0,86545	-0,34412	-0,02945	0,08472	7,09	1,55
NH ₃	-55,40518	-55,80237	-55,78095	-0,58748	-0,21462	-0,02143	0,06939	5,07	1,24
PF ₃	-635,41458	-635,82227	-635,78665	-0,55695	-0,25932	-0,02949	0,08634	4,05	1,58
PH ₃	-340,12256	-340,49713	-340,47698	-0,51952	-0,23188	-0,02000	0,06377	3,91	1,14

Tabela 8.464: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 10% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,23881	-321,77594	-321,74969	-0,68270	-0,39399	-0,01945	0,07531	3,93	1,29
BHF ₂	-222,73059	-223,22119	-223,19537	-0,63373	-0,34803	-0,03948	0,06785	3,89	1,46
C ₂ H ₂	-75,88609	-76,30110	-76,27672	-0,56084	-0,27411	0,00353	0,05524	3,90	0,70
C ₂ H ₄	-77,10549	-77,49157	-77,46134	-0,51959	-0,25624	-0,02116	0,05996	3,58	1,10
C ₂ H ₆	-78,24029	-78,66478	-78,64248	-0,54686	-0,30376	-0,00581	0,05749	3,31	0,86
CH ₄	-39,38991	-39,89141	-39,86774	-0,65326	-0,35381	-0,00369	0,06044	4,07	0,87
CO	-111,63214	-112,13471	-112,09479	-0,66023	-0,34359	-0,05035	0,09693	4,31	2,00
F ₂ O	-271,90587	-272,37320	-272,36541	-0,63241	-0,30518	-0,13213	0,11810	4,45	3,40
H ₂ O	-75,20506	-75,66992	-75,64884	-0,65595	-0,28316	-0,02145	0,06904	5,07	1,23
HF	-99,00485	-99,59982	-99,57570	-0,82437	-0,37689	-0,02158	0,07844	6,09	1,36
NH ₃	-55,47905	-55,87475	-55,85316	-0,55999	-0,23799	-0,01508	0,06456	4,38	1,08
PF ₃	-635,83998	-636,25174	-636,21529	-0,54413	-0,28020	-0,01759	0,08160	3,59	1,35
PH ₃	-340,30787	-340,68320	-340,66276	-0,50306	-0,24960	-0,01394	0,05946	3,45	1,00

Tabela 8.465: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 20% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,52763	-322,07698	-322,05003	-0,67401	-0,42689	-0,01192	0,07027	3,36	1,12
BHF ₂	-222,94161	-223,44032	-223,41359	-0,62316	-0,37444	-0,02523	0,06328	3,38	1,20
C ₂ H ₂	-75,99683	-76,40976	-76,38500	-0,53773	-0,29255	0,00697	0,05212	3,34	0,61
C ₂ H ₄	-77,22504	-77,60841	-77,57788	-0,49730	-0,27272	-0,00703	0,05689	3,06	0,87
C ₂ H ₆	-78,35911	-78,78993	-78,76735	-0,53643	-0,32655	-0,00098	0,05367	2,86	0,74
CH ₄	-39,45433	-39,95878	-39,93508	-0,63475	-0,37767	0,00054	0,05630	3,50	0,76
CO	-111,75259	-112,25851	-112,21732	-0,64126	-0,36977	-0,03308	0,09097	3,69	1,69
F ₂ O	-272,13194	-272,60895	-272,60072	-0,61737	-0,33933	-0,10919	0,10639	3,78	2,93
H ₂ O	-75,28790	-75,75024	-75,72905	-0,62228	-0,31083	-0,01474	0,06363	4,24	1,07
HF	-99,09867	-99,69054	-99,66655	-0,78395	-0,41002	-0,01453	0,07216	5,09	1,18
NH ₃	-55,55320	-55,94747	-55,92575	-0,53303	-0,26165	-0,00931	0,05976	3,69	0,94
PF ₃	-636,26769	-636,68333	-636,64611	-0,53094	-0,30130	-0,00652	0,07696	3,12	1,14
PH ₃	-340,49371	-340,86982	-340,84911	-0,48676	-0,26748	-0,00840	0,05520	2,98	0,87

Tabela 8.466: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 30% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,81819	-322,37974	-322,35214	-0,66502	-0,46014	-0,00504	0,06529	2,79	0,96
BHF ₂	-223,15407	-223,66075	-223,63371	-0,61236	-0,40105	-0,01195	0,05359	2,88	0,89
C ₂ H ₂	-76,10807	-76,51892	-76,49382	-0,51490	-0,31103	0,00971	0,04900	2,77	0,53
C ₂ H ₄	-77,34515	-77,72585	-77,69503	-0,47533	-0,28923	0,00646	0,05383	2,53	0,64
C ₂ H ₆	-78,47856	-78,91575	-78,89292	-0,52599	-0,34958	0,00332	0,04990	2,40	0,63
CH ₄	-39,51904	-40,02650	-40,00279	-0,61644	-0,40171	0,00435	0,05217	2,92	0,65
CO	-111,87378	-112,38294	-112,34056	-0,62247	-0,39617	-0,01659	0,08506	3,08	1,38
F ₂ O	-272,36048	-272,84633	-272,83815	-0,59997	-0,37372	-0,08622	0,09173	3,08	2,42
H ₂ O	-75,37104	-75,83094	-75,80968	-0,58925	-0,33884	-0,00870	0,05825	3,41	0,91
HF	-99,19281	-99,78167	-99,75785	-0,74420	-0,44348	-0,00826	0,06589	4,09	1,01
NH ₃	-55,62763	-56,02053	-55,99871	-0,50659	-0,28559	-0,00410	0,05498	3,01	0,80
PF ₃	-636,69764	-637,11699	-637,07901	-0,51744	-0,32262	0,00346	0,07237	2,65	0,94
PH ₃	-340,68008	-341,05699	-341,03602	-0,47062	-0,28552	-0,00335	0,05098	2,52	0,74

Tabela 8.467: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 40% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,11047	-322,68417	-322,65596	-0,65571	-0,49370	0,00124	0,06037	2,20	0,80
BHF ₂	-223,36797	-223,88243	-223,85533	-0,60135	-0,42785	-0,00007	0,04986	2,36	0,68
C ₂ H ₂	-76,21981	-76,62860	-76,60316	-0,49237	-0,32955	0,01220	0,04589	2,22	0,46
C ₂ H ₄	-77,46583	-77,84390	-77,81281	-0,45369	-0,30578	0,01005	0,05078	2,01	0,55
C ₂ H ₆	-78,59863	-79,04225	-79,01919	-0,51553	-0,37283	0,00714	0,04615	1,94	0,53
CH ₄	-39,58405	-40,09456	-40,07086	-0,59832	-0,42592	0,00777	0,04806	2,35	0,55
CO	-111,99566	-112,50801	-112,46452	-0,60391	-0,42279	-0,00117	0,07923	2,46	1,09
F ₂ O	-272,59165	-273,08526	-273,07775	-0,57935	-0,40836	-0,06337	0,07308	2,33	1,86
H ₂ O	-75,45448	-75,91200	-75,89071	-0,55687	-0,36717	-0,00330	0,05290	2,58	0,76
HF	-99,28727	-99,87318	-99,84958	-0,70513	-0,47726	-0,00269	0,05961	3,10	0,85
NH ₃	-55,70233	-56,09393	-56,07204	-0,48070	-0,30981	0,00058	0,05023	2,33	0,68
PF ₃	-637,12978	-637,55267	-637,51396	-0,50369	-0,34415	0,01218	0,06784	2,17	0,76
PH ₃	-340,86698	-341,24471	-341,22350	-0,45464	-0,30372	0,00123	0,04681	2,05	0,62

Tabela 8.468: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 50% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,40442	-322,99023	-322,96144	-0,64608	-0,52759	0,00694	0,05550	1,61	0,66
BHF ₂	-223,58328	-224,10535	-224,07819	-0,59015	-0,45483	0,00981	0,04613	1,84	0,49
C ₂ H ₂	-76,33203	-76,73878	-76,71302	-0,47013	-0,34811	0,01446	0,04278	1,66	0,39
C ₂ H ₄	-77,58706	-77,96254	-77,90468	-0,43239	-0,32237	0,01297	0,08234	1,50	0,94
C ₂ H ₆	-78,71933	-79,16941	-79,14616	-0,50503	-0,39632	0,01053	0,04244	1,48	0,43
CH ₄	-39,64934	-40,16297	-40,13929	-0,58039	-0,45031	0,01083	0,04397	1,77	0,45
CO	-112,11823	-112,63370	-112,58919	-0,58563	-0,44961	0,01270	0,07350	1,85	0,83
F ₂ O	-272,82563	-273,32568	-273,31951	-0,55488	-0,44327	-0,04086	0,05026	1,52	1,24
H ₂ O	-75,53822	-75,99342	-75,97213	-0,52518	-0,39581	0,00153	0,04756	1,76	0,63
HF	-99,38204	-99,96508	-99,94173	-0,66678	-0,51135	0,00224	0,05332	2,11	0,69
NH ₃	-55,77732	-56,16765	-56,14572	-0,45536	-0,33431	0,00478	0,04550	1,65	0,55
PF ₃	-637,56404	-637,99032	-637,95092	-0,48975	-0,36588	0,01955	0,06340	1,69	0,60
PH ₃	-341,05441	-341,43296	-341,41154	-0,43883	-0,32208	0,00537	0,04267	1,59	0,51

Tabela 8.469: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 60% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,70001	-323,29788	-323,26856	-0,63613	-0,56177	0,01210	0,05068	1,01	0,52
BHF ₂	-223,80000	-224,32946	-224,30228	-0,57879	-0,48198	0,01720	0,04240	1,32	0,34
C ₂ H ₂	-76,44473	-76,84946	-76,82339	-0,44820	-0,36671	0,01652	0,03968	1,11	0,32
C ₂ H ₄	-77,70885	-78,08178	-78,02244	-0,41143	-0,33901	0,01559	0,07835	0,99	0,85
C ₂ H ₆	-78,84070	-79,29724	-79,27383	-0,49435	-0,42004	0,01353	0,03875	1,01	0,34
CH ₄	-39,71493	-40,23171	-40,20807	-0,56263	-0,47489	0,01356	0,03988	1,19	0,36
CO	-112,24146	-112,76001	-112,71457	-0,56766	-0,47663	0,02436	0,06793	1,24	0,59
F ₂ O	-273,06255	-273,56753	-273,56331	-0,52665	-0,47844	-0,01892	0,02400	0,66	0,58
H ₂ O	-75,62226	-76,07519	-76,05395	-0,49418	-0,42476	0,00582	0,04224	0,94	0,50
HF	-99,47712	-100,05735	-100,03430	-0,62916	-0,54574	0,00660	0,04701	1,13	0,55
NH ₃	-55,85257	-56,24171	-56,21977	-0,43059	-0,35906	0,00854	0,04078	0,97	0,44
PF ₃	-638,00036	-638,42990	-638,38983	-0,47569	-0,38781	0,02561	0,05902	1,20	0,45
PH ₃	-341,24236	-341,62177	-341,60014	-0,42320	-0,34061	0,00911	0,03857	1,12	0,40

Tabela 8.470: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 70% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,99720	-323,60708	-323,57727	-0,62585	-0,59623	0,01678	0,04591	0,40	0,40
BHF ₂	-224,01811	-224,55475	-224,52757	-0,56730	-0,50929	0,02089	0,03866	0,79	0,24
C ₂ H ₂	-76,55792	-76,96064	-76,93428	-0,42659	-0,38535	0,01840	0,03658	0,56	0,25
C ₂ H ₄	-77,83118	-78,20161	-78,14083	-0,39084	-0,35568	0,01794	0,07449	0,48	0,77
C ₂ H ₆	-78,96287	-79,42574	-79,40218	-0,48260	-0,44399	0,01619	0,03508	0,53	0,26
CH ₄	-39,78081	-40,30080	-40,27722	-0,54504	-0,49964	0,01601	0,03581	0,62	0,27
CO	-112,36535	-112,88693	-112,84066	-0,55001	-0,50386	0,03325	0,06253	0,63	0,40
F ₂ O	-273,30247	-273,81074	-273,80905	-0,49553	-0,51389	0,00206	-0,00480	-0,25	-0,09
H ₂ O	-75,70659	-76,15730	-76,13614	-0,46392	-0,45400	0,00964	0,03693	0,13	0,37
HF	-99,57251	-100,14999	-100,12727	-0,59230	-0,58041	0,01045	0,04068	0,16	0,41
NH ₃	-55,92810	-56,31608	-56,29416	-0,40641	-0,38407	0,01190	0,03608	0,30	0,33
PF ₃	-638,43869	-638,87135	-638,83066	-0,46154	-0,40993	0,03056	0,05473	0,70	0,33
PH ₃	-341,43084	-341,81111	-341,78930	-0,40776	-0,35929	0,01248	0,03450	0,66	0,30

Tabela 8.471: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 80% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-323,29596	-323,91779	-323,88753	-0,61524	-0,63098	0,02102	0,04119	-0,21	0,27
BHF ₂	-224,23762	-224,78118	-224,75097	-0,55572	-0,53677	0,02272	0,03843	0,26	0,21
C ₂ H ₂	-76,67158	-77,07231	-77,04567	-0,40531	-0,40404	0,02010	0,03348	0,02	0,18
C ₂ H ₄	-77,95407	-78,32202	-78,25985	-0,37062	-0,37241	0,02006	0,07081	-0,02	0,69
C ₂ H ₆	-79,08657	-79,55490	-79,53122	-0,46512	-0,46817	0,01855	0,03143	-0,04	0,18
CH ₄	-39,84698	-40,37024	-40,34673	-0,52760	-0,52458	0,01821	0,03175	0,04	0,18
CO	-112,48988	-113,01446	-112,96746	-0,53271	-0,53127	0,03953	0,05734	0,02	0,24
F ₂ O	-273,54547	-274,05529	-274,05662	-0,46277	-0,54961	0,02148	-0,03550	-1,18	-0,78
H ₂ O	-75,79120	-76,23976	-76,21870	-0,43442	-0,48352	0,01305	0,03162	-0,67	0,25
HF	-99,66820	-100,24299	-100,22064	-0,55622	-0,61536	0,01387	0,03433	-0,80	0,28
NH ₃	-56,00390	-56,39078	-56,36890	-0,38283	-0,40933	0,01491	0,03138	-0,36	0,22
PF ₃	-638,87897	-639,31464	-639,27337	-0,44738	-0,43224	0,03461	0,05050	0,21	0,22
PH ₃	-341,61983	-342,00099	-341,97902	-0,39251	-0,37815	0,01551	0,03047	0,20	0,20

Tabela 8.472: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 90% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-323,59626	-324,22998	-324,19930	-0,60429	-0,66598	0,02485	0,03650	-0,84	0,16
BHF ₂	-224,45851	-225,00873	-224,97821	-0,54409	-0,56441	0,02435	0,03463	-0,28	0,14
C ₂ H ₂	-76,78571	-77,18447	-77,15755	-0,38437	-0,42278	0,02166	0,03037	-0,52	0,12
C ₂ H ₄	-78,07749	-78,44302	-78,41076	-0,35079	-0,38918	0,02197	0,03564	-0,52	0,19
C ₂ H ₆	-79,20751	-79,68473	-79,66095	-0,46237	-0,49258	0,02066	0,02779	-0,41	0,10
CH ₄	-39,91344	-40,44001	-40,41659	-0,51032	-0,54970	0,02018	0,02770	-0,54	0,10
CO	-112,61504	-113,14260	-113,09496	-0,51577	-0,55888	0,04392	0,05233	-0,59	0,11
F ₂ O	-273,79167	-274,30113	-274,30595	-0,42985	-0,58560	0,03845	-0,06768	-2,12	-1,44
H ₂ O	-75,87610	-76,32256	-76,30164	-0,40573	-0,51331	0,01608	0,02630	-1,46	0,14
HF	-99,76420	-100,33635	-100,31440	-0,52098	-0,65058	0,01690	0,02794	-1,76	0,15
NH ₃	-56,07996	-56,46580	-56,44398	-0,35987	-0,43483	0,01760	0,02669	-1,02	0,12
PF ₃	-639,32116	-639,75973	-639,71791	-0,43326	-0,45473	0,03797	0,04633	-0,29	0,11
PH ₃	-341,80934	-342,19141	-342,16929	-0,37746	-0,39717	0,01825	0,02646	-0,27	0,11

