

Evaluación del campo de fuerza GFN-FF y de los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB para el estudio de las interacciones entre nanopartículas de Cu (CuNP) con moléculas orgánicas pequeñas

Ana Margarita Calle Pacheco

Trabajo de Grado para optar al título de Química

Directora

Martha Cecilia Daza Espinosa

Doctora en Ciencias - Química

Codirector

Markus Hans Oliver Doerr

Dr. rer. nat.

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Química

Bucaramanga

2024

Dedicatoria

A mi madre, por motivarme y recordarme la importancia de culminar esta etapa de mi vida. A mi padre, quien fue un apoyo incondicional en este proceso y siempre estuvo presente cuando decidí estudiar esta hermosa carrera. A mis docentes, Martha y Markus, por guiarme durante la realización de este trabajo y ser un apoyo en la terminación de la etapa académica de pregrado.

Agradecimientos

Agradezco a mi madre y padre por estar presentes en los momentos de dificultad y ser un gran apoyo en mi vida. Además de que gracias a sus esfuerzos y a los privilegios que me han brindado llegué donde estoy y he alcanzado poco a poco mis metas propuestas.

Agradezco a mi hermana, por recordarme cada día que puedo con todo y motivarme a terminar este trabajo de grado.

Agradezco a la Dra. Martha Daza y al Dr. Markus Doerr, por recordarme que con esfuerzo y exigencia se puede conseguir lo que queremos, buscando siempre mejorar en todos los aspectos de la vida.

Agradezco al Grupo de Investigación de Bioquímica Teórica (GBQT), por brindarme las herramientas necesarias para hacer posible este trabajo de grado, como: los equipos de cómputo y los diversos seminarios, que me permitieron tener una perspectiva más amplia sobre la química computacional y sus áreas de estudio, aportando a mi formación académica.

Tabla de contenido

| | |
|---|----|
| Introducción | 13 |
| 1. Estado del arte | 16 |
| 2. Marco conceptual | 21 |
| 2.1. Ecuación de Schrödinger..... | 21 |
| 2.1.1. Aproximación de Hartree-Fock (HF) | 21 |
| 2.1.1.1. Método de campo autoconsistente (SCF)..... | 22 |
| 2.1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer (BO)..... | 23 |
| 2.2. Base | 24 |
| 2.2.1. Orbitales de tipo Slater (STO) | 24 |
| 2.2.2. Orbitales de tipo Gaussiano (GTO)..... | 25 |
| 2.3. Métodos GFNn-xTB | 25 |
| 2.3.1. GFN1-xTB..... | 26 |
| 2.3.2. GFN0-xTB..... | 27 |
| 2.4. Método GFN-FF..... | 28 |
| 2.5. Métodos DFT | 29 |
| 2.5.1. Funcionales | 30 |
| 2.5.1.1. B97-3c | 30 |
| 2.5.1.2. PBE-D3..... | 31 |

| | |
|--|----|
| 2.5.1.3. PBEh-3c..... | 31 |
| 2.6. Error de superposición de bases (BSSE)..... | 32 |
| 3. Metodología..... | 34 |
| 3.1. Selección del parámetro <i>SmearTemp</i> | 34 |
| 3.3. Cálculos para determinar el error de superposición de bases con PBE-D3/def2-SVP | 35 |
| 3.4. Cálculo de las energías de interacción y comparación de los métodos..... | 36 |
| 3.5. Análisis de resultados..... | 36 |
| 4. Resultados..... | 37 |
| 4.1. Energías de interacción y el error de superposición de bases (BSSE)..... | 37 |
| 4.2. Frecuencias vibracionales | 42 |
| 4.3. Parámetros geométricos de los complejos | 44 |
| 4.4. Costo computacional | 46 |
| 5. Conclusiones..... | 49 |
| Referencias..... | 51 |

Lista de tablas y figuras

| | |
|---|----|
| Tabla 1. Energías de interacción [kcal/mol] para los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP con BSSE y la energía de interacción corregida (ΔE^{CP}) con el método de corrección de contrapeso (CP), B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K) y PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K) y los métodos GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF. | 38 |
| Figura 1. Energías de interacción [kcal/mol] para los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP (CP), B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K) y PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K) y los métodos GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF. | 41 |
| Tabla 2. Frecuencias vibracionales imaginarias [cm^{-1}] obtenidas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol. | 43 |
| Tabla 3. Distancias de enlace [Å], ángulos de enlace [$^{\circ}$] y ángulos diedros [$^{\circ}$] de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculados con PBE-D3/def2-SVP, PBEh-3c/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP, GFN1-xTB y GFN-FF. Con el parámetro SmearTemp de 3100 K y 4000 K para PBEh-3c. | 45 |
| Tabla 4. Análisis del costo computacional para las optimizaciones de las geometrías de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB. Ciclos de optimización. | 47 |

Lista de apéndices y anexos

| | |
|---|----|
| Apéndice A. Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, SmearTemp de 3100 K. | 58 |
| Apéndice B. Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con B97-3c/def2-TZVP, SmearTemp de 3100 K. | 61 |
| Apéndice C. Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN0-xTB. | 64 |
| Apéndice D. Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN1-xTB. | 67 |
| Apéndice E. Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN-FF..... | 70 |
| Apéndice F. Geometrías de los complejos entre la nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y las moléculas de 2-propanamina, 2-propanol y 2- propanotiol, optimizadas con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SV y con el método semiempírico GFN0-xTB. | 73 |
| Apéndice G. Geometrías de la nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y de las moléculas de 2-propanamina, 2-propanol y 2- propanotiol, optimizadas con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP y con el método semiempírico GFN0-xTB..... | 74 |
| Anexo A. Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu ₅₅ NP) y la molécula de 2-propanamina, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 | |

K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB. 75

Anexo B. Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y la molécula de 2-propanol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB. 78

Anexo C. Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y la molécula de 2-propanotiol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB. 81

Abreviaturas

| | |
|------------------------|---|
| ΔE | Energía de interacción. |
| ΔE^{CP} | Energía de interacción corregida por el método de corrección de contrapeso. |
| a.u. | Unidades atómicas. |
| BO | Aproximación de Born-Oppenheimer. |
| BSSE | Error de superposición de bases. |
| CP | Método de corrección de contrapeso. |
| Cu ₅₅ NP | Nanopartícula de cobre de 55 átomos. |
| DFT | Teoría del funcional de la densidad. |
| FF | Campo de fuerza. |
| GFN | Geometrías, frecuencias e interacciones no covalentes. |
| GTO | Orbitales de tipo gaussiano. |
| HF | Aproximación de Hartree-Fock. |
| HOMO | Orbital molecular ocupado más alto. |
| KS | Kohn-Sham. |
| LUMO | Orbital molecular desocupado de más baja energía. |
| PES | Superficie de energía potencial. |
| SCF | Campo autoconsistente. |
| SQM | Métodos semiempíricos de mecánica cuántica. |
| STO | Orbitales de tipo Slater. |
| SVP | Valencia dividida polarizada. |

| | |
|---------|--------------------------------------|
| TZVP | Valencia triple zeta polarizada. |
| xTB | Método extendido de enlace estrecho. |
| ζ | Exponente de Slater. |

RESUMEN

Título: Evaluación del campo de fuerza GFN-FF y de los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB para el estudio de las interacciones entre nanopartículas de Cu (CuNP) con moléculas orgánicas pequeñas.*

Autora: Ana Margarita Calle Pacheco.**

Palabras clave: Campo de fuerza GFN-FF, método semiempírico GFN1-xTB y GFN0-xTB, PBE-D3, nanopartículas de cobre, energías de interacción.

Descripción:

En este trabajo se presenta un análisis del efecto del campo de fuerza GFN-FF, los métodos semiempíricos GFN0-xTB y GFN1-xTB, y los funcionales PBE-D3, B97-3c y PBEh-3c sobre la energía de interacción de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y las moléculas 2-aminopropano, 2-propanol y 2-propanotiol. También se evalúa el efecto del error de superposición de bases con el método de corrección de contrapeso (CP) sobre la energía de interacción obtenida con el funcional PBE-D3; este funcional se utilizó como referencia para evaluar la “calidad” de los resultados.

Los resultados muestran que las energías de interacción obtenidas con B97-3c y GFN1-xTB fueron más cercanas a las calculadas con PBE-D3/def2-SVP, estas difieren en menos de 17 [kcal/mol]. Por otra parte, el método semiempírico GFN1-xTB describe mejor los enlaces Cu-O y Cu-S, además de los ángulos $\angle \text{Cu-S-C}_2$ y $\angle \text{Cu-S-C}_2\text{-C}_1$; en cambio el campo de fuerza GFN-FF presenta resultados con menor variabilidad respecto a PBE-D3/def2-SVP para la longitud de enlace Cu-N y los ángulos $\angle \text{Cu-O-C}_2$, $\angle \text{Cu-N-C}_2$, $\angle \text{Cu-O-C}_2\text{-C}_1$ y $\angle \text{Cu-N-C}_2\text{-C}_1$. Sin embargo, la estructura optimizada con B97-3c fue la más cercana a la calculada con la referencia.

El interés para la evaluación de la calidad de los resultados con estos métodos se debe al bajo costo computacional de los métodos semiempíricos y el campo de fuerza en comparación con los funcionales PBE-D3. Además, estos resultados son de interés para modelar interacciones entre nanopartículas y polímeros como la celulosa. En conclusión, dentro de los métodos evaluados GFN1-xTB muestra los mejores resultados con un bajo costo computacional, comparables con el funcional PBE-D3.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Directora: Martha Cecilia Daza Espinosa, Dra. En Ciencias - Química. Codirector: Markus Hans Oliver Doerr, Dr. rer. nat.

ABSTRACT

Title: Evaluation of the GFN-FF force field and the semiempirical methods GFN1-xTB and GFN0-xTB for the study of the interactions between Cu nanoparticles (CuNP) with small organic molecules.*

Author: Ana Margarita Calle Pacheco.**

Keywords: Force field GFN-FF, semiempirical method GFN1-xTB and GFN0-xTB, PBE-D3, copper nanoparticles, interaction energies.

Description:

This work presents an analysis of the effect of the GFN-FF force field, the semiempirical methods GFN0-xTB and GFN1-xTB, and the functionals PBE-D3, B97-3c and PBEh-3c on the interaction energy of the complexes between a copper nanoparticle (Cu₅₅NP) and the molecules 2-aminopropane, 2-propanol and 2-propanethiol. The effect of the base overlap error with the counterpoise correction (CP) method on the interaction energy obtained with the PBE-D3 functional is also evaluated; this functional was used as a reference to evaluate the “quality” of the results.

The results show that the interaction energies obtained with B97-3c and GFN1-xTB were closer to those calculated with PBE-D3/def2-SVP, these differ by less than 17 [kcal/mol]. On the other hand, the semiempirical method GFN1-xTB better describes the Cu-O and Cu-S bonds, in addition to the angles $\angle\text{Cu-S-C}_2$ and $\angle\text{Cu-S-C}_2\text{-C}_1$; in contrast, the GFN-FF force field presents results with lower variability with respect to PBE-D3/def2-SVP for the Cu-N bond length and the angles $\angle\text{Cu-O-C}_2$, $\angle\text{Cu-N-C}_2$, $\angle\text{Cu-O-C}_2\text{-C}_1$ and $\angle\text{Cu-N-C}_2\text{-C}_1$. However, the structure optimized with B97-3c was the closest to that calculated with the reference.

The interest for the evaluation of the quality of the results with these methods is due to the low computational cost of the semiempirical methods and the force field compared to the PBE-D3 functionals. Furthermore, these results are of interest for modeling interactions between nanoparticles and polymers such as cellulose. In conclusion, within the evaluated methods GFN1-xTB shows the best results with a low computational cost, comparable with the PBE-D3 functional.

* Bachelor Thesis

** Faculty of Sciences. Department of Chemistry. Director: Martha Cecilia Daza Espinosa, Dr. In Sciences - Chemistry. Co-director: Markus Hans Oliver Doerr, Dr. rer. nat.

Introducción

En las últimas décadas, la química teórica ha evolucionado hasta convertirse en una parte indispensable de la química y ha demostrado ser un complemento importante del experimento.

En este trabajo de grado se evaluará la calidad y eficiencia de los resultados obtenidos en la caracterización de complejos entre una nanopartícula de cobre y moléculas orgánicas pequeñas. Se compararán los resultados obtenidos con el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN0-xTB y GFN1-xTB, y los funcionales PBEh-3c, B97-3c y PBE-D3. El interés para la evaluación de la calidad de los resultados con estos métodos se debe al bajo costo computacional de los métodos semiempíricos, los campos de fuerza y los funcionales de tipo 3c en comparación con el funcional PBE-D3. Estos resultados son de interés para modelar interacciones entre nanopartículas y polímeros como la celulosa.

La descripción estructural y de interacciones entre macromoléculas y nanopartículas es un tema de amplia relevancia tanto para la química experimental como para la química teórica. El estudio computacional de estos sistemas requiere de modelos que incluyan la descripción de muchos átomos y de las interacciones no covalentes entre ellos. Esto es desafiante para la química computacional; sin embargo, recientemente se han hecho avances considerables en el desarrollo de métodos semiempíricos y campos de fuerza que permiten modelar de forma rápida y precisa este tipo de moléculas grandes (Bannwarth et al., 2021). Entre estos métodos tenemos el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFNn-xTB, que han mostrado muy buenos resultados para modelar sistemas organometálicos (Spicher & Grimme, 2020) y permiten calcular algunas de las propiedades del sistema.

Estos métodos se han aplicado al estudio de sistemas macromoleculares con elementos hasta el radón, proteínas (Bannwarth et al., 2021), marcos metal-orgánicos (MOFs), poliedros metal-orgánicos (MOPs), jaulas porosas orgánicas (POCs) (Spicher et al., 2020), componentes altamente insaturados (arilenos, grafito y grafeno) (Keller et al., 2021) y en catálisis, evaluando la actividad catalítica mediante el cálculo de las energías de adsorción (Dononelli & Klüner, 2018; Zhang et al., 2021) con buenos resultados. Hasta ahora hay pocos estudios aplicados a sistemas extendidos como nanopartículas y su interacción con moléculas y a la evaluación sistemática de la calidad de los resultados obtenida con métodos xTB (Barrionuevo et al., 2022; Martins et al., 2020; Nguyen et al., 2020; Quan et al., 2021; Zheng et al., 2022).

Por otra parte, el método DFT, teoría del funcional de la densidad, establece la conexión entre la energía del sistema y su densidad electrónica, proporcionando superficies de energía potencial y la predicción de energías de formación con una mayor precisión (Spicher & Grimme, 2020). Por consiguiente, se convierte en un método utilizado como referencia para comparar los resultados obtenidos con otros métodos como los campos de fuerza y los semiempíricos; para ello se utilizarán los funcionales PBE-D3, PBEh-3c y B97-3c debido a que brindan buenos resultados (Bursch et al., 2021; Grimme et al., 2010, 2017).

Debido al interés de modelar polímeros y materiales de nanopartículas, se buscan moléculas que sean modelos sencillos de estos sistemas, por consiguiente, el complejo que se va a estudiar se conforma por una molécula orgánica pequeña que puede ser el 2-propanol, 2-aminopropano o 2-propanotiol y una nanopartícula metálica. En cuanto al metal de transición, la estructura más estable que presentan las nanopartículas de cobre (Cu_{55}) es la icosaédrica (Piotrowski et al., 2016; Rapps et al., 2013), siendo este agrupamiento el ideal para emplear como

nanopartícula ya que proporciona una estructura que representa un mínimo de energía (Piotrowski et al., 2016).

Con el fin de evaluar la calidad y eficiencia de los nuevos métodos semiempíricos GFN0-xTB y GFN1-xTB y el campo de fuerza GFN-FF, en este trabajo de investigación se pretende establecer si los resultados obtenidos con los métodos aplicados son comparables con la precisión que brinda DFT en la optimización de geometrías y el cálculo de energías de interacción entre la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y moléculas orgánicas pequeñas, y así en un futuro poder desarrollar y caracterizar nuevos materiales a partir del sistema estudiado.

1. Estado del arte

En la búsqueda de métodos que permitan describir sistemas macromoleculares de forma precisa y eficiente con un bajo costo computacional, los métodos GFN0-xTB y GFN1-xTB, junto con el método de campo de fuerza GFN-FF son una opción que en los últimos años se han convertido en la base de varios estudios realizados en química computacional. Al hacer una revisión, se tiene que, para optimizar y describir sistemas moleculares grandes, en la implementación de enfoques SQM, los métodos GFN presentan mejores resultados respecto a los demás, obteniendo una menor variabilidad entre los datos siendo comparables con el método DFT (Bannwarth et al., 2021). Aun así, al evaluar el rendimiento de los métodos se encuentra que los estudios realizados se reducen a sistemas bioquímicos y no se enfatizan en sistemas organometálicos y sistemas que contienen nanopartículas metálicas, por lo cual, se realiza una revisión bibliográfica con enfoque en estos dos últimos.

De acuerdo con lo anterior, Spicher et al. (2020) aplicaron los métodos GFN1-xTB, GFN2-xTB y GFN-FF para describir MOFs, MOPs y POCs, encontrando que para el cálculo de energías de enlace y optimización de las estructuras GFN1-xTB y GFN-FF muestran resultados con una baja desviación al igual que con los obtenidos con DFT. Para los casos que involucren especies altamente cargadas el método indicado es GFN1-xTB, además de mostrar mejores resultados en el estudio de los complejos metálicos unidos a las jaulas orgánicas porosas. De igual forma, el método de campo de fuerza GFN-FF muestra un tiempo menor de cálculo en la optimización de las geometrías. Por otra parte, al realizar cálculos de energías conformacionales de 40 complejos de capa cerrada de metales de transición, tomados de la *Cambridge Structural Database* (CSD), se tuvo que al hacer el cálculo de las energías de punto único (SPE), utilizando las estructuras

optimizadas con B97-3c, el método GFN1-xTB es el que mejor se comporta con un coeficiente de correlación de Pearson (rp) en promedio de 0.617. Para el caso de GFN-FF a pesar de tener un menor costo computacional el rp dado equivale a 0.304 siendo el más bajo para los métodos evaluados (Bursch et al., 2021). Lo anterior se complementa con el trabajo realizado por Bursch et al. (2019), donde al optimizar las estructuras de complejos de metales de transición con GFN1-xTB y GFN2-xTB se obtienen cálculos robustos y buenos resultados para metales de transición hasta $Z=80$, donde la longitud de enlace y ángulos de enlace entre el ligando y el metal son comparables a los calculados con DFT; demostrando que los métodos GFN pueden ser utilizados para el estudio de estos sistemas con resultados favorables.

