

Aplicação da química computacional no cálculo dos deslocamentos químicos de RMN de ^{13}C de moléculas orgânicas

Lindgren, E. B.; Leal, K.Z.*

Rev. Virtual Quim., 2013, 5 (2), S1-S16. Data de publicação na Web: 10 de março de 2013

<http://www.uff.br/rvq>

Material suplementar

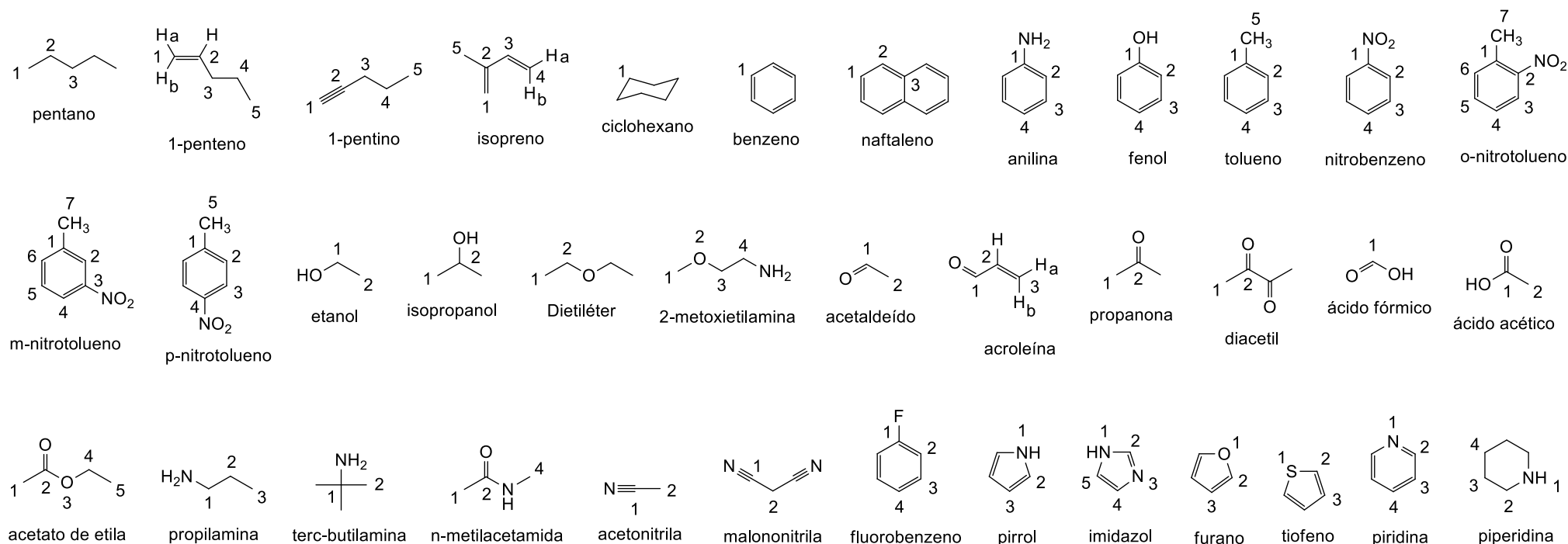


Figura S1: Estruturas químicas das 37 moléculas orgânicas estudadas

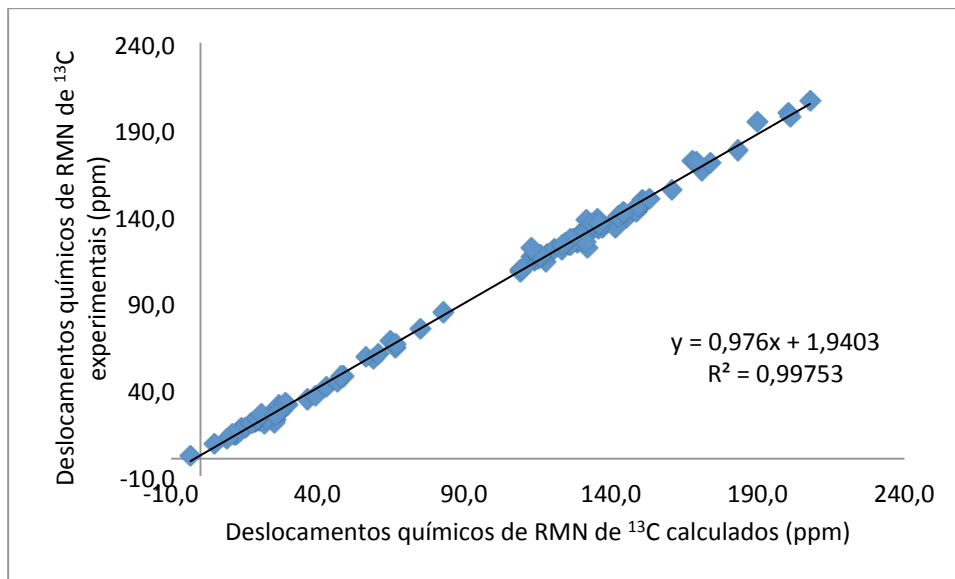


Figura S2a: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3LYP/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d) em fase gasosa

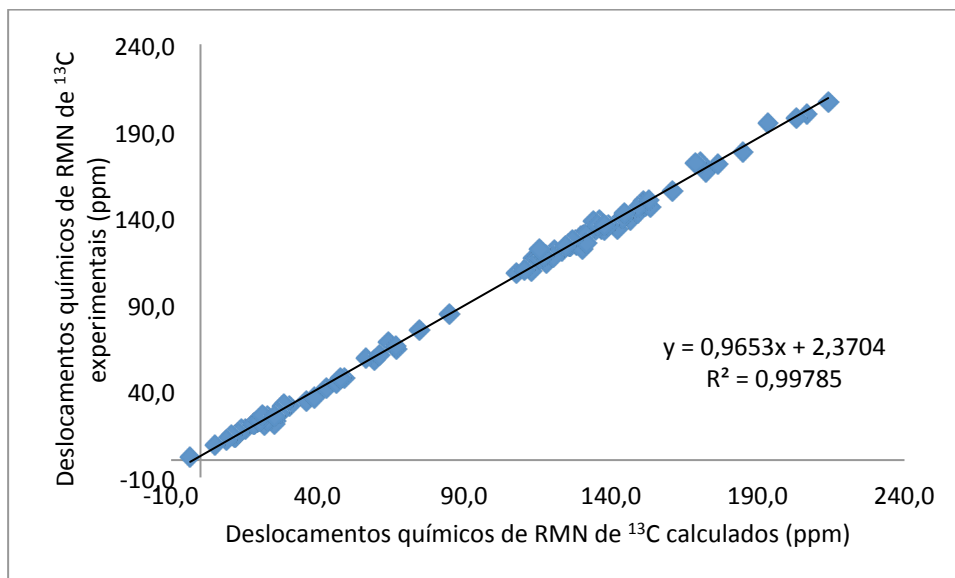


Figura S2b: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3LYP/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