Tabela 8.473: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 100% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-323,89808	-324,54361	-324,51256	-0,59300	-0,70125	0,02833	0,03184	-1,47	0,05
BHF ₂	-224,68075	-225,23737	-225,20660	-0,53245	-0,59220	0,02581	0,03087	-0,81	0,07
C ₂ H ₂	-76,90032	-77,29711	-77,26993	-0,36378	-0,44157	0,02309	0,02727	-1,06	0,06
C ₂ H ₄	-78,20146	-78,56459	-78,53213	-0,33136	-0,40601	0,02371	0,03262	-1,02	0,12
C ₂ H ₆	-79,33131	-79,81522	-79,79136	-0,45227	-0,51721	0,02254	0,02417	-0,88	0,02
CH ₄	-39,98020	-40,51014	-40,48681	-0,49318	-0,57500	0,02196	0,02365	-1,11	0,02
CO	-112,74084	-113,27134	-113,22315	-0,49920	-0,58667	0,04713	0,04748	-1,19	0,00
F ₂ O	-274,04108	-274,54823	-274,55697	-0,39781	-0,62186	0,05196	-0,10107	-3,05	-2,08
H ₂ O	-75,96129	-76,40568	-76,38493	-0,37787	-0,54337	0,01878	0,02099	-2,25	0,03
HF	-99,86049	-100,43007	-100,40855	-0,48660	-0,68605	0,01960	0,02152	-2,71	0,03
NH ₃	-56,15630	-56,54114	-56,51940	-0,33757	-0,46057	0,02002	0,02200	-1,67	0,03
PF ₃	-639,76519	-640,20658	-640,16424	-0,41921	-0,47740	0,04081	0,04223	-0,79	0,02
PH ₃	-341,99937	-342,38237	-342,36011	-0,36263	-0,41636	0,02072	0,02247	-0,73	0,02

Tabela 8.474: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 30% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,07601	-324,63965	-324,61356	-0,66771	-0,46156	-0,00067	0,05233	2,80	0,72
BHF ₂	-224,78020	-225,29500	-225,27298	-0,62220	-0,40662	-0,01028	0,04872	2,93	0,80
C ₂ H ₂	-76,90702	-77,32166	-77,30187	-0,51714	-0,31351	0,00643	0,04362	2,77	0,51
C ₂ H ₄	-78,18645	-78,57091	-78,54583	-0,47686	-0,29214	0,00529	0,04777	2,51	0,58
C ₂ H ₆	-79,35500	-79,80359	-79,78483	-0,53977	-0,35859	0,00277	0,04593	2,47	0,59
CH ₄	-39,98324	-40,50113	-40,48133	-0,62945	-0,40882	0,00252	0,04812	3,00	0,62
CO	-112,80862	-113,32555	-113,28762	-0,62460	-0,40147	-0,01778	0,07840	3,04	1,31
F ₂ O	-274,22648	-274,71718	-274,70973	-0,60508	-0,37788	-0,08639	0,09032	3,09	2,40
H ₂ O	-75,97289	-76,43710	-76,41833	-0,59138	-0,34204	-0,00867	0,05418	3,39	0,86
HF	-99,87618	-100,46875	-100,44797	-0,74537	-0,44638	-0,00880	0,06125	4,07	0,95
NH ₃	-56,15605	-56,55516	-56,53598	-0,50896	-0,29024	-0,00441	0,05084	2,98	0,75
PF ₃	-639,92781	-640,35219	-640,31773	-0,52023	-0,32675	0,00470	0,06674	2,63	0,84
PH ₃	-342,02494	-342,41067	-342,39254	-0,47726	-0,29276	-0,00306	0,04675	2,51	0,68

Tabela 8.475: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 40% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,04791	-324,62353	-324,59639	-0,65855	-0,49467	0,00571	0,04966	2,23	0,60
BHF ₂	-224,76285	-225,28441	-225,26181	-0,61012	-0,43226	0,00159	0,04582	2,42	0,60
C ₂ H ₂	-76,90431	-77,31719	-77,29627	-0,49542	-0,33193	0,01040	0,04135	2,22	0,42
C ₂ H ₄	-78,18654	-78,56877	-78,54269	-0,45595	-0,30877	0,00913	0,04561	2,00	0,50
C ₂ H ₆	-79,35060	-79,80411	-79,78478	-0,52795	-0,38025	0,00689	0,04284	2,01	0,49
CH ₄	-39,98168	-40,50156	-40,48133	-0,61063	-0,43171	0,00652	0,04467	2,43	0,52
CO	-112,79775	-113,31681	-113,27702	-0,60481	-0,42691	-0,00175	0,07377	2,42	1,03
F ₂ O	-274,19314	-274,69092	-274,68342	-0,58415	-0,41147	-0,06319	0,07282	2,35	1,85
H ₂ O	-75,97025	-76,43200	-76,41275	-0,55987	-0,36969	-0,00270	0,04951	2,59	0,71
HF	-99,87324	-100,46282	-100,44170	-0,70751	-0,47934	-0,00256	0,05571	3,10	0,79
NH ₃	-56,15504	-56,55250	-56,53284	-0,48358	-0,31374	0,00077	0,04684	2,31	0,63
PF ₃	-639,90700	-640,33448	-640,29871	-0,50626	-0,34764	0,01366	0,06319	2,16	0,67
PH ₃	-342,02509	-342,41088	-342,39222	-0,46080	-0,31012	0,00181	0,04333	2,05	0,56

Tabela 8.476: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 50% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,02103	-324,60855	-324,58038	-0,64909	-0,52802	0,01160	0,04692	1,65	0,48
BHF ₂	-224,74665	-225,27468	-225,25152	-0,59780	-0,45792	0,01131	0,04283	1,90	0,43
C ₂ H ₂	-76,90195	-77,31312	-77,29225	-0,47397	-0,35039	0,01336	0,04031	1,68	0,37
C ₂ H ₄	-78,18703	-78,56706	-78,54000	-0,43534	-0,32543	0,01260	0,04343	1,50	0,42
C ₂ H ₆	-79,34670	-79,80509	-79,78521	-0,51605	-0,40203	0,01067	0,03972	1,55	0,40
CH ₄	-39,98035	-40,50222	-40,48157	-0,59192	-0,45469	0,01020	0,04118	1,87	0,42
CO	-112,78746	-113,30854	-113,26699	-0,58518	-0,45247	0,01278	0,06924	1,81	0,77
F ₂ O	-274,16225	-274,66583	-274,65892	-0,55976	-0,44521	-0,04023	0,05110	1,56	1,24
H ₂ O	-75,96783	-76,42718	-76,40749	-0,52895	-0,39757	0,00270	0,04484	1,79	0,57
HF	-99,87053	-100,45719	-100,43576	-0,67026	-0,51254	0,00308	0,05017	2,15	0,64
NH ₃	-56,15423	-56,55011	-56,52998	-0,45867	-0,33743	0,00551	0,04282	1,65	0,51
PF ₃	-639,88775	-640,31814	-640,28110	-0,49215	-0,36864	0,02127	0,05969	1,68	0,52
PH ₃	-342,02560	-342,41146	-342,39228	-0,44450	-0,32757	0,00631	0,03990	1,59	0,46

Tabela 8.477: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972B95 50% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,35139	-320,89214	-320,85522	-0,60357	-0,48021	0,01306	0,06260	1,68	0,67
BHF ₂	-222,13539	-222,62294	-222,58927	-0,55966	-0,41620	0,01583	0,05495	1,95	0,53
C ₂ H ₂	-75,74325	-76,12776	-76,09981	-0,44829	-0,32240	0,01312	0,04665	1,71	0,46
C ₂ H ₄	-76,95286	-77,30776	-77,27535	-0,41129	-0,29901	0,01257	0,05018	1,53	0,51
C ₂ H ₆	-78,04686	-78,47076	-78,44528	-0,48325	-0,36625	0,01092	0,04720	1,59	0,49
CH ₄	-39,31029	-39,80010	-39,77365	-0,56228	-0,42059	0,01063	0,04876	1,93	0,52
CO	-111,37779	-111,86256	-111,80965	-0,55362	-0,41375	0,02894	0,08005	1,90	0,70
F ₂ O	-271,15050	-271,60537	-271,55743	-0,51708	-0,39312	0,00108	0,09027	1,69	1,21
H ₂ O	-75,03500	-75,46094	-75,43292	-0,49950	-0,36041	0,00399	0,05383	1,89	0,68
HF	-98,78243	-99,32936	-99,29859	-0,63452	-0,46899	0,00496	0,06027	2,25	0,75
NH ₃	-55,36021	-55,72656	-55,69937	-0,43145	-0,30475	0,00616	0,05123	1,72	0,61
PF ₃	-634,22182	-634,61227	-634,56607	-0,45121	-0,32827	0,02652	0,06980	1,67	0,59
PH ₃	-339,54466	-339,90284	-339,87728	-0,41636	-0,29891	0,00690	0,04798	1,60	0,56

Tabela 8.478: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972B95 60% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,05773	-321,61926	-321,58339	-0,60272	-0,52271	0,01792	0,05663	1,09	0,53
BHF ₂	-222,64090	-223,14264	-223,10939	-0,55513	-0,44975	0,01897	0,05035	1,43	0,43
C ₂ H ₂	-75,97261	-76,36079	-76,33295	-0,43244	-0,34627	0,01650	0,04288	1,17	0,36
C ₂ H ₄	-77,20008	-77,55788	-77,52558	-0,39599	-0,32079	0,01587	0,04666	1,02	0,42
C ₂ H ₆	-78,30301	-78,73847	-78,71357	-0,47791	-0,39489	0,01439	0,04268	1,13	0,38
CH ₄	-39,44292	-39,94105	-39,91534	-0,54976	-0,45011	0,01402	0,04384	1,36	0,41
CO	-111,64944	-112,14330	-112,09108	-0,54160	-0,44651	0,03457	0,07396	1,29	0,54
F ₂ O	-271,72255	-272,19203	-272,15106	-0,50040	-0,43658	0,01392	0,06446	0,87	0,69
H ₂ O	-75,21885	-75,64907	-75,62227	-0,47545	-0,39529	0,00849	0,04763	1,09	0,53
HF	-98,99686	-99,54881	-99,51958	-0,60540	-0,51047	0,00959	0,05301	1,29	0,59
NH ₃	-55,51804	-55,88871	-55,86244	-0,41280	-0,33456	0,01031	0,04570	1,06	0,48
PF ₃	-635,33449	-635,73547	-635,68985	-0,44518	-0,35688	0,03072	0,06445	1,20	0,46
PH ₃	-340,04085	-340,40455	-340,37974	-0,40604	-0,32180	0,01083	0,04306	1,15	0,44

Tabela 8.479: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972B95 70% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,76616	-322,34859	-322,31378	-0,60165	-0,56576	0,02267	0,05057	0,49	0,38
BHF ₂	-223,14834	-223,66401	-223,63121	-0,55034	-0,48359	0,02182	0,04567	0,91	0,32
C ₂ H ₂	-76,20250	-76,59436	-76,56665	-0,41678	-0,37029	0,01888	0,03906	0,63	0,27
C ₂ H ₄	-77,44790	-77,80865	-77,77646	-0,38089	-0,34270	0,01894	0,04313	0,52	0,33
C ₂ H ₆	-78,55990	-79,00691	-78,98260	-0,47225	-0,42385	0,01759	0,03807	0,66	0,28
CH ₄	-39,57591	-40,08241	-40,05745	-0,53729	-0,47989	0,01716	0,03885	0,78	0,30
CO	-111,92192	-112,42482	-112,37333	-0,52936	-0,47968	0,03944	0,06778	0,68	0,39
F ₂ O	-272,29789	-272,78051	-272,74865	-0,47998	-0,48063	0,02619	0,02998	-0,01	0,05
H ₂ O	-75,40318	-75,83777	-75,81222	-0,45185	-0,43071	0,01270	0,04129	0,29	0,39
HF	-99,21188	-99,76893	-99,74129	-0,57655	-0,55252	0,01387	0,04560	0,33	0,43
NH ₃	-55,67626	-56,05131	-56,02601	-0,39447	-0,36484	0,01418	0,04006	0,40	0,35
PF ₃	-636,44999	-636,86144	-636,81643	-0,43914	-0,38589	0,03466	0,05915	0,72	0,33
PH ₃	-340,53782	-340,90708	-340,88303	-0,39582	-0,34496	0,01456	0,03807	0,69	0,32

Tabela 8.480: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B971 50% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,55426	-321,10175	-321,06451	-0,60838	-0,48870	0,02199	0,06122	1,63	0,53
BHF ₂	-222,28014	-222,77579	-222,74396	-0,56560	-0,42606	0,02467	0,05149	1,90	0,36
C ₂ H ₂	-75,81119	-76,19811	-76,17173	-0,45354	-0,32668	0,02176	0,04336	1,73	0,29
C ₂ H ₄	-77,03014	-77,38729	-77,35526	-0,41751	-0,30243	0,02155	0,04804	1,57	0,36
C ₂ H ₆	-78,12685	-78,55754	-78,53119	-0,48786	-0,37496	0,01982	0,04445	1,54	0,34
CH ₄	-39,35111	-39,84580	-39,81929	-0,56507	-0,42899	0,01964	0,04580	1,85	0,36
CO	-111,44808	-111,94396	-111,89309	-0,60092	-0,42368	0,03191	0,07646	2,41	0,61
F ₂ O	-271,31305	-271,77546	-271,73387	-0,52113	-0,40305	-0,00285	0,08390	1,61	1,18
H ₂ O	-75,08676	-75,51717	-75,49066	-0,50345	-0,36849	0,01356	0,05075	1,84	0,51
HF	-98,83761	-99,38916	-99,36032	-0,63717	-0,47779	0,01517	0,05713	2,17	0,57
NH ₃	-55,40653	-55,77730	-55,75118	-0,44409	-0,31163	0,01546	0,04833	1,80	0,45
PF ₃	-634,46854	-634,86626	-634,82117	-0,46940	-0,33603	0,03413	0,06693	1,81	0,45
PH ₃	-339,61997	-339,98391	-339,95817	-0,43622	-0,30481	0,01562	0,04599	1,79	0,41

Tabela 8.481: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B98 50% E_X^{HF} com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,44107	-320,98793	-320,95126	-0,60746	-0,48837	0,01989	0,06117	1,62	0,56
BHF ₂	-222,20218	-222,69807	-222,66659	-0,56589	-0,42619	0,02344	0,05139	1,90	0,38
C ₂ H ₂	-75,78111	-76,16706	-76,14098	-0,45206	-0,32613	0,02020	0,04334	1,71	0,31
C ₂ H ₄	-76,99993	-77,35616	-77,32433	-0,41618	-0,30182	0,01984	0,04810	1,56	0,38
C ₂ H ₆	-78,09517	-78,52594	-78,49975	-0,48764	-0,37526	0,01812	0,04463	1,53	0,36
CH ₄	-39,33742	-39,83174	-39,80532	-0,56422	-0,42912	0,01796	0,04634	1,84	0,39
CO	-111,40534	-111,90149	-111,85098	-0,59967	-0,42410	0,03073	0,07649	2,39	0,62
F ₂ O	-271,21725	-271,67929	-271,63819	-0,51984	-0,40318	-0,00318	0,08321	1,59	1,18
H ₂ O	-75,06100	-75,49080	-75,46471	-0,50202	-0,36864	0,01147	0,05087	1,81	0,54
HF	-98,80508	-99,35601	-99,32755	-0,63581	-0,47781	0,01310	0,05730	2,15	0,60
NH ₃	-55,38680	-55,75698	-55,73119	-0,44232	-0,31169	0,01346	0,04848	1,78	0,48
PF ₃	-634,27916	-634,67670	-634,63202	-0,46847	-0,33588	0,03248	0,06692	1,80	0,47
PH ₃	-339,53756	-339,90142	-339,87600	-0,43536	-0,30481	0,01370	0,04611	1,78	0,44