Sin embargo, es importante tener en cuenta las limitaciones descritas por Bannwarth et al. (2021) en los métodos GFN, que establece que, en el análisis de sistemas periódicos para celdas pequeñas, el error del punto Γ llega a ser muy grande. Por lo tanto, para el cálculo con sistemas que poseen condiciones de entorno periódicas, GFN1-xTB no es recomendable, tal como en el trabajo realizado por Martins et al. (2020), que al estudiar nanopartículas de Au adsorbidas sobre nanopartículas de TiO_2 se tuvo que cambiar el sistema a uno finito con nanopartículas de TiO_2 de mayor tamaño, donde después de establecer el modo de adsorción se encontró que el oro es capaz de aumentar la actividad del material compuesto debido a la transferencia de electrones del oro a la anatasa, teniendo una mayor transferencia de carga a los átomos de Ti. El efecto observado mediante el análisis obtenido con GFN1-xTB se ajustó con los cálculos realizados con DFT y los controles experimentales. El método GFN-FF para estudiar sistemas periódicos fue adaptado a una extensión llamada ρ GFN-FF, al implementar ajustes que incluyen: primero el uso de la dispersión amortiguada de corto alcance de tres cuerpos, que evita que las estructuras colapsen y deja de lado las complicaciones que se presentaban en sistemas extendidos al emplear un radio de corte para

las interacciones de Coulomb; se propone un segundo ajuste que corresponde a la suma de Wolf, que permite que dichas interacciones se evalúen en el espacio real y no que para poder hacer la corrección se tenga conocimiento previo de la red (Gale et al., 2021). Esta modificación del método demostró que el rendimiento para evaluar MOFs es comparable a las variantes del campo de fuerza UFF y para sólidos demostró una mejora con respecto a UFF. Del mismo modo, esta extensión demostró que es aplicable a la dinámica de red y dinámica molecular. A pesar de las modificaciones al método GFN-FF, ρ GFN-FF conserva la robustez y rapidez en los cálculos.

Además, otro punto de interés en este trabajo de investigación es la determinación de la geometría del clúster de nanopartículas metálicas para optimizar y calcular energías de interacción a través de métodos de química computacional, se tiene en cuenta lo propuesto por Piotrowski et al. (2016), que encontró, después de realizar el estudio de 42 sistemas metálicos usando el método DFT con los funcionales PBE y PBE+U, que el nanoclúster de cobre adopta una geometría icosaédrica de Mackay, que corresponde a la configuración del mínimo global, cuyas energías de enlace calculadas con cada funcional (EPBE y EPBE+U) fueron de 0.00 eV, con sistemas de nanopartículas metálicas de 55 átomos. En otros trabajos que involucran el estudio teórico de nanoclústers metálicos se tiene el artículo publicado por Dononelli & Klüner (2018), donde se estudia la actividad catalítica de nanopartículas de Ag y Cu a través del método de la teoría funcional de la densidad (DFT) con el nivel de teoría PBE. La geometría utilizada para los cálculos fueron terrazas (111) triangulares con 6 átomos para las nanopartículas de 55 átomos y una superficie monocristalina de metal (M321) de terrazas (111) con pasos en forma de zigzag, que están formados por átomos 6f-M y 8f-M, a partir de ello se encontró que las energías de adsorción del CO en la superficie M321 y las nanopartículas M₅₅ poseen el mismo orden de magnitud.

Por otra parte, dentro de otros sistemas estudiados (a parte de los de interés) con el campo de fuerza GFN-FF están las ruedas de radios moleculares (MSW). Al sintetizar MSW por medio de la trimerización de Vollhardt partiendo de estructuras con mancuernas simétricas C_{2v} con unidades centrales de acetileno, de simetrías D_{3h} y C_s , y nanopatrones supramoleculares formados por ellos con el fin de caracterizarlos con mediciones de vida media en RMN y PL, se dedujo que las moléculas de ácido octanoico forman dímeros en la superficie ayudando a estabilizar el empaquetamiento debido a que los dímeros se alinean en paralelo con las cadenas alcoxi, lo cual se puede observar analizando las imágenes obtenidas por microscopia de efecto túnel (STM). Para comprobar lo anterior se utilizó el campo de fuerza GFN-FF con el propósito de optimizar la geometría de cuatro MSWs con cuatro dímeros de ácido octanoico intercalados, los cálculos realizados corroboran lo observado con STM (Keller et al., 2021), siendo este método computacional una gran herramienta para complementar y verificar la información obtenida a través de los métodos de análisis experimental.

En el caso del método GFN0-xTB se evaluó su desempeño junto con otros nueve métodos para el cálculo del momento dipolar de 7211 moléculas orgánicas que se encuentran en la base de datos QM7b, para ello los resultados obtenidos se compararon con los reportados por Yang en otro trabajo. Dentro de los funcionales correspondientes al método DFT, B97-3c y PBEh-3c suministraron valores de momento dipolar más precisos, con un de error absoluto medio (MAE) de 0.10 y 0.11 D para cada uno. En los métodos de unión estrecha extendidos, el que peor resultados arrojó fue GNF0-xTB con un MAE de 0.88 y RMSE del 56%, seguido de GFN1-xTB con un error absoluto medio de 0.70 D, por último, se tiene GFN2-xTB que mostró mejores resultados con un error absoluto de 0.27 D. A pesar de que B97-3c y PBEh-3c tuvieron los valores de error más bajos, se recomienda utilizar GFN2-xTB como método para el cálculo del momento

dipolar, excepto para moléculas que contengan azufre, ya que requiere un menor costo computacional (Soyemi & Szilvási, 2022).

2. Marco conceptual

2.1. Ecuación de Schrödinger

Es un modelo matemático que representa una expresión de la energía total, a través de una ecuación diferencial para partículas que se comportan como ondas.

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad (1)$$

donde \hat{H} representa el operador del Hamiltoniano (en a.u.) para un sistema conformado por núcleos (M) y electrones (N),

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (2)$$

con M_A siendo la relación entre masa del núcleo A y la masa de un electrón. El primer término de la ecuación (2) corresponde al operador de energía cinética de los electrones, el segundo es el operador de energía cinética del núcleo, el tercer término es la atracción de Coulomb entre los electrones y los núcleos, el cuarto y quinto término representan la repulsión entre electrones y los núcleos.

La solución de la ecuación de Schrödinger no relativista e independiente del tiempo (Ec. 1) con aproximaciones es la base de los cálculos semiempíricos (Gund, 1996).

2.1.1. Aproximación de Hartree-Fock (HF)

La aproximación HF se basa en tomar el problema de muchos electrones y reducirlo a un problema de un solo electrón, bajo la suposición de que cada electrón se mueve en un campo

autoconsistente (SCF) promedio creado por todos los electrones del sistema, el cual es un determinante de Slater.

La ecuación HF es una ecuación de valores propios de la forma:

$$\hat{f}\chi_i = E_i\chi_i \quad (8)$$

Derivando la ecuación de Hartree-Fock,

$$\hat{f}|\chi_i\rangle = \sum_j^N E_{ij} |\chi_j\rangle; \forall i = 1, N \quad (9)$$

la cual permite determinar los espín-orbital óptimos para reducir la energía E_0 , que corresponde a la energía más baja posible. La ecuación (9) se resuelve de manera iterativa y el procedimiento para darle solución se denomina método del campo autoconsistente. Cabe mencionar que se debe tener en cuenta el principio de antisimetría (principio de exclusión de Pauli).

2.1.1.1. Método de campo autoconsistente (SCF)

El operador Fock \hat{f} , es un operador de un solo electrón, que permite hallar la energía del electrón en un orbital individual.

$$\hat{f}(i) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + v^{HF}(i) \quad (10)$$

donde $v^{HF}(i)$ es el potencial de Hartree-Fock, que corresponde al campo producido por el i -ésimo electrón (Szabo & Ostlund, 1996) en el campo promedio al cual se hace referencia en la sección anterior.

Como se busca resolver la ecuación HF de manera iterativa, se inicia con una estimación inicial sobre el espín-orbital que sea capaz de calcular v^{HF} y así poder resolver la ecuación de valores propios (Ec. 8) con un nuevo conjunto de espín-orbital. Este procedimiento se repite hasta que los campos no varíen y los espín-orbital empleados en el operador Fock sean iguales a sus funciones propias (Szabo & Ostlund, 1996).

2.1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer (BO)

Como se mostró anteriormente el Hamiltoniano molecular representa la energía de los núcleos y de los electrones presentes en una molécula (Ec. 2). Con el fin de dar solución a la energía total de manera simplificada y eficiente, se tienen diferentes aproximaciones; una de ellas es la aproximación de BO, que se basa en la diferencia entre las masas de los núcleos y los electrones.

Como los núcleos son más pesados que los electrones ($m_\alpha \gg m_e$), los núcleos se mueven mucho más lento que los electrones, por lo que bajo este hecho se puede considerar que los electrones en una molécula se mueven en un campo donde los núcleos se encuentran fijos, en estado estacionario (Levine, 2001). Por consiguiente, el término de energía cinética nuclear se desprecia, considerándolo cero, y el término de repulsión nuclear (\hat{V}_{NN}) se considera un valor constante, debido a que la variable \hat{V}_{NN} es independiente de las coordenadas electrónicas, dando lugar a la ecuación del Hamiltoniano puramente electrónico,

$$\hat{H}_{elec} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3)$$

$$\hat{H}_{elec} |\Phi_{elec}\rangle = E_{elec} |\Phi_{elec}\rangle \quad (4)$$

Al resolver la ecuación de valores propios, se obtiene la función de onda y la energía,

$$\Phi_{elec} = E_{elec}(\{r_i\}; \{R_A\}) \quad (5)$$

$$E_{elec} = E_{elec}(\{R_A\}) \quad (6)$$

Como se observa la energía electrónica depende paramétricamente de las coordenadas de los núcleos, y al incluir una constante a un operador esta solo va a adicionar valores propios del operador, obteniendo que al tomar diferentes valores para \hat{V}_{NN} en la ecuación de energía total (7) la solución de esta va a dar como resultado una superficie de energía potencial (PES).

$$E_{elec} = E_{elec} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (7)$$

donde el último término corresponde a \hat{V}_{NN} .

2.2. Base

Son un conjunto de vectores linealmente independientes, que se emplean para abarcar un espacio vectorial (Hoffman & Kunze, 1971, p. 41).

2.2.1. Orbitales de tipo Slater (STO)

Son orbitales atómicos caracterizados por los números cuánticos n , l , m y el exponente ζ que indica el tamaño radial de la función base. Estos describen el componente radial de las funciones. La representación matemática de STOs es,

$$\varphi_{nml}(r, \theta, \varphi) = N_{mlm\zeta} Y_{lm}(\theta, \varphi) r^{n-1} e^{-\zeta r} \quad (11)$$

con N como la constante de normalización, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ representando los armónicos esféricos, n es un número natural, ζ es la carga efectiva del núcleo y r la distancia entre el electrón y el núcleo.

El uso de este tipo de orbitales en química cuántica se ha dado para dar solución a problemas donde se calculan integrales multicéntricas (Harris y Michels) e integrales multicéntricas multielectrón (Majumdar et al., 2021). De igual forma, en cálculos semiempíricos los conjuntos de bases utilizados están compuestos por STOs y la implementación de estos orbitales en cálculos DFT ha sido efectivo para numerosas aplicaciones, entre ellas están: hallar energías de excitación y cálculos de estructuras moleculares simples.

2.2.2. Orbitales de tipo Gaussiano (GTO)

Son orbitales atómicos centrados en los átomos que se combinan linealmente con el propósito de crear orbitales moleculares (Zielinski et al., 2005), proporcionando una base que permite representar el orbital molecular. Los GTOs están descritos por los números cuánticos a , b y c y las coordenadas cartesianas x , y , z .

$$\chi_{abc}(r, \theta, \varphi) = N_{abca} x^a y^b z^c e^{-\alpha r^2} \quad (12)$$

Los números cuánticos a , b y c describen la forma angular y dirección del orbital; mientras que el exponente gaussiano α determina el tamaño radial de la función base.

2.3. Métodos GFNn-xTB

Son métodos semiempíricos que consisten en un conjunto de bases de valencia mínima de funciones gaussianas contraídas (GTO) centradas en el átomo que se aproximan a las funciones STO; estos emplean una base no ortogonal donde no se aplican aproximaciones del tipo ZDO

(superposición diferencial cero) (Bannwarth et al., 2021). Una ventaja que poseen estos métodos es que no utilizan correcciones del tipo FF (enlaces de hidrógeno o halógenos), sino que se basan en parámetros globales y específicos del elemento. Estos métodos están parametrizados para elementos hasta el radón, con número atómico $Z=86$. Además, los métodos GFNn-xTB introducen un tratamiento de temperatura electrónica con la finalidad de permitir que los enlaces covalentes se disocien (Bannwarth et al., 2021) y poder incorporar efectos de correlación electrónica.

Cabe resaltar que todos los métodos están formulados de tal manera que se encuentren restringidos al momento angular intrínseco, debido a que en los hamiltonianos no hay términos que dependan del espín y siempre se favorecerán las configuraciones de bajo giro (Bannwarth et al., 2021).

Los métodos GFNn-xTB se clasifican en GFN1-xTB, GFN2-xTB y GFN0-xTB. En este trabajo solo se evalúan los métodos GFN1-xTB y GFN0-xTB, debido a que al realizar los cálculos de optimización con GFN2-xTB no hubo convergencia del SCF, a pesar de ser la versión más sofisticada y que muestra buenos resultados para modelar sistemas similares a los estudiados (Bannwarth et al., 2021). Por lo anteriormente mencionado, no se tiene en cuenta el método GFN2-xTB para esta investigación.

2.3.1. GFN1-xTB

Este método es la primera versión de los métodos xTB y emplea las mismas aproximaciones de segundo y tercer orden utilizadas en DFTB3, pero evita parámetros específicos de pares de elementos, lo que permite una parametrización consistente (Bannwarth et al., 2021).

El cálculo de la energía viene dado por la siguiente expresión, donde las interacciones de dispersión se tratan en el modelo de dispersión D3, que al incluir términos de segundo y tercer orden debe resolverse de manera autoconsistente.

$$E_{\text{GFN1-xTB}} = E_{\text{rep}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{XB}} + E_{\text{EHT}} + E_{\gamma}^{(2)}(\text{IES+IXC}) + E_{\Gamma}^{(3)}(\text{IES+IXC}) \quad (13)$$

cuyos términos hacen referencia a la energía de repulsión, la energía de dispersión, la corrección de los enlaces halógeno XB, la energía isotrópica γ y el último término es la corrección electrostática XC. Además, la energía EHT (E extendida tipo Hückel) calculada dentro de la ecuación (13), es la principal responsable de la unión covalente, proporcionando un equilibrio entre los efectos de corto y largo alcance.

2.3.2. GFN0-xTB

Con el propósito de evitar las iteraciones de carga autoconsistente que implican la diagonalización repetida de la matriz (Bannwarth et al., 2021), se formuló una variante a los métodos xTB anteriores (GFN1-xTB y GFN2-xTB), que no tiene en cuenta términos de expansión de unión estrecha más allá del primer orden. Siendo el método más empírico de la familia GFNn-xTB.

La energía en GFN0-xTB tiene en cuenta las interacciones de dispersión a través del modelo D4, con la diferencia de que el término de tres cuerpos no se tiene en cuenta. La ecuación de energía es,

$$E_{\text{GFN0-xTB}} = E_{\text{rep}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{EEQ}} + E_{\text{EHT}} + E_{\text{Srb}} \quad (14)$$

Para este método se incluyen dos términos nuevos, uno que corresponde a un potencial por pares que se encarga de corregir los enlaces de corto alcance (E_{Srb}) entre pares heteroatómicos,

mejorando la descripción de los enlaces covalentes, y el segundo (E_{EEQ}) que incorpora cargas atómicas semiclásicas, donde mediante la implementación del modelo de carga atómica de electronegatividad-equilibrio (EEQ) se toman las cargas parciales con la restricción de que la carga total se conserva (Bannwarth et al., 2021). Asimismo, no aplica correcciones empíricas o específicas de pares de elementos para los enlaces de hidrógeno y halógenos.

En comparación con los campos de fuerza (FF), GFN0-xTB no depende de la información de enlace y puede aplicarse a un sistema con cualquier estructura inicial, lo que no es posible con los FF, ya que estos requieren como mínimo información de pares de enlace (Pracht et al., 2019).

2.4. Método GFN-FF

Consiste en un campo de fuerza que combina la velocidad de los FF (*Force Field*) con una precisión mecánica casi cuántica. Este método maneja un método clásico, el modelo EEQ; empleando dos conjuntos, uno que depende de la geometría estándar y otro que se basa en la topología. GFN-FF reemplaza la teoría del tipo de Hückel extendido, utilizada en GFN0-xTB, por términos clásicos de enlace, ángulo y torsión para describir enlaces covalentes (Spicher & Grimme, 2020), sin embargo, en sistemas conjugados conserva el esquema iterativo de Hückel para un conjunto determinado de átomos.

Para el cálculo de la energía total, GFN-FF utiliza una estrategia de parámetros globales y específicos de cada elemento, donde los términos de energía potencial se forman automáticamente a partir de las coordenadas cartesianas y la composición elemental, obteniendo que la energía en GFN-FF es,

$$E = E_{\text{COV}} + E_{\text{NCI}} \quad (15)$$

con términos designados a las interacciones covalentes y no covalentes intra e intermoleculares. La energía covalente, aparte de tener en cuenta los términos de enlace, ángulo y torsión, también introduce términos repulsivos para las interacciones ligadas y no ligadas por separado (Spicher & Grimme, 2020).

$$E_{\text{COV}}=E_{\text{bond}}+E_{\text{bend}}+E_{\text{tors}}+E_{\text{repbond}}+E_{\text{abcbond}} \quad (16)$$

Por otra parte, para las interacciones no covalentes, el modelo EEQ permite calcular la energía electrostática isotrópica y las cargas atómicas parciales. En cuanto a los enlaces de hidrógeno y halógenos se aplican correcciones que permiten describir de manera precisa este tipo de enlaces.

$$E_{\text{NCI}}=E_{\text{IES}}+E_{\text{disp}}+E_{\text{HB}}+E_{\text{XB}}+E_{\text{repNCI}} \quad (17)$$

2.5. Métodos DFT

La teoría del funcional de la densidad es un método de modelado de mecánica cuántica que permite determinar las propiedades de un sistema a través del uso de funcionales. Los teoremas propuestos por Khon y Hohenberg (Hohenberg & Kohn, 1964) establecen que las propiedades del estado fundamental de un sistema se pueden calcular mediante la densidad electrónica, sin embargo, más adelante, Khon y Sham (Kohn & Sham, 1965) determinaron que la densidad electrónica es una sumatoria de orbitales moleculares que se resuelven a través de ecuaciones autoconsistentes, determinando que la energía del estado fundamental es un funcional de la densidad electrónica $\rho(r)$.