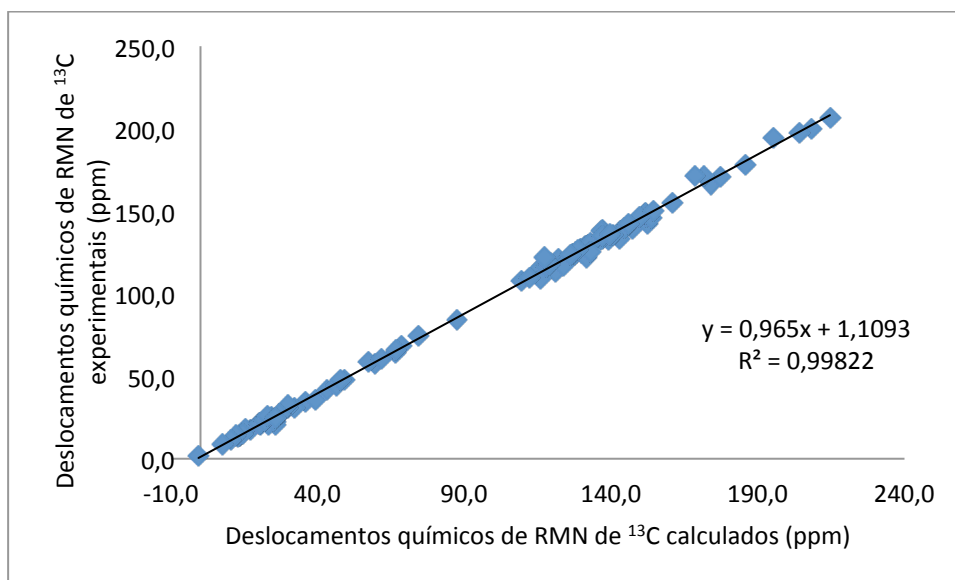


Figura S2c: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO mPW1PW91/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

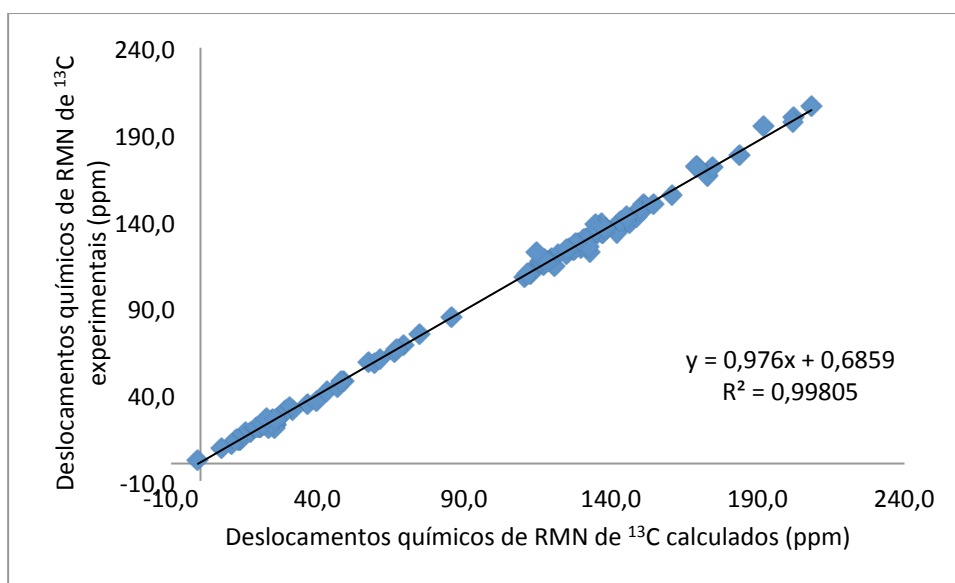


Figura S2d: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO PBE0/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d) em fase gasosa

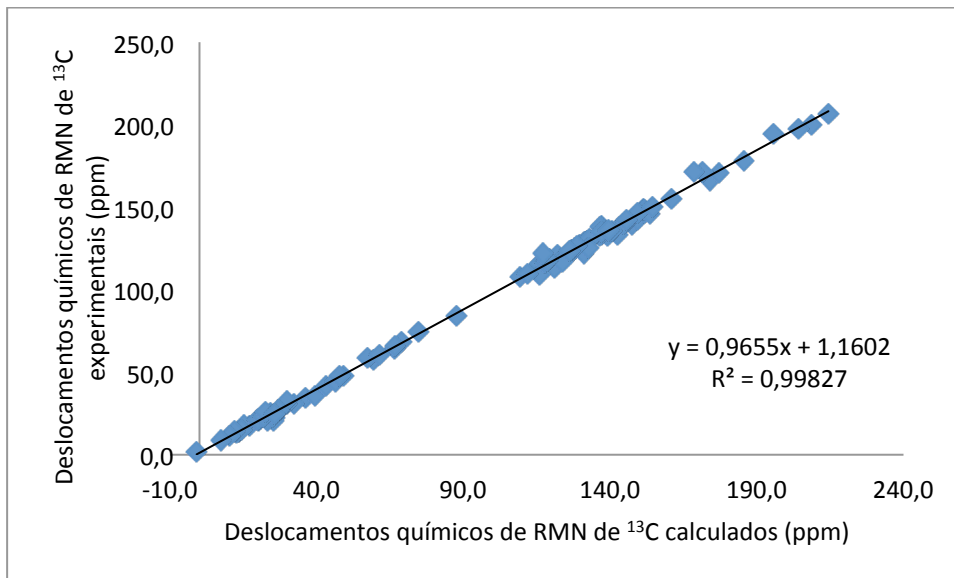


Figura S2e: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO PBE0/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