Tabela 8.482: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97X(20%|100%|#) com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-325,29051	-325,87695	-325,84158	-0,61128	-0,56298	0,03995	0,03410	0,66	-0,08
BHF ₂	-225,64432	-226,17786	-226,15010	-0,55779	-0,50889	0,03618	0,02621	0,67	-0,14
C ₂ H ₂	-77,29342	-77,71059	-77,68668	-0,42803	-0,40866	0,03225	0,02227	0,26	-0,14
C ₂ H ₄	-78,60189	-78,98766	-78,96251	-0,39001	-0,38411	0,03426	0,02353	0,08	-0,15
C ₂ H ₆	-79,78277	-80,24978	-80,22555	-0,47658	-0,45753	0,03303	0,02255	0,26	-0,14
CH ₄	-40,20646	-40,73489	-40,71186	-0,54680	-0,51050	0,03223	0,02109	0,49	-0,15
CO	-113,27782	-113,80529	-113,76148	-0,56739	-0,50675	0,04836	0,04330	0,83	-0,07
F ₂ O	-275,23005	-275,73646	-275,73921	-0,52958	-0,48160	-0,01324	0,00549	0,65	0,25
H ₂ O	-76,28650	-76,75868	-76,73685	-0,49875	-0,44357	0,03200	0,01969	0,75	-0,17
HF	-100,24238	-100,84419	-100,82182	-0,65224	-0,54875	0,03337	0,02045	1,41	-0,18
NH ₃	-56,42413	-56,82958	-56,80734	-0,42418	-0,38974	0,03236	0,02016	0,47	-0,17
PF ₃	-641,81762	-642,25338	-642,21089	-0,45607	-0,42370	0,05204	0,04059	0,44	-0,16
PH ₃	-342,85332	-343,24533	-343,22286	-0,41224	-0,38483	0,03202	0,02028	0,37	-0,16

Tabela 8.483: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97XD(#|#|0,35) com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,04660	-324,63770	-324,60463	-0,60734	-0,57641	0,03732	0,03198	0,42	-0,07
BHF ₂	-224,76873	-225,30337	-225,27796	-0,55237	-0,51893	0,03262	0,02422	0,53	-0,11
C ₂ H ₂	-76,91571	-77,33239	-77,31041	-0,41904	-0,41682	0,02902	0,02075	0,03	-0,11
C ₂ H ₄	-78,21638	-78,60166	-78,57857	-0,38156	-0,39154	0,03035	0,02204	-0,14	-0,11
C ₂ H ₆	-79,38885	-79,85654	-79,83441	-0,46955	-0,46596	0,02913	0,02106	0,05	-0,11
CH ₄	-40,00733	-40,53513	-40,51377	-0,53628	-0,52045	0,02846	0,02026	0,22	-0,11
CO	-112,79478	-113,32337	-113,28039	-0,55124	-0,51814	0,04881	0,04198	0,45	-0,09
F ₂ O	-274,19670	-274,70339	-274,70288	-0,51724	-0,49452	0,00033	-0,00133	0,31	-0,02
H ₂ O	-75,98132	-76,45300	-76,43392	-0,48700	-0,45681	0,02678	0,01744	0,41	-0,13
HF	-99,87351	-100,47441	-100,45490	-0,63818	-0,56387	0,02819	0,01788	1,01	-0,14
NH ₃	-56,17507	-56,57998	-56,56015	-0,41346	-0,40065	0,02751	0,01827	0,17	-0,13
PF ₃	-639,86360	-640,29904	-640,25867	-0,44788	-0,43076	0,04810	0,03876	0,23	-0,13
PH ₃	-341,99416	-342,38605	-342,36572	-0,40254	-0,39171	0,02749	0,01891	0,15	-0,12

Tabela 8.484: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para LC-B1B95(40%|100%|0,40) com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-323,72100	-324,32838	-324,29536	-0,60592	-0,61081	0,03329	0,03294	-0,07	-0,00
BHF ₂	-224,52926	-225,06664	-225,03576	-0,53999	-0,53627	0,02852	0,03079	0,05	0,03
C ₂ H ₂	-76,77441	-77,19040	-77,16771	-0,40959	-0,42626	0,02557	0,02400	-0,23	-0,02
C ₂ H ₄	-78,05686	-78,44136	-78,41801	-0,37262	-0,39914	0,02641	0,02465	-0,36	-0,02
C ₂ H ₆	-79,21178	-79,67920	-79,65724	-0,46066	-0,47576	0,02520	0,02336	-0,21	-0,03
CH ₄	-39,90824	-40,43453	-40,41233	-0,52425	-0,53229	0,02462	0,02308	-0,11	-0,02
CO	-112,65121	-113,17917	-113,13214	-0,52341	-0,53436	0,04829	0,04647	-0,15	-0,02
F ₂ O	-273,92268	-274,43580	-274,43462	-0,49521	-0,52816	0,01980	-0,02196	-0,45	-0,57
H ₂ O	-75,88580	-76,35226	-76,33188	-0,46276	-0,48000	0,02209	0,02017	-0,23	-0,03
HF	-99,78005	-100,37524	-100,35379	-0,60479	-0,59647	0,02309	0,02127	0,11	-0,02
NH ₃	-56,07849	-56,47966	-56,45832	-0,39379	-0,41662	0,02314	0,02145	-0,31	-0,02
PF ₃	-639,52282	-639,96063	-639,91871	-0,43611	-0,44335	0,04373	0,04139	-0,10	-0,03
PH ₃	-341,87940	-342,26814	-342,24719	-0,38418	-0,39740	0,02356	0,02172	-0,18	-0,03

Tabela 8.485: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para LC-BHandH(40%|100%|0,30) com geometrias experimentais na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,30423	-322,90085	-322,87283	-0,60467	-0,59045	0,02486	0,02924	0,19	0,06
BHF ₂	-223,52185	-224,05264	-224,02610	-0,54290	-0,52022	0,02515	0,02691	0,31	0,02
C ₂ H ₂	-76,31945	-76,73293	-76,70904	-0,41845	-0,41365	0,02261	0,02422	0,07	0,02
C ₂ H ₄	-77,58651	-77,96852	-77,94418	-0,38145	-0,38713	0,02288	0,02472	-0,08	0,03
C ₂ H ₆	-78,72911	-79,18885	-79,16601	-0,45984	-0,46082	0,02136	0,02326	-0,01	0,03
CH ₄	-39,66134	-40,18195	-40,15951	-0,52811	-0,51678	0,02089	0,02289	0,15	0,03
CO	-112,08313	-112,60737	-112,56304	-0,53729	-0,51753	0,04238	0,04478	0,27	0,03
F ₂ O	-272,74442	-273,25179	-273,25261	-0,50599	-0,50701	0,00466	-0,00965	-0,01	-0,19
H ₂ O	-75,52423	-75,98919	-75,97056	-0,47775	-0,46237	0,01610	0,01941	0,21	0,05
HF	-99,35273	-99,94669	-99,92719	-0,62277	-0,57640	0,01665	0,02059	0,63	0,05
NH ₃	-55,77656	-56,17524	-56,15517	-0,40595	-0,40071	0,01802	0,02062	0,07	0,04
PF ₃	-637,37730	-637,81080	-637,76432	-0,44139	-0,42981	0,03846	0,04622	0,16	0,11
PH ₃	-340,97492	-341,35940	-341,33880	-0,38939	-0,38472	0,01888	0,02096	0,06	0,03

Tabela 8.486: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,08177	-324,64301	-324,61713	-0,66949	-0,45501	-0,00200	0,05292	2,92	0,75
BHF ₂	-224,78311	-225,29724	-225,27534	-0,62536	-0,40220	-0,01286	0,04928	3,04	0,85
C ₂ H ₂	-76,90613	-77,32276	-77,30283	-0,52349	-0,31116	0,00653	0,04723	2,89	0,55
C ₂ H ₄	-78,18341	-78,57190	-78,54709	-0,48521	-0,29182	0,00256	0,04808	2,63	0,62
C ₂ H ₆	-79,35703	-79,80378	-79,78510	-0,54216	-0,35281	0,00190	0,04661	2,58	0,61
CH ₄	-39,98313	-40,50108	-40,48135	-0,63382	-0,40459	0,00168	0,04882	3,12	0,64
CO	-112,81157	-113,32747	-113,28935	-0,62784	-0,39570	-0,02113	0,07921	3,16	1,37
F ₂ O	-274,24160	-274,72384	-274,69799	-0,60360	-0,36295	-0,09105	0,10011	3,27	2,60
H ₂ O	-75,97333	-76,43817	-76,41944	-0,59796	-0,33657	-0,00993	0,05512	3,56	0,89
HF	-99,87679	-100,46997	-100,44927	-0,75302	-0,43982	-0,01013	0,06236	4,26	0,99
NH ₃	-56,15687	-56,55575	-56,53660	-0,51373	-0,28485	-0,00550	0,05167	3,11	0,78
PF ₃	-639,91850	-640,35875	-640,32780	-0,53889	-0,33996	0,00274	0,06697	2,71	0,87
PH ₃	-342,02553	-342,41091	-342,39274	-0,48058	-0,28858	-0,00409	0,04756	2,61	0,70

Tabela 8.487: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B971 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,07515	-324,63040	-324,60349	-0,67586	-0,43642	-0,00692	0,06486	3,26	0,98
BHF ₂	-224,78188	-225,29495	-225,27450	-0,63565	-0,38996	-0,01950	0,05197	3,34	0,97
C ₂ H ₂	-76,92177	-77,33724	-77,32093	-0,53474	-0,29962	0,00783	0,04197	3,20	0,46
C ₂ H ₄	-78,20740	-78,59425	-78,57158	-0,49633	-0,28031	-0,00687	0,04648	2,94	0,73
C ₂ H ₆	-79,38491	-79,83246	-79,81404	-0,55274	-0,34370	0,00084	0,04612	2,84	0,62
CH ₄	-39,99607	-40,51802	-40,49919	-0,64900	-0,39355	0,00183	0,04804	3,48	0,63
CO	-112,81390	-113,33262	-113,29740	-0,67086	-0,38438	-0,03321	0,07933	3,90	1,53
F ₂ O	-274,23598	-274,71751	-274,70102	-0,61724	-0,34734	-0,10598	0,10831	3,67	2,92
H ₂ O	-75,97815	-76,44408	-76,42621	-0,61472	-0,32152	-0,01276	0,05594	3,99	0,93
HF	-99,87164	-100,46608	-100,44681	-0,77219	-0,42128	-0,01227	0,06367	4,77	1,03
NH ₃	-56,16815	-56,56843	-56,55036	-0,53387	-0,27308	-0,00772	0,05247	3,55	0,82
PF ₃	-639,82446	-640,26413	-640,23502	-0,55037	-0,33019	-0,00400	0,06743	3,00	0,97
PH ₃	-341,95976	-342,34550	-342,32741	-0,49965	-0,27946	-0,00637	0,04859	3,00	0,75

Tabela 8.488: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,06195	-324,61890	-324,58877	-0,67763	-0,43792	-0,00587	0,06694	3,26	0,99
BHF ₂	-224,77372	-225,28750	-225,26612	-0,63692	-0,39023	-0,01697	0,04895	3,36	0,90
C ₂ H ₂	-76,91753	-77,33295	-77,31716	-0,53375	-0,30089	0,00670	0,04191	3,17	0,48
C ₂ H ₄	-78,20613	-78,59286	-78,57085	-0,49572	-0,28123	-0,00557	0,04617	2,92	0,70
C ₂ H ₆	-79,38627	-79,83448	-79,81517	-0,55401	-0,34374	0,00023	0,04657	2,86	0,63
CH ₄	-40,00235	-40,52115	-40,50175	-0,64538	-0,39449	0,00085	0,04844	3,41	0,65
CO	-112,80444	-113,32184	-113,28606	-0,67191	-0,38429	-0,03198	0,07862	3,91	1,50
F ₂ O	-274,22367	-274,70408	-274,68075	-0,61608	-0,34598	-0,10607	0,11169	3,67	2,96
H ₂ O	-75,97612	-76,44252	-76,42285	-0,61387	-0,32241	-0,01267	0,05653	3,97	0,94
HF	-99,87116	-100,46653	-100,44532	-0,77143	-0,42265	-0,01245	0,06514	4,75	1,06
NH ₃	-56,16778	-56,56838	-56,54907	-0,53359	-0,27381	-0,00785	0,05217	3,53	0,82
PF ₃	-639,86896	-640,30690	-640,27626	-0,54875	-0,32886	-0,00269	0,06777	2,99	0,96
PH ₃	-342,01841	-342,40296	-342,38376	-0,49912	-0,27928	-0,00681	0,04870	2,99	0,76

Tabela 8.489: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B98 com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO ε _{cátion}	HOMO ε _{neutra}	LUMO ε _{neutra}	HOMO ε _{ânion}	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,05226	-324,61128	-324,58477	-0,67753	-0,44226	-0,00781	0,06418	3,20	0,98
BHF ₂	-224,76709	-225,28302	-225,26294	-0,63681	-0,39445	-0,01983	0,05136	3,30	0,97
C ₂ H ₂	-76,91363	-77,33006	-77,31402	-0,53300	-0,30291	0,00651	0,04148	3,13	0,48
C ₂ H ₄	-78,20241	-78,59005	-78,56758	-0,49454	-0,28333	-0,00694	0,04608	2,87	0,72
C ₂ H ₆	-79,38158	-79,83116	-79,81289	-0,55290	-0,34754	-0,00039	0,04573	2,79	0,63
CH ₄	-40,00033	-40,51946	-40,50072	-0,64329	-0,39748	0,00054	0,04769	3,34	0,64
CO	-112,80100	-113,32153	-113,28694	-0,66869	-0,38895	-0,03343	0,07857	3,81	1,52
F ₂ O	-274,21307	-274,69749	-274,68149	-0,61728	-0,35280	-0,10646	0,10661	3,60	2,90
H ₂ O	-75,97425	-76,44146	-76,42404	-0,61214	-0,32634	-0,01394	0,05537	3,89	0,94
HF	-99,86600	-100,46227	-100,44348	-0,76987	-0,42699	-0,01347	0,06300	4,67	1,04
NH ₃	-56,16647	-56,56744	-56,54968	-0,53030	-0,27692	-0,00895	0,05203	3,45	0,83
PF ₃	-639,80651	-640,24776	-640,21904	-0,54978	-0,33338	-0,00448	0,06674	2,94	0,97
PH ₃	-341,96434	-342,35091	-342,33308	-0,49750	-0,28222	-0,00760	0,04820	2,93	0,76

Tabela 8.490: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,40581	-322,99112	-322,96180	-0,64603	-0,52664	0,00694	0,05581	1,62	0,66
BHF ₂	-223,58535	-224,10606	-224,07880	-0,58947	-0,45294	0,00981	0,04618	1,86	0,49
C ₂ H ₂	-76,32932	-76,73947	-76,71357	-0,47382	-0,35126	0,01446	0,04290	1,67	0,39
C ₂ H ₄	-77,58263	-77,96363	-77,93228	-0,43828	-0,32757	0,01297	0,04768	1,51	0,47
C ₂ H ₆	-78,72272	-79,17005	-79,14673	-0,50246	-0,39336	0,01053	0,04250	1,48	0,43
CH ₄	-39,64848	-40,16298	-40,13927	-0,58141	-0,45087	0,01083	0,04398	1,78	0,45
CO	-112,12114	-112,63470	-112,58862	-0,58408	-0,44748	0,01270	0,07377	1,86	0,83
F ₂ O	-272,84885	-273,33313	-273,27881	-0,54635	-0,42303	-0,04086	0,09139	1,68	1,80
H ₂ O	-75,53768	-75,99354	-75,97200	-0,52624	-0,39607	0,00153	0,04769	1,77	0,63
HF	-99,38124	-99,96511	-99,94159	-0,66789	-0,51188	0,00224	0,05342	2,12	0,70
NH ₃	-55,78065	-56,16783	-56,14560	-0,45247	-0,33089	0,00478	0,04566	1,65	0,56
PF ₃	-637,55443	-637,99180	-637,95446	-0,50065	-0,37693	0,01955	0,06220	1,68	0,58
PH ₃	-341,05682	-341,43334	-341,41171	-0,43720	-0,31973	0,00537	0,04283	1,60	0,51