Para el cálculo del Hamiltoniano del sistema este viene dado por,

$$H=T+U+V \quad (18)$$

Con T y U como operadores de la interacción electrón – electrón y de la energía cinética (Bagayoko, 2014). Por otra parte, para la energía total se tiene la siguiente expresión,

$$E=T_s+U+V_{\text{nuc}}+E_{\text{XC}[\rho]} \quad (19)$$

donde T_s corresponde a la energía cinética de los orbitales KS, V_{nuc} a la atracción con el núcleo, U el término de la interacción e-e (energía de Coulomb) y $E_{\text{XC}[\rho]}$ incluye las contribuciones de intercambio y correlación (Burke, 2012). La ecuación de Kohn-Sham se deriva de las ecuaciones de Hartree-Fock al incluir el potencial de intercambio y correlación.

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) + V_{\text{XC}}(r) \right] \varphi_i^K = \varepsilon_i^K \varphi_i^K \quad (20)$$

Con $V(r)$ representando la forma del potencial (FP: *full potential*, MT: *Muffin-tin*, PP: *pseudopotencial*), V_{XC} el funcional de intercambio y correlación y φ_i^K la función base (Bagayoko, 2014).

Dentro de los funcionales (DFT) que se van a utilizar en el presente trabajo de investigación se tienen B97-3c, PBE-D3 y PBEh-3c, de los cuales los dos últimos parten de la forma funcional PBE.

2.5.1. Funcionales

2.5.1.1. B97-3c

Este funcional se basa en el *ansatz* de Becke, donde los orbitales se expanden en un conjunto modificado de bases gaussianas de valencia triple-zeta y las interacciones de dispersión son representadas a través del modelo estándar D3 (Brandenburg et al., 2018). La energía Kohn-Sham total se calcula con la siguiente ecuación,

$$E_{\text{tot}}^{(\text{D3})} = E_{\text{tot}}^{\text{mB97}} + E_{\text{D3}} + E_{\text{srb}} \quad (21)$$

El término mB97 hace referencia al ajuste que se le hace al término E_{XC}^{B97} con el conjunto de bases triple zeta (mTZVP). Cabe resaltar que los métodos -3c poseen un menor costo computacional en comparación con otros funcionales sin perder precisión en los resultados.

2.5.1.2. PBE-D3

Es un funcional que utiliza las interacciones de dispersión que se encuentran mediante el método D3 y se basa en el método de Perdew-Burke-Emzerhof (PBE) (Perdew et al., 1996). La energía de dispersión viene dada por,

$$E_{\text{DFT-D3}} = E_{\text{KS-DFT}} - E_{\text{disp}} \quad (22)$$

Donde $E_{\text{KS-DFT}}$ es la energía KS (Kohn-Sham) y la energía de dispersión:

$$E_{\text{disp}} = E^{(2)} + E^{(3)} = \sum_{AB} \sum_{n=6,8,10,\dots} S_n \frac{C_n^{AB}}{r_{AB}^n} f_{\text{dn}}(r_{AB}) + \sum_{AB} f_{\text{d,(3)}}(\bar{r}_{ABC}) E^{ABC} \quad (23)$$

La cual incluye en el término $E^{(2)}$: el coeficiente de dispersión isotrópico para el par atómico AB (C_n^{AB}), la distancia entre núcleos (r_{AB}) y los factores de escala globales S_n , con $n > 6$ que garantiza la exactitud asintótica. En $E^{(3)}$ E^{ABC} corresponde al término de dispersión del triple dipolo y \bar{r}_{ABC} es el promedio geométrico de los radios (Grimme et al., 2010).

2.5.1.3. PBEh-3c

Es un funcional híbrido que trabaja con un conjunto de bases gaussianas, la energía del sistema se halla introduciendo dos términos con el propósito de corregir la energía DFT (E^{PBEh}), incluyendo la dispersión de largo alcance y el término de pares de átomos.

$$E_{\text{tot}}^{(\text{PBEh-3c})} = E_{\text{tot}}^{\text{PBEh}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{BSSE}}^{\text{damped gCP}} \quad (24)$$

En la ecuación (24), la energía de dispersión de London se calcula por el modelo D3 y el último término establece los esquemas de corrección gCP (contrapeso geométrico) por pares de átomos (Grimme et al., 2015).

2.6. Error de superposición de bases (BSSE)

El uso de orbitales atómicos con el fin de expandir los orbitales moleculares da lugar al error en cálculos de sistemas poliatómicos, ya que el conjunto de bases utilizado no está completo, por lo tanto, al realizar cálculos computacionales los datos obtenidos no representan las características reales del sistema.

Al describir la distribución de electrones de un complejo AB, las funciones base de A ayudan a disminuir la energía de B y viceversa (Neese, 2022). Lo anterior se da porque se crea un sesgo en la energía hacia la formación del complejo, debido a que a grandes distancias intermoleculares los monómeros (A y B) están demasiado lejos y sus funciones no proporcionan estabilización, ya que no son capaces de acceder a las funciones adicionales del otro monómero. Lo anterior explica el BSSE. Por ende, el error de superposición de bases implica que la energía del complejo sea menor a la esperada.

Una solución al error de superposición de bases (BSSE) es el método de contrapeso (CP) propuesto por Boys & Bernardi (Fodil et al., 2017), el cual estima mediante aproximaciones el tamaño del BSSE. El método de contrapeso consiste en computar no solo el sistema de interés, sino también sus fragmentos en el conjunto de bases del sistema completo.

La ecuación para la energía de interacción entre dos fragmentos A y B está dada por,

$$\Delta E = E_{AB}^{AB}(AB) - E_A^A(A) - E_B^B(B) \quad (25)$$

La energía de interacción formulada por Boys & Bernardi (ΔE^{CP}) introduce 4 términos de energía en la ecuación (25),

$$\Delta E^{CP} = \left[E_{AB}^{AB}(AB) - E_A^A(A) - E_B^B(B) \right] + \left[E_{AB}^A(A) - E_{AB}^{AB}(A) \right] + \left[E_{AB}^B(B) - E_{AB}^{AB}(B) \right] \quad (26)$$

Las energías $E_A^A(A)$, $E_B^B(B)$ y $E_{AB}^{AB}(AB)$ corresponden a las energías obtenidas con los cálculos de optimización de los monómeros A y B y el dímero AB. La notación $E_{AB}^Z(X)$ representa el valor de la energía del fragmento X calculado en la geometría optimizada de Y con el conjunto de bases de Z (Neese, 2022).

La corrección de contrapeso (CP) se utiliza cuando hay una baja interacción energética, siendo esta más pequeña que la energía total de los fragmentos (Fodil et al., 2017), como es el caso de complejos que están débilmente limitados. Es importante tener en cuenta los efectos producidos por el conjunto de bases, ya que como se mencionó estas pueden inducir a errores significativos en el cálculo de las energías de un sistema.

3. Metodología

3.1. Selección del parámetro *SmearTemp*

El parámetro *SmearTemp* permite el ensanchamiento térmico de la ocupación de los orbitales moleculares, haciendo un barrido del número de ocupaciones tipo Fermi sobre los orbitales del sistema (Basiuk et al., 2020), en otras palabras, hace una distribución de los electrones según la estadística Fermi entre los orbitales disponibles. Por consiguiente, se implementó este parámetro en los cálculos de optimización con el propósito de acelerar la convergencia del campo autoconsistente SCF.

Con el fin de determinar el valor mínimo a utilizar se tomaron diferentes valores de *SmearTemp* para cada funcional y se aumentó progresivamente la temperatura en 100 K. El valor mínimo de convergencia para el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP fue 2900 K y el máximo fue de 3500 K, por encima de este valor el campo auto consistente no convergía. Para B97-3c/def2-TZVP el valor mínimo de *SmearTemp* fue de 3100 K y el máximo 3500 K. Al analizar el nivel de teoría PBEh-3c/def2-SVP, el valor mínimo que permitía que la optimización de la estructura convergiera fue 4000 K. De manera que, se estableció el valor de 3100 K para PBE-D3 y B97-3c, ya que era el valor de *SmearTemp* mínimo para estos funcionales y 4000 K para PBEh-3c, debido a que, tomando valores inferiores a este, el archivo de salida reportaba un error en el campo auto consistente (SCF).

3.2. Optimización de la geometría de la nanopartícula, de las moléculas y de los complejos

Las coordenadas de la nanopartícula de (Cu₅₅) se tomaron de la referencia Piotrowski et al., 2016 y las de las moléculas se obtuvieron con el software Avogadro 2 (Hanwell et al., 2012).

Posteriormente se hicieron optimizaciones de la nanopartícula de cobre (Cu_{55}), el 2-propanol, el 2-aminopropano y el 2-propanotiol con los funcionales: PBEh-3c, PBE-D3 y la base def2-SVP y con el B97-3c (que incluye la base def2-TZVP). De igual forma, se optimizaron con los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB y el campo de fuerza GFN-FF.

Los complejos se construyeron a partir de los sistemas previamente optimizados. Se optimizaron los complejos utilizando los funcionales DFT establecidos y con GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF. Seguido se realizaron cálculos de frecuencias para la nanopartícula de Cu_{55} , las moléculas y los complejos.

Los parámetros establecidos para estos cálculos fueron: multiplicidad de espín 1 para las moléculas y multiplicidad de espín 2 para la nanopartícula de cobre Cu_{55} y los tres complejos. En cada caso la carga fue cero. Para GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF se implementó el uso de –UHF, número de electrones no apareados, con un valor de 1 para la nanopartícula y cada uno de los tres complejos y cero para cada una de las moléculas.

3.3. Cálculos para determinar el error de superposición de bases con PBE-D3/def2-SVP

Utilizando el método de contrapeso (CP) (Boys & Bernardi, 1970) se realizó la corrección del error de superposición de bases para el funcional PBE-D3. El procedimiento empleado para obtener ΔE^{CP} fue el propuesto en Orca (Neese, 2022). Una vez optimizados la nanopartícula Cu_{55} (A), las moléculas (B) y los complejos (AB); se obtienen los valores de $E_A^A(A)$, $E_B^B(B)$ y $E_{AB}^{AB}(AB)$ respectivamente. Para hallar $E_{AB}^A(A)$ y $E_{AB}^B(B)$ se usó la geometría de A y B en el dímero (AB) y la base de A y B según sea el caso. Para las energías $E_{AB}^{AB}(A)$ y $E_{AB}^{AB}(B)$ se utilizó la geometría de las moléculas orgánicas A y B, con la base AB y en la geometría del complejo AB.

3.4. Cálculo de las energías de interacción y comparación de los métodos

Se calcularon las energías de interacción ($\Delta E = E_{\text{complejo}} - E_{\text{NP}} - E_{\text{molécula}}$) utilizando las energías de la nanopartícula, de las moléculas y de los 3 complejos. Las energías obtenidas con los métodos -3c, los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB y el campo de fuerza GFN-FF se compararon con los resultados obtenidos con el funcional PBE-D3 para las energías de interacción corregidas con la corrección de contrapeso (CP).

3.5. Análisis de resultados

Dentro de los resultados obtenidos para los complejos: Cu₅₅NP-2-propanamina, Cu₅₅NP-2-propanol y Cu₅₅NP-2-propanotiol, se calcularon las energías de interacción [kcal/mol], las longitudes de enlace [Å], ángulos [°] y ángulos diedros [°]. Para la evaluación de la calidad de los resultados obtenidos con el campo de fuerza GFN-FF, los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB y los obtenidos con los funcionales PBEh-3c y B97-3c se compararon con los obtenidos con PBE-D3/def2-SVP (CP).

4. Resultados

En el siguiente capítulo se presentarán los resultados obtenidos, comenzando con las energías de interacción y seguido de los parámetros geométricos. Los sistemas estudiados son complejos conformados por una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP), con geometría icosaédrica, y moléculas orgánicas como: 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol.

En este trabajo se busca determinar qué tan buenos son los métodos semiempíricos (GFN1-xTB y GFN0-xTB), el campo de fuerza GFN-FF y el funcional B97-3c, para modelar interacciones con nanopartículas metálicas de cobre (Cu_{55}NP), para ello se tomaron como referencia los cálculos y geometrías obtenidas con el funcional PBDE-D3 y la base def2-SVP. Esta base proporciona funciones de polarización en todos los átomos, además de una función de polarización adicional.

4.1. Energías de interacción y el error de superposición de bases (BSSE)

En la Tabla 1 a las energías de interacción (ΔE) obtenidas con PBE-D3/def2-SVP se les aplicó la corrección del error de superposición de bases (BSSE), obteniendo la energía de interacción corregida (ΔE^{cp}). Se utilizó el método de contrapeso propuesto por Boys & Bernardi (Ec. 26) para la corrección del BSSE. Por otra parte, las energías registradas en la Tabla 1, corresponden a las calculadas con los funcionales PBE-D3 y B97-3c y los métodos GFN0-xTB y GFN1-xTB para una *SmearTemp* de 3100 K; los cálculos realizados con el funcional PBEh-3c se evaluaron a 4000 K.

Las geometrías optimizadas con GFN0-xTB para los complejos entre la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y las moléculas orgánicas 2-propanamina y el 2-propanol difieren a la estructura del archivo de entrada, observando interacciones entre diferentes átomos de la molécula orgánica

con la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) (ver Apéndice F). Por ende, las energías de interacción difieren a las obtenidas con PBE-D3/def2-SVP, ya que no se trata de la misma estructura, las estructuras optimizadas convergen en diferentes geometrías, por lo que no son comparables entre sí. Sin embargo, las estructuras de la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y de las moléculas de 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol sí convergen en geometrías que coinciden con las estructuras optimizadas con PBE-D3 (ver Apéndice G).

Tabla 1

Energías de interacción [kcal/mol] para los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP con BSSE y la energía de interacción corregida (ΔE^{CP}) con el método de corrección de contrapeso (CP), B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K) y PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K) y los métodos GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF.

| Complejo | ΔE [kcal/mol] | | | | | | |
|--|-----------------------|------------------|---------|--------|-----------|----------|---------|
| | PBE-D3 con BSSE | PBE-D3 con CP | PBEh-3c | B97-3c | GFN0-xTB | GFN1-xTB | GFN-FF |
| Cu_{55}NP -2-propanamina | -36.14 | -24.87* | -37.50 | -30.05 | (6.48)** | -29.75** | -9.75** |
| Cu_{55}NP -2-propanol | -27.14 | -14.98* | -33.24 | -19.98 | (4.84)** | -25.87** | -3.23** |
| Cu_{55}NP -2-propanotiol | -32.26 | -19.93* | -34.51 | -29.07 | (-6.72)** | -36.00** | -0.15** |

* Energías de interacción corregidas (ΔE^{CP}).

** Complejos que son un mínimo, con frecuencias vibracionales positivas.

() Geometrías no comparables con PBE-D3/def2-SVP.

El error de superposición de bases (BSSE) obtenido con el método PBE-D3 corresponde al 31% del valor de la energía de interacción (ΔE) para el complejo Cu_{55}NP -2-propanamina, al 45% para el Cu_{55}NP -2-propanol y a un 38% para el Cu_{55}NP -2-propanotiol. Además, se corrobora el efecto del error de superposición de bases (BSSE) sobre la energía de interacción, observando

que después de aplicar la corrección de contrapeso (CP) las energías son menos negativas que las energías de interacción ΔE calculadas inicialmente.

Con el propósito de evitar la presencia de energías positivas en el cálculo de energías de interacción con los métodos GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF se utilizó el nivel de optimización *verytight*, el cual permite establecer umbrales específicos para la convergencia de la energía, en este caso el nivel implementado optimiza la geometría hasta que el cambio en la energía total sea inferior a 1×10^{-7} Eh (Geometry Optimization — xtb doc 2023 documentation, s. f.); al no usar este criterio en los cálculos se observó un aumento en la energía de interacción, por ejemplo para el complejo Cu₅₅NP-2-propanamina la energía fue de 22.52 kcal/mol. Por otra parte, los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB tienen en cuenta el término de temperatura electrónica (T_{el}) en el Hamiltoniano, el cual utiliza el ensanchamiento de Fermi (Singlepoint Calculations — xtb doc 2023 documentation, s. f.). El valor de la temperatura electrónica se estableció en 3100 K para que los cálculos obtenidos fuesen comparables con los funcionales PBE-D3 y B97-3c. En los cálculos de energía del complejo Cu₅₅NP-2-propanamina donde no se utilizó el parámetro de temperatura electrónica la energía de interacción fue mayor, con un valor de 31.45 kcal/mol.

A pesar de los criterios aplicados las energías obtenidas con el método GFN0-xTB presentan valores positivos (energías de interacción repulsivas) para los complejos Cu₅₅NP-2-propanamina y Cu₅₅NP-2-propanol (Tabla 1), esto se debe a que GFN0-xTB al ser un método no autoconsistente evita las iteraciones de carga, lo que implica que la precisión al describir las interacciones electrostáticas va a ser menor. Además, GFN0-xTB no aplica correcciones empíricas de pares de electrones, ni incorpora efectos electrostáticos de primer orden producidos por átomos vecinos (Bannwarth et al., 2021); en su lugar emplea un modelo clásico desacoplado de carga de equilibrio de electronegatividad (EEQ) con el fin de obtener cargas atómicas parciales e

implementarlas indirectamente en el Hamiltoniano (Pracht et al., 2019), lo que se traduce en un menor costo computacional en los cálculos de optimización, pero no explica correctamente los efectos electrostáticos, produciendo imprecisiones en las energías de interacción calculadas. De igual forma, la falta de iteración hasta que se dé la convergencia da lugar a que la estructura no se optimice por completo.

Respecto a las energías obtenidas con GFN1-xTB, para los complejos entre la nanopartícula metálica y la 2-propanamina, el 2-propanol y el 2-propanotiol se presentan diferencias de 4.88, 10.89 y 16.07 kcal/mol respectivamente, en comparación con el funcional de referencia PBE-D3. Por otra parte, con el campo de fuerza GFN-FF las diferencias fueron de 15.12, 11.75 y 19.78 kcal/mol para los complejos Cu₅₅NP-2-propanamina, Cu₅₅NP-2-propanol y Cu₅₅NP-2-propanotiol.