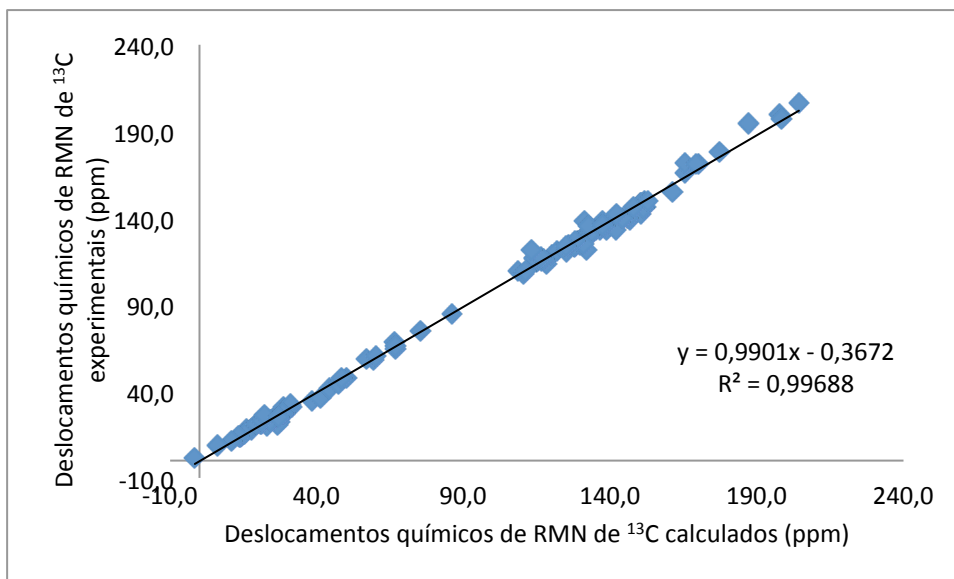


Figura S2f: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3LYP/6-311+G(2d,p)//HF/6-31G(d) em fase gasosa

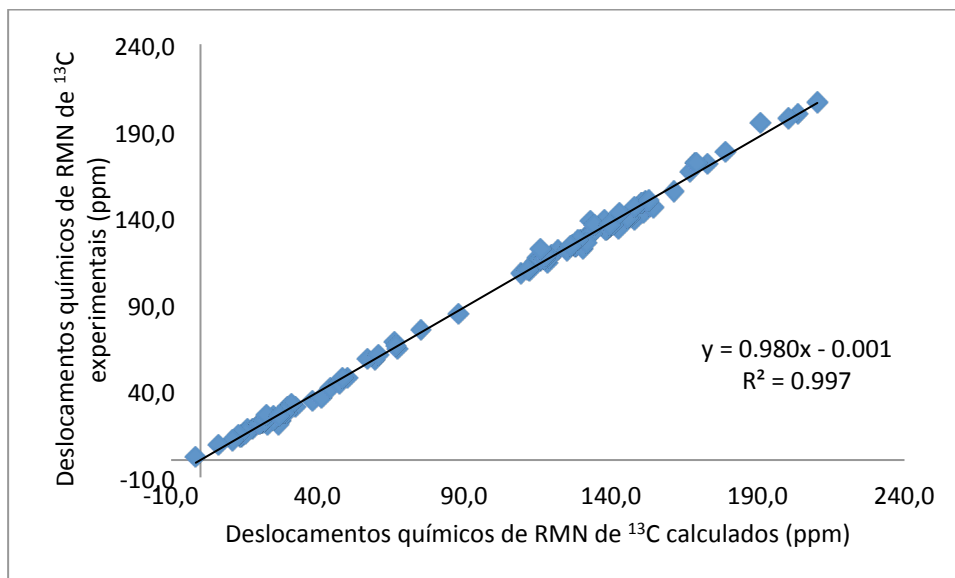


Figura S2g: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3LYP/6-311+G(2d,p)//HF/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

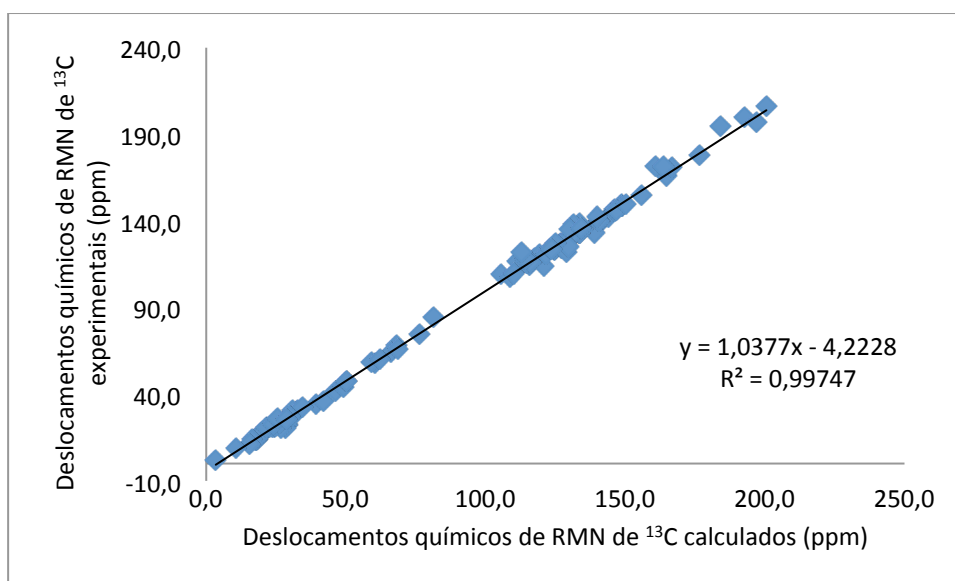


Figura S2h: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3PW91/cc-pVDZ//B3PW91/cc-pVDZ em fase gasosa