Tabela 8.491: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97X com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,07571	-324,64660	-324,61106	-0,59964	-0,54365	0,04025	0,03438	0,76	-0,08
BHF ₂	-224,78287	-225,30579	-225,27789	-0,55063	-0,49523	0,03630	0,02644	0,75	-0,13
C ₂ H ₂	-76,92259	-77,33744	-77,31340	-0,42971	-0,40240	0,03237	0,02246	0,37	-0,13
C ₂ H ₄	-78,21003	-78,59600	-78,57070	-0,39395	-0,38057	0,03441	0,02376	0,18	-0,14
C ₂ H ₆	-79,38200	-79,83866	-79,81429	-0,46923	-0,44452	0,03316	0,02273	0,34	-0,14
CH ₄	-39,99627	-40,52114	-40,49798	-0,54988	-0,49931	0,03235	0,02128	0,69	-0,15
CO	-112,81616	-113,33551	-113,28995	-0,56402	-0,49286	0,05015	0,04496	0,97	-0,07
F ₂ O	-274,24397	-274,72771	-274,69706	-0,51615	-0,45183	-0,00695	0,04021	0,88	0,64
H ₂ O	-75,98106	-76,44760	-76,42549	-0,50142	-0,42997	0,03207	0,02015	0,97	-0,16
HF	-99,87793	-100,47187	-100,44913	-0,65494	-0,53096	0,03364	0,02109	1,69	-0,17
NH ₃	-56,17245	-56,57121	-56,54874	-0,42357	-0,37680	0,03240	0,02052	0,64	-0,16
PF ₃	-639,86678	-640,31020	-640,27046	-0,46399	-0,42870	0,05271	0,03818	0,48	-0,20
PH ₃	-341,98851	-342,37355	-342,35088	-0,40880	-0,37445	0,03205	0,02057	0,47	-0,16

Tabela 8.492: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97XD com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,06294	-324,62852	-324,59616	-0,61076	-0,52216	0,03729	0,03069	1,21	-0,09
BHF ₂	-224,77541	-225,29437	-225,26883	-0,56493	-0,47259	0,03245	0,02462	1,26	-0,11
C ₂ H ₂	-76,91686	-77,33279	-77,31062	-0,45015	-0,38171	0,02910	0,02109	0,93	-0,11
C ₂ H ₄	-78,20750	-78,59440	-78,56538	-0,41260	-0,36083	0,03016	0,02780	0,70	-0,03
C ₂ H ₆	-79,38619	-79,83921	-79,81675	-0,48265	-0,42399	0,02878	0,02135	0,80	-0,10
CH ₄	-40,00285	-40,52337	-40,50203	-0,56393	-0,47703	0,02810	0,01981	1,18	-0,11
CO	-112,80718	-113,32548	-113,28465	-0,56434	-0,46958	0,03665	0,04299	1,29	0,09
F ₂ O	-274,22717	-274,71054	-274,68209	-0,53804	-0,42972	-0,02616	0,05008	1,47	1,04
H ₂ O	-75,97948	-76,44594	-76,42649	-0,52422	-0,40687	0,02601	0,01850	1,60	-0,10
HF	-99,87509	-100,46934	-100,44926	-0,67915	-0,50805	0,02723	0,02032	2,33	-0,09
NH ₃	-56,17223	-56,57108	-56,55088	-0,44246	-0,35481	0,02699	0,01880	1,19	-0,11
PF ₃	-639,85349	-640,29539	-640,25933	-0,47744	-0,40822	0,04591	0,03600	0,94	-0,13
PH ₃	-341,99620	-342,38253	-342,36187	-0,42116	-0,35664	0,02683	0,01908	0,88	-0,11

Tabela 8.493: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 30% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,81875	-322,38010	-322,35211	-0,66525	-0,45951	-0,00504	0,06545	2,80	0,96
BHF ₂	-223,15578	-223,66113	-223,63396	-0,61144	-0,39928	-0,01195	0,05366	2,89	0,89
C ₂ H ₂	-76,10661	-76,51921	-76,49404	-0,51685	-0,31259	0,00971	0,04908	2,78	0,54
C ₂ H ₄	-77,34148	-77,72649	-77,69570	-0,48006	-0,29314	0,00646	0,05374	2,54	0,64
C ₂ H ₆	-78,48296	-78,91629	-78,89345	-0,52236	-0,34558	0,00332	0,04992	2,41	0,63
CH ₄	-39,51791	-40,02654	-40,00287	-0,61859	-0,40102	0,00435	0,05214	2,96	0,65
CO	-111,87523	-112,38335	-112,33979	-0,62159	-0,39489	-0,01659	0,08490	3,08	1,38
F ₂ O	-272,37741	-272,85067	-272,80931	-0,59025	-0,35879	-0,08622	0,10534	3,15	2,61
H ₂ O	-75,37178	-75,83099	-75,80970	-0,58833	-0,33838	-0,00870	0,05824	3,40	0,91
HF	-99,19341	-99,78168	-99,75800	-0,74340	-0,44311	-0,00826	0,06584	4,09	1,01
NH ₃	-55,63113	-56,02062	-55,99866	-0,50295	-0,28246	-0,00410	0,05500	3,00	0,80
PF ₃	-636,68606	-637,11872	-637,08355	-0,53021	-0,33628	0,00346	0,07151	2,64	0,93
PH ₃	-340,68008	-341,05707	-341,03597	-0,47094	-0,28537	-0,00335	0,05106	2,52	0,74

Tabela 8.494: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 40% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{cátion}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,11141	-322,68477	-322,65609	-0,65583	-0,49292	0,00124	0,06060	2,22	0,81
BHF ₂	-223,36985	-223,88296	-223,85574	-0,60057	-0,42598	-0,00007	0,04992	2,38	0,68
C ₂ H ₂	-76,21767	-76,62905	-76,60422	-0,49523	-0,33188	0,01220	0,04702	2,22	0,47
C ₂ H ₄	-77,46173	-77,84472	-77,81364	-0,45903	-0,31032	0,01005	0,05070	2,02	0,55
C ₂ H ₆	-78,60249	-79,04279	-79,01969	-0,51244	-0,36932	0,00714	0,04619	1,95	0,53
CH ₄	-39,58405	-40,09456	-40,07086	-0,59832	-0,42592	0,00777	0,04806	2,35	0,55
CO	-111,99780	-112,50869	-112,46378	-0,60270	-0,42109	-0,00117	0,07923	2,47	1,09
F ₂ O	-272,61197	-273,09110	-273,04308	-0,56935	-0,39075	-0,06337	0,09808	2,43	2,20
H ₂ O	-75,45452	-75,91205	-75,89061	-0,55699	-0,36708	-0,00330	0,05295	2,58	0,77
HF	-99,28715	-99,87318	-99,84956	-0,70530	-0,47734	-0,00269	0,05962	3,10	0,85
NH ₃	-55,70584	-56,09402	-56,07191	-0,47733	-0,30642	0,00058	0,05032	2,33	0,68
PF ₃	-637,11914	-637,55421	-637,51791	-0,51552	-0,35646	0,01218	0,06678	2,16	0,74
PH ₃	-340,86814	-341,24490	-341,22352	-0,45400	-0,30248	0,00123	0,04693	2,06	0,62

Tabela 8.495: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH BHandH 50% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{cátion}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,40581	-322,99112	-322,96180	-0,64603	-0,52664	0,00694	0,05581	1,62	0,66
BHF ₂	-223,58535	-224,10606	-224,07880	-0,58947	-0,45294	0,00981	0,04618	1,86	0,49
C ₂ H ₂	-76,32932	-76,73947	-76,71357	-0,47382	-0,35126	0,01446	0,04290	1,67	0,39
C ₂ H ₄	-77,58263	-77,96363	-77,93228	-0,43828	-0,32757	0,01297	0,04768	1,51	0,47
C ₂ H ₆	-78,72272	-79,17005	-79,14673	-0,50246	-0,39336	0,01053	0,04250	1,48	0,43
CH ₄	-39,64848	-40,16298	-40,13927	-0,58141	-0,45087	0,01083	0,04398	1,78	0,45
CO	-112,12114	-112,63470	-112,58862	-0,58408	-0,44748	0,01270	0,07377	1,86	0,83
F ₂ O	-272,84885	-273,33313	-273,27881	-0,54635	-0,42303	-0,04086	0,09139	1,68	1,80
H ₂ O	-75,53768	-75,99354	-75,97200	-0,52624	-0,39607	0,00153	0,04769	1,77	0,63
HF	-99,38124	-99,96511	-99,94159	-0,66789	-0,51188	0,00224	0,05342	2,12	0,70
NH ₃	-55,78065	-56,16783	-56,14560	-0,45247	-0,33089	0,00478	0,04566	1,65	0,56
PF ₃	-637,55443	-637,99180	-637,95446	-0,50065	-0,37693	0,01955	0,06220	1,68	0,58
PH ₃	-341,05682	-341,43334	-341,41171	-0,43720	-0,31973	0,00537	0,04283	1,60	0,51

Tabela 8.496: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para BHandH 60% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{cátion}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-322,70191	-323,29909	-323,26919	-0,63585	-0,56068	0,01210	0,05107	1,02	0,53
BHF ₂	-223,80226	-224,33038	-224,30312	-0,57819	-0,48015	0,01720	0,04243	1,33	0,34
C ₂ H ₂	-76,44154	-76,85048	-76,82424	-0,45264	-0,37073	0,01652	0,03982	1,11	0,32
C ₂ H ₄	-77,70418	-78,08320	-78,02228	-0,41782	-0,34488	0,01559	0,07904	0,99	0,86
C ₂ H ₆	-78,84335	-79,29805	-79,27454	-0,49271	-0,41797	0,01353	0,03882	1,02	0,34
CH ₄	-39,71430	-40,23180	-40,20810	-0,56297	-0,47618	0,01356	0,03993	1,18	0,36
CO	-112,24522	-112,76138	-112,71429	-0,56579	-0,47407	0,02436	0,06856	1,25	0,60
F ₂ O	-273,08798	-273,57667	-273,51655	-0,52129	-0,45561	-0,01892	0,08588	0,89	1,43
H ₂ O	-75,62121	-76,07545	-76,05387	-0,49614	-0,42535	0,00582	0,04246	0,96	0,50
HF	-99,47569	-100,05746	-100,03410	-0,63119	-0,54673	0,00660	0,04723	1,15	0,55
NH ₃	-55,85621	-56,24203	-56,21972	-0,42773	-0,35527	0,00854	0,04103	0,99	0,44
PF ₃	-637,99177	-638,43141	-638,39315	-0,48574	-0,39774	0,02561	0,05774	1,20	0,44
PH ₃	-341,24610	-341,62239	-341,60053	-0,42056	-0,33713	0,00911	0,03876	1,14	0,40

Tabela 8.497: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B1B95 40% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{cátion}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{neutra}}$	$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{ânion}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-324,04812	-324,62362	-324,59623	-0,65862	-0,49438	0,00571	0,05615	2,23	0,69
BHF ₂	-224,76241	-225,28453	-225,26194	-0,61091	-0,43260	0,00159	0,04580	2,43	0,60
C ₂ H ₂	-76,90210	-77,31759	-77,29711	-0,49835	-0,33416	0,01040	0,04352	2,23	0,45
C ₂ H ₄	-78,18291	-78,56962	-78,54359	-0,46101	-0,31268	0,00913	0,04551	2,02	0,49
C ₂ H ₆	-79,35177	-79,80456	-79,78518	-0,52798	-0,37900	0,00689	0,04292	2,03	0,49
CH ₄	-39,98052	-40,50162	-40,48135	-0,61213	-0,43267	0,00652	0,04470	2,44	0,52
CO	-112,79927	-113,31719	-113,27648	-0,60337	-0,42565	-0,00175	0,07373	2,42	1,03
F ₂ O	-274,20691	-274,69401	-274,65540	-0,57712	-0,39837	-0,06319	0,09234	2,43	2,12
H ₂ O	-75,96948	-76,43209	-76,41267	-0,56118	-0,37009	-0,00270	0,04958	2,60	0,71
HF	-99,87249	-100,46285	-100,44158	-0,70840	-0,47984	-0,00256	0,05578	3,11	0,79
NH ₃	-56,15623	-56,55264	-56,53282	-0,48295	-0,31232	0,00077	0,04693	2,32	0,63
PF ₃	-639,89443	-640,33640	-640,30322	-0,52038	-0,36257	0,01366	0,06230	2,15	0,66
PH ₃	-342,02671	-342,41132	-342,39248	-0,45997	-0,30851	0,00181	0,04349	2,06	0,57

Tabela 8.498: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B971//B971 50% E_X^{HF} na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,55459	-321,10234	-321,06523	-0,60845	-0,48915	-0,00692	0,06111	1,62	0,93
BHF ₂	-222,27938	-222,77601	-222,74426	-0,56630	-0,42727	-0,01950	0,05146	1,89	0,97
C ₂ H ₂	-75,81038	-76,19797	-76,17157	-0,45426	-0,32733	0,00783	0,04338	1,73	0,48
C ₂ H ₄	-77,02763	-77,38687	-77,35494	-0,41970	-0,30443	-0,00687	0,04791	1,57	0,75
C ₂ H ₆	-78,12810	-78,55769	-78,53133	-0,48714	-0,37375	0,00084	0,04445	1,54	0,59
CH ₄	-39,34974	-39,84608	-39,81958	-0,56875	-0,42850	0,00183	0,04580	1,91	0,60
CO	-111,44817	-111,94391	-111,89301	-0,60106	-0,42352	-0,03321	0,07643	2,42	1,49
F ₂ O	-271,31776	-271,77613	-271,72437	-0,51872	-0,39803	-0,10598	0,09234	1,64	2,70
H ₂ O	-75,08728	-75,51729	-75,49078	-0,50291	-0,36825	-0,01276	0,05075	1,83	0,86
HF	-98,83804	-99,38922	-99,36044	-0,63667	-0,47757	-0,01227	0,05709	2,16	0,94
NH ₃	-55,40725	-55,77745	-55,75133	-0,44334	-0,31119	-0,00772	0,04832	1,80	0,76
PF ₃	-634,45510	-634,87133	-634,82856	-0,48459	-0,35542	-0,00400	0,06578	1,76	0,95
PH ₃	-339,62090	-339,98354	-339,95772	-0,43542	-0,30328	-0,00637	0,04606	1,80	0,71

Tabela 8.499: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B972B95 60% E_X^{HF} com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-321,05763	-321,61938	-321,58360	-0,60281	-0,52307	0,01792	0,05652	1,08	0,53
BHF ₂	-222,64198	-223,14283	-223,11452	-0,55433	-0,44880	0,01897	0,04606	1,44	0,37
C ₂ H ₂	-75,97347	-76,36102	-76,08438	-0,43143	-0,34598	0,01650	0,01719	1,16	0,01
C ₂ H ₄	-77,19930	-77,55817	-77,52593	-0,39667	-0,32224	0,01587	0,04659	1,01	0,42
C ₂ H ₆	-78,30688	-78,73906	-78,71422	-0,47442	-0,39184	0,01439	0,04263	1,12	0,38
CH ₄	-39,44664	-39,94152	-39,91588	-0,54604	-0,44729	0,01402	0,04379	1,34	0,41
CO	-111,64974	-112,14332	-112,09104	-0,54131	-0,44623	0,03457	0,07397	1,29	0,54
F ₂ O	-271,73726	-272,19579	-272,12764	-0,49571	-0,42192	0,01392	0,09352	1,00	1,08
H ₂ O	-75,21963	-75,64911	-75,62233	-0,47445	-0,39485	0,00849	0,04761	1,08	0,53
HF	-98,99714	-99,54881	-99,51962	-0,60483	-0,51032	0,00959	0,05298	1,29	0,59
NH ₃	-55,51939	-55,88884	-55,86263	-0,41128	-0,33374	0,01031	0,04564	1,05	0,48
PF ₃	-635,32020	-635,73813	-635,69438	-0,46175	-0,37418	0,03072	0,06315	1,19	0,44
PH ₃	-340,04251	-340,40458	-340,37981	-0,40436	-0,32024	0,01083	0,04303	1,14	0,44