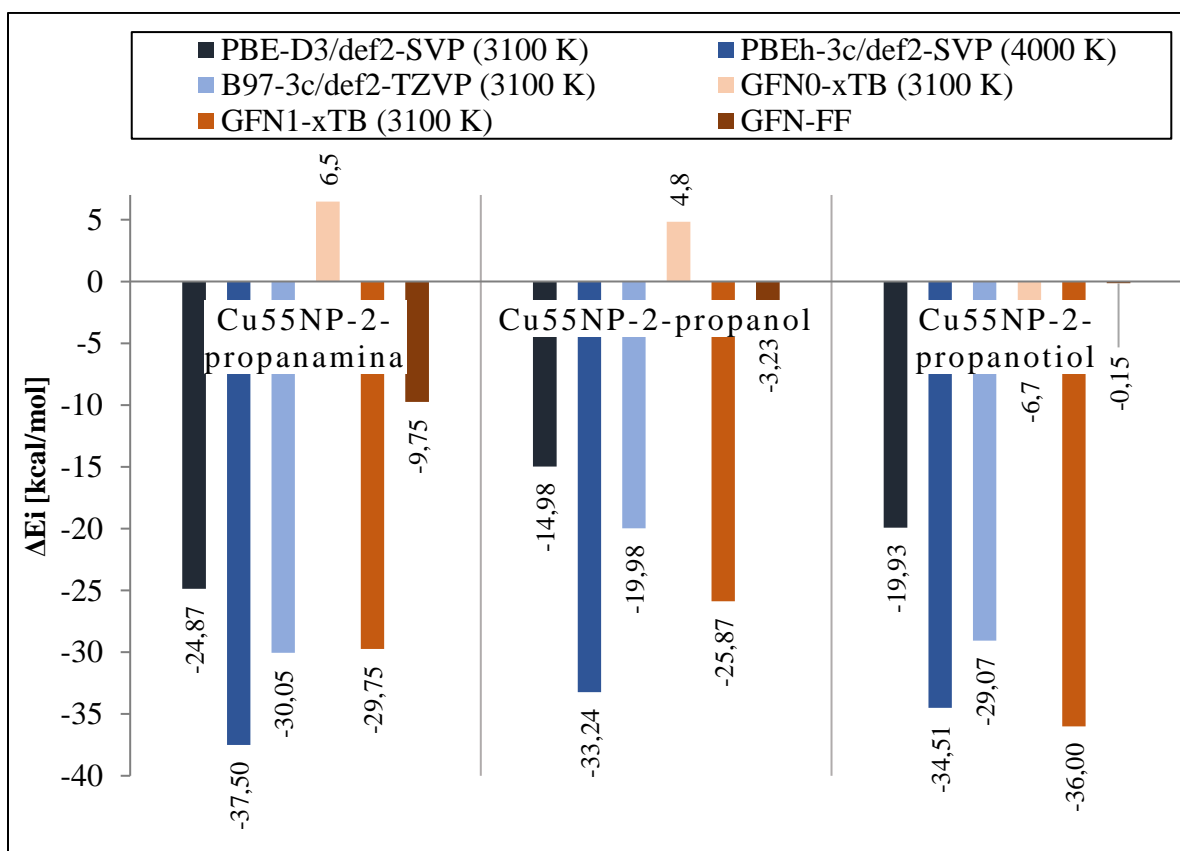
Con base en lo anterior, para el complejo Cu₅₅NP-2-propanamina dentro de los métodos DFT evaluados, B97-3c es el que muestra resultados más cercanos a PBE-D3 con la corrección de contrapeso (CP), con una diferencia de 5.18 kcal/mol. Además, entre el método semiempírico y el campo de fuerza, GFN1-xTB es el que obtiene valores de la energía de interacción con menor diferencia a los calculados con PBE-D3.

En cuanto al complejo entre la nanopartícula de cobre Cu₅₅NP y el 2-propanol, con B97-3c se obtienen cálculos con valores similares de energía a PBE-D3, siendo PBEh-3c el método que presenta mayor diferencia en la energía de interacción; con relación a los métodos evaluados, GFN1-xTB es el más cercano a la energía de interacción corregida obtenida con PBE-D3, no obstante, en comparación con GFN-FF la diferencia entre las energías de interacción calculadas con el método semiempírico es de 0.86 kcal/mol, por lo que no existe una diferencia significativa entre estos métodos para el cálculo de la energía de interacción del complejo Cu₅₅NP-2-propanol.

Por último, para el complejo Cu_{55}NP -2-propanotiol con B97-3c se obtuvo una diferencia en las energías de 9.14 kcal/mol y PBEh-3c de 14.58 kcal/mol respecto a las obtenidas con PBE-D3, teniendo que B97-3c y GFN1-xTB fueron los métodos que presentaron menor diferencia con los valores de energía de interacción calculados con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP.

Figura 1

Energías de interacción [kcal/mol] para los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP (CP), B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K) y PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K) y los métodos GFN1-xTB, GFN0-xTB y GFN-FF.



Como se puede observar en la Figura 1 de los métodos de interés el campo de fuerza GFN-FF es el que más se aleja de los valores de energías de interacción obtenidas con los funcionales DFT (PBE-D3 y B97-3c). Esto se debe a que en el campo de fuerza no se tienen en cuenta interacciones como el acoplamiento espín-orbita (Jha & Heine, 2023) y las polarizaciones

isotrópicas explícitas, que mejoran el transporte de electrones en complejos con metales de transición, que GFN1-xTB sí implementa en el operador hamiltoniano. Asimismo, GFN1-xTB incluye la técnica de *fermi smearing* en el término de energía electrónica (E_{el}), permitiendo tratar sistemas con pequeñas brechas HOMO-LUMO como los complejos con metales de transición (Grimme et al., 2017). Por tanto, el método semiempírico no disocia o reorganiza el complejo significativamente. De igual forma, GFN-FF incluye parametrizaciones para cada uno de los elementos, lo que explica la variabilidad entre los cálculos de energía al cambiar de grupo funcional.

4.2. Frecuencias vibracionales

Se calcularon las frecuencias vibracionales tanto para el Cu_{55} como para cada una de las moléculas y complejos. Por consiguiente, para la nanopartícula de cobre Cu_{55} se tomaron las coordenadas proporcionadas en el trabajo de Piotrowski, que corresponde a una nanopartícula de 55 átomos de cobre, y para las moléculas evaluadas (2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol) se obtuvieron frecuencias positivas con cada uno de los funcionales y métodos.

Al realizar el cálculo de frecuencias vibracionales de los complejos se presentaron inconvenientes de convergencia y se tuvieron que cambiar los parámetros establecidos; implementando una cuadrícula de integración mucho más densa (defgrid3) que la predeterminada por Orca (defgrid2), permitiendo que se manejen errores numéricos, ya que al aumentar la cuadrícula hay menor espacio entre los puntos de esta y al ser una malla 3D describe con mayor precisión la densidad electrónica debido a la dimensión extra que posee (*ORCA Input Library - Numerical precision*, s. f.). Además, se aumentó el criterio de convergencia SCF, con el fin de bajar los umbrales de optimización de la geometría y así tener mayor seguridad de que converja a

un mínimo. Lo anterior también se realizó con la finalidad de reducir la presencia de modos vibracionales imaginarios. Sin embargo, con el nivel de teoría PBEh-3c/def2-SVP no se pudo realizar el cálculo de frecuencias.

Tabla 2

Frecuencias vibracionales imaginarias [cm^{-1}] obtenidas con los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol.

| Complejo | Funcional | Frecuencia vibracional imaginaria [cm^{-1}] |
|--|-----------|--|
| Cu_{55}NP -2-propanamina | PBE-D3 | -15.77 |
| | | -27.15 |
| | B97-3c | -17.33 |
| | | -11.53 |
| Cu_{55}NP -2-propanol | PBE-D3 | -16.57 |
| | | -19.41 |
| | B97-3c | -16.56 |
| Cu_{55}NP -2-propanotiol | PBE-D3 | -20.80 |
| | | -30.04 |
| | B97-3c | -17.09 |

Con relación a los niveles de teoría PBE-D3/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP, se encontraron frecuencias vibracionales negativas para los tres complejos, no obstante, estos modos vibracionales imaginarios se encuentran por debajo de 100 cm^{-1} (Tabla 2). Por otra parte, con los métodos semiempíricos GFN0-xTB y GFN1-xTB y el campo de fuerza GFN-FF no se presentaron frecuencias imaginarias (ver Apéndices C, D y E).

4.3. Parámetros geométricos de los complejos

Las coordenadas de las estructuras optimizadas con PBE-D3/def2-SVP se utilizaron para el archivo de entrada de los demás funcionales DFT, métodos semiempíricos y el campo de fuerza. Con GFN0-xTB las estructuras experimentan una reorganización de los átomos respecto a la estructura inicial, creando interacciones para Cu₅₅NP-2-propanamina entre el hidrógeno del grupo -C₃H₃ con la nanopartícula metálica. Con el Cu₅₅NP-2-propanol la interacción se da entre los hidrógenos del C₁ y C₂ y los átomos de cobre de la nanopartícula metálica. Por último, el complejo con el grupo tiol formó interacciones entre el azufre del grupo -SH y el Cu₅₅, y entre los hidrógenos del C₁ y C₃ y la nanopartícula. De acuerdo con lo anterior, las geometrías optimizadas con GFN0-xTB no son comparables a las geometrías calculadas con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP, debido a que son estructuras diferentes.

Teniendo en cuenta lo mostrado en la Tabla 3, se observa que con respecto a PBE-D3 las longitudes de enlace presentan una variabilidad no mayor a ± 0.1 Å. Sin embargo, para los ángulos y ángulos diedros se observa un mayor cambio entre los valores. Los ángulos negativos calculados se dan por los pequeños cambios en las posiciones atómicas y la ambigüedad que se presenta en la definición de los ángulos para las disposiciones lineales de los átomos.

Como se menciona anteriormente, los valores calculados con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP se tomaron como referencia, por consiguiente, con el método semiempírico GFN1-xTB se obtuvo una diferencia no mayor a 0.05 Å en las longitudes de enlace Cu-O y Cu-S, pero para el enlace Cu-N la variación fue de 0.12 Å; el ángulo \angle Cu-S-C₂ difiere en 4.5 °. En cuanto a los ángulos diedros, GFN1-xTB mostró mejores resultados para los complejos Cu₅₅NP-2-propanol y Cu₅₅NP-2-propanotiol, variando en 0.7 ° y 1.5 ° respectivamente, mientras que con GFN-FF fue

de 10.34 ° y 15.27 °. Las longitudes de enlace Cu-N, Cu-O y Cu-S calculadas con el campo de fuerza GFN-FF difieren en 0.04 Å, 0.08 Å y 0.09 Å respectivamente y los ángulos \angle Cu-N-C₂ y \angle Cu-O-C₂ varían en 1.90 ° y 2.00 ° en comparación con la referencia. Con el ángulo diedro \angle Cu-N-C₂-C₁ obtenido con GFN-FF la diferencia fue de 8.33 °.

Con el funcional PBEh-3c se presentan diferencias de 0.09 Å, 0.02 Å y 0.05 Å en el cálculo de las longitudes de enlace Cu-N, Cu-O y Cu-S respectivamente, por el contrario, con B97-3c se obtuvieron diferencias de 0.02 Å, 0.02 Å y 0.06 Å. Por otra parte, los ángulos \angle Cu-N-C₂, \angle Cu-O-C₂ y \angle Cu-S-C₂ calculados con PBEh-3c difieren en 5.24 °, 12.21 ° y 2.77 ° y los ángulos diedros \angle Cu-N-C₂-C₁, \angle Cu-O-C₂-C₁ y \angle Cu-S-C₂-C₁ en 6.80 °, 105.76° y 106.45° con respecto a la referencia. Los valores obtenidos con B97-3c no varían en más de 3 ° para los ángulos y 2 ° para los ángulos diedros respecto a PBE-D3.

Tabla 3

Distancias de enlace [Å], ángulos de enlace [°] y ángulos diedros [°] de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculados con PBE-D3/def2-SVP, PBEh-3c/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP, GFN1-xTB y GFN-FF. Con el parámetro SmearTemp de 3100 K y 4000 K para PBEh-3c.

| Complejo | | Funcional / Método | | | | |
|-----------------------------------|--|--------------------|---------|--------|----------|--------|
| | | PBE-D3 | PBEh-3c | B97-3c | GFN1-xTB | GFN-FF |
| Cu ₅₅ NP-2-propanamina | Cu-N | 2.07 | 2.16 | 2.05 | 2.18 | 2.03 |
| | \angle Cu-N-C ₂ | 112.08 | 117.32 | 113.82 | 119.23 | 113.98 |
| | \angle Cu-N-C ₂ -C ₁ | 165.35 | 172.16 | 167.24 | 177.08 | 173.68 |
| Cu ₅₅ NP-2-propanol | Cu-O | 2.12 | 2.15 | 2.11 | 2.15 | 2.04 |
| | \angle Cu-O-C ₂ | 111.79 | 124.00 | 112.79 | 124.42 | 113.78 |
| | \angle Cu-O-C ₂ -C ₁ | 163.76 | 58.01 | 163.13 | 165.27 | 174.10 |
| Cu ₅₅ NP-2-propanotiol | Cu-S | 2.34 | 2.39 | 2.28 | 2.39 | 2.25 |
| | \angle Cu-S-C ₂ | 104.11 | 106.89 | 106.67 | 108.63 | 98.39 |
| | \angle Cu-S-C ₂ -C ₁ | 67.33 | -173.79 | 67.77 | 66.65 | 82.60 |

Con base en lo anterior, para describir la estructura del Cu₅₅NP-2-propanamina el funcional B97-3c y GFN-FF fueron los más cercanos a PBE-D3, pero para el Cu₅₅NP-2-propanotiol y Cu₅₅NP-2-propanol GFN1-xTB y B97-3c fueron los de menor desviación.

En resumen, dentro de los métodos de interés en comparación con el funcional DFT de referencia, GFN1-xTB tiende a aumentar las distancias entre las longitudes de los enlaces Cu-N, Cu-O y Cu-S, en cambio GFN-FF muestra una ligera disminución en estas; estas variaciones en las longitudes de enlace se encuentran en un rango entre 0.03 y 0.11 Å. Por otra parte, en cuanto a los ángulos y ángulos diedros se observa que para los complejos entre la nanopartícula de cobre Cu₅₅NP y las moléculas 2-propanamina y 2-propanol, GFN1-xTB y GFN-FF presentan un aumento en los valores calculados respecto a los obtenidos con PBE-D3 y para el complejo Cu₅₅NP-2-propanotiol con GFN1-xTB el ángulo \angle Cu-S-C₂ es mayor al obtenido con PBE-D3 y el ángulo diedro disminuye en 0.68 °; en cambio con GFN-FF el ángulo \angle Cu-S-C₂ es menor y el ángulo diedro \angle Cu-S-C₂-C₁ aumenta.

En conclusión, para el cálculo de energías de interacción y optimización de geometrías, de los métodos de interés, GFN1-xTB mostró resultados con menor variabilidad y más cercanos al nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP, sin embargo, B97-3c fue el funcional que obtuvo resultados más exactos.

4.4. Costo computacional

Los valores registrados en la Tabla 4 corresponden al tiempo de cómputo empleado para la optimización de la geometría de los diferentes complejos en un procesador Intel Xeon E5-2687W v2. Todos los cálculos se hicieron usando 16 procesadores y el parámetro %maxcore 8000, con el fin de utilizar un total de memoria de 128 GB. Cabe resaltar, que con los niveles de teoría

PBE/def2-SVP y B97-3c/def2-TZVP se hicieron cálculos integrados de optimización y frecuencias vibracionales, no obstante, para que los datos sean comparables, al tiempo total de ejecución se le restó el tiempo correspondiente a los cálculos analíticos de frecuencia. Por otra parte, con el nivel de teoría PBEh-3c/def2-SVP y con GFN0-xTB, GFN1-xTB y GFN-FF se registraron los tiempos correspondientes a los cálculos de optimización de las geometrías.

Con los métodos evaluados, los cálculos de optimización de geometrías se demoran segundos para que el SCF converja. Dentro de estos métodos, el campo de fuerza GFN-FF es el que presenta un menor tiempo de cómputo en el cálculo de la optimización de las geometrías para cada uno de los complejos, seguido por GFN0-xTB y, por último, se tiene el método semiempírico GFN1-xTB. El nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP presenta un tiempo de cálculo promedio por ciclo más alto en comparación con el campo de fuerza, con un orden de magnitud 9.5 veces mayor que con GFN-FF. Sin embargo, el funcional B97-3c es el que presenta un tiempo promedio de cálculo mayor.

Tabla 4

Análisis del costo computacional para las optimizaciones de las geometrías de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB. Ciclos de optimización.

| Complejo | PBE-D3/ def2-SVP | | PBEh-3c/ def2-SVP | | B97-3c/ def2-TZVP | | GFN0-xTB | | GFN1-xTB | | GFN-FF | |
|-----------------------------------|---------------------|---------|----------------------|----------|----------------------|---------|----------|---------|----------|---------|--------|---------|
| | Ciclos | s/ciclo | Ciclos | s/ciclo | Ciclos | s/ciclo | Ciclos | s/ciclo | Ciclos | s/ciclo | Ciclos | s/ciclo |
| Cu ₅₅ NP-2-propanamina | 49 | 3480.31 | 99 | 12386.36 | 49 | 8746.91 | 94 | 1.24 | 63 | 4.58 | 122 | 0.03 |
| Cu ₅₅ NP-2-propanol | 61 | 3100.68 | 86 | 6710.06 | 59 | 7359.99 | 72 | 1.25 | 94 | 4.65 | 44 | 0.10 |
| Cu ₅₅ NP-2-propanotiol | 78 | 3842.44 | 88 | 7824.13 | 62 | 7300.71 | 71 | 1.29 | 86 | 4.69 | 68 | 0.04 |

Pese a que con el campo de fuerza GFN-FF se obtienen cálculos en menor tiempo, se debe tener en cuenta la calidad de los resultados obtenidos. Con base en lo anterior, se tiene que GFN1-xTB, a pesar de no ser el que menor costo computacional requiere, es el método con el que se obtienen geometrías optimizadas y energías de interacción más cercanas al funcional de referencia (PBE-D3); con un tiempo de cálculo no mayor a 8 minutos, de manera que este método es el que presenta mejores resultados para el estudio de las interacciones entre nanopartículas de cobre (Cu_{55}NP) y moléculas orgánicas como el 2-propanol, 2-propanamina y 2-propanotiol, con un bajo costo computacional.

5. Conclusiones

Dentro de los métodos evaluados, GFN1-xTB mostró mejores resultados en el cálculo de energías de interacción, optimización de geometrías y en los valores de los parámetros geométricos de los complejos entre la nanopartícula de cobre (Cu₅₅) y las moléculas 2-propanol y 2-propanotiol. Sin embargo, los parámetros geométricos calculados con GFN-FF del complejo Cu₅₅NP-2-propanamina son comparables al funcional de referencia PBE-D3 y a GFN1-xTB; con una diferencia para la longitud de enlace respecto a GFN1-xTB de 0.15 Å, para el ángulo ∠Cu-N-C₂ de 5.25 ° y en cuanto al ángulo diedro este difiere en 3.4 °.