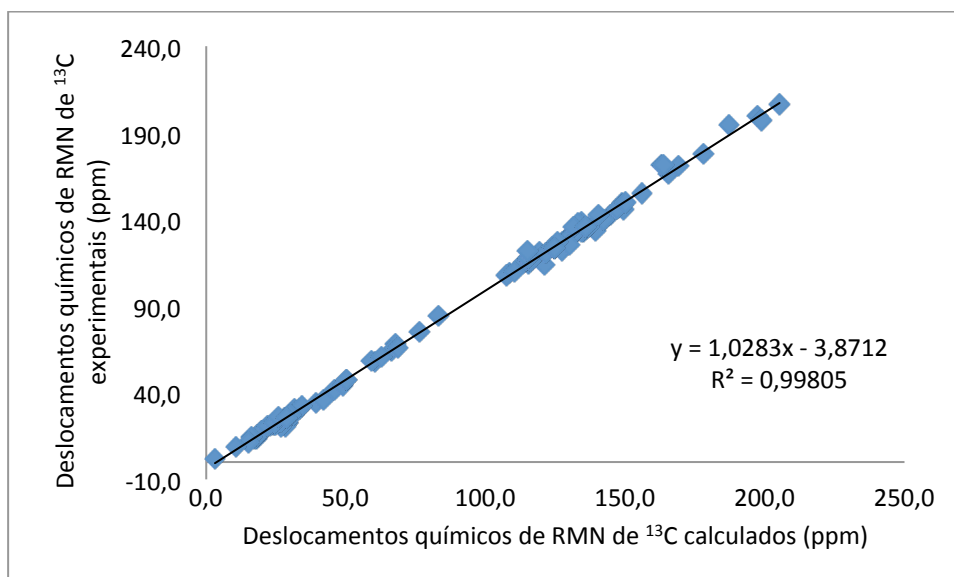


Figura S2i: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO B3PW91/cc-pVDZ//B3PW91/cc-pVDZ, com inclusão implícita do solvente

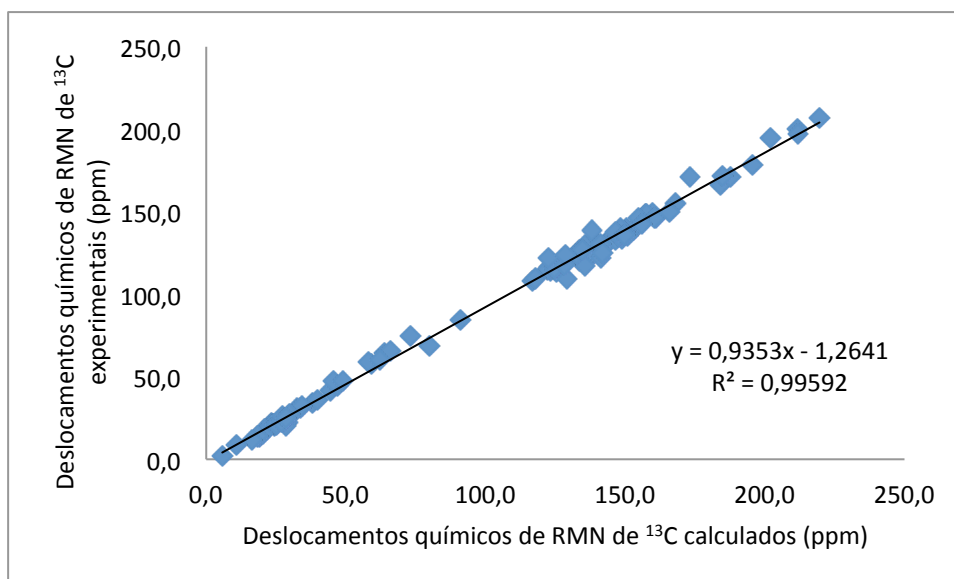


Figura S2j: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ^{13}C experimentais e calculados pela abordagem GIAO MP2/6-311+G(2d,p)//MP2/6-31G(d) em fase gasosa

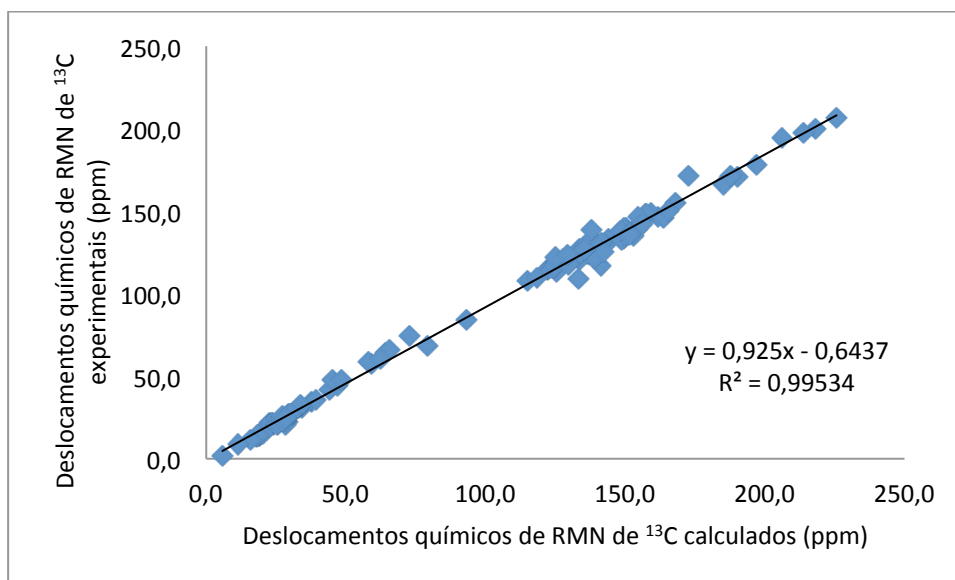


Figura S2k: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ¹³C experimentais e calculados pela abordagem GIAO MP2/6-311+G(2d,p)//MP2/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