Tabela 8.500: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para B98//B98 45% E_X^{HF} na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-320,44144	-320,98851	-320,95195	-0,60752	-0,48872	-0,00781	0,06108	1,62	0,94
BHF ₂	-222,20148	-222,69824	-222,66683	-0,56654	-0,42725	-0,01983	0,05136	1,90	0,97
C ₂ H ₂	-75,77993	-76,16681	-76,14070	-0,45306	-0,32698	0,00651	0,04336	1,72	0,50
C ₂ H ₄	-76,99701	-77,35555	-77,32383	-0,41862	-0,30403	-0,00694	0,04796	1,56	0,75
C ₂ H ₆	-78,09617	-78,52598	-78,49978	-0,48717	-0,37413	-0,00039	0,04464	1,54	0,61
CH ₄	-39,33621	-39,83198	-39,80558	-0,56758	-0,42872	0,00054	0,04635	1,89	0,62
CO	-111,40548	-111,90136	-111,85076	-0,59994	-0,42379	-0,03343	0,07646	2,40	1,50
F ₂ O	-271,22227	-271,67969	-271,62704	-0,51712	-0,39742	-0,10646	0,09248	1,63	2,71
H ₂ O	-75,06144	-75,49091	-75,46481	-0,50158	-0,36843	-0,01394	0,05088	1,81	0,88
HF	-98,80539	-99,32606	-99,32764	-0,63547	-0,47766	-0,01347	0,05726	2,15	0,96
NH ₃	-55,38765	-55,75712	-55,73131	-0,44143	-0,31109	-0,00895	0,04849	1,77	0,78
PF ₃	-634,26688	-634,68213	-634,63969	-0,48318	-0,35438	-0,00448	0,06575	1,75	0,96
PH ₃	-339,53870	-339,90095	-339,87543	-0,43431	-0,30296	-0,00760	0,04619	1,79	0,73

Tabela 8.501: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97X(20%|100%|#) com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	$E_{\text{cátion}}$	E_{neutra}	$E_{\text{ânion}}$	$\epsilon_{\text{cátion}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{HOMO}}$	$\epsilon_{\text{neutra}}^{\text{LUMO}}$	$\epsilon_{\text{ânion}}^{\text{HOMO}}$	Conc.cátion	Conc.ânion
BF ₃	-325,29082	-325,87706	-325,84171	-0,61120	-0,56267	0,03995	0,03409	0,66	-0,08
BHF ₂	-225,64350	-226,17805	-226,15057	-0,55905	-0,50968	0,03618	0,02571	0,67	-0,14
C ₂ H ₂	-77,29035	-77,71156	-77,68762	-0,43261	-0,41218	0,03225	0,02228	0,28	-0,14
C ₂ H ₄	-78,59768	-78,98928	-78,96408	-0,39662	-0,38923	0,03426	0,02357	0,10	-0,15
C ₂ H ₆	-79,78420	-80,25083	-80,22654	-0,47716	-0,45655	0,03303	0,02260	0,28	-0,14
CH ₄	-40,20102	-40,73521	-40,71211	-0,55489	-0,51266	0,03223	0,02116	0,57	-0,15
CO	-113,27970	-113,80587	-113,76074	-0,56832	-0,50526	0,04836	0,04424	0,86	-0,06
F ₂ O	-275,24566	-275,74014	-275,70490	-0,52121	-0,46747	-0,01324	0,04162	0,73	0,75
H ₂ O	-76,28512	-76,75899	-76,73687	-0,50125	-0,44444	0,03200	0,01996	0,77	-0,16
HF	-100,24105	-100,84429	-100,82163	-0,65422	-0,54964	0,03337	0,02072	1,42	-0,17
NH ₃	-56,42648	-56,83005	-56,80752	-0,42285	-0,38719	0,03236	0,02048	0,49	-0,16
PF ₃	-641,80575	-642,25502	-642,21525	-0,46812	-0,43735	0,05204	0,03797	0,42	-0,19
PH ₃	-342,85713	-343,24638	-343,22369	-0,41076	-0,38153	0,03202	0,02052	0,40	-0,16

Tabela 8.502: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para ω B97XD($\#|\#|0,35$) com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-324,04664	-324,63770	-324,60464	-0,60731	-0,57636	0,03732	0,03198	0,42	-0,07
BHF ₂	-224,76811	-225,30339	-225,27815	-0,55097	-0,51953	0,03262	0,02393	0,43	-0,12
C ₂ H ₂	-76,91328	-77,33294	-77,31089	-0,42214	-0,41967	0,02902	0,02091	0,03	-0,11
C ₂ H ₄	-78,21248	-78,60246	-78,57933	-0,38656	-0,39598	0,03035	0,02209	-0,13	-0,11
C ₂ H ₆	-79,39014	-79,85680	-79,83464	-0,46920	-0,46465	0,02913	0,02109	0,06	-0,11
CH ₄	-40,00429	-40,53515	-40,51377	-0,54131	-0,52097	0,02846	0,02028	0,28	-0,11
CO	-112,79616	-113,32371	-113,27983	-0,55107	-0,51702	0,04881	0,04275	0,46	-0,08
F ₂ O	-274,21148	-274,70677	-274,67023	-0,50933	-0,48105	0,00033	0,03561	0,38	0,48
H ₂ O	-75,98091	-76,45307	-76,43381	-0,48778	-0,45701	0,02678	0,01764	0,42	-0,12
HF	-99,87308	-100,47442	-100,45482	-0,63877	-0,56415	0,02819	0,01797	1,02	-0,14
NH ₃	-56,17828	-56,58012	-56,56004	-0,41036	-0,39744	0,02751	0,01855	0,18	-0,12
PF ₃	-639,85055	-640,30113	-640,26348	-0,46168	-0,44603	0,04810	0,03598	0,21	-0,16
PH ₃	-341,99831	-342,38667	-342,36618	-0,39968	-0,38783	0,02749	0,01904	0,16	-0,11

Tabela 8.503: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para LC-B1B95(40%|100%|0,25) com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-323,76889	-324,35813	-324,32538	-0,60637	-0,57415	0,03112	0,03280	0,44	0,02
BHF ₂	-224,49750	-225,08620	-225,06118	-0,60442	-0,50645	0,02802	0,02612	1,33	-0,03
C ₂ H ₂	-76,78640	-77,20670	-77,18439	-0,43571	-0,40800	0,02511	0,02365	0,38	-0,02
C ₂ H ₄	-78,06009	-78,45199	-78,42914	-0,40009	-0,38555	0,02576	0,02422	0,20	-0,02
C ₂ H ₆	-79,22476	-79,68163	-79,66025	-0,46682	-0,44835	0,02442	0,02280	0,25	-0,02
CH ₄	-39,90807	-40,43197	-40,41033	-0,54501	-0,50628	0,02387	0,02260	0,53	-0,02
CO	-112,67615	-113,19822	-113,15098	-0,54099	-0,50227	0,04412	0,04921	0,53	0,07
F ₂ O	-273,98613	-274,47563	-274,42533	-0,50754	-0,47304	0,00071	0,05184	0,47	0,70
H ₂ O	-75,88880	-76,35503	-76,33540	-0,49257	-0,44827	0,02065	0,02003	0,60	-0,01
HF	-99,78564	-100,37954	-100,35874	-0,63719	-0,56023	0,02157	0,02174	1,05	0,00
NH ₃	-56,08203	-56,48050	-56,45981	-0,41652	-0,38641	0,02195	0,02108	0,41	-0,01
PF ₃	-639,56302	-640,00865	-639,97064	-0,46069	-0,43229	0,04184	0,03796	0,39	-0,05
PH ₃	-341,89785	-342,28483	-342,26449	-0,39952	-0,37680	0,02244	0,02115	0,31	-0,02

Tabela 8.504: Energias utilizadas (em hartree) e concavidades (Conc.) obtidas pelo Teorema de Janak para LC-BHandH(40%|100%|0,10) com geometrias otimizadas na base aug-pcJ-2.

Molécula	E _{cátion}	E _{neutra}	E _{ânion}	LUMO $\epsilon_{\text{cátion}}$	HOMO ϵ_{neutra}	LUMO ϵ_{neutra}	HOMO $\epsilon_{\text{ânion}}$	Conc. _{cátion}	Conc. _{ânion}
BF ₃	-322,14415	-322,72026	-322,69432	-0,62618	-0,52807	0,01697	0,03416	1,33	0,23
BHF ₂	-223,39608	-223,91171	-223,88657	-0,57071	-0,46102	0,02001	0,02816	1,49	0,11
C ₂ H ₂	-76,23643	-76,64991	-76,62728	-0,46471	-0,36676	0,02033	0,02530	1,33	0,07
C ₂ H ₄	-77,48422	-77,86927	-77,84660	-0,42869	-0,34500	0,01978	0,02574	1,14	0,08
C ₂ H ₆	-78,62821	-79,07113	-79,05020	-0,48287	-0,40414	0,01773	0,02414	1,07	0,09
CH ₄	-39,59901	-40,11151	-40,09044	-0,56747	-0,46082	0,01761	0,02485	1,45	0,10
CO	-112,01333	-112,52687	-112,47887	-0,57329	-0,45662	0,02426	0,05543	1,59	0,42
F ₂ O	-272,63787	-273,11929	-273,07412	-0,53848	-0,42616	-0,03347	0,06736	1,53	1,37
H ₂ O	-75,46623	-75,92585	-75,90776	-0,52597	-0,40253	0,01030	0,02610	1,68	0,21
HF	-99,29747	-99,88540	-99,86549	-0,67381	-0,51279	0,01062	0,03094	2,19	0,28
NH ₃	-55,71906	-56,10941	-56,09030	-0,44679	-0,34164	0,01314	0,02501	1,43	0,16
PF ₃	-637,15968	-637,59725	-637,56284	-0,48597	-0,39132	0,03014	0,04199	1,29	0,16
PH ₃	-340,88822	-341,26722	-341,24839	-0,42435	-0,33699	0,01409	0,02325	1,19	0,12

8.10 Teste com diferentes tipos de acoplamento

Tabela 8.505: Cálculo das constantes de acoplamento com conjunto teste de moléculas para funcionais selecionados (1 de 2) na base aug-pcJ-2.

	Func.	B1B95	B1B95	LC-B1B95 (0,4 1,0 0,25) 40,00	LC-B1B95 (0,4 0,7 0,35) 40,00	B971	B971	B972	B972B95	B98	B98	Exp.
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	¹ JNF	-191,9	-199,6	-200,1	-188,0	-185,7	-187,9	-194,0	-189,9	21,98	-186,7	-145
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	² JNF	13,0	8,1	9,7	17,8	16,1	15,7	17,1	9,4	15	15	37
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	³ JFF	-203,6	-137,8	-141,1	-200,7	-182,5	-179,1	-179,1	-149,9	-211,5	-187,3	-99
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	¹ JNF	-166,1	-173,8	-173,7	-162,9	-157,9	-163,8	-168,8	-164,4	-163,8	-159,5	-136
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	² JNF	45,4	50,5	50,3	45,4	51,6	44,0	44,0	47,8	44,2	51,3	73
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	³ JFF	-369,9	-335,6	-341,2	-420,2	-392,8	-399,3	-399,3	-344,5	-428,3	-397,7	-322
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	¹ JFF	-415,7	-157,7	-158,1	-163,5	-149,4	-167,2	-167,2	-145,1	-164,1	-151,2	-167
N ₂ F ₄	¹ JSH	-197,3	-187,3	-192,8	-194,1	-176,2	-206,1	-206,1	-180,7	-194,4	-176,8	-203
SH ₄	¹ JSH	277,6	191,0	192,7	303,1	197,6	303,6	303,6	171,3	306,0	200,9	178
PF ₅	¹ JPF	-1153,2	-947,1	-960,2	-1238,2	-999,9	-1255,3	-1255,3	-896,5	-1250,6	-1010,9	-1080,0
PF ₃ O	¹ JPF	-1281,4	-1064,3	-1079,2	-1365,6	-1118,3	-1379,2	-1379,2	-1022,8	-1373,2	-1125,9	-1080
PF ₃ O	² JPO	245,4	194,8	198,2	263,3	207,6	258,9	258,9	189,4	268,8	210,1	184
PF ₃ O	¹ JO	44,1	37,3	36,9	44,5	36,2	44,6	44,6	34,0	45,2	37	31
PCH ₃ Cl ₂	¹ JPC	-47,3	-23,9	-26,4	-48,9	-25,7	-49,2	-49,2	-20,2	-48,1	-24,9	-106,6
PCH ₃ Cl ₂	² JPH	25,9	22,0	22,3	27,7	24,3	27,7	26,9	19,6	27,4	24,3	16,5
PCH ₃ Cl ₂ O	¹ JPC	101,1	119,6	120,3	104,6	124,1	100,9	100,9	116,2	104,9	126,4	43,9
PCH ₃ Cl ₂ O	² JPH	-13,4	-17,4	-17,9	-13,2	-14,3	-13,3	-13,3	-17,4	-14,4	-14,8	-17,7
P(CH ₃) ₃	¹ JPC	-19,8	-5,5	-6,5	-19,2	-2,9	-18,0	-17,9	-1,4	-17,9	-13,6	-1,7
P(CH ₃) ₃	² JPH	6,5	3,7	3,7	7,5	4,7	7,5	7,5	2,8	6,9	4,4	2,6
P(CH ₃) ₃ O	¹ JPO	184,0	153,3	157,3	195,2	164,6	190,8	190,8	156,0	200,0	168	120
P(N(CH ₃) ₂) ₃	¹ JPN	-57,7	-45,6	-46,8	-65,6	-52,9	-59,6	-59,6	-44,5	-65,3	-52,7	-59,1
P(N(CH ₃) ₂) ₃	² JPC	17,3	13,1	15,4	16,2	16,4	18,5	18,5	16,0	16,6	17	19,15
CH ₃ NH ₂	¹ JNC	2,8	4,8	4,8	2,2	4,3	2,4	2,4	3,7	2,0	4,3	4,5
CH ₃ NH ₂	² JNH	1,0	0,6	0,7	1,1	1	1,0	1,0	0,8	1,1	1,0	1
CH ₃ NH ₂	³ JHH	7,6	7,6	7,6	7,2	6,7	7,0	7,0	7,0	7,2	6,8	1,3
etanamida	¹ JNC	10,9	12,5	12,6	10,6	12,7	10,5	10,5	11,5	10,3	12,6	14,4
etanamida	² JNC	8,1	7,6	7,3	8,7	8	7,2	8,3	7,2	8,5	8,1	8,5
etanamida	³ JNH	0,7	0,8	0,8	0,7	0,7	0,6	0,6	0,7	0,6	0,7	1,3
ureia	² JNN	3,9	3,5	3,5	4,1	3,8	4,0	4,0	3,5	4,0	3,8	5,1
CH ₃ F	¹ JCH	144,1	138,1	141,2	150,0	140	138,7	138,7	132,8	149,4	140,7	149,1
CH ₃ F	¹ JCF	-202,3	-176,3	-178,0	-220,2	-182,6	-214,4	-214,4	-174,1	-225,2	-188,7	-157,5
CH ₃ F	² JFH	48,8	48,5	49,3	50,0	51,8	46,0	46,0	48,6	49,5	51,9	46,4
CH ₂ F ₂	¹ JCH	176,0	167,7	171,6	182,0	168,1	170,1	170,1	161,1	181,3	168,7	184,5
CH ₂ F ₂	¹ JCF	-277,6	-255,3	-242,0	-298,0	-247,8	-293,2	-293,2	-232,0	-302,0	-252,6	-234,8
CH ₂ F ₂	² JFH	51,9	50,9	51,7	53,1	53,3	49,2	49,2	50,1	52,6	53,5	50,2
CHF ₃	¹ JCH	230,8	218,1	222,7	236,5	214,8	223,4	223,4	208,2	235,7	215,1	239,1
CHF ₃	¹ JCF	-320,1	-271,0	-274,4	-346,1	-283,9	-342,3	-342,3	-262,1	-349,3	-287,6	-274,3
CHF ₃	² JFH	81,8	80,5	80,6	82,9	79,9	78,9	78,9	76,4	81,9	80,1	79,7
CF ₄	¹ JCF	-313,0	-251,5	-257,1	-345,2	-275,2	-342,5	-342,5	-248,3	-348,5	-278,4	-259,2
C ₂ H ₃ F	² JFH	85,9	86,5	87,4	86,8	81,3	87,4	87,4	83,8	87,7	84,7	84,7
C ₂ H ₃ F	³ JFH _c	19,5	20,6	19,5	18,3	17,8	17,9	17,9	14,6	18,0	17,7	20,1
C ₂ H ₃ F	³ JFH _t	49,7	49,2	48,4	48,0	46,6	46,6	46,6	43,7	46,8	46,1	52,4