Respecto a los funcionales evaluados, con el funcional B97-3c se obtuvieron valores para las energías de interacción y parámetros geométricos más cercanos a los obtenidos con el funcional PBE-D3; las diferencias fueron menores a 9.2 kcal/mol, 0.06 Å, 3 ° para los ángulos y 2 ° para los ángulos diedros. Por otra parte, el funcional PBEh-3c fue el que presentó resultados con mayor variabilidad a los calculados con PBE-D3.

Con el método semiempírico GFN0-xTB se obtuvieron energías de interacción repulsivas, además, se presentan interacciones entre diferentes átomos de la molécula orgánica con la nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP), por lo que las energías de interacción difieren a las obtenidas con PBE-D3/def2-SVP, ya que no se trata de la misma estructura, las estructuras optimizadas convergen en diferentes geometrías. Por consiguiente, las geometrías obtenidas con este método no son comparables con los cálculos dados con el funcional PBE-D3.

Además, se comprobó el efecto del error de superposición de bases (BSSE) sobre la energía de interacción, observando que después de aplicar la corrección de contrapeso (CP) las energías son menos negativas que las energías de interacción ΔE calculadas inicialmente.

En cuanto al costo computacional, pese a que con el campo de fuerza GFN-FF se obtienen cálculos en menor tiempo, se debe tener en cuenta la calidad de los resultados obtenidos. Con base en lo anterior, se tiene que GFN1-xTB, a pesar de no ser el que menor costo computacional requiere, es el método con el que se obtienen geometrías mejor optimizadas y energías de interacción más cercanas al funcional de referencia PBE-D3; con un tiempo de cálculo no mayor a 8 minutos, de manera que este método es el que presenta mejores resultados para el estudio de las interacciones, con un bajo costo computacional, entre una nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y moléculas orgánicas como el 2-propanol, 2-propanamina y 2-propanotiol.

Referencias

- Abdelhamid, H. N., & Mathew, A. P. (2022). Cellulose–metal organic frameworks (CelloMOFs) hybrid materials and their multifaceted Applications: A review. *Coordination Chemistry Reviews*, 451, 214263. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2021.214263>
- Bagayoko, D. (2014). Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice. *AIP Advances*, 4(12), 127104. <https://doi.org/10.1063/1.4903408>
- Bannwarth, C., Caldeweyher, E., Ehlert, S., Hansen, A., Pracht, P., Seibert, J., Spicher, S., & Grimme, S. (2021). Extended tight-binding quantum chemistry methods. *WIREs Computational Molecular Science*, 11(2), e1493. <https://doi.org/10.1002/wcms.1493>
- Barrionuevo, M. V. F., Andrés, J., & San-Miguel, M. A. (2022). A Theoretical Study on the Structural, Electronic, and Magnetic Properties of Bimetallic Pt_{13–n}N_n (N = 0, 3, 6, 9, 13) Nanoclusters to Unveil the Catalytic Mechanisms for the Water-Gas Shift Reaction. *Frontiers in Chemistry*, 10. <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fchem.2022.852196>
- Basiuk, V. A., Prezhdo, O. V., & Basiuk, E. V. (2020). Thermal smearing in DFT calculations: How small is really small? A case of La and Lu atoms adsorbed on graphene. *Materials Today Communications*, 25, 101595. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101595>
- Boys, S. F., & Bernardi, F. (1970). The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors. *Molecular Physics*, 19(4), 553-566. <https://doi.org/10.1080/00268977000101561>

- Brandenburg, J. G., Bannwarth, C., Hansen, A., & Grimme, S. (2018). B97-3c: A revised low-cost variant of the B97-D density functional method. *The Journal of Chemical Physics*, *148*(6), 064104. <https://doi.org/10.1063/1.5012601>
- Burke, K. (2012). Perspective on density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*, *136*(15), 150901. <https://doi.org/10.1063/1.4704546>
- Bursch, M., Hansen, A., Pracht, P., Kohn, J. T., & Grimme, S. (2021). Theoretical study on conformational energies of transition metal complexes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *23*(1), 287-299. <https://doi.org/10.1039/D0CP04696E>
- Bursch, M., Neugebauer, H., & Grimme, S. (2019). Structure Optimisation of Large Transition-Metal Complexes with Extended Tight-Binding Methods. *Angewandte Chemie International Edition*, *58*(32), 11078-11087. <https://doi.org/10.1002/anie.201904021>
- Dononelli, W., & Klüner, T. (2018). CO adsorption and oxygen activation on group 11 nanoparticles – a combined DFT and high level CCSD(T) study about size effects and activation processes. *Faraday Discussions*, *208*(0), 105-121. <https://doi.org/10.1039/C7FD00225D>
- Fodil, R., Sekkal-Rahal, M., & Sayede, A. (2017). Testing the CP-correction procedure with different DFT methods on H-bonding complexes of κ -carrabiose with water molecules. *Journal of Molecular Modeling*, *23*(1), 31. <https://doi.org/10.1007/s00894-016-3199-2>
- Gale, J. D., LeBlanc, L. M., Spackman, P. R., Silvestri, A., & Raiteri, P. (2021). A Universal Force Field for Materials, Periodic GFN-FF: Implementation and Examination. *Journal of Chemical Theory and Computation*, *17*(12), 7827-7849. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00832>

Geometry Optimization—Xtb doc 2023 documentation. (s. f.). Recuperado 18 de abril de 2024, de <https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/optimization.html>

Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of Chemical Physics*, *132*(15), 154104. <https://doi.org/10.1063/1.3382344>

Grimme, S., Bannwarth, C., & Shushkov, P. (2017). A Robust and Accurate Tight-Binding Quantum Chemical Method for Structures, Vibrational Frequencies, and Noncovalent Interactions of Large Molecular Systems Parametrized for All spd-Block Elements ($Z = 1-86$). *Journal of Chemical Theory and Computation*, *13*(5), 1989-2009. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00118>

Grimme, S., Brandenburg, J. G., Bannwarth, C., & Hansen, A. (2015). Consistent structures and interactions by density functional theory with small atomic orbital basis sets. *The Journal of Chemical Physics*, *143*(5), 054107. <https://doi.org/10.1063/1.4927476>

Gund, T. (1996). 3—Molecular Modeling of Small Molecules. En N. C. Cohen (Ed.), *Guidebook on Molecular Modeling in Drug Design* (pp. 55-92). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-012178245-0/50004-4>

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, *4*(1), 17. <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>

Hoffman, K. M., & Kunze, R. (1971). *Linear Algebra* (Segunda). Pearson.

Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, *136*(3B), B864-B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>

- Jha, G., & Heine, T. (2023). Spin-orbit coupling corrections for the GFN1-xTB method. *The Journal of Chemical Physics*, *158*(4), 044120. <https://doi.org/10.1063/5.0129071>
- Keller, T. J., Sterzenbach, C., Bahr, J., Schneiders, T. L., Bursch, M., Kohn, J., Eder, T., Lupton, J. M., Grimme, S., Höger, S., & Jester, S.-S. (2021). Nanopatterns of molecular spoked wheels as giant homologues of benzene tricarboxylic acids. *Chemical Science*, *12*(27), 9352-9358. <https://doi.org/10.1039/D1SC01381E>
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, *140*(4A), A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Levine, I. N. (2001). *Química cuántica* (5.^a ed.). Pearson Educación.
- Majumdar, D., Samanta, P. N., Roszak, S., & Leszczynski, J. (2021). Slater-Type Orbitals. En E. Perlt (Ed.), *Basis Sets in Computational Chemistry* (pp. 17-40). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-67262-1_2
- Martins, P., Kappert, S., Nga Le, H., Sebastian, V., Kühn, K., Alves, M., Pereira, L., Cuniberti, G., Melle-Franco, M., & Lanceros-Méndez, S. (2020). Enhanced Photocatalytic Activity of Au/TiO₂ Nanoparticles against Ciprofloxacin. *Catalysts*, *10*(2), Article 2. <https://doi.org/10.3390/catal10020234>
- Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system - Version 5.0. <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/home>

Nguyen, T. T. H., Le, M. C., Jiang, Z.-T., & Nguyen, N. H. (2020). Theoretical study on the adsorption ability of (ZnO)₆ cluster for dimethylmercury removal and the influences of the supports and other ions in the adsorption process. *Adsorption*, 26(8), 1335-1344. <https://doi.org/10.1007/s10450-020-00252-1>

ORCA Input Library—Numerical precision. (s. f.). Recuperado 8 de abril de 2024, de <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/numerical-precision>

Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

Piotrowski, M. J., Ungureanu, C. G., Tereshchuk, P., Batista, K. E. A., Chaves, A. S., Guedes-Sobrinho, D., & Da Silva, J. L. F. (2016). Theoretical Study of the Structural, Energetic, and Electronic Properties of 55-Atom Metal Nanoclusters: A DFT Investigation within van der Waals Corrections, Spin–Orbit Coupling, and PBE+U of 42 Metal Systems. *The Journal of Physical Chemistry C*, 120(50), 28844-28856. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b10404>

Pracht, P., Caldeweyher, E., Ehlert, S., & Grimme, S. (2019). A Robust Non-Self-Consistent Tight-Binding Quantum Chemistry Method for large Molecules. ChemRxiv. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.8326202.v1>

Quan, D. P., Thao, B. T. P., Trang, N. V., Huy, N. L., Dung, N. Q., Ahmed, M. U., & Lam, T. D. (2021). The role of copper nanoparticles decorating polydopamine/graphene film as catalyst in the enhancement of uric acid sensing. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 893, 115322. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2021.115322>

- Rapps, T., Ahlrichs, R., Waldt, E., Kappes, M. M., & Schooss, D. (2013). On the Structures of 55-Atom Transition-Metal Clusters and Their Relationship to the Crystalline Bulk. *Angewandte Chemie International Edition*, 52(23), 6102-6105. <https://doi.org/10.1002/anie.201302165>
- Singlepoint Calculations—Xtb doc 2023 documentation*. (s. f.). Recuperado 18 de abril de 2024, de <https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/sp.html#fermi-smearing>
- Soyemi, A., & Szilvási, T. (2022). Benchmarking Semiempirical QM Methods for Calculating the Dipole Moment of Organic Molecules. *The Journal of Physical Chemistry A*, 126(11), 1905-1921. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c10144>
- Spicher, S., Bursch, M., & Grimme, S. (2020). Efficient Calculation of Small Molecule Binding in Metal–Organic Frameworks and Porous Organic Cages. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(50), 27529-27541. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c08617>
- Spicher, S., & Grimme, S. (2020). Robust Atomistic Modeling of Materials, Organometallic, and Biochemical Systems. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(36), 15665-15673. <https://doi.org/10.1002/anie.202004239>
- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Courier Corporation.
- Zhang, Q. H., Hou, B. S., Li, Y. Y., Zhu, G. Y., Lei, Y., Wang, X., Liu, H. F., & Zhang, G. A. (2021). Dextran derivatives as highly efficient green corrosion inhibitors for carbon steel in CO₂-saturated oilfield produced water: Experimental and theoretical approaches. *Chemical Engineering Journal*, 424, 130519. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130519>

Zheng, Z., Hu, J., Eliaz, N., Zhou, L., Yuan, X., & Zhong, X. (2022). Mercaptopropionic acid-modified oleic imidazoline as a highly efficient corrosion inhibitor for carbon steel in CO₂-saturated formation water. *Corrosion Science*, *194*, 109930.
<https://doi.org/10.1016/j.corsci.2021.109930>

Zielinski, T. J., Harvey, E., Sweeney, R., & Hanson, D. M. (2005). Quantum States of Atoms and Molecules. *Journal of Chemical Education*, *82*(12), 1880.
<https://doi.org/10.1021/ed082p1880.2>

Apéndice A

Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, SmearTemp de 3100 K

1. Cu₅₅NP-2-propanamina

| | | | | | | | |
|-----|-------------------------|------|-------------------------|------|-------------------------|------|--------------------------|
| 0: | 0.00 cm ⁻¹ | 51: | 108.63 cm ⁻¹ | 102: | 157.44 cm ⁻¹ | 153: | 239.18 cm ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm ⁻¹ | 52: | 110.09 cm ⁻¹ | 103: | 157.62 cm ⁻¹ | 154: | 239.36 cm ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm ⁻¹ | 53: | 110.92 cm ⁻¹ | 104: | 157.83 cm ⁻¹ | 155: | 244.29 cm ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm ⁻¹ | 54: | 111.97 cm ⁻¹ | 105: | 157.96 cm ⁻¹ | 156: | 249.24 cm ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm ⁻¹ | 55: | 112.41 cm ⁻¹ | 106: | 158.86 cm ⁻¹ | 157: | 249.91 cm ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm ⁻¹ | 56: | 112.82 cm ⁻¹ | 107: | 158.91 cm ⁻¹ | 158: | 250.32 cm ⁻¹ |
| 6: | -15.77 cm ⁻¹ | 57: | 112.94 cm ⁻¹ | 108: | 159.37 cm ⁻¹ | 159: | 250.94 cm ⁻¹ |
| 7: | 17.63 cm ⁻¹ | 58: | 114.17 cm ⁻¹ | 109: | 159.61 cm ⁻¹ | 160: | 268.27 cm ⁻¹ |
| 8: | 32.84 cm ⁻¹ | 59: | 114.77 cm ⁻¹ | 110: | 162.08 cm ⁻¹ | 161: | 268.72 cm ⁻¹ |
| 9: | 54.97 cm ⁻¹ | 60: | 114.87 cm ⁻¹ | 111: | 163.43 cm ⁻¹ | 162: | 269.18 cm ⁻¹ |
| 10: | 55.79 cm ⁻¹ | 61: | 115.03 cm ⁻¹ | 112: | 163.51 cm ⁻¹ | 163: | 272.78 cm ⁻¹ |
| 11: | 55.89 cm ⁻¹ | 62: | 115.17 cm ⁻¹ | 113: | 163.70 cm ⁻¹ | 164: | 276.05 cm ⁻¹ |
| 12: | 56.28 cm ⁻¹ | 63: | 115.42 cm ⁻¹ | 114: | 163.83 cm ⁻¹ | 165: | 276.06 cm ⁻¹ |
| 13: | 56.74 cm ⁻¹ | 64: | 115.65 cm ⁻¹ | 115: | 164.09 cm ⁻¹ | 166: | 276.80 cm ⁻¹ |
| 14: | 68.01 cm ⁻¹ | 65: | 116.49 cm ⁻¹ | 116: | 164.17 cm ⁻¹ | 167: | 277.02 cm ⁻¹ |
| 15: | 68.36 cm ⁻¹ | 66: | 117.40 cm ⁻¹ | 117: | 164.54 cm ⁻¹ | 168: | 287.48 cm ⁻¹ |
| 16: | 68.45 cm ⁻¹ | 67: | 119.34 cm ⁻¹ | 118: | 166.11 cm ⁻¹ | 169: | 293.99 cm ⁻¹ |
| 17: | 69.40 cm ⁻¹ | 68: | 119.57 cm ⁻¹ | 119: | 169.36 cm ⁻¹ | 170: | 321.15 cm ⁻¹ |
| 18: | 69.70 cm ⁻¹ | 69: | 119.83 cm ⁻¹ | 120: | 170.05 cm ⁻¹ | 171: | 326.96 cm ⁻¹ |
| 19: | 73.09 cm ⁻¹ | 70: | 120.35 cm ⁻¹ | 121: | 171.10 cm ⁻¹ | 172: | 327.17 cm ⁻¹ |
| 20: | 73.55 cm ⁻¹ | 71: | 122.07 cm ⁻¹ | 122: | 172.57 cm ⁻¹ | 173: | 368.59 cm ⁻¹ |
| 21: | 73.88 cm ⁻¹ | 72: | 123.64 cm ⁻¹ | 123: | 175.02 cm ⁻¹ | 174: | 397.48 cm ⁻¹ |
| 22: | 74.29 cm ⁻¹ | 73: | 124.75 cm ⁻¹ | 124: | 176.83 cm ⁻¹ | 175: | 490.99 cm ⁻¹ |
| 23: | 75.22 cm ⁻¹ | 74: | 124.97 cm ⁻¹ | 125: | 177.00 cm ⁻¹ | 176: | 549.95 cm ⁻¹ |
| 24: | 76.49 cm ⁻¹ | 75: | 125.41 cm ⁻¹ | 126: | 182.21 cm ⁻¹ | 177: | 805.53 cm ⁻¹ |
| 25: | 77.43 cm ⁻¹ | 76: | 125.85 cm ⁻¹ | 127: | 183.77 cm ⁻¹ | 178: | 891.92 cm ⁻¹ |
| 26: | 78.75 cm ⁻¹ | 77: | 126.27 cm ⁻¹ | 128: | 183.97 cm ⁻¹ | 179: | 918.25 cm ⁻¹ |
| 27: | 80.05 cm ⁻¹ | 78: | 127.86 cm ⁻¹ | 129: | 184.04 cm ⁻¹ | 180: | 931.61 cm ⁻¹ |
| 28: | 80.53 cm ⁻¹ | 79: | 128.40 cm ⁻¹ | 130: | 184.56 cm ⁻¹ | 181: | 980.71 cm ⁻¹ |
| 29: | 80.97 cm ⁻¹ | 80: | 129.23 cm ⁻¹ | 131: | 201.92 cm ⁻¹ | 182: | 1018.20 cm ⁻¹ |
| 30: | 82.01 cm ⁻¹ | 81: | 130.72 cm ⁻¹ | 132: | 202.27 cm ⁻¹ | 183: | 1138.96 cm ⁻¹ |
| 31: | 82.16 cm ⁻¹ | 82: | 131.16 cm ⁻¹ | 133: | 202.46 cm ⁻¹ | 184: | 1144.95 cm ⁻¹ |
| 32: | 82.29 cm ⁻¹ | 83: | 132.09 cm ⁻¹ | 134: | 203.90 cm ⁻¹ | 185: | 1211.13 cm ⁻¹ |
| 33: | 82.49 cm ⁻¹ | 84: | 132.43 cm ⁻¹ | 135: | 204.55 cm ⁻¹ | 186: | 1297.13 cm ⁻¹ |
| 34: | 83.51 cm ⁻¹ | 85: | 133.65 cm ⁻¹ | 136: | 205.38 cm ⁻¹ | 187: | 1324.59 cm ⁻¹ |
| 35: | 84.58 cm ⁻¹ | 86: | 135.39 cm ⁻¹ | 137: | 205.94 cm ⁻¹ | 188: | 1347.22 cm ⁻¹ |
| 36: | 84.82 cm ⁻¹ | 87: | 135.51 cm ⁻¹ | 138: | 206.48 cm ⁻¹ | 189: | 1355.89 cm ⁻¹ |
| 37: | 85.94 cm ⁻¹ | 88: | 135.57 cm ⁻¹ | 139: | 206.57 cm ⁻¹ | 190: | 1394.94 cm ⁻¹ |
| 38: | 86.20 cm ⁻¹ | 89: | 135.82 cm ⁻¹ | 140: | 206.94 cm ⁻¹ | 191: | 1401.93 cm ⁻¹ |
| 39: | 87.45 cm ⁻¹ | 90: | 141.87 cm ⁻¹ | 141: | 207.23 cm ⁻¹ | 192: | 1421.42 cm ⁻¹ |
| 40: | 88.16 cm ⁻¹ | 91: | 146.31 cm ⁻¹ | 142: | 215.68 cm ⁻¹ | 193: | 1423.77 cm ⁻¹ |
| 41: | 88.23 cm ⁻¹ | 92: | 151.85 cm ⁻¹ | 143: | 215.74 cm ⁻¹ | 194: | 1558.32 cm ⁻¹ |
| 42: | 93.62 cm ⁻¹ | 93: | 154.21 cm ⁻¹ | 144: | 215.85 cm ⁻¹ | 195: | 2877.32 cm ⁻¹ |
| 43: | 95.92 cm ⁻¹ | 94: | 154.84 cm ⁻¹ | 145: | 216.04 cm ⁻¹ | 196: | 2944.30 cm ⁻¹ |
| 44: | 96.80 cm ⁻¹ | 95: | 155.64 cm ⁻¹ | 146: | 218.07 cm ⁻¹ | 197: | 2963.21 cm ⁻¹ |
| 45: | 98.89 cm ⁻¹ | 96: | 156.40 cm ⁻¹ | 147: | 224.17 cm ⁻¹ | 198: | 3003.87 cm ⁻¹ |
| 46: | 100.38 cm ⁻¹ | 97: | 156.53 cm ⁻¹ | 148: | 224.70 cm ⁻¹ | 199: | 3050.02 cm ⁻¹ |
| 47: | 104.81 cm ⁻¹ | 98: | 156.65 cm ⁻¹ | 149: | 233.32 cm ⁻¹ | 200: | 3066.16 cm ⁻¹ |
| 48: | 105.76 cm ⁻¹ | 99: | 156.76 cm ⁻¹ | 150: | 237.36 cm ⁻¹ | 201: | 3076.10 cm ⁻¹ |
| 49: | 106.06 cm ⁻¹ | 100: | 156.93 cm ⁻¹ | 151: | 237.78 cm ⁻¹ | 202: | 3374.64 cm ⁻¹ |
| 50: | 107.86 cm ⁻¹ | 101: | 157.11 cm ⁻¹ | 152: | 238.09 cm ⁻¹ | 203: | 3449.70 cm ⁻¹ |