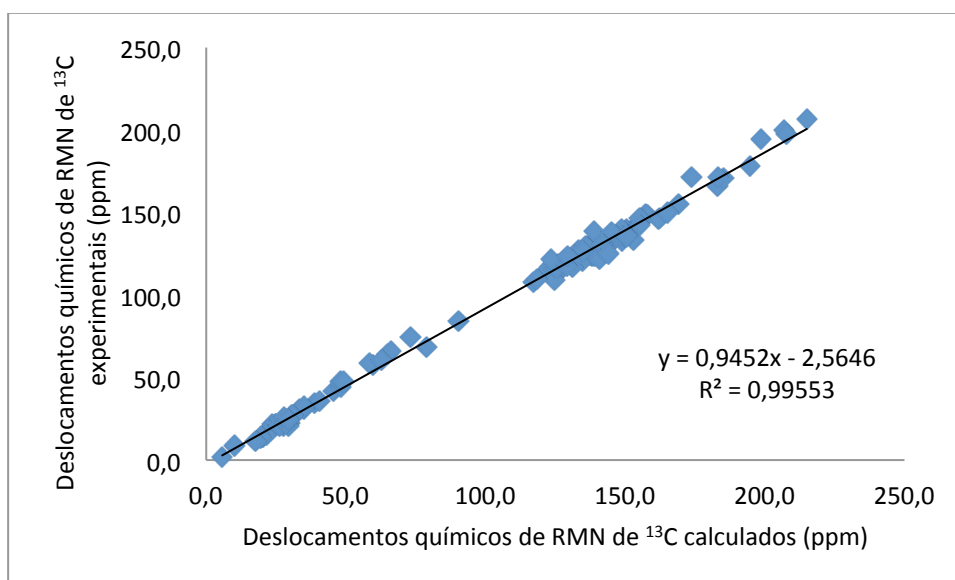


Figura S2l: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ¹³C experimentais e calculados pela abordagem GIAO MP2/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d) em fase gasosa

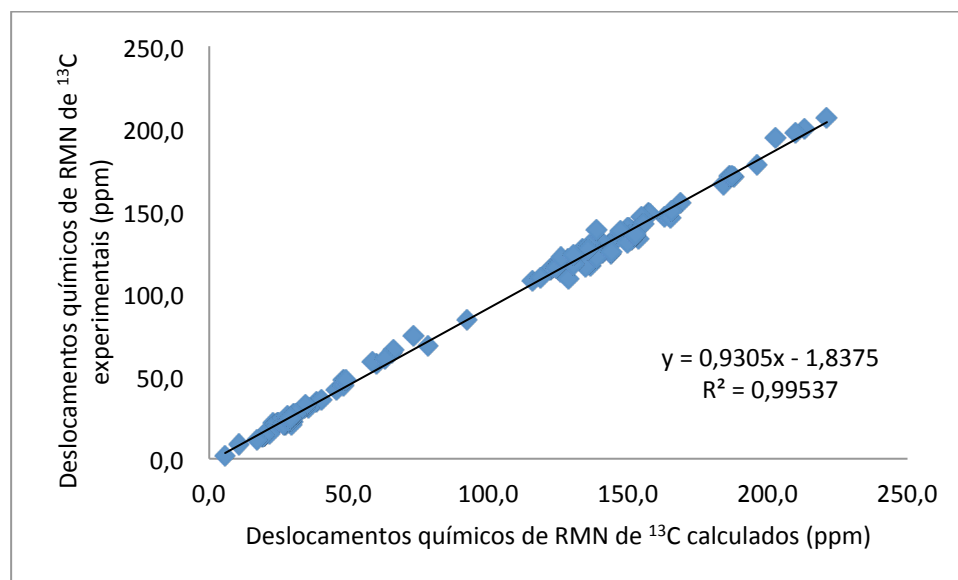


Figura S2m: Correlação linear entre os deslocamentos químicos de ¹³C experimentais e calculados pela abordagem GIAO MP2/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d), com inclusão implícita do solvente

Tabela S1: Deslocamentos químicos de RMN de ^{13}C (δ , ppm) teóricos (calculados em fase gasosa) e experimentais^a

Molécula	Número	B3LYP/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	mPW1PW91/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	PBE0/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	B3LYP/6-311+G(2d,p)//HF/6-31G(d)	B3PW91/cc-pVDZ//B3PW91/cc-pVDZ	MP2/6-311+G(2d,p)//MP2/6-31G(d)	MP2/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	Experimental
pentano	1	12,3	13,8	13,6	14,3	18,3	19,2	20,2	14,1
	2	25,2	25,5	25,5	27,1	29,3	28,3	29,4	22,6
	3	36,3	36,0	36,3	38,3	39,3	38,0	38,7	34,4
1-penteno	1	113,7	116,8	116,8	114,9	115,7	123,2	122,8	114,4
	2	145,2	145,9	146,0	146,7	140,8	153,0	152,2	139,0
	3	39,2	39,4	39,6	41,4	42,1	39,7	40,5	36,1
	4	25,4	25,7	25,6	27,2	28,8	29,1	30,0	22,3
	5	12,1	13,6	13,5	14,1	18,1	18,9	19,9	13,7
1-pentino	1	64,6	69,1	69,2	66,5	68,2	79,8	78,9	68,3
	2	82,9	85,5	85,6	86,0	81,2	91,2	90,4	84,5
	3	20,2	21,2	21,2	22,2	24,6	23,2	23,6	22,1
	4	25,2	25,4	25,3	26,6	28,2	28,4	29,6	20,5
	5	11,6	13,1	13,0	13,6	17,5	18,5	19,4	13,4
isopreno	1	117,8	120,8	120,8	118,3	120,9	125,3	125,8	113,6
	2	148,5	148,7	148,8	150,4	144,1	154,5	154,5	142,5
	3	143,8	144,8	144,9	146,0	140,8	150,6	150,4	139,8
	4	113,0	115,9	115,9	114,1	114,9	123,0	122,8	116,8
	5	15,4	17,2	17,1	17,8	20,4	21,6	22,6	17,9
ciclohexano	1	26,9	27,1	27,1	28,6	30,4	29,7	30,4	27,1
benzeno	1	129,4	130,9	130,9	131,1	128,5	138,5	139,1	128,4
naftaleno	1	126,7	128,3	131,3	128,4	126,3	135,4	135,8	125,8
	2	129,4	130,9	130,9	131,2	128,9	137,8	138,2	127,8
	3	136,9	137,1	137,1	138,8	133,4	144,4	145,7	133,5
anilina	1	150,6	151,0	150,8	152,1	146,2	161,1	162,2	146,5
	2	113,6	115,4	115,3	115,4	113,2	122,3	122,2	115,1
	3	130,5	132,1	132,0	132,3	129,5	142,6	143,4	129,3
	4	118,3	119,9	119,8	120,1	117,4	126,0	125,9	118,4
fenol	1	160,8	160,9	160,8	161,2	155,7	168,2	169,1	155,0