Continuação da Tabela 8.505

<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	-54,1	-19,9	-4,7	-4,4	-72,3	-11,7	-84,1	-5,6	-81,3	-20,6	-32,7
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFc}	-0,1	-0,3	0,7	0,2	-0,8	0	-0,6	-1,5	-1,0	-0,1	0,8
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFt}	31,9	31,7	31,3	31,1	30,8	30,5	30,0	29,3	29,8	29,9	34,5
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	73,3	75,7	73,7	75,0	74,3	76,3	69,3	73,1	73,7	76,5	72,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFc}	-21,7	-14,2	-14,8	-12,1	-18,2	-7,4	-18,8	-8,4	-17,0	-5,8	-18,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFt}	18,4	17,7	16,9	16,9	17,3	15,8	17,4	15,2	16,5	15,3	20,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	77,1	79,4	77,3	78,6	78,4	79,9	73,2	76,6	77,7	80,1	74,3
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFc}	4,0	2,7	3,7	3,1	3,5	2,3	4,0	0,4	3,5	2,3	4,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FFt}	-172,7	-152,5	-144,9	-143,0	-171,5	-143,4	-172,1	-138,3	-170,1	-141,5	-132,7
C ₂ HF ₃	² J _{FF}	72,9	75,2	72,9	74,2	74,3	76,1	69,4	72,7	73,6	76,3	70,6
C ₂ HF ₃	³ J _{FFc}	-3,9	-5	-4,5	-4,9	-4,2	-4,8	-3,5	-6,0	-4,3	-4,9	4,2
C ₂ HF ₃	³ J _{FFt}	11,0	10,4	9,5	9,6	10,3	9	10,4	8,9	9,6	8,5	12,8
C ₂ HF ₃	² J _{FF}	10,1	38,1	52,6	50,5	-9,3	46,5	-22,2	51,2	-19,5	36,7	87
C ₂ HF ₃	³ J _{FFc}	42,4	44,6	43,5	44,5	46,3	51,6	42,8	45,9	47,0	53,1	33
C ₂ HF ₃	³ J _{FFt}	-155,4	-139	-134,7	-132,3	-152,4	-129,8	-154,5	-128,5	-151,5	-128,4	-119
HCCF	³ J _{FF}	20,2	18,1	18,5	17,8	18,8	17	19,2	15,9	18,4	16,9	21
fosfitano	¹ J _{PH}	145,0	158	149,4	153,7	165,5	177,6	157,5	157,8	171,8	182,8	158,3
cicloexano	³ J _{HHaa}	13,6	13,8	13,8	13,9	12,9	11,9	12,6	12,6	12,9	11,9	13,2
cicloexano	³ J _{HHae}	3,7	3,8	3,6	3,8	3,9	3,7	3,8	3,4	3,9	3,8	3,6
cicloexano	³ J _{HHee}	3,3	3,4	3,7	3,6	3,0	2,9	2,9	3,2	3,0	3	3,1
benzeno	¹ J _{CH}	156,4	157,4	150,0	153,1	161,6	149,3	149,9	144,4	161,1	149,6	158,45
benzeno	² J _{CH}	1,7	0,8	0,9	0,6	1,3	0,9	1,2	0,5	1,0	0,7	1,14
benzeno	³ J _{CH}	7,7	7,9	7,8	8,0	7,9	7,9	7,5	8,0	7,9	7,60	7,60
benzeno	⁴ J _{CH}	-1,0	-1,4	-1,3	-1,4	-1,4	-1,5	-1,4	-1,8	-1,4	-1,5	-1,29
benzeno	³ J _{HH}	8,6	8,9	9,1	9,1	7,9	7,7	7,8	8,0	8,0	7,7	7,540
benzeno	⁴ J _{HH}	1,3	1,1	1,0	0,9	1,2	0,9	1,1	0,9	1,1	0,9	1,380
benzeno	⁵ J _{HH}	0,6	0,8	0,7	0,8	0,6	0,6	0,7	0,9	0,7	0,7	0,653
piridina	¹ J _{NC}	-0,3	1,4	2,2	2,3	-0,7	2,7	-0,8	1,5	-0,9	2,8	0,7
piridina	² J _{NC}	-1,6	-1,9	-2,1	-2,1	-1,8	-2,2	-1,8	-2,4	-1,8	-2,2	2,5
piridina	³ J _{NC}	0,9	1,1	1,1	1,1	0,9	1,1	0,9	1,2	0,9	1,1	10,0
anilina	¹ J _{NC}	4,7	6,1	9,9	9,9	4,0	6,5	4,1	5,6	3,9	6,5	11,5
anilina	² J _{NC}	2,8	2,8	2,3	2,3	3,0	3	2,8	2,7	2,9	2,9	2,7
anilina	³ J _{NC}	1,3	1,3	1,7	1,7	1,2	1,3	1,2	1,2	1,2	1,3	1,9
fluorbenzeno	¹ J _{CF}	-286,9	-266,7	-248,6	-252,6	-309,4	-261,4	-303,0	-248,4	-313,6	-266,2	-244,70
fluorbenzeno	² J _{CF}	17,3	21,5	23,3	23,5	19,0	26,8	16,8	23,8	18,3	26,6	20,98
fluorbenzeno	³ J _{CF}	6,9	6,4	6,5	6,1	6,5	6,1	5,9	4,8	6,0	5,8	7,81
fluorbenzeno	⁴ J _{CF}	4,2	5,2	5,5	5,9	5,0	6,6	4,8	6,5	5,0	6,7	3,18
fluorbenzeno	³ J _{FF}	9,3	8,9	10,0	9,4	8,4	8,5	8,5	6,7	8,1	8,4	9,176
fluorbenzeno	⁴ J _{FF}	5,0	5,1	4,5	4,8	5,2	5,1	4,8	5,2	5,0	5,1	5,759
fluorbenzeno	⁵ J _{FF}	0,3	-0,3	-0,5	-0,6	0,2	-0,6	0,4	-1,2	0,2	-0,7	0,348
1,2- difluorbenzeno	³ J _{FF}	-24,5	-21,2	-22,5	-20,2	-20,3	-14,3	-20,7	-15,4	-19,3	-13,1	-20,8
1,3,5- trifluorbenzeno	⁴ J _{FF}	5,5	3,5	1,4	1,3	5,2	1,8	4,7	0,4	4,2	1,1	5,8
Total	DM	-7,63	-1,49	1,84	1,58	-10,12	0,08	-11,54	2,51	-10,99	-0,50	—
DMA	18,10	18,10	12,20	10,86	10,49	22,56	13,01	22,54	12,81	23,78	13,65	—
PDMA	34,47	33,87	33,89	36,11	39,42	39,42	39,35	38,53	43,07	41,47	40,99	—

Tabela 8.506: Cálculo das constantes de acoplamento com conjunto teste de moléculas selecionados (2 de 2) na base aug-pcJ-2.

	Func. EXHF (%)	BHH	BHH	LCSLP (0,4 1,0 0,10)	LCSLP (0,4 0,8 0,15)	ω_{B97X}	ω_{B97X} (0,2 1,0 0,35)	ω_{97XD}	ω_{97XD} (# 0,35)	B3LYP	PBE0	Exp.
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-217,1	-214,6	-213,8	-213,4	-193,5	-205,5	-196,3	-200,6	-188,7	-199,3	-145
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	16,6	14,1	13,9	13,6	13,9	16,0	15,3	12,4	19,5	17,2	37
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-78,7	-110,7	-111,7	-111,1	-150,9	-107,3	-167,4	-127,4	-223,6	-182,3	-99
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-190,3	-188,8	-188,2	-187,9	-168,4	-178,7	-170,4	-175,0	-164,2	-174,9	-136
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	58,9	54,8	55,0	55,1	49,6	53,5	48,4	51,7	48,0	47,0	73
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-306,4	-342,8	-339,8	-336,6	-345,8	-304,9	-367,8	-323,0	-442,3	-398,0	-322
N ₂ F ₄	¹ J _{NF}	-166,2	-170,8	-170,3	-169,9	-162,4	-166,8	-164,7	-162,9	-166,2	-167,2	-167
SiH ₄	¹ J _{SH}	-201,6	-197,4	-196,8	-196,4	-195,3	-202,9	-187,2	-186,8	-211,7	-197,8	-203
PF ₅	¹ J _{SF}	176,4	221,0	219,4	216,6	238,7	199,5	246,9	192,3	325,5	295,9	178
PF ₅	¹ J _{PF}	-956,4	-1052,3	-1049,3	-1043,4	-1123,9	-1051,5	-1123,4	-1022,4	-1319,2	-1236,0	-1080,0
PF ₃ O	¹ J _{PF}	-1079,7	-1172,5	-1172,5	-1164,8	-1235,5	-1164,7	-1252,2	-1126,5	-1441,3	-1359,2	-1080
PF ₃ O	¹ J _{PO}	191,8	215,3	214,8	213,4	235,9	214,9	244,0	217,3	283,9	265,1	184
PF ₃ O	² J _{OF}	35,1	40,0	39,8	39,5	40,7	37,3	41,2	37,0	47,1	44,5	31
PCH ₃ Cl ₂	¹ J _{PC}	-28,9	-39,4	-38,9	-38,0	-38,0	-28,9	-43,0	-29,3	-65,6	-53,5	-106,6
PCH ₃ Cl ₂	² J _{PH}	24,7	26,2	26,3	26,2	24,6	23,5	25,6	23,3	31,6	26,5	16,5
PCH ₃ Cl ₂ O	¹ J _{PC}	121,1	107,8	109,5	111,0	109,0	119,2	102,6	120,0	94,9	95,8	43,9
PCH ₃ Cl ₂ O	² J _{PH}	-18,2	-15,5	-15,6	-15,8	-16,1	-19,3	-15,4	-18,6	-10,7	-15,6	-17,7
P(CH ₃) ₃	¹ J _{PC}	-6,9	-14,8	-14,5	-14,0	-15,7	-7,7	-16,0	-8,7	-31,8	-26,3	-13,6
P(CH ₃) ₃	² J _{PH}	3,9	5,2	5,3	5,2	6,1	4,7	6,3	4,5	9,2	5,4	2,6
P(CH ₃) ₃ O	¹ J _{PO}	157,5	169,3	168,7	167,6	170,2	159,2	179,9	164,4	206,9	196,9	120
P(N(CH ₃) ₂) ₃	¹ J _{PN}	-48,6	-52,4	-52,3	-52,0	-56,1	-50,2	-59,2	-53,4	-72,0	-63,9	-59,1
P(N(CH ₃) ₂) ₃	² J _{PC}	14,5	14,8	15,3	15,5	16,5	17,2	16,4	15,6	16,0	15,8	19,15
CH ₃ NH ₂	¹ J _{NC}	5,2	4,2	4,2	4,3	2,9	4,1	2,0	3,5	2,2	2,2	4,5
CH ₃ NH ₂	² J _{NH}	0,7	0,8	0,8	0,8	0,8	0,6	0,9	0,7	1,2	0,9	1,0
CH ₃ NH ₂	³ J _{HH}	7,9	7,8	7,8	7,8	6,8	7,1	7,0	7,0	7,8	7,7	1,3
etanamida	¹ J _{NC}	13,2	12,1	12,1	12,2	11,0	12,2	10,5	11,8	10,6	10,6	14,4
etanamida	² J _{NC}	7,5	7,8	7,8	7,8	7,9	7,6	7,9	7,5	8,7	8,1	8,5
etanamida	³ J _{NH}	0,8	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	1,3
ureia	² J _{NN}	3,5	3,6	3,6	3,6	3,8	3,7	3,8	2,9	4,2	3,9	5,1
CH ₃ F	¹ J _{CH}	143,4	138,9	138,9	138,9	133,1	136,9	135,6	136,0	153,9	143,5	149,1
CH ₃ F	¹ J _{CF}	-190,1	-203,6	-202,7	-201,3	-182,2	-177,1	-198,1	-181,5	-222,0	-221,5	-157,5
CH ₃ F	² J _{HF}	53,4	51,0	51,1	51,1	47,9	49,1	50,0	50,0	52,8	51,3	46,4
CH ₂ F ₂	¹ J _{CH}	172,4	167,8	167,8	167,8	164,0	168,0	166,5	166,4	188,5	175,6	184,5
CH ₂ F ₂	¹ J _{CF}	-247,9	-265,3	-264,5	-263,1	-261,3	-251,0	-273,1	-252,0	-306,9	-297,0	-234,8
CH ₂ F ₂	² J _{FF}	55,3	53,4	53,4	53,4	50,9	52,2	52,6	52,5	56,2	54,1	50,2
CHF ₃	¹ J _{CH}	222,0	217,8	217,8	217,9	216,6	220,5	219,2	217,9	247,9	230,6	239,1
CHF ₃	¹ J _{CF}	-274,1	-295,0	-294,5	-293,1	-306,8	-291,2	-314,7	-289,0	-359,4	-341,0	-274,3
CHF ₃	² J _{HF}	85,2	84,7	84,7	84,6	80,2	81,5	80,9	80,4	87,0	83,6	79,7
CF ₄	¹ J _{CF}	-248,1	-270,5	-270,2	-268,8	-300,7	-279,6	-305,9	-275,4	-360,1	-336,7	-259,2
C ₂ H ₃ F	² J _{FF}	94,3	91,1	91,2	91,2	84,7	87,4	86,2	87,9	92,2	88,4	84,7
C ₂ H ₃ F	³ J _{FFH_c}	22,0	23,8	23,8	23,7	18,4	18,7	17,8	18,3	20,2	17,2	20,1
C ₂ H ₃ F	³ J _{FFH_t}	51,8	53,3	53,0	52,7	45,7	46,4	45,8	44,9	50,9	47,6	52,4