2. CussNP-2-propanol

| | | | | | | | |
|-----|---------------------------|------|---------------------------|------|---------------------------|------|----------------------------|
| 0: | 0.00 cm** ⁻¹ | 51: | 108.07 cm** ⁻¹ | 102: | 157.25 cm** ⁻¹ | 153: | 238.89 cm** ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm** ⁻¹ | 52: | 109.58 cm** ⁻¹ | 103: | 157.69 cm** ⁻¹ | 154: | 239.18 cm** ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm** ⁻¹ | 53: | 110.63 cm** ⁻¹ | 104: | 157.77 cm** ⁻¹ | 155: | 239.84 cm** ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm** ⁻¹ | 54: | 111.86 cm** ⁻¹ | 105: | 158.05 cm** ⁻¹ | 156: | 249.03 cm** ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm** ⁻¹ | 55: | 112.24 cm** ⁻¹ | 106: | 158.70 cm** ⁻¹ | 157: | 250.02 cm** ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm** ⁻¹ | 56: | 112.32 cm** ⁻¹ | 107: | 158.79 cm** ⁻¹ | 158: | 250.10 cm** ⁻¹ |
| 6: | -16.57 cm** ⁻¹ | 57: | 112.79 cm** ⁻¹ | 108: | 159.22 cm** ⁻¹ | 159: | 250.54 cm** ⁻¹ |
| 7: | 13.24 cm** ⁻¹ | 58: | 113.85 cm** ⁻¹ | 109: | 159.50 cm** ⁻¹ | 160: | 268.13 cm** ⁻¹ |
| 8: | 35.04 cm** ⁻¹ | 59: | 114.41 cm** ⁻¹ | 110: | 161.90 cm** ⁻¹ | 161: | 268.67 cm** ⁻¹ |
| 9: | 54.60 cm** ⁻¹ | 60: | 114.74 cm** ⁻¹ | 111: | 163.28 cm** ⁻¹ | 162: | 269.17 cm** ⁻¹ |
| 10: | 55.61 cm** ⁻¹ | 61: | 114.79 cm** ⁻¹ | 112: | 163.54 cm** ⁻¹ | 163: | 272.00 cm** ⁻¹ |
| 11: | 55.71 cm** ⁻¹ | 62: | 114.89 cm** ⁻¹ | 113: | 163.60 cm** ⁻¹ | 164: | 276.01 cm** ⁻¹ |
| 12: | 55.99 cm** ⁻¹ | 63: | 115.17 cm** ⁻¹ | 114: | 163.67 cm** ⁻¹ | 165: | 276.05 cm** ⁻¹ |
| 13: | 56.60 cm** ⁻¹ | 64: | 115.32 cm** ⁻¹ | 115: | 163.95 cm** ⁻¹ | 166: | 276.73 cm** ⁻¹ |
| 14: | 67.53 cm** ⁻¹ | 65: | 115.56 cm** ⁻¹ | 116: | 164.08 cm** ⁻¹ | 167: | 276.95 cm** ⁻¹ |
| 15: | 67.99 cm** ⁻¹ | 66: | 117.71 cm** ⁻¹ | 117: | 164.24 cm** ⁻¹ | 168: | 278.42 cm** ⁻¹ |
| 16: | 68.36 cm** ⁻¹ | 67: | 119.21 cm** ⁻¹ | 118: | 164.83 cm** ⁻¹ | 169: | 293.90 cm** ⁻¹ |
| 17: | 69.06 cm** ⁻¹ | 68: | 119.33 cm** ⁻¹ | 119: | 169.29 cm** ⁻¹ | 170: | 322.21 cm** ⁻¹ |
| 18: | 69.31 cm** ⁻¹ | 69: | 119.64 cm** ⁻¹ | 120: | 169.93 cm** ⁻¹ | 171: | 326.74 cm** ⁻¹ |
| 19: | 70.50 cm** ⁻¹ | 70: | 120.08 cm** ⁻¹ | 121: | 170.34 cm** ⁻¹ | 172: | 326.88 cm** ⁻¹ |
| 20: | 72.87 cm** ⁻¹ | 71: | 122.21 cm** ⁻¹ | 122: | 172.68 cm** ⁻¹ | 173: | 361.06 cm** ⁻¹ |
| 21: | 73.27 cm** ⁻¹ | 72: | 123.35 cm** ⁻¹ | 123: | 175.47 cm** ⁻¹ | 174: | 409.74 cm** ⁻¹ |
| 22: | 73.87 cm** ⁻¹ | 73: | 124.47 cm** ⁻¹ | 124: | 176.77 cm** ⁻¹ | 175: | 468.32 cm** ⁻¹ |
| 23: | 74.27 cm** ⁻¹ | 74: | 124.50 cm** ⁻¹ | 125: | 176.93 cm** ⁻¹ | 176: | 488.35 cm** ⁻¹ |
| 24: | 75.33 cm** ⁻¹ | 75: | 124.85 cm** ⁻¹ | 126: | 182.35 cm** ⁻¹ | 177: | 795.66 cm** ⁻¹ |
| 25: | 76.78 cm** ⁻¹ | 76: | 125.46 cm** ⁻¹ | 127: | 183.66 cm** ⁻¹ | 178: | 891.57 cm** ⁻¹ |
| 26: | 78.54 cm** ⁻¹ | 77: | 125.81 cm** ⁻¹ | 128: | 183.74 cm** ⁻¹ | 179: | 912.37 cm** ⁻¹ |
| 27: | 79.72 cm** ⁻¹ | 78: | 127.16 cm** ⁻¹ | 129: | 184.12 cm** ⁻¹ | 180: | 920.07 cm** ⁻¹ |
| 28: | 80.37 cm** ⁻¹ | 79: | 128.17 cm** ⁻¹ | 130: | 184.53 cm** ⁻¹ | 181: | 1064.42 cm** ⁻¹ |
| 29: | 80.73 cm** ⁻¹ | 80: | 128.56 cm** ⁻¹ | 131: | 200.07 cm** ⁻¹ | 182: | 1092.11 cm** ⁻¹ |
| 30: | 81.12 cm** ⁻¹ | 81: | 130.95 cm** ⁻¹ | 132: | 201.82 cm** ⁻¹ | 183: | 1138.75 cm** ⁻¹ |
| 31: | 81.54 cm** ⁻¹ | 82: | 131.16 cm** ⁻¹ | 133: | 202.12 cm** ⁻¹ | 184: | 1227.41 cm** ⁻¹ |
| 32: | 82.09 cm** ⁻¹ | 83: | 131.70 cm** ⁻¹ | 134: | 202.55 cm** ⁻¹ | 185: | 1301.07 cm** ⁻¹ |
| 33: | 82.40 cm** ⁻¹ | 84: | 132.10 cm** ⁻¹ | 135: | 203.78 cm** ⁻¹ | 186: | 1319.25 cm** ⁻¹ |
| 34: | 82.84 cm** ⁻¹ | 85: | 132.92 cm** ⁻¹ | 136: | 204.33 cm** ⁻¹ | 187: | 1347.62 cm** ⁻¹ |
| 35: | 84.41 cm** ⁻¹ | 86: | 134.61 cm** ⁻¹ | 137: | 205.95 cm** ⁻¹ | 188: | 1363.01 cm** ⁻¹ |
| 36: | 84.72 cm** ⁻¹ | 87: | 135.26 cm** ⁻¹ | 138: | 206.39 cm** ⁻¹ | 189: | 1394.71 cm** ⁻¹ |
| 37: | 85.14 cm** ⁻¹ | 88: | 135.43 cm** ⁻¹ | 139: | 206.51 cm** ⁻¹ | 190: | 1402.78 cm** ⁻¹ |
| 38: | 85.62 cm** ⁻¹ | 89: | 135.63 cm** ⁻¹ | 140: | 206.66 cm** ⁻¹ | 191: | 1417.99 cm** ⁻¹ |
| 39: | 87.26 cm** ⁻¹ | 90: | 138.11 cm** ⁻¹ | 141: | 207.24 cm** ⁻¹ | 192: | 1425.57 cm** ⁻¹ |
| 40: | 87.43 cm** ⁻¹ | 91: | 142.58 cm** ⁻¹ | 142: | 212.06 cm** ⁻¹ | 193: | 2861.10 cm** ⁻¹ |
| 41: | 88.10 cm** ⁻¹ | 92: | 150.85 cm** ⁻¹ | 143: | 215.41 cm** ⁻¹ | 194: | 2892.17 cm** ⁻¹ |
| 42: | 90.81 cm** ⁻¹ | 93: | 153.48 cm** ⁻¹ | 144: | 215.60 cm** ⁻¹ | 195: | 2968.79 cm** ⁻¹ |
| 43: | 95.77 cm** ⁻¹ | 94: | 154.38 cm** ⁻¹ | 145: | 215.80 cm** ⁻¹ | 196: | 3025.25 cm** ⁻¹ |
| 44: | 96.65 cm** ⁻¹ | 95: | 155.60 cm** ⁻¹ | 146: | 216.27 cm** ⁻¹ | 197: | 3056.69 cm** ⁻¹ |
| 45: | 97.23 cm** ⁻¹ | 96: | 156.12 cm** ⁻¹ | 147: | 224.19 cm** ⁻¹ | 198: | 3074.40 cm** ⁻¹ |
| 46: | 99.27 cm** ⁻¹ | 97: | 156.50 cm** ⁻¹ | 148: | 224.61 cm** ⁻¹ | 199: | 3084.17 cm** ⁻¹ |
| 47: | 104.82 cm** ⁻¹ | 98: | 156.57 cm** ⁻¹ | 149: | 228.82 cm** ⁻¹ | 200: | 3650.34 cm** ⁻¹ |
| 48: | 104.98 cm** ⁻¹ | 99: | 156.77 cm** ⁻¹ | 150: | 234.88 cm** ⁻¹ | | |
| 49: | 105.95 cm** ⁻¹ | 100: | 156.98 cm** ⁻¹ | 151: | 237.33 cm** ⁻¹ | | |
| 50: | 107.60 cm** ⁻¹ | 101: | 157.21 cm** ⁻¹ | 152: | 237.90 cm** ⁻¹ | | |

3. Cu55NP-2-propanotiol

| | | | | | | | |
|-----|---------------------------|------|---------------------------|------|---------------------------|------|----------------------------|
| 0: | 0.00 cm** ⁻¹ | 51: | 108.86 cm** ⁻¹ | 102: | 157.36 cm** ⁻¹ | 153: | 239.83 cm** ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm** ⁻¹ | 52: | 110.80 cm** ⁻¹ | 103: | 157.45 cm** ⁻¹ | 154: | 239.89 cm** ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm** ⁻¹ | 53: | 110.93 cm** ⁻¹ | 104: | 157.59 cm** ⁻¹ | 155: | 245.03 cm** ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm** ⁻¹ | 54: | 112.09 cm** ⁻¹ | 105: | 157.86 cm** ⁻¹ | 156: | 249.36 cm** ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm** ⁻¹ | 55: | 112.48 cm** ⁻¹ | 106: | 158.83 cm** ⁻¹ | 157: | 250.01 cm** ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm** ⁻¹ | 56: | 112.77 cm** ⁻¹ | 107: | 158.85 cm** ⁻¹ | 158: | 251.13 cm** ⁻¹ |
| 6: | -20.80 cm** ⁻¹ | 57: | 112.98 cm** ⁻¹ | 108: | 159.33 cm** ⁻¹ | 159: | 251.32 cm** ⁻¹ |
| 7: | 20.92 cm** ⁻¹ | 58: | 113.94 cm** ⁻¹ | 109: | 159.53 cm** ⁻¹ | 160: | 268.39 cm** ⁻¹ |
| 8: | 24.97 cm** ⁻¹ | 59: | 114.56 cm** ⁻¹ | 110: | 162.47 cm** ⁻¹ | 161: | 268.73 cm** ⁻¹ |
| 9: | 55.78 cm** ⁻¹ | 60: | 114.72 cm** ⁻¹ | 111: | 163.47 cm** ⁻¹ | 162: | 269.10 cm** ⁻¹ |
| 10: | 56.12 cm** ⁻¹ | 61: | 114.85 cm** ⁻¹ | 112: | 163.57 cm** ⁻¹ | 163: | 275.91 cm** ⁻¹ |
| 11: | 56.42 cm** ⁻¹ | 62: | 115.01 cm** ⁻¹ | 113: | 163.77 cm** ⁻¹ | 164: | 276.04 cm** ⁻¹ |
| 12: | 56.59 cm** ⁻¹ | 63: | 115.31 cm** ⁻¹ | 114: | 163.97 cm** ⁻¹ | 165: | 276.28 cm** ⁻¹ |
| 13: | 56.79 cm** ⁻¹ | 64: | 115.54 cm** ⁻¹ | 115: | 164.03 cm** ⁻¹ | 166: | 276.85 cm** ⁻¹ |
| 14: | 67.20 cm** ⁻¹ | 65: | 115.87 cm** ⁻¹ | 116: | 164.25 cm** ⁻¹ | 167: | 276.96 cm** ⁻¹ |
| 15: | 68.66 cm** ⁻¹ | 66: | 116.43 cm** ⁻¹ | 117: | 164.48 cm** ⁻¹ | 168: | 286.24 cm** ⁻¹ |
| 16: | 68.83 cm** ⁻¹ | 67: | 119.64 cm** ⁻¹ | 118: | 164.54 cm** ⁻¹ | 169: | 289.60 cm** ⁻¹ |
| 17: | 69.45 cm** ⁻¹ | 68: | 120.02 cm** ⁻¹ | 119: | 168.85 cm** ⁻¹ | 170: | 294.02 cm** ⁻¹ |
| 18: | 69.87 cm** ⁻¹ | 69: | 120.15 cm** ⁻¹ | 120: | 170.10 cm** ⁻¹ | 171: | 322.30 cm** ⁻¹ |
| 19: | 73.77 cm** ⁻¹ | 70: | 120.36 cm** ⁻¹ | 121: | 170.37 cm** ⁻¹ | 172: | 327.18 cm** ⁻¹ |
| 20: | 73.95 cm** ⁻¹ | 71: | 121.38 cm** ⁻¹ | 122: | 172.13 cm** ⁻¹ | 173: | 327.35 cm** ⁻¹ |
| 21: | 74.36 cm** ⁻¹ | 72: | 123.83 cm** ⁻¹ | 123: | 174.79 cm** ⁻¹ | 174: | 331.12 cm** ⁻¹ |
| 22: | 74.85 cm** ⁻¹ | 73: | 124.56 cm** ⁻¹ | 124: | 176.87 cm** ⁻¹ | 175: | 412.10 cm** ⁻¹ |
| 23: | 76.13 cm** ⁻¹ | 74: | 124.75 cm** ⁻¹ | 125: | 176.97 cm** ⁻¹ | 176: | 416.61 cm** ⁻¹ |
| 24: | 77.19 cm** ⁻¹ | 75: | 125.01 cm** ⁻¹ | 126: | 182.29 cm** ⁻¹ | 177: | 574.77 cm** ⁻¹ |
| 25: | 79.23 cm** ⁻¹ | 76: | 125.69 cm** ⁻¹ | 127: | 183.81 cm** ⁻¹ | 178: | 809.70 cm** ⁻¹ |
| 26: | 79.86 cm** ⁻¹ | 77: | 126.24 cm** ⁻¹ | 128: | 183.96 cm** ⁻¹ | 179: | 881.35 cm** ⁻¹ |
| 27: | 80.68 cm** ⁻¹ | 78: | 127.96 cm** ⁻¹ | 129: | 184.13 cm** ⁻¹ | 180: | 895.55 cm** ⁻¹ |
| 28: | 81.39 cm** ⁻¹ | 79: | 128.30 cm** ⁻¹ | 130: | 184.48 cm** ⁻¹ | 181: | 929.37 cm** ⁻¹ |
| 29: | 82.04 cm** ⁻¹ | 80: | 129.80 cm** ⁻¹ | 131: | 202.17 cm** ⁻¹ | 182: | 1017.15 cm** ⁻¹ |
| 30: | 82.24 cm** ⁻¹ | 81: | 130.24 cm** ⁻¹ | 132: | 202.39 cm** ⁻¹ | 183: | 1125.19 cm** ⁻¹ |
| 31: | 82.44 cm** ⁻¹ | 82: | 131.24 cm** ⁻¹ | 133: | 202.63 cm** ⁻¹ | 184: | 1127.96 cm** ⁻¹ |
| 32: | 82.55 cm** ⁻¹ | 83: | 132.20 cm** ⁻¹ | 134: | 203.01 cm** ⁻¹ | 185: | 1198.02 cm** ⁻¹ |
| 33: | 82.79 cm** ⁻¹ | 84: | 132.35 cm** ⁻¹ | 135: | 204.99 cm** ⁻¹ | 186: | 1284.69 cm** ⁻¹ |
| 34: | 84.76 cm** ⁻¹ | 85: | 133.50 cm** ⁻¹ | 136: | 205.26 cm** ⁻¹ | 187: | 1334.57 cm** ⁻¹ |
| 35: | 84.97 cm** ⁻¹ | 86: | 133.80 cm** ⁻¹ | 137: | 205.95 cm** ⁻¹ | 188: | 1340.24 cm** ⁻¹ |
| 36: | 85.36 cm** ⁻¹ | 87: | 135.46 cm** ⁻¹ | 138: | 206.35 cm** ⁻¹ | 189: | 1390.89 cm** ⁻¹ |
| 37: | 86.03 cm** ⁻¹ | 88: | 135.63 cm** ⁻¹ | 139: | 206.92 cm** ⁻¹ | 190: | 1398.03 cm** ⁻¹ |
| 38: | 87.17 cm** ⁻¹ | 89: | 135.98 cm** ⁻¹ | 140: | 207.14 cm** ⁻¹ | 191: | 1405.68 cm** ⁻¹ |
| 39: | 87.63 cm** ⁻¹ | 90: | 136.99 cm** ⁻¹ | 141: | 207.37 cm** ⁻¹ | 192: | 1418.11 cm** ⁻¹ |
| 40: | 88.16 cm** ⁻¹ | 91: | 142.16 cm** ⁻¹ | 142: | 212.03 cm** ⁻¹ | 193: | 2573.42 cm** ⁻¹ |
| 41: | 91.86 cm** ⁻¹ | 92: | 148.50 cm** ⁻¹ | 143: | 215.96 cm** ⁻¹ | 194: | 2857.60 cm** ⁻¹ |
| 42: | 95.68 cm** ⁻¹ | 93: | 154.41 cm** ⁻¹ | 144: | 216.15 cm** ⁻¹ | 195: | 2867.26 cm** ⁻¹ |
| 43: | 95.94 cm** ⁻¹ | 94: | 155.30 cm** ⁻¹ | 145: | 216.40 cm** ⁻¹ | 196: | 2998.67 cm** ⁻¹ |
| 44: | 96.82 cm** ⁻¹ | 95: | 155.77 cm** ⁻¹ | 146: | 216.50 cm** ⁻¹ | 197: | 3014.30 cm** ⁻¹ |
| 45: | 98.93 cm** ⁻¹ | 96: | 156.33 cm** ⁻¹ | 147: | 224.86 cm** ⁻¹ | 198: | 3025.12 cm** ⁻¹ |
| 46: | 102.45 cm** ⁻¹ | 97: | 156.54 cm** ⁻¹ | 148: | 225.52 cm** ⁻¹ | 199: | 3062.59 cm** ⁻¹ |
| 47: | 104.85 cm** ⁻¹ | 98: | 156.59 cm** ⁻¹ | 149: | 229.29 cm** ⁻¹ | 200: | 3074.31 cm** ⁻¹ |
| 48: | 105.48 cm** ⁻¹ | 99: | 156.77 cm** ⁻¹ | 150: | 237.36 cm** ⁻¹ | | |
| 49: | 105.89 cm** ⁻¹ | 100: | 156.95 cm** ⁻¹ | 151: | 237.87 cm** ⁻¹ | | |
| 50: | 108.25 cm** ⁻¹ | 101: | 157.23 cm** ⁻¹ | 152: | 239.61 cm** ⁻¹ | | |