	2	115,3	117,1	116,9	116,6	114,8	124,5	124,8	115,5
	3	131,2	132,9	132,8	133,0	130,3	143,1	143,8	129,8
	4	120,5	122,0	121,9	121,8	119,3	127,9	128,3	121,1
tolueno	1	141,4	142,0	141,9	143,2	138,7	149,8	150,6	137,8
	2	130,0	131,7	131,6	131,6	129,0	138,1	138,8	129,1
	3	129,4	130,9	130,9	131,1	128,6	139,4	139,9	128,3
	4	126,5	128,0	128,0	128,0	125,6	134,8	135,5	125,4
	5	18,7	20,5	20,5	21,1	24,4	23,9	24,8	21,4
nitrobenzeno	1	150,9	151,5	151,3	150,2	148,8	157,2	157,6	148,3
	2	125,7	127,4	127,2	127,7	124,5	137,0	138,0	123,5
	3	129,6	131,1	131,1	131,4	129,3	136,2	136,4	129,4
	4	136,1	137,6	137,5	137,4	134,0	147,6	148,5	134,7
o-nitrotolueno	1	141,5	142,1	141,9	141,9	138,9	149,0	153,1	133,5
	2	150,8	151,4	151,1	151,8	148,7	159,5	157,2	149,4
	3	128,3	130,0	129,8	129,8	127,1	138,9	141,1	124,6
	4	127,1	128,7	128,7	128,8	126,9	133,4	133,2	126,9
	5	135,7	137,2	137,1	136,5	133,5	146,6	149,0	133,0
	6	133,9	135,4	135,4	135,2	133,6	138,5	139,2	132,8
	7	21,8	23,3	23,3	23,0	26,8	24,3	27,6	20,3
m-nitrotolueno	1	142,4	143,0	143,0	144,1	140,7	148,5	148,7	139,9
	2	125,9	127,7	127,6	127,7	124,8	136,4	137,2	123,8
	3	151,1	151,6	151,4	150,6	148,9	157,7	158,0	148,4
	4	123,2	124,9	124,7	125,1	121,6	133,6	134,6	120,7
	5	129,0	130,6	130,6	130,8	129,0	136,9	136,9	129,2
	6	136,8	138,3	138,2	138,1	134,7	147,4	148,6	135,4
	7	18,4	20,3	20,2	20,9	23,7	23,5	24,3	21,2
p-nitrotolueno	1	149,9	150,5	150,3	151,2	146,4	160,5	161,9	146,0
	2	130,0	131,7	131,6	131,7	129,6	135,5	135,8	129,8
	3	126,0	127,6	127,4	128,0	124,6	138,0	138,9	123,5
	4	148,8	149,5	149,3	148,1	146,9	154,8	155,1	146,3
	5	18,8	20,7	20,6	21,2	24,6	23,9	24,9	21,6
etanol	1	59,1	59,3	59,2	59,3	60,4	59,0	59,8	57,8
	2	14,0	15,4	15,3	16,0	19,8	21,1	22,3	18,1

isopropanol	1	23,4	24,6	24,6	25,5	28,3	29,1	30,0	25,3
	2	66,4	66,2	66,1	66,8	66,1	63,9	65,0	64,0
dietiléter	1	13,1	14,6	14,5	15,3	18,5	20,3	21,5	15,4
	2	66,7	66,9	66,8	66,8	68,7	65,8	66,0	66,0
2-metoxietilamina	1	56,4	57,3	57,3	56,8	58,9	58,1	58,4	58,7
	3	74,9	74,5	74,7	75,3	76,5	72,9	73,0	74,9
	4	43,0	43,2	43,1	44,2	46,1	44,3	45,5	41,8
acetaldeído	1	200,5	202,2	202,3	197,7	192,6	211,8	206,8	199,9
	2	29,6	31,3	31,3	31,6	32,7	33,9	35,0	30,9
acroleína	1	189,8	191,7	191,9	187,1	184,1	202,1	198,5	194,4
	2	135,5	136,5	136,7	137,3	133,7	138,1	138,7	138,5
	3	131,7	134,6	134,5	131,2	131,4	146,5	145,2	138,0
propanona	1	26,8	28,9	28,8	28,7	30,8	32,4	33,4	30,8
	2	207,8	208,5	208,3	204,4	200,6	219,6	215,0	206,6
diacetil	1	22,3	24,3	24,2	24,1	26,2	28,0	28,8	23,3
	2	201,1	202,1	202,0	198,4	197,1	211,9	207,7	197,1
ácido fórmico	1	170,9	172,7	172,7	165,5	164,6	184,1	183,1	166,2
ácido acético	1	183,2	184,1	183,9	177,3	176,6	195,5	194,7	178,1
	2	17,9	19,9	19,7	19,4	22,6	25,2	26,3	20,8
acetato de etila	1	17,4	19,4	19,2	19,4	21,6	25,0	26,1	21,0
	2	173,8	174,7	174,5	170,2	166,8	187,6	185,1	171,1
	4	60,6	61,3	61,1	60,1	62,1	62,3	62,6	60,4
	5	10,9	12,5	12,3	13,2	16,4	18,5	19,7	14,3
	1	46,6	46,6	46,6	47,5	49,1	47,2	48,2	44,4
propilamina	2	27,1	27,3	27,3	29,1	31,2	30,4	31,5	27,1
	3	9,1	10,7	10,5	11,0	15,4	16,4	17,5	11,4
	1	48,9	49,0	48,9	50,1	50,1	45,4	48,0	47,4
terc-butilamina	2	29,0	30,2	30,3	31,2	34,4	34,3	35,0	32,6
	1	19,4	21,5	21,3	21,3	24,3	26,9	28,2	22,7
n-metilacetamida	2	167,6	168,7	168,9	165,6	160,7	184,8	183,2	171,8
	4	20,8	22,8	22,6	22,2	25,5	27,2	27,9	26,2
	1	115,1	118,4	118,6	113,9	111,3	135,6	130,9	116,9
acetonitrila	2	-3,4	-0,6	-0,9	-1,6	3,4	5,7	5,7	1,8