Continuação da Tabela 8.506

<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	7,7	-21,2	-19,5	-17,4	-23,0	-1,9	-25,7	0,9	-77,0	-68,7	-32,7
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	1,0	1,8	1,7	1,7	-0,2	-0,2	-0,4	-0,1	-0,3	-1,8	0,8
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	33,1	33,6	33,2	33,0	29,0	29,6	29,4	28,5	32,3	30,7	34,5
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	80,5	76,8	76,9	76,9	72,7	75,2	74,2	75,8	78,6	75,9	72,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_c}	-2,3	-12,3	-11,6	-10,9	-9,6	-3,8	-11,6	-2,8	-17,2	-11,5	-18,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	16,8	17,9	17,7	17,5	15,5	15,7	16,3	14,8	17,7	16,5	20,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	84,7	80,9	81,0	81,0	76,3	78,8	77,8	79,3	82,8	80,1	74,3
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	2,7	4,7	4,6	4,5	3,2	2,8	2,8	2,4	3,8	1,7	4,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_t}	-126,3	-146,0	-144,5	-143,0	-151,1	-135,8	-154,3	-132,1	-175,0	-162,4	-132,7
C ₂ HF ₃	² J _{FH}	79,4	75,8	75,9	75,9	72,6	74,9	74,3	75,4	78,2	75,8	70,6
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_c}	-5,8	-4,3	-4,3	-4,4	-4,3	-4,9	-4,4	-5,0	-4,5	-5,8	-4,2
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_t}	9,0	9,9	9,7	9,5	8,6	8,4	9,2	7,7	10,3	9,6	12,8
C ₂ HF ₃	² J _{FF}	59,8	36,0	36,8	38,4	34,5	50,6	33,3	51,0	-13,1	-5,6	87
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_c}	53,0	47,7	48,4	48,7	49,9	51,2	49,3	51,6	50,9	52,6	33
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_t}	-119,1	-135,4	-134,4	-133,2	-137,7	-125,6	-140,1	-122,5	-154,2	-146,0	-119
HCCF	³ J _{FH}	15,6	18,3	18,1	17,9	16,5	15,3	16,9	15,0	18,4	17,0	21
fosfano	¹ J _{PH}	164,1	150,7	150,0	149,1	143,0	159,8	156,5	158,5	139,5	125,9	158,3
cicloexano	³ J _{HH_{aa}}	14,1	13,7	13,7	13,8	12,3	13,0	12,5	12,7	14,0	13,6	13,2
cicloexano	³ J _{HH_{ae}}	4,1	3,9	3,9	3,9	3,7	4,0	3,8	3,9	4,2	4,0	3,6
cicloexano	³ J _{HH_{ee}}	3,7	3,7	3,6	3,6	3,0	3,2	3,0	3,1	3,2	3,2	3,1
benzeno	¹ J _{CH}	155,5	151,2	151,0	150,9	142,8	147,6	145,7	145,1	165,2	155,7	158,45
benzeno	² J _{CH}	0,1	0,9	0,9	0,9	1,3	0,4	1,5	0,7	2,0	0,7	1,14
benzeno	³ J _{CH}	8,2	7,7	7,7	7,8	7,5	7,9	7,3	7,7	7,9	8,0	7,60
benzeno	⁴ J _{CH}	-1,6	-1,2	-1,2	-1,2	-1,4	-1,7	-1,0	-1,5	-1,2	-1,4	-1,29
benzeno	³ J _{HH}	9,5	9,2	9,2	9,2	8,0	8,7	8,0	8,5	8,8	8,6	7,540
benzeno	⁴ J _{HH}	0,8	1,0	0,9	0,9	0,7	0,5	0,9	0,5	1,2	1,0	1,380
benzeno	⁵ J _{HH}	0,9	0,7	0,7	0,7	0,9	1,2	0,8	1,1	0,7	0,9	0,653
piridina	¹ J _{NC}	3,3	1,6	1,7	1,8	0,0	1,7	-0,3	1,6	-1,0	-0,7	0,7
piridina	² J _{NC}	-2,4	-1,9	-1,9	-2,0	-2,0	-2,3	-1,7	-2,2	-1,7	-2,0	2,5
piridina	³ J _{NH}	1,3	1,1	1,1	1,1	1,0	1,2	0,9	1,2	0,9	0,9	10,0
anilina	¹ J _{NC}	11,2	10,4	10,4	10,4	4,9	6,2	4,1	5,9	4,3	4,2	11,5
anilina	² J _{NC}	2,4	2,3	2,3	2,4	2,9	2,8	2,9	2,8	3,0	2,8	2,7
anilina	³ J _{NH}	1,8	1,9	1,9	1,9	1,3	1,4	1,3	1,4	1,3	1,2	1,9
fluorbenzeno	¹ J _{CF}	-255,0	-269,6	-268,5	-267,1	-269,4	-260,0	-281,4	-261,5	-313,9	-307,3	-244,70
fluorbenzeno	² J _{CF}	28,5	24,0	24,4	24,7	23,8	26,7	21,8	27,2	18,8	21,0	20,98
fluorbenzeno	³ J _{CF}	5,2	6,5	6,4	6,3	5,5	4,9	6,4	4,6	5,9	4,8	7,81
fluorbenzeno	⁴ J _{CF}	7,0	5,2	5,4	5,5	6,7	7,7	5,4	7,7	5,2	6,3	3,18
fluorbenzeno	³ J _{FH}	10,6	11,6	11,5	11,5	8,8	9,1	8,5	8,7	9,3	7,8	9,176
fluorbenzeno	⁴ J _{FH}	5,2	4,8	4,7	4,7	4,7	5,0	4,8	4,9	5,4	5,5	5,759
fluorbenzeno	⁵ J _{FH}	-1,0	-0,1	-0,1	-0,2	-0,5	-1,0	-0,4	-1,2	0,3	-0,2	0,348
1,2- difluorbenzeno	³ J _{FF}	-14,5	-20,7	-19,9	-19,2	-14,0	-11,3	-16,8	-9,5	-19,3	-18,8	-20,8
1,3,5- trifluorbenzeno	⁴ J _{FF}	-0,8	2,0	1,6	1,2	0,9	-0,5	3,0	-1,9	4,2	2,7	5,8
Total	DM	3,77	-1,63	-1,38	-1,04	-4,30	-0,07	-5,27	0,39	-12,64	-10,25	—
DMA	DMA	10,98	12,22	12,15	11,96	14,33	11,17	15,80	11,48	26,97	22,47	—
PDMA	PDMA	43,60	33,12	33,54	34,20	37,41	41,91	37,64	42,97	44,77	45,91	—

Tabela 8.507: Cálculo das constantes de acoplamento com conjunto teste de moléculas para funcionais selecionados (1 de 2) na base HuzIII-su3.

	Func.	B1B95	B1B95	LC-B1B95 (0,4 1,0 0,25) 40,00	LC-B1B95 (0,4 0,7 0,35) 40,00	B971	B971	B971	B972	E972B95	B98	B98	B98	Exp.
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-193,0	-200,7	-202,0	-202,4	-189,4	-187,0	-196,4	-192,3	60,00	21,98	21,98	-188,0	-145
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	14,3	13,8	9,3	10,8	19,6	17,8	19,4	11,1	-18,5	17,5	16,6	16,6	37
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-223,0	-181,6	-154,8	-157,7	-212,6	-195,5	-188,2	-163,4	-188,2	-223,0	-200,3	-200,3	-99
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-166,3	-173,0	-175,4	-175,2	-163,1	-158,0	-169,7	-165,9	-165,9	-164,0	-159,6	-159,6	-136
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	45,5	48,9	50,6	50,4	45,8	51,9	45,0	48,6	48,6	44,6	51,6	51,6	73
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-440,7	-392,7	-356,8	-362,6	-438,2	-411,3	-415,7	-363,4	-363,4	-445,8	-416,1	-322	-322
N ₂ F ₄	¹ J _{NF}	-164,5	-162,6	-160,6	-161,0	-164,8	-150,7	-169,4	-147,6	-147,6	-165,6	-152,6	-152,6	-167
SH ₄	¹ J _{SH}	-192,0	-193,3	-182,1	-187,6	-190,6	-172,9	-202,2	-178,8	-178,8	-190,8	-173,4	-173,4	-203
PF ₅	¹ J _{SF}	293,8	237,7	207,9	209,6	316,0	213,4	316,8	187,9	187,9	319,8	217,6	178	178
PF ₃ O	¹ J _{PF}	-1218,5	-1096,7	-1012,2	-1027,1	-1296,0	-1062,6	-1313,1	-959,8	-959,8	-1309,7	-1074,8	-1080,0	-1080,0
PF ₃ O	¹ J _{PO}	-1330,8	-1207,1	-1111,7	-1128,1	-1412,6	-1168,7	-1425,9	-1069,9	-1069,9	-1421,1	-1177,3	-1177,3	-1080
PF ₃ O	² J _{OF}	256,3	225,9	204,4	208,3	272,4	218,3	267,1	199,1	199,1	278,1	220,9	184	184
PCH ₃ Cl ₂	¹ J _{PC}	45,2	40,1	38,4	38,1	45,2	37,1	45,1	34,7	34,7	45,9	37,8	31	31
PCH ₃ Cl ₂	² J _{PC}	-52,8	-40,6	-29,7	-32,3	-53,6	-30,7	-55,1	-24,8	-24,8	-53,1	-30,2	-106,6	-106,6
PCH ₃ Cl ₂ O	¹ J _{PC}	25,4	23,5	21,9	22,1	27,2	24,4	26,7	19,5	19,5	26,8	24,3	16,5	16,5
PCH ₃ Cl ₂ O	² J _{PC}	96,2	109,8	115,1	115,7	100,5	120,1	96,6	113,8	113,8	101,2	122,5	43,9	43,9
P(CH ₃) ₂ O	¹ J _{PH}	-13,3	-16,3	-17,2	-17,7	-13,2	-14,1	-13,1	-17,4	-17,4	-14,5	-14,7	-17,7	-17,7
P(CH ₃) ₃	¹ J _{PC}	-24,7	-15,5	-10,8	-11,8	-22,5	-6,2	-22,6	-6,3	-6,3	-21,4	-13,6	-13,6	-13,6
P(CH ₃) ₃	² J _{PH}	7,5	5,8	5,0	4,9	8,5	5,9	8,5	3,8	3,8	7,8	5,5	2,6	2,6
P(CH ₃) ₃ O	¹ J _{PO}	191,1	176,1	160,5	164,7	201,1	172,0	195,9	162,8	162,8	206,0	175,5	120	120
P(N(CH ₃) ₂) ₃	¹ J _{PN}	-62,6	-56,2	-49,4	-51,4	-70,0	-57,1	-69,7	-49,8	-49,8	-69,7	-57,0	-59,1	-59,1
P(N(CH ₃) ₂) ₃	² J _{PC}	14,5	14,0	11,8	12,7	14,0	14,3	16,4	13,0	13,0	14,3	14,9	19,15	19,15
CH ₃ NH ₂	¹ J _{NC}	2,5	3,8	4,5	4,5	2,0	4,1	2,3	3,6	3,6	1,9	4,1	4,1	4,5
CH ₃ NH ₂	² J _{NH}	1,0	0,9	0,7	0,7	1,2	1,1	1,0	0,8	0,8	1,1	1,0	1,0	1,0
CH ₃ NH ₂	³ J _{HH}	7,5	7,6	7,6	7,6	7,1	6,6	6,9	6,9	6,9	7,1	6,7	1,3	1,3
etanamida	¹ J _{NC}	11,1	12,4	12,8	12,8	10,8	12,8	10,9	11,9	11,9	10,6	12,8	14,4	14,4
etanamida	² J _{NH}	8,2	7,7	7,5	7,4	8,8	8,2	8,5	7,3	7,3	8,7	8,2	8,5	8,5
etanamida	³ J _{NH}	0,7	0,7	0,8	0,8	0,7	0,7	0,6	0,7	0,7	0,6	0,7	1,3	1,3
ureia	² J _{NN}	3,9	3,8	3,6	3,6	4,2	3,9	4,1	3,5	3,5	4,1	3,9	5,1	5,1
CH ₃ F	¹ J _{CH}	145,3	146,4	139,3	142,4	151,6	141,2	140,7	134,6	134,6	151,3	142,1	149,1	149,1
CH ₃ F	¹ J _{CF}	-208,2	-193,6	-181,9	-183,6	-225,1	-187,6	-218,0	-178,3	-178,3	-230,3	-193,8	-157,5	-157,5
CH ₃ F	² J _{HF}	49,4	50,9	49,1	49,9	50,7	52,5	46,8	49,4	49,4	50,3	52,7	46,4	46,4
CH ₂ F ₂	¹ J _{CH}	177,9	178,1	169,4	173,3	184,1	169,9	172,7	163,5	163,5	183,7	170,6	184,5	184,5
CH ₂ F ₂	² J _{CF}	-284,7	-262,8	-246,9	-249,3	-304,8	-254,3	-298,2	-238,0	-238,0	-309,0	-234,8	-234,8	-234,8
CH ₂ F ₂	² J _{FF}	52,3	53,3	51,3	52,2	53,8	53,8	50,0	50,6	50,6	53,3	54,1	50,2	50,2
CHF ₃	¹ J _{CH}	233,2	231,3	220,4	225,0	239,2	217,2	226,4	211,2	211,2	238,8	217,6	239,1	239,1
CHF ₃	¹ J _{CF}	-329,3	-300,2	-279,6	-283,1	-354,1	-291,6	-348,4	-269,4	-269,4	-357,6	-295,4	-274,3	-274,3
CHF ₃	² J _{HF}	82,2	82,0	80,9	80,9	83,6	80,4	79,6	76,8	76,8	82,7	80,6	79,7	79,7
CF ₄	¹ J _{CF}	-322,7	-287,9	-260,3	-266,1	-353,3	-283,0	-348,6	-255,9	-255,9	-356,9	-286,4	-259,2	-259,2
C ₂ H ₃ F	² J _{FF}	86,3	88,4	86,9	87,8	87,5	88,2	84,6	82,2	82,2	84,6	88,4	84,7	84,7
C ₂ H ₃ F	³ J _{FF_c}	19,5	18,6	20,6	19,5	18,3	17,7	17,9	14,6	14,6	17,9	17,6	20,1	20,1
C ₂ H ₃ F	³ J _{FF_t}	49,3	48,4	48,8	48,1	47,9	46,4	46,6	43,5	43,5	46,7	45,8	52,4	52,4

Continuação da Tabela 8.507

<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	-57,0	-21,9	-6,4	-5,7	-71,7	-10,9	-80,9	-3,9	-80,3	-19,4	-32,7
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	-0,1	-0,4	0,6	0,1	-0,8	-0,1	-0,6	-1,6	-1,0	-0,2	0,8
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	31,6	31,4	31,0	30,7	30,7	30,3	30,0	29,1	29,7	29,7	34,5
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	73,5	75,9	73,9	75,2	74,9	76,7	70,0	73,7	74,3	77,0	72,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_c}	-23,2	-16,1	-15,0	-12,7	-19,3	-7,7	-20,2	-8,5	-18,0	-5,8	-18,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	17,7	17,0	16,2	16,2	16,9	15,3	17,1	14,5	16,1	14,7	20,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	77,5	79,9	77,7	79,0	79,0	80,5	74,1	77,4	78,4	80,8	74,3
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	3,8	2,5	3,5	2,8	3,2	2,0	3,8	0,1	3,2	1,9	4,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_t}	-178,1	-157,8	-148,7	-147,4	-175,7	-146,7	-175,8	-141,6	-174,6	-145,3	-132,7
C ₂ HF ₃	² J _{FH}	73,2	75,5	73,1	74,5	74,9	76,5	70,2	73,3	74,3	76,8	70,6
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_c}	-4,0	-5,1	-4,7	-5,0	-4,4	-5,1	-3,7	-6,2	-4,5	-5,2	-4,2
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_t}	10,4	9,7	8,8	8,9	9,9	8,5	10,1	8,3	9,2	7,9	12,8
C ₂ HF ₃	² J _{FF}	8,6	36,8	52,1	49,9	-7,4	48,7	-17,7	53,9	-17,5	38,9	87
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_c}	42,2	44,0	43,6	44,6	46,0	52,6	42,7	47,4	46,5	54,0	33
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_t}	-159,8	-143,2	-138,4	-136,0	-155,8	-132,5	-157,7	-131,3	-154,9	-131,1	-119
HCCF	³ J _{FH}	18,7	16,6	17,1	16,3	17,4	15,6	17,8	14,4	16,9	15,4	21
fosfitano	¹ J _{PH}	132,4	146,0	136,6	141,6	158,8	170,9	147,5	144,4	163,3	174,8	158,3
cicloexano	³ J _{H_{aa}}	13,6	13,8	13,8	12,9	12,9	11,8	12,6	12,6	12,9	11,9	13,2
cicloexano	³ J _{H_{aa}}	3,7	3,8	3,5	3,7	3,8	3,6	3,7	3,3	3,9	3,7	3,6
cicloexano	³ J _{H_{ae}}	3,2	3,4	3,6	3,5	2,9	2,9	2,8	3,1	3,0	2,9	3,1
benzeno	¹ J _{CH}	157,7	158,8	151,3	154,4	163,2	150,5	151,9	146,2	162,9	151,0	158,45
benzeno	² J _{CH}	1,6	0,8	0,8	0,5	1,2	0,8	1,1	0,4	0,8	0,6	1,14
benzeno	³ J _{CH}	7,7	8,0	7,9	8,0	8,0	8,0	7,6	8,1	8,0	8,0	7,60
benzeno	⁴ J _{CH}	-1,2	-1,5	-1,4	-1,6	-1,4	-1,5	-1,4	-1,8	-1,5	-1,6	-1,29
benzeno	³ J _{HH}	8,5	8,8	9,0	9,1	7,9	7,6	7,7	7,9	8,0	7,7	7,540
benzeno	⁴ J _{HH}	1,2	1,1	0,9	0,9	1,1	0,9	1,0	0,9	1,0	0,9	1,380
benzeno	⁵ J _{HH}	0,6	0,7	0,7	0,8	0,7	0,6	0,7	0,9	0,7	0,7	0,653
piridina	¹ J _{NC}	-0,3	1,5	2,3	2,3	-0,7	2,7	-0,5	1,8	-0,8	2,8	0,7
piridina	² J _{NC}	-1,6	-2,0	-2,1	-2,2	-1,8	-2,3	-1,8	-2,5	-1,9	-2,3	2,5
piridina	³ J _{NH}	0,9	1,1	1,1	1,2	0,9	1,1	0,9	1,2	0,9	1,1	10,0
anilina	¹ J _{NC}	4,4	5,9	6,8	6,7	3,8	6,3	4,1	5,6	3,7	6,3	11,5
anilina	² J _{NC}	2,9	2,8	2,8	2,8	3,0	3,0	2,9	2,7	2,9	3,0	2,7
anilina	³ J _{NH}	1,3	1,3	1,4	1,4	1,2	1,3	1,2	1,2	1,2	1,3	1,9
fluorbenzeno	¹ J _{CF}	-292,9	-272,6	-254,3	-258,3	-314,7	-266,6	-306,5	-253,0	-319,0	-271,5	-244,70
fluorbenzeno	² J _{CF}	17,6	21,8	23,6	23,8	19,6	27,4	17,8	24,7	19,0	27,3	20,98
fluorbenzeno	³ J _{CF}	6,9	6,4	6,4	6,0	6,6	6,0	6,1	4,7	6,0	5,7	7,81
fluorbenzeno	⁴ J _{CF}	3,8	4,9	5,2	5,5	4,7	6,6	4,6	6,4	4,8	6,7	3,18
fluorbenzeno	³ J _{FH}	9,3	8,9	10,0	9,4	8,5	8,5	8,5	6,7	8,2	8,4	9,176
fluorbenzeno	⁴ J _{FH}	5,0	5,2	4,6	4,9	5,3	5,2	5,0	5,3	5,1	5,2	5,759
fluorbenzeno	⁵ J _{FH}	0,1	-0,5	-0,6	-0,8	0,1	-0,8	0,2	-1,4	0,0	-0,9	0,348
1,2- difluorbenzeno	³ J _{FF}	-25,2	-21,8	-22,8	-20,6	-21,0	-14,5	-21,5	-15,8	-20,1	-13,3	-20,8
1,3,5- trifluorbenzeno	⁴ J _{FF}	5,2	3,2	1,1	1,1	5,1	1,7	4,5	0,1	4,1	0,9	5,8
Total	DM	-10,06	-3,90	-0,43	-0,76	-11,99	-1,80	-13,23	0,59	-12,88	-2,42	—
	DMA	21,24	13,90	11,44	11,63	24,97	13,90	26,20	12,11	26,20	14,56	—
	PDMA	37,31	36,00	35,91	38,41	41,43	41,56	39,65	45,26	43,89	43,31	—

Tabela 8.508: Cálculo das constantes de acoplamento com conjunto teste de moléculas para funcionais selecionados (2 de 2) na base HuzIII-su3.