Apéndice B
Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre
(Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con B97-3c/def2-
TZVP, SmearTemp de 3100 K

1. Cu₅₅NP-2-propanamina

| | | | | | | | |
|-----|-------------------------|------|-------------------------|------|-------------------------|------|--------------------------|
| 0: | 0.00 cm ⁻¹ | 55: | 103.68 cm ⁻¹ | 106: | 159.19 cm ⁻¹ | 157: | 253.89 cm ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm ⁻¹ | 56: | 104.06 cm ⁻¹ | 107: | 160.17 cm ⁻¹ | 158: | 254.35 cm ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm ⁻¹ | 57: | 104.48 cm ⁻¹ | 108: | 160.51 cm ⁻¹ | 159: | 255.38 cm ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm ⁻¹ | 58: | 104.86 cm ⁻¹ | 109: | 160.67 cm ⁻¹ | 160: | 258.41 cm ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm ⁻¹ | 59: | 105.75 cm ⁻¹ | 110: | 161.01 cm ⁻¹ | 161: | 265.47 cm ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm ⁻¹ | 60: | 106.28 cm ⁻¹ | 111: | 161.29 cm ⁻¹ | 162: | 265.49 cm ⁻¹ |
| 6: | -27.15 cm ⁻¹ | 61: | 106.60 cm ⁻¹ | 112: | 161.41 cm ⁻¹ | 163: | 269.16 cm ⁻¹ |
| 7: | -17.33 cm ⁻¹ | 62: | 107.00 cm ⁻¹ | 113: | 161.61 cm ⁻¹ | 164: | 274.97 cm ⁻¹ |
| 8: | -11.53 cm ⁻¹ | 63: | 107.54 cm ⁻¹ | 114: | 161.76 cm ⁻¹ | 165: | 275.21 cm ⁻¹ |
| 9: | 38.13 cm ⁻¹ | 64: | 107.87 cm ⁻¹ | 115: | 161.87 cm ⁻¹ | 166: | 276.09 cm ⁻¹ |
| 10: | 40.54 cm ⁻¹ | 65: | 108.21 cm ⁻¹ | 116: | 162.01 cm ⁻¹ | 167: | 276.37 cm ⁻¹ |
| 11: | 41.08 cm ⁻¹ | 66: | 109.01 cm ⁻¹ | 117: | 162.74 cm ⁻¹ | 168: | 279.45 cm ⁻¹ |
| 12: | 42.01 cm ⁻¹ | 67: | 111.51 cm ⁻¹ | 118: | 165.13 cm ⁻¹ | 169: | 295.48 cm ⁻¹ |
| 13: | 42.75 cm ⁻¹ | 68: | 112.04 cm ⁻¹ | 119: | 167.71 cm ⁻¹ | 170: | 312.61 cm ⁻¹ |
| 14: | 58.29 cm ⁻¹ | 69: | 112.14 cm ⁻¹ | 120: | 168.54 cm ⁻¹ | 171: | 325.20 cm ⁻¹ |
| 15: | 63.30 cm ⁻¹ | 70: | 112.78 cm ⁻¹ | 121: | 169.17 cm ⁻¹ | 172: | 325.69 cm ⁻¹ |
| 16: | 64.22 cm ⁻¹ | 71: | 115.12 cm ⁻¹ | 122: | 172.33 cm ⁻¹ | 173: | 373.44 cm ⁻¹ |
| 17: | 64.88 cm ⁻¹ | 72: | 115.89 cm ⁻¹ | 123: | 176.19 cm ⁻¹ | 174: | 401.07 cm ⁻¹ |
| 18: | 66.04 cm ⁻¹ | 73: | 116.40 cm ⁻¹ | 124: | 179.61 cm ⁻¹ | 175: | 496.02 cm ⁻¹ |
| 19: | 66.45 cm ⁻¹ | 74: | 116.57 cm ⁻¹ | 125: | 179.89 cm ⁻¹ | 176: | 555.20 cm ⁻¹ |
| 20: | 66.94 cm ⁻¹ | 75: | 117.09 cm ⁻¹ | 126: | 182.73 cm ⁻¹ | 177: | 804.76 cm ⁻¹ |
| 21: | 67.92 cm ⁻¹ | 76: | 117.21 cm ⁻¹ | 127: | 184.86 cm ⁻¹ | 178: | 918.46 cm ⁻¹ |
| 22: | 68.94 cm ⁻¹ | 77: | 117.43 cm ⁻¹ | 128: | 185.53 cm ⁻¹ | 179: | 938.01 cm ⁻¹ |
| 23: | 69.06 cm ⁻¹ | 78: | 118.38 cm ⁻¹ | 129: | 185.82 cm ⁻¹ | 180: | 949.40 cm ⁻¹ |
| 24: | 69.26 cm ⁻¹ | 79: | 118.73 cm ⁻¹ | 130: | 186.39 cm ⁻¹ | 181: | 1009.43 cm ⁻¹ |
| 25: | 69.52 cm ⁻¹ | 80: | 120.98 cm ⁻¹ | 131: | 190.19 cm ⁻¹ | 182: | 1041.05 cm ⁻¹ |
| 26: | 69.76 cm ⁻¹ | 81: | 121.67 cm ⁻¹ | 132: | 192.16 cm ⁻¹ | 183: | 1165.09 cm ⁻¹ |
| 27: | 70.40 cm ⁻¹ | 82: | 122.09 cm ⁻¹ | 133: | 195.85 cm ⁻¹ | 184: | 1169.13 cm ⁻¹ |
| 28: | 70.90 cm ⁻¹ | 83: | 122.70 cm ⁻¹ | 134: | 196.10 cm ⁻¹ | 185: | 1250.17 cm ⁻¹ |
| 29: | 72.38 cm ⁻¹ | 84: | 123.07 cm ⁻¹ | 135: | 197.74 cm ⁻¹ | 186: | 1349.04 cm ⁻¹ |
| 30: | 73.57 cm ⁻¹ | 85: | 128.17 cm ⁻¹ | 136: | 199.43 cm ⁻¹ | 187: | 1376.73 cm ⁻¹ |
| 31: | 77.44 cm ⁻¹ | 86: | 136.49 cm ⁻¹ | 137: | 200.01 cm ⁻¹ | 188: | 1390.50 cm ⁻¹ |
| 32: | 78.51 cm ⁻¹ | 87: | 136.57 cm ⁻¹ | 138: | 200.73 cm ⁻¹ | 189: | 1402.41 cm ⁻¹ |
| 33: | 78.88 cm ⁻¹ | 88: | 136.74 cm ⁻¹ | 139: | 201.31 cm ⁻¹ | 190: | 1449.43 cm ⁻¹ |
| 34: | 79.46 cm ⁻¹ | 89: | 137.08 cm ⁻¹ | 140: | 201.90 cm ⁻¹ | 191: | 1461.39 cm ⁻¹ |
| 35: | 85.20 cm ⁻¹ | 90: | 137.94 cm ⁻¹ | 141: | 203.66 cm ⁻¹ | 192: | 1479.91 cm ⁻¹ |
| 36: | 87.29 cm ⁻¹ | 91: | 140.38 cm ⁻¹ | 142: | 204.44 cm ⁻¹ | 193: | 1483.12 cm ⁻¹ |
| 37: | 87.57 cm ⁻¹ | 92: | 145.98 cm ⁻¹ | 143: | 204.70 cm ⁻¹ | 194: | 1625.88 cm ⁻¹ |
| 38: | 88.33 cm ⁻¹ | 93: | 146.48 cm ⁻¹ | 144: | 206.71 cm ⁻¹ | 195: | 2940.65 cm ⁻¹ |
| 39: | 90.35 cm ⁻¹ | 94: | 148.21 cm ⁻¹ | 145: | 206.92 cm ⁻¹ | 196: | 2989.72 cm ⁻¹ |
| 40: | 91.66 cm ⁻¹ | 95: | 150.86 cm ⁻¹ | 146: | 211.62 cm ⁻¹ | 197: | 2995.19 cm ⁻¹ |
| 41: | 93.29 cm ⁻¹ | 96: | 153.42 cm ⁻¹ | 147: | 213.69 cm ⁻¹ | 198: | 3033.37 cm ⁻¹ |
| 42: | 93.66 cm ⁻¹ | 97: | 153.93 cm ⁻¹ | 148: | 214.69 cm ⁻¹ | 199: | 3065.52 cm ⁻¹ |
| 43: | 94.92 cm ⁻¹ | 98: | 155.23 cm ⁻¹ | 149: | 216.94 cm ⁻¹ | 200: | 3077.49 cm ⁻¹ |
| 44: | 95.70 cm ⁻¹ | 99: | 156.81 cm ⁻¹ | 150: | 229.08 cm ⁻¹ | 201: | 3091.50 cm ⁻¹ |
| 45: | 97.14 cm ⁻¹ | 100: | 157.24 cm ⁻¹ | 151: | 236.58 cm ⁻¹ | 202: | 3420.73 cm ⁻¹ |
| 46: | 97.75 cm ⁻¹ | 101: | 157.28 cm ⁻¹ | 152: | 236.75 cm ⁻¹ | 203: | 3497.99 cm ⁻¹ |
| 47: | 98.49 cm ⁻¹ | 102: | 157.45 cm ⁻¹ | 153: | 237.29 cm ⁻¹ | | |
| 48: | 99.62 cm ⁻¹ | 103: | 158.50 cm ⁻¹ | 154: | 237.59 cm ⁻¹ | | |
| 49: | 100.00 cm ⁻¹ | 104: | 158.60 cm ⁻¹ | 155: | 239.47 cm ⁻¹ | | |
| 50: | 101.13 cm ⁻¹ | 105: | 159.02 cm ⁻¹ | 156: | 253.81 cm ⁻¹ | | |
| 51: | 101.45 cm ⁻¹ | | | | | | |
| 52: | 102.29 cm ⁻¹ | | | | | | |
| 53: | 103.03 cm ⁻¹ | | | | | | |
| 54: | 103.31 cm ⁻¹ | | | | | | |

2. Cu55NP-2-propanol

| | | | | | | | |
|-----|---------------------------|------|---------------------------|------|---------------------------|------|----------------------------|
| 0: | 0.00 cm** ⁻¹ | 51: | 102.36 cm** ⁻¹ | 102: | 157.94 cm** ⁻¹ | 153: | 237.14 cm** ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm** ⁻¹ | 52: | 102.46 cm** ⁻¹ | 103: | 158.54 cm** ⁻¹ | 154: | 238.03 cm** ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm** ⁻¹ | 53: | 103.05 cm** ⁻¹ | 104: | 158.98 cm** ⁻¹ | 155: | 238.56 cm** ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm** ⁻¹ | 54: | 103.17 cm** ⁻¹ | 105: | 159.17 cm** ⁻¹ | 156: | 254.07 cm** ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm** ⁻¹ | 55: | 103.42 cm** ⁻¹ | 106: | 159.39 cm** ⁻¹ | 157: | 254.40 cm** ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm** ⁻¹ | 56: | 103.61 cm** ⁻¹ | 107: | 159.48 cm** ⁻¹ | 158: | 255.32 cm** ⁻¹ |
| 6: | -19.41 cm** ⁻¹ | 57: | 104.31 cm** ⁻¹ | 108: | 160.37 cm** ⁻¹ | 159: | 256.40 cm** ⁻¹ |
| 7: | -16.56 cm** ⁻¹ | 58: | 105.20 cm** ⁻¹ | 109: | 160.47 cm** ⁻¹ | 160: | 258.23 cm** ⁻¹ |
| 8: | 20.87 cm** ⁻¹ | 59: | 106.20 cm** ⁻¹ | 110: | 160.71 cm** ⁻¹ | 161: | 265.37 cm** ⁻¹ |
| 9: | 37.13 cm** ⁻¹ | 60: | 106.41 cm** ⁻¹ | 111: | 161.25 cm** ⁻¹ | 162: | 265.74 cm** ⁻¹ |
| 10: | 40.35 cm** ⁻¹ | 61: | 106.64 cm** ⁻¹ | 112: | 161.41 cm** ⁻¹ | 163: | 266.37 cm** ⁻¹ |
| 11: | 41.65 cm** ⁻¹ | 62: | 106.90 cm** ⁻¹ | 113: | 161.54 cm** ⁻¹ | 164: | 275.31 cm** ⁻¹ |
| 12: | 41.78 cm** ⁻¹ | 63: | 107.44 cm** ⁻¹ | 114: | 161.75 cm** ⁻¹ | 165: | 275.79 cm** ⁻¹ |
| 13: | 42.59 cm** ⁻¹ | 64: | 107.97 cm** ⁻¹ | 115: | 161.86 cm** ⁻¹ | 166: | 276.03 cm** ⁻¹ |
| 14: | 58.32 cm** ⁻¹ | 65: | 108.31 cm** ⁻¹ | 116: | 162.18 cm** ⁻¹ | 167: | 276.59 cm** ⁻¹ |
| 15: | 60.64 cm** ⁻¹ | 66: | 109.14 cm** ⁻¹ | 117: | 162.40 cm** ⁻¹ | 168: | 276.79 cm** ⁻¹ |
| 16: | 63.25 cm** ⁻¹ | 67: | 111.34 cm** ⁻¹ | 118: | 162.99 cm** ⁻¹ | 169: | 296.69 cm** ⁻¹ |
| 17: | 65.13 cm** ⁻¹ | 68: | 112.04 cm** ⁻¹ | 119: | 167.23 cm** ⁻¹ | 170: | 320.26 cm** ⁻¹ |
| 18: | 67.08 cm** ⁻¹ | 69: | 112.54 cm** ⁻¹ | 120: | 169.44 cm** ⁻¹ | 171: | 327.27 cm** ⁻¹ |
| 19: | 67.52 cm** ⁻¹ | 70: | 112.66 cm** ⁻¹ | 121: | 169.61 cm** ⁻¹ | 172: | 327.76 cm** ⁻¹ |
| 20: | 67.70 cm** ⁻¹ | 71: | 115.29 cm** ⁻¹ | 122: | 171.79 cm** ⁻¹ | 173: | 369.03 cm** ⁻¹ |
| 21: | 68.62 cm** ⁻¹ | 72: | 115.75 cm** ⁻¹ | 123: | 176.53 cm** ⁻¹ | 174: | 411.61 cm** ⁻¹ |
| 22: | 68.92 cm** ⁻¹ | 73: | 116.38 cm** ⁻¹ | 124: | 179.89 cm** ⁻¹ | 175: | 475.25 cm** ⁻¹ |
| 23: | 69.20 cm** ⁻¹ | 74: | 116.51 cm** ⁻¹ | 125: | 180.05 cm** ⁻¹ | 176: | 492.93 cm** ⁻¹ |
| 24: | 69.30 cm** ⁻¹ | 75: | 116.76 cm** ⁻¹ | 126: | 183.40 cm** ⁻¹ | 177: | 792.88 cm** ⁻¹ |
| 25: | 69.69 cm** ⁻¹ | 76: | 117.00 cm** ⁻¹ | 127: | 184.97 cm** ⁻¹ | 178: | 912.35 cm** ⁻¹ |
| 26: | 70.22 cm** ⁻¹ | 77: | 117.57 cm** ⁻¹ | 128: | 185.53 cm** ⁻¹ | 179: | 926.73 cm** ⁻¹ |
| 27: | 70.37 cm** ⁻¹ | 78: | 118.21 cm** ⁻¹ | 129: | 186.16 cm** ⁻¹ | 180: | 943.02 cm** ⁻¹ |
| 28: | 70.82 cm** ⁻¹ | 79: | 120.21 cm** ⁻¹ | 130: | 186.60 cm** ⁻¹ | 181: | 1079.31 cm** ⁻¹ |
| 29: | 74.92 cm** ⁻¹ | 80: | 121.24 cm** ⁻¹ | 131: | 192.51 cm** ⁻¹ | 182: | 1115.95 cm** ⁻¹ |
| 30: | 75.21 cm** ⁻¹ | 81: | 121.74 cm** ⁻¹ | 132: | 194.08 cm** ⁻¹ | 183: | 1173.26 cm** ⁻¹ |
| 31: | 77.64 cm** ⁻¹ | 82: | 122.15 cm** ⁻¹ | 133: | 195.65 cm** ⁻¹ | 184: | 1259.57 cm** ⁻¹ |
| 32: | 78.83 cm** ⁻¹ | 83: | 122.72 cm** ⁻¹ | 134: | 196.24 cm** ⁻¹ | 185: | 1346.29 cm** ⁻¹ |
| 33: | 79.15 cm** ⁻¹ | 84: | 123.53 cm** ⁻¹ | 135: | 198.71 cm** ⁻¹ | 186: | 1372.41 cm** ⁻¹ |
| 34: | 79.22 cm** ⁻¹ | 85: | 126.36 cm** ⁻¹ | 136: | 199.66 cm** ⁻¹ | 187: | 1395.44 cm** ⁻¹ |
| 35: | 84.76 cm** ⁻¹ | 86: | 133.71 cm** ⁻¹ | 137: | 201.19 cm** ⁻¹ | 188: | 1402.31 cm** ⁻¹ |
| 36: | 87.23 cm** ⁻¹ | 87: | 136.57 cm** ⁻¹ | 138: | 201.58 cm** ⁻¹ | 189: | 1452.65 cm** ⁻¹ |
| 37: | 87.54 cm** ⁻¹ | 88: | 136.80 cm** ⁻¹ | 139: | 201.67 cm** ⁻¹ | 190: | 1459.06 cm** ⁻¹ |
| 38: | 88.14 cm** ⁻¹ | 89: | 136.96 cm** ⁻¹ | 140: | 202.22 cm** ⁻¹ | 191: | 1478.17 cm** ⁻¹ |
| 39: | 91.18 cm** ⁻¹ | 90: | 137.49 cm** ⁻¹ | 141: | 203.43 cm** ⁻¹ | 192: | 1482.27 cm** ⁻¹ |
| 40: | 91.76 cm** ⁻¹ | 91: | 138.19 cm** ⁻¹ | 142: | 203.88 cm** ⁻¹ | 193: | 2931.59 cm** ⁻¹ |
| 41: | 92.32 cm** ⁻¹ | 92: | 146.58 cm** ⁻¹ | 143: | 205.50 cm** ⁻¹ | 194: | 2960.44 cm** ⁻¹ |
| 42: | 93.76 cm** ⁻¹ | 93: | 150.02 cm** ⁻¹ | 144: | 206.78 cm** ⁻¹ | 195: | 2997.16 cm** ⁻¹ |
| 43: | 94.24 cm** ⁻¹ | 94: | 151.10 cm** ⁻¹ | 145: | 207.01 cm** ⁻¹ | 196: | 3054.43 cm** ⁻¹ |
| 44: | 94.72 cm** ⁻¹ | 95: | 151.32 cm** ⁻¹ | 146: | 208.46 cm** ⁻¹ | 197: | 3070.20 cm** ⁻¹ |
| 45: | 97.04 cm** ⁻¹ | 96: | 153.36 cm** ⁻¹ | 147: | 211.60 cm** ⁻¹ | 198: | 3086.81 cm** ⁻¹ |
| 46: | 97.19 cm** ⁻¹ | 97: | 154.37 cm** ⁻¹ | 148: | 217.57 cm** ⁻¹ | 199: | 3098.18 cm** ⁻¹ |
| 47: | 98.56 cm** ⁻¹ | 98: | 154.86 cm** ⁻¹ | 149: | 218.06 cm** ⁻¹ | 200: | 3725.40 cm** ⁻¹ |
| 48: | 98.94 cm** ⁻¹ | 99: | 157.39 cm** ⁻¹ | 150: | 223.03 cm** ⁻¹ | | |
| 49: | 100.91 cm** ⁻¹ | 100: | 157.43 cm** ⁻¹ | 151: | 236.46 cm** ⁻¹ | | |
| 50: | 101.60 cm** ⁻¹ | 101: | 157.87 cm** ⁻¹ | 152: | 237.00 cm** ⁻¹ | | |

3. Cu₅₅NP-2-propanotiol

| | | | | | | | |
|-----|---------------------------|------|---------------------------|------|---------------------------|------|----------------------------|
| 0: | 0.00 cm** ⁻¹ | 51: | 101.49 cm** ⁻¹ | 102: | 157.53 cm** ⁻¹ | 153: | 237.05 cm** ⁻¹ |
| 1: | 0.00 cm** ⁻¹ | 52: | 101.97 cm** ⁻¹ | 103: | 158.66 cm** ⁻¹ | 154: | 237.33 cm** ⁻¹ |
| 2: | 0.00 cm** ⁻¹ | 53: | 102.25 cm** ⁻¹ | 104: | 159.15 cm** ⁻¹ | 155: | 238.20 cm** ⁻¹ |
| 3: | 0.00 cm** ⁻¹ | 54: | 103.03 cm** ⁻¹ | 105: | 159.32 cm** ⁻¹ | 156: | 248.68 cm** ⁻¹ |
| 4: | 0.00 cm** ⁻¹ | 55: | 103.30 cm** ⁻¹ | 106: | 159.60 cm** ⁻¹ | 157: | 252.73 cm** ⁻¹ |
| 5: | 0.00 cm** ⁻¹ | 56: | 103.55 cm** ⁻¹ | 107: | 159.99 cm** ⁻¹ | 158: | 253.72 cm** ⁻¹ |
| 6: | -30.04 cm** ⁻¹ | 57: | 104.04 cm** ⁻¹ | 108: | 160.65 cm** ⁻¹ | 159: | 255.14 cm** ⁻¹ |
| 7: | -17.09 cm** ⁻¹ | 58: | 104.19 cm** ⁻¹ | 109: | 160.78 cm** ⁻¹ | 160: | 256.06 cm** ⁻¹ |
| 8: | 12.85 cm** ⁻¹ | 59: | 104.86 cm** ⁻¹ | 110: | 161.11 cm** ⁻¹ | 161: | 265.22 cm** ⁻¹ |
| 9: | 38.35 cm** ⁻¹ | 60: | 105.27 cm** ⁻¹ | 111: | 161.37 cm** ⁻¹ | 162: | 265.59 cm** ⁻¹ |
| 10: | 39.40 cm** ⁻¹ | 61: | 106.01 cm** ⁻¹ | 112: | 161.48 cm** ⁻¹ | 163: | 267.01 cm** ⁻¹ |
| 11: | 41.45 cm** ⁻¹ | 62: | 106.66 cm** ⁻¹ | 113: | 161.64 cm** ⁻¹ | 164: | 274.62 cm** ⁻¹ |
| 12: | 42.48 cm** ⁻¹ | 63: | 107.00 cm** ⁻¹ | 114: | 161.94 cm** ⁻¹ | 165: | 275.15 cm** ⁻¹ |
| 13: | 43.06 cm** ⁻¹ | 64: | 107.59 cm** ⁻¹ | 115: | 162.03 cm** ⁻¹ | 166: | 275.83 cm** ⁻¹ |
| 14: | 49.91 cm** ⁻¹ | 65: | 107.81 cm** ⁻¹ | 116: | 162.28 cm** ⁻¹ | 167: | 275.95 cm** ⁻¹ |
| 15: | 62.21 cm** ⁻¹ | 66: | 108.57 cm** ⁻¹ | 117: | 162.81 cm** ⁻¹ | 168: | 276.73 cm** ⁻¹ |
| 16: | 64.21 cm** ⁻¹ | 67: | 111.05 cm** ⁻¹ | 118: | 163.78 cm** ⁻¹ | 169: | 292.28 cm** ⁻¹ |
| 17: | 64.70 cm** ⁻¹ | 68: | 111.34 cm** ⁻¹ | 119: | 166.86 cm** ⁻¹ | 170: | 295.79 cm** ⁻¹ |
| 18: | 64.97 cm** ⁻¹ | 69: | 112.29 cm** ⁻¹ | 120: | 168.39 cm** ⁻¹ | 171: | 312.03 cm** ⁻¹ |
| 19: | 65.43 cm** ⁻¹ | 70: | 112.67 cm** ⁻¹ | 121: | 168.96 cm** ⁻¹ | 172: | 325.08 cm** ⁻¹ |
| 20: | 66.87 cm** ⁻¹ | 71: | 114.10 cm** ⁻¹ | 122: | 171.85 cm** ⁻¹ | 173: | 325.58 cm** ⁻¹ |
| 21: | 67.06 cm** ⁻¹ | 72: | 115.48 cm** ⁻¹ | 123: | 176.83 cm** ⁻¹ | 174: | 333.12 cm** ⁻¹ |
| 22: | 68.17 cm** ⁻¹ | 73: | 115.97 cm** ⁻¹ | 124: | 179.50 cm** ⁻¹ | 175: | 418.51 cm** ⁻¹ |
| 23: | 68.96 cm** ⁻¹ | 74: | 116.25 cm** ⁻¹ | 125: | 179.95 cm** ⁻¹ | 176: | 430.42 cm** ⁻¹ |
| 24: | 69.25 cm** ⁻¹ | 75: | 116.73 cm** ⁻¹ | 126: | 182.50 cm** ⁻¹ | 177: | 582.38 cm** ⁻¹ |
| 25: | 69.33 cm** ⁻¹ | 76: | 117.19 cm** ⁻¹ | 127: | 185.13 cm** ⁻¹ | 178: | 829.93 cm** ⁻¹ |
| 26: | 70.35 cm** ⁻¹ | 77: | 117.27 cm** ⁻¹ | 128: | 185.29 cm** ⁻¹ | 179: | 886.12 cm** ⁻¹ |
| 27: | 70.69 cm** ⁻¹ | 78: | 118.25 cm** ⁻¹ | 129: | 185.77 cm** ⁻¹ | 180: | 921.29 cm** ⁻¹ |
| 28: | 71.17 cm** ⁻¹ | 79: | 118.77 cm** ⁻¹ | 130: | 186.14 cm** ⁻¹ | 181: | 953.10 cm** ⁻¹ |
| 29: | 71.73 cm** ⁻¹ | 80: | 120.93 cm** ⁻¹ | 131: | 191.06 cm** ⁻¹ | 182: | 1057.29 cm** ⁻¹ |
| 30: | 73.82 cm** ⁻¹ | 81: | 121.61 cm** ⁻¹ | 132: | 192.66 cm** ⁻¹ | 183: | 1137.67 cm** ⁻¹ |
| 31: | 77.42 cm** ⁻¹ | 82: | 122.13 cm** ⁻¹ | 133: | 196.35 cm** ⁻¹ | 184: | 1163.68 cm** ⁻¹ |
| 32: | 78.23 cm** ⁻¹ | 83: | 122.62 cm** ⁻¹ | 134: | 197.17 cm** ⁻¹ | 185: | 1250.07 cm** ⁻¹ |
| 33: | 79.12 cm** ⁻¹ | 84: | 123.87 cm** ⁻¹ | 135: | 198.49 cm** ⁻¹ | 186: | 1330.86 cm** ⁻¹ |
| 34: | 80.02 cm** ⁻¹ | 85: | 124.78 cm** ⁻¹ | 136: | 199.66 cm** ⁻¹ | 187: | 1377.61 cm** ⁻¹ |
| 35: | 83.81 cm** ⁻¹ | 86: | 130.59 cm** ⁻¹ | 137: | 200.15 cm** ⁻¹ | 188: | 1395.84 cm** ⁻¹ |
| 36: | 85.92 cm** ⁻¹ | 87: | 136.69 cm** ⁻¹ | 138: | 200.88 cm** ⁻¹ | 189: | 1450.42 cm** ⁻¹ |
| 37: | 87.59 cm** ⁻¹ | 88: | 136.76 cm** ⁻¹ | 139: | 201.43 cm** ⁻¹ | 190: | 1457.51 cm** ⁻¹ |
| 38: | 88.14 cm** ⁻¹ | 89: | 137.03 cm** ⁻¹ | 140: | 202.80 cm** ⁻¹ | 191: | 1465.99 cm** ⁻¹ |
| 39: | 88.83 cm** ⁻¹ | 90: | 137.39 cm** ⁻¹ | 141: | 203.63 cm** ⁻¹ | 192: | 1477.77 cm** ⁻¹ |
| 40: | 90.67 cm** ⁻¹ | 91: | 137.87 cm** ⁻¹ | 142: | 203.99 cm** ⁻¹ | 193: | 2628.76 cm** ⁻¹ |
| 41: | 91.29 cm** ⁻¹ | 92: | 144.25 cm** ⁻¹ | 143: | 204.66 cm** ⁻¹ | 194: | 2946.05 cm** ⁻¹ |
| 42: | 93.30 cm** ⁻¹ | 93: | 145.49 cm** ⁻¹ | 144: | 206.49 cm** ⁻¹ | 195: | 2953.30 cm** ⁻¹ |
| 43: | 94.07 cm** ⁻¹ | 94: | 146.81 cm** ⁻¹ | 145: | 206.68 cm** ⁻¹ | 196: | 3018.21 cm** ⁻¹ |
| 44: | 94.34 cm** ⁻¹ | 95: | 149.99 cm** ⁻¹ | 146: | 207.48 cm** ⁻¹ | 197: | 3042.04 cm** ⁻¹ |
| 45: | 96.98 cm** ⁻¹ | 96: | 153.36 cm** ⁻¹ | 147: | 212.08 cm** ⁻¹ | 198: | 3053.66 cm** ⁻¹ |
| 46: | 97.75 cm** ⁻¹ | 97: | 153.68 cm** ⁻¹ | 148: | 213.65 cm** ⁻¹ | 199: | 3076.20 cm** ⁻¹ |
| 47: | 98.77 cm** ⁻¹ | 98: | 154.69 cm** ⁻¹ | 149: | 214.88 cm** ⁻¹ | 200: | 3086.66 cm** ⁻¹ |
| 48: | 99.71 cm** ⁻¹ | 99: | 156.85 cm** ⁻¹ | 150: | 225.26 cm** ⁻¹ | | |
| 49: | 99.99 cm** ⁻¹ | 100: | 157.30 cm** ⁻¹ | 151: | 236.07 cm** ⁻¹ | | |
| 50: | 100.22 cm** ⁻¹ | 101: | 157.48 cm** ⁻¹ | 152: | 236.45 cm** ⁻¹ | | |

Apéndice C
Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre
(Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN0-xTB

1. Cu₅₅NP-2-propanamina [cm^{(-1)}]**

| | | | | | | | |
|----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 58 | 107.06 | 115 | 160.09 | 172 | 321.76 |
| 2 | 0.00 | 59 | 108.77 | 116 | 161.85 | 173 | 322.17 |
| 3 | 0.00 | 60 | 108.94 | 117 | 167.05 | 174 | 345.65 |
| 4 | 0.00 | 61 | 109.15 | 118 | 168.65 | 175 | 374.46 |
| 5 | 0.00 | 62 | 109.41 | 119 | 168.98 | 176 | 407.32 |
| 6 | 0.00 | 63 | 111.17 | 120 | 173.07 | 177 | 451.53 |
| 7 | 3.45 | 64 | 111.22 | 121 | 173.73 | 178 | 852.98 |
| 8 | 29.10 | 65 | 111.42 | 122 | 173.92 | 179 | 869.87 |
| 9 | 37.52 | 66 | 111.47 | 123 | 175.77 | 180 | 919.58 |
| 10 | 50.51 | 67 | 111.66 | 124 | 175.87 | 181 | 941.75 |
| 11 | 51.41 | 68 | 113.07 | 125 | 176.01 | 182 | 959.80 |
| 12 | 51.87 | 69 | 113.24 | 126 | 176.13 | 183 | 1010.86 |
| 13 | 52.18 | 70 | 116.52 | 127 | 185.46 | 184 | 1101.08 |
| 14 | 52.76 | 71 | 120.44 | 128 | 187.10 | 185 | 1160.43 |
| 15 | 63.74 | 72 | 121.12 | 129 | 187.41 | 186 | 1202.67 |
| 16 | 67.27 | 73 | 121.40 | 130 | 188.06 | 187 | 1282.34 |
| 17 | 67.40 | 74 | 121.64 | 131 | 188.30 | 188 | 1315.88 |
| 18 | 67.71 | 75 | 121.97 | 132 | 190.33 | 189 | 1358.64 |
| 19 | 69.27 | 76 | 124.13 | 133 | 197.12 | 190 | 1378.91 |
| 20 | 69.44 | 77 | 125.65 | 134 | 202.96 | 191 | 1410.62 |
| 21 | 69.45 | 78 | 125.85 | 135 | 203.07 | 192 | 1431.89 |
| 22 | 69.57 | 79 | 125.97 | 136 | 206.41 | 193 | 1456.46 |
| 23 | 71.87 | 80 | 127.27 | 137 | 211.18 | 194 | 1464.14 |
| 24 | 77.60 | 81 | 133.73 | 138 | 211.95 | 195 | 1472.05 |
| 25 | 78.16 | 82 | 134.25 | 139 | 212.72 | 196 | 2386.17 |
| 26 | 78.54 | 83 | 134.84 | 140 | 213.92 | 197 | 3082.17 |
| 27 | 78.63 | 84 | 134.94 | 141 | 216.67 | 198 | 3099.68 |
| 28 | 78.72 | 85 | 136.86 | 142 | 217.01 | 199 | 3113.75 |
| 29 | 78.88 | 86 | 137.51 | 143 | 217.47 | 200