malononitrila	1	109,1	112,2	112,4	108,5	105,5	129,1	124,7	109,4
	2	4,6	7,2	7,0	5,9	10,6	11,0	10,2	8,8
fluorobenzeno	1	169,0	169,0	168,9	169,3	163,9	173,3	173,7	171,3
	2	116,1	117,9	117,7	117,2	116,0	124,8	125,4	116,2
	3	130,8	132,5	132,4	132,6	130,2	141,1	141,8	130,4
	4	124,5	125,9	125,8	125,8	123,1	132,6	133,2	124,3
pirrol	2	115,9	117,7	117,4	116,4	114,2	128,3	129,1	117,9
	3	109,1	110,7	110,5	110,4	108,7	116,8	117,3	107,9
imidazol	2	133,7	135,4	135,1	132,6	130,1	151,0	150,3	135,4
	4	131,8	133,2	132,9	132,0	128,9	141,3	140,9	121,9
	5	112,9	114,7	114,5	113,1	112,8	122,4	123,4	121,9
furano	2	144,1	145,4	145,2	142,2	139,8	155,9	155,2	142,6
	3	109,9	111,7	111,5	111,1	110,2	117,9	118,3	109,5
tiofeno	2	131,2	132,5	132,1	130,9	129,6	142,0	144,1	125,1
	3	126,1	128,0	127,9	128,0	125,0	134,7	134,8	126,8
piridina	2	153,1	154,6	154,5	152,9	150,1	165,7	165,2	149,9
	3	123,3	124,8	124,8	125,0	123,7	128,6	129,5	123,8
	4	135,9	137,7	137,6	137,5	134,3	149,7	150,5	135,9
piperidina	2	47,8	47,9	47,9	48,4	50,2	48,9	49,1	47,5
	3	26,6	26,9	26,9	28,3	29,9	30,0	30,8	27,2
	4	25,3	25,6	25,6	26,9	28,9	28,5	29,2	25,2

^avalores obtidos do SDDBS.¹⁰

Tabela S2: Deslocamentos químicos de RMN de ^{13}C (δ , ppm) teóricos (calculados com a inclusão implícita do solvente pelo método PCM) e experimentais^a

Molécula	Número	B3LYP/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	mPW1PW91/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	PBE0/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	B3LYP/6-311+G(2d,p)//HF/6-31G(d)	B3PW91/cc-pVDZ//B3PW91/cc-pVDZ	MP2/6-311+G(2d,p)//MP2/6-31G(d)	MP2/6-311+G(2d,p)//B3LYP/6-31G(d)	Experimental
pentano	1	12,1	13,5	13,3	14,1	18,2	18,9	19,9	14,1
	2	25,0	25,3	25,3	26,9	29,3	28,1	28,9	22,6
	3	36,2	35,8	36,1	38,2	39,3	37,7	38,4	34,4
1-penteno	1	113,1	116,2	116,2	114,3	115,3	122,2	122,0	114,4
	2	146,5	147,2	147,4	148,1	142,1	154,3	153,5	139,0
	3	39,0	39,1	39,3	41,2	42,0	39,3	40,1	36,1
	4	25,3	25,5	25,5	27,1	28,9	28,9	29,8	22,3
	5	11,9	13,3	13,2	13,9	18,0	18,6	19,6	13,7
1-pentino	1	64,1	68,6	68,7	66,1	67,8	79,2	78,4	68,3
	2	84,8	87,4	87,5	87,9	83,0	93,2	92,4	84,5
	3	19,5	20,5	20,5	21,6	24,0	22,5	22,9	22,1
	4	25,2	25,3	25,3	26,6	28,4	28,3	29,5	20,5
	5	11,4	12,8	12,6	13,4	17,4	18,0	19,0	13,4
isopreno	1	117,9	120,9	120,9	118,4	121,1	125,2	125,6	113,6
	2	149,3	152,4	149,4	151,1	144,8	155,1	155,0	142,5
	3	143,8	144,8	144,9	146,0	140,9	150,3	150,2	139,8
	4	113,6	116,6	116,6	114,8	115,6	123,6	123,4	116,8
	5	15,3	17,1	17,0	17,7	20,3	21,4	22,4	17,9
ciclohexano	1	26,7	26,9	26,9	28,5	30,4	29,4	30,2	27,1
benzeno	1	129,7	131,2	131,2	131,4	128,8	138,6	139,3	128,4
naftaleno	1	127,1	128,8	128,7	128,9	126,8	135,7	136,1	125,8
	2	129,5	131,1	131,0	131,4	129,1	137,8	138,2	127,8
	3	136,7	136,9	136,9	138,7	133,3	144,0	145,3	133,5
anilina	1	151,6	152,0	151,8	153,0	147,4	161,7	162,9	146,5
	2	114,1	115,8	115,7	115,8	113,5	122,5	122,3	115,1
	3	130,6	132,2	132,1	132,4	129,6	142,6	143,5	129,3
	4	117,7	119,3	119,2	119,6	116,8	125,4	125,2	118,4
fenol	1	160,9	161,0	160,9	161,4	156,1	167,9	168,9	155,0

	2	114,2	116,0	115,9	115,5	113,9	123,9	124,2	115,5
	3	131,0	132,7	132,6	132,8	130,2	142,9	143,7	129,8
	4	120,6	122,1	122,0	121,9	119,3	127,9	128,4	121,1
tolueno	1	142,5	143,1	143,0	144,2	139,8	150,7	151,5	137,8
	2	130,3	131,9	131,8	131,8	129,3	138,1	138,9	129,1
	3	129,5	131,1	131,1	131,3	128,8	139,4	139,9	128,3
	4	126,4	128,0	127,9	128,0	125,6	134,5	135,2	125,4
	5	18,5	20,3	20,2	20,9	24,3	23,5	24,5	21,4
nitrobenzeno	1	151,2	151,7	151,4	150,3	149,0	157,1	157,5	148,3
	2	125,9	127,5	127,3	127,9	124,6	137,1	138,1	123,5
	3	130,6	132,1	132,1	132,3	130,2	136,7	136,9	129,4
	4	138,5	139,9	139,8	139,6	136,0	150,0	150,8	134,7
o-nitrotolueno	1	142,2	142,7	142,6	142,6	139,6	149,4	153,6	133,5
	2	151,1	151,6	151,3	151,9	149,0	159,2	157,2	149,4
	3	128,3	129,9	129,8	129,8	127,1	138,8	141,0	124,6
	4	127,9	129,5	129,5	129,5	127,6	133,7	133,5	126,9
	5	137,8	139,2	139,2	138,4	135,2	148,7	151,1	133,0
	6	134,7	136,2	136,3	138,1	134,3	138,9	139,6	132,8
	7	21,8	23,2	23,1	22,9	26,8	24,0	27,4	20,3
m-nitrotolueno	1	144,0	144,6	144,6	145,7	142,3	149,4	149,7	139,9
	2	125,9	127,6	127,5	127,6	124,8	136,4	137,1	123,8
	3	151,4	151,8	151,5	150,6	149,1	157,5	157,8	148,4
	4	123,2	124,8	124,6	125,0	121,6	133,5	134,5	120,7
	5	129,8	131,3	131,3	131,5	129,7	137,2	137,2	129,2
	6	139,2	140,7	140,6	140,4	136,7	149,8	151,0	135,4
	7	18,3	20,2	20,1	20,8	23,8	23,2	24,1	21,2
p-nitrotolueno	1	153,3	153,8	153,6	154,3	149,3	163,7	165,1	146,0
	2	131,0	132,6	132,5	132,6	130,5	135,9	136,2	129,8
	3	126,0	127,5	127,4	127,9	124,6	138,0	138,9	123,5
	4	149,1	149,6	149,3	148,0	147,0	154,7	154,8	146,3
	5	19,0	20,8	20,7	21,4	24,7	23,8	24,8	21,6
etanol	1	59,2	59,4	59,2	59,4	60,3	59,1	59,9	57,8
	2	14,0	15,4	15,3	16,1	19,8	21,0	22,2	18,1

isopropanol	1	22,9	24,1	24,1	25,0	28,0	28,5	29,5	25,3
	2	66,8	66,6	66,5	67,2	66,4	64,4	65,4	64,0
dietiléter	1	13,1	14,6	14,4	15,3	18,5	20,2	21,4	15,4
	2	66,6	66,7	66,7	66,6	68,7	65,6	66,0	66,0
2-metoxietilamina	1	56,4	57,3	57,3	56,9	58,9	58,1	58,4	58,7
	3	74,8	74,4	74,6	75,2	76,4	72,7	73,0	74,9
	4	42,9	43,2	43,1	44,2	46,0	44,2	45,5	41,8
acetaldeído	1	206,7	208,3	208,4	203,6	197,4	218,0	213,1	199,9
	2	30,4	32,1	32,1	32,3	33,3	34,3	35,4	30,9
acroleína	1	193,6	195,5	195,6	190,8	187,1	206,1	202,7	194,4
	2	136,1	137,1	137,2	137,9	134,3	138,0	138,5	138,5
	3	133,8	136,7	136,5	133,0	133,1	148,5	147,2	138,0
propanona	1	27,8	29,8	29,7	29,7	31,5	33,0	34,0	30,8
	2	214,0	214,6	214,4	210,3	205,3	225,7	221,2	206,6
diacetil	1	22,9	24,8	24,7	24,7	26,6	28,4	29,2	23,3
	2	203,3	204,2	204,1	200,5	198,8	213,9	209,8	197,1
ácido fórmico	1	172,2	174,0	174,0	166,8	165,6	185,2	184,2	166,2
ácido acético	1	184,9	185,8	185,6	179,0	177,9	197,0	196,1	178,1
	2	18,4	20,4	20,2	19,9	22,8	25,5	26,7	20,8
acetato de etila	1	18,0	20,0	19,7	20,0	21,8	25,4	26,6	21,0
	2	176,5	177,4	177,2	172,7	168,9	190,2	187,7	171,1
	4	61,0	61,7	61,5	60,5	62,6	62,5	62,8	60,4
	5	10,6	12,2	12,0	13,0	16,3	18,2	19,4	14,3
	1	46,4	46,3	46,3	47,3	48,9	46,9	47,9	44,4
propilamina	2	27,2	27,4	27,4	29,3	31,4	30,4	31,5	27,1
	3	8,8	10,4	10,2	10,8	15,3	16,0	17,1	11,4
	1	48,9	49,0	48,9	50,2	50,2	45,4	48,0	47,4
terc-butilamina	2	28,6	29,7	29,8	30,8	34,2	33,8	34,6	32,6
	1	20,0	22,0	21,8	21,9	24,5	27,1	28,2	22,7
n-metilacetamida	2	170,6	171,7	171,3	168,5	163,2	187,6	186,2	171,8
	4	21,0	22,9	22,7	22,4	25,8	27,1	28,2	26,2
	1	120,4	123,6	123,7	119,0	115,5	141,4	136,4	116,9
acetonitrila	2	-3,5	-0,7	-1,0	-1,6	3,1	5,8	5,7	1,8

malononitrila	1	112,8	115,9	116,0	112,1	108,5	133,3	128,6	109,4
	2	4,9	7,5	7,3	6,3	10,7	11,4	10,6	8,8
fluorobenzeno	1	168,7	168,7	168,6	169,1	163,7	172,8	187,2	171,3
	2	116,1	117,9	117,8	117,3	116,1	124,7	134,6	116,2
	3	131,4	133,1	133,0	133,2	130,7	141,5	149,9	130,4
	4	125,4	126,8	126,7	126,6	123,8	133,5	143,8	124,3
pirrol	2	117,2	118,9	118,7	117,7	115,4	129,6	130,4	117,9
	3	107,7	109,4	109,2	109,1	107,4	115,0	115,6	107,9
imidazol	2	135,4	137,2	136,9	134,3	131,4	153,0	152,4	135,4
	4	130,1	131,4	131,2	130,3	127,3	139,0	138,6	121,9
	5	115,6	117,4	117,1	115,8	115,1	125,0	125,9	121,9
furano	2	144,6	146,0	145,7	142,8	140,4	156,2	155,5	142,6
	3	110,4	112,1	111,9	111,5	110,4	118,3	118,6	109,5
tiofeno	2	131,8	133,1	132,7	131,4	130,0	142,2	144,1	125,1
	3	126,8	128,7	128,6	128,7	125,6	135,3	135,6	126,8
piridina	2	152,9	154,4	154,3	152,8	150,0	165,7	165,4	149,9
	3	124,6	126,0	126,0	126,2	124,8	129,4	130,3	123,8
	4	137,8	139,5	139,4	139,3	135,8	151,7	152,5	135,9
piperidina	2	47,6	47,6	47,6	48,3	50,1	48,6	48,9	47,5
	3	26,8	27,0	27,0	28,5	30,1	30,0	30,9	27,2
	4	25,2	25,4	25,5	26,8	28,9	28,2	28,9	25,2

^avalores obtidos do SDDBS.¹⁰