	Func.	BHH	BHH	LCSLP (0,4 1,0 0,10)	LCSLP (0,4 0,8 0,15)	ω_{B97X}	ω_{B97X} (0,2 1,0 0,35)	ω_{97XD}	ω_{97XD} (# 0,35)	B3LYP	PBE0	Exp.
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-219,2	-216,3	-215,6	-215,2	-195,5	-207,9	-197,5	-202,7	-188,8	-199,9	-145
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	17,6	15,3	15,0	14,7	15,8	17,9	17,1	14,0	20,3	17,9	37
<i>cis</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-94,0	-127,3	-128,9	-128,2	-160,0	-113,9	-178,2	-135,1	-244,8	-200,6	-99
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	¹ J _{NF}	-191,7	-189,8	-189,2	-188,9	-169,2	-180,2	-170,7	-176,2	-163,3	-174,7	-136
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	² J _{NF}	58,7	54,6	54,7	54,8	50,5	54,3	49,1	52,3	47,5	46,5	73
<i>trans</i> -N ₂ F ₂	³ J _{FF}	-327,5	-364,9	-362,1	-358,7	-360,0	-316,9	-383,0	-336,0	-468,3	-422,4	-322
N ₂ F ₄	¹ J _{NF}	-169,0	-173,3	-172,8	-172,3	-164,7	-169,6	-166,6	-165,9	-167,2	-168,6	-167
SH ₄	¹ J _{SH}	-196,3	-192,0	-191,2	-190,8	-190,3	-197,7	-181,9	-181,9	-206,0	-192,9	-203
PF ₅	¹ J _{SF}	195,2	238,4	236,8	234,0	254,0	216,0	262,9	209,3	342,0	312,8	178
PF ₃ O	¹ J _{PF}	-1028,2	-1122,7	-1119,5	-1113,7	-1171,2	-1101,8	-1173,7	-1073,7	-1387,5	-1304,2	-1080,0
PF ₃ O	¹ J _{PO}	-1135,3	-1231,7	-1226,5	-1218,8	-1269,9	-1201,7	-1287,3	-1165,0	-1496,7	-1413,5	-1080
PF ₃ O	² J _{OF}	203,1	226,7	226,1	224,7	241,6	220,2	250,6	223,8	296,7	277,0	184
PF ₃ O	² J _{PC}	36,3	41,2	41,0	40,7	41,4	38,1	42,0	37,8	48,3	45,7	31
PCH ₃ Cl ₂	¹ J _{PC}	-35,3	-45,2	-44,7	-43,9	-43,3	-35,0	-48,0	-34,6	-71,1	-59,3	-106,6
PCH ₃ Cl ₂	² J _{PH}	24,6	25,9	26,1	26,0	25,2	24,2	25,8	23,9	30,6	25,8	16,5
PCH ₃ Cl ₂ O	¹ J _{PC}	114,9	101,7	103,5	105,0	106,3	116,1	99,8	117,4	88,1	89,5	43,9
PCH ₃ Cl ₂ O	² J _{PH}	-18,1	-15,4	-15,5	-15,8	-15,8	-19,0	-15,3	-18,4	-11,0	-15,9	-17,7
P(CH ₃) ₃	¹ J _{PC}	-12,0	-19,6	-19,4	-19,0	-18,6	-11,0	-18,9	-11,9	-36,6	-30,8	-13,6
P(CH ₃) ₃	² J _{PH}	5,1	6,4	6,5	6,4	7,5	6,1	7,4	5,8	10,0	6,2	2,6
P(CH ₃) ₃ O	¹ J _{PO}	165,4	176,9	176,3	175,2	174,4	163,3	184,8	169,4	214,2	203,9	120
P(N(CH ₃) ₂) ₃	¹ J _{PN}	-52,6	-56,1	-56,1	-55,8	-60,6	-54,6	-63,2	-57,0	-76,7	-68,4	-59,1
P(N(CH ₃) ₂) ₃	² J _{PC}	12,6	13,0	13,5	13,6	14,8	15,7	14,5	14,0	13,7	13,6	19,15
CH ₃ NH ₂	¹ J _{NC}	4,9	3,8	3,8	3,9	2,9	4,0	2,0	3,5	1,9	1,9	4,5
CH ₃ NH ₂	² J _{NH}	0,7	0,8	0,8	0,8	0,9	0,7	1,0	0,8	1,3	1,0	1,0
CH ₃ NH ₂	³ J _{HH}	7,9	7,7	7,7	7,7	6,7	7,1	6,9	6,9	7,8	7,6	1,3
etanamida	¹ J _{NC}	13,3	12,2	12,2	12,3	11,4	12,6	10,8	12,1	10,7	10,7	14,4
etanamida	² J _{NC}	7,6	7,9	7,9	7,9	8,1	7,8	8,1	7,6	8,8	8,2	8,5
etanamida	³ J _{NH}	0,8	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	1,3
ureia	² J _{NN}	3,6	3,7	3,8	3,8	4,0	3,8	3,9	3,7	4,3	4,0	5,1
CH ₃ F	¹ J _{CH}	144,0	139,6	139,6	139,6	135,2	139,2	137,6	137,9	154,6	144,1	149,1
CH ₃ F	¹ J _{CF}	-209,2	-209,2	-208,3	-206,4	-184,0	-179,0	-200,4	-183,6	-227,9	-227,2	-157,5
CH ₃ F	² J _{CF}	54,0	51,6	51,6	51,6	48,7	49,8	50,5	50,5	53,5	52,0	46,4
CH ₂ F ₂	¹ J _{CH}	173,6	169,0	168,9	169,0	166,8	170,9	169,1	169,0	189,7	176,8	184,5
CH ₂ F ₂	¹ J _{CF}	-255,1	-272,7	-271,9	-270,4	-264,8	-254,5	-277,2	-256,1	-314,2	-303,6	-234,8
CH ₂ F ₂	² J _{FH}	55,7	53,7	53,8	53,8	51,5	52,8	53,0	53,0	56,8	54,5	50,2
CHF ₃	¹ J _{CH}	223,7	219,6	219,6	219,7	219,9	223,9	222,5	221,0	249,6	232,2	239,1
CHF ₃	² J _{CF}	-282,5	-303,7	-303,1	-301,7	-295,8	-320,6	-320,6	-294,3	-368,3	-349,5	-274,3
CHF ₃	¹ J _{FH}	85,5	85,0	85,0	84,9	80,8	82,1	81,5	80,9	87,5	84,1	79,7
CF ₄	² J _{CF}	-256,9	-279,5	-279,1	-277,8	-305,8	-284,5	-312,0	-280,6	-369,8	-345,1	-259,2
C ₂ H ₃ F	¹ J _{CF}	94,8	91,5	91,5	91,5	88,4	88,1	86,6	88,4	92,6	88,9	84,7
C ₂ H ₃ F	³ J _{FH}	23,9	23,7	23,7	23,6	18,4	18,7	17,8	18,2	20,0	17,1	20,1
C ₂ H ₃ F	³ J _{FH_c}	51,3	52,9	52,5	52,2	45,5	46,3	45,7	44,8	50,4	47,1	52,4

Continuação da Tabela 8.508

<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FF}	5,5	-22,9	-21,8	-19,6	-20,8	0,8	-25,8	2,5	-80,9	-71,5	-32,7
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	0,9	1,7	1,7	1,6	-0,2	-0,2	-0,4	-0,1	-0,4	-1,8	0,8
<i>gem</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	32,7	33,1	32,8	32,6	28,9	29,4	29,3	28,3	32,0	30,3	34,5
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	80,7	76,9	76,9	77,0	73,2	75,8	74,6	76,2	78,9	76,2	72,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_c}	-2,7	-13,9	-12,0	-11,3	-10,4	-4,6	-12,4	-2,9	-19,3	-14,2	-18,7
<i>cis</i> -C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_t}	16,0	17,2	16,9	16,7	15,1	15,3	16,0	14,3	17,2	15,9	20,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	² J _{FH}	85,1	81,2	81,3	81,3	77,0	79,5	78,4	79,9	83,3	80,5	74,3
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FH_c}	2,4	4,5	4,4	4,3	3,0	2,5	2,7	2,2	3,5	1,5	4,4
<i>trans</i> - C ₂ H ₂ F ₂	³ J _{FF_t}	-130,9	-151,2	-149,2	-147,8	-154,9	-139,3	-158,1	-135,8	-180,6	-168,5	-132,7
C ₂ HF ₃	² J _{FH}	79,7	76,0	76,1	76,1	73,1	75,4	74,6	75,8	78,6	76,2	70,6
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_c}	-5,9	-4,4	-4,5	-4,5	-4,4	-5,1	-4,5	-5,1	-4,6	-5,9	-4,2
C ₂ HF ₃	³ J _{FH_t}	8,3	9,2	9,0	8,8	8,2	8,0	8,8	7,2	9,7	9,0	12,8
C ₂ HF ₃	² J _{FF}	58,8	34,7	35,6	37,2	38,5	54,7	34,9	53,2	-15,7	-7,2	87
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_c}	52,9	47,5	48,5	48,9	49,8	50,8	48,9	51,4	49,7	51,4	33
C ₂ HF ₃	³ J _{FF_t}	-122,6	-140,3	-138,2	-137,0	-140,6	-128,4	-143,1	-125,5	-158,8	-150,9	-119
HCCF	³ J _{FH}	14,0	16,8	16,5	16,3	15,1	13,8	15,6	13,6	16,8	15,2	21
fosfitano	¹ J _{PH}	152,4	138,4	137,2	136,5	137,3	154,3	148,8	152,5	126,7	116,2	158,3
cicloexano	³ J _{FH_{aa}}	14,0	13,7	13,7	13,7	12,3	12,9	12,4	12,6	13,9	13,5	13,2
cicloexano	³ J _{FH_{ae}}	4,0	3,8	3,8	3,9	3,6	4,0	3,7	3,8	4,2	3,9	3,6
cicloexano	³ J _{FH_{ee}}	3,7	3,6	3,5	3,5	2,9	3,1	2,9	3,1	3,1	3,2	3,1
benzeno	¹ J _{CH}	156,2	152,0	151,7	151,6	144,8	149,7	147,7	147,5	166,0	156,4	158,45
benzeno	² J _{CH}	0,0	0,9	0,9	0,8	1,2	0,2	1,4	0,5	1,9	0,6	1,14
benzeno	³ J _{CH}	8,3	7,8	7,8	7,8	7,6	8,1	7,4	7,8	8,0	8,0	7,60
benzeno	⁴ J _{CH}	-1,7	-1,2	-1,3	-1,3	-1,5	-1,8	-1,2	-1,6	-1,2	-1,5	-1,29
benzeno	³ J _{HH}	9,4	9,1	9,1	9,1	7,9	8,6	7,9	8,4	8,7	8,5	7,540
benzeno	⁴ J _{HH}	0,7	0,9	0,9	0,9	0,7	0,5	0,8	0,5	1,2	1,0	1,380
benzeno	⁵ J _{HH}	1,0	0,7	0,7	0,7	0,9	1,2	0,8	1,1	0,7	0,9	0,653
piridina	¹ J _{NC}	3,2	1,5	1,6	1,8	0,4	2,1	-0,1	1,9	-1,1	-0,9	0,7
piridina	² J _{NC}	-2,4	-1,9	-1,9	-2,0	-2,1	-2,4	-1,7	-2,3	-1,7	-1,9	2,5
piridina	³ J _{NH}	1,3	1,1	1,1	1,1	1,1	1,3	1,0	1,2	0,9	0,9	10,0
anilina	¹ J _{NC}	10,5	9,8	9,7	9,8	4,9	6,3	4,1	5,9	3,9	3,9	11,5
anilina	² J _{NC}	2,4	2,3	2,4	2,4	3,0	2,9	3,0	2,9	3,0	2,9	2,7
anilina	³ J _{NH}	1,7	1,8	1,8	1,8	1,3	1,4	1,3	1,4	1,3	1,2	1,9
fluorbenzeno	¹ J _{CF}	-260,7	-275,4	-274,3	-272,8	-271,6	-262,1	-284,2	-264,2	-319,6	-312,6	-244,70
fluorbenzeno	² J _{CF}	28,7	24,2	24,6	24,9	24,7	27,6	22,4	27,9	18,9	21,0	20,98
fluorbenzeno	³ J _{CF}	5,2	6,4	6,3	6,2	5,6	5,1	6,4	4,6	5,9	4,9	7,81
fluorbenzeno	⁴ J _{CF}	6,7	4,9	5,0	5,2	6,5	7,4	5,2	7,5	4,8	5,8	3,18
fluorbenzeno	³ J _{FH}	10,6	11,6	11,5	11,4	8,8	9,2	8,5	8,7	9,3	7,8	9,176
fluorbenzeno	⁴ J _{FH}	5,3	4,8	4,8	4,7	4,8	5,1	4,8	5,0	5,4	5,6	5,759
fluorbenzeno	⁵ J _{FH}	-1,2	-0,2	-0,3	-0,4	-0,7	-1,2	-0,5	-1,4	0,1	-0,4	0,348
1,2- difluorbenzeno	³ J _{FF}	-15,1	-21,3	-20,4	-19,7	-14,5	-11,9	-17,3	-10,0	-20,4	-20,1	-20,8
1,3,5- trifluorbenzeno	⁴ J _{FF}	-1,0	1,8	1,4	1,0	1,0	-0,3	3,1	-1,8	3,9	2,5	5,8
Total	DM	1,34	-4,10	-3,84	-3,49	-5,50	-1,28	-6,62	-0,92	-15,27	-12,76	—
DMA	14,67	11,00	14,67	14,19	16,16	17,80	11,96	17,80	12,13	25,63	—	—
PDMA	44,62	35,10	35,80	36,69	38,75	38,71	44,23	38,71	45,02	47,95	48,73	—

9 Smula Curricular

Dados pessoais

- Luiz Felipe Guain Teixeira
- So Paulo, 02/08/1994

Educao

- Colgio Santa Maria, So Paulo, 2011.
- Universidade de So Paulo, So Paulo, 2016.
Cincias Moleculares (Bacharelado)

Participaes em Congressos

1. Guain Teixeira, L. F. ; Ducati, L. C. *Density Functional Calibration for Indirect Spin-Spin Coupling Constant Calculations*. 16th International Congress of Quantum Chemistry, Menton - Frana, 2018
2. Guain Teixeira, L. F. ; Ducati, L. C. *Density Functional Calibration for Indirect Spin-Spin Coupling Constant Calculations*. XIX Simpsio Brasileiro de Qumica Terica, guas de Lindia - SP - Brasil, 2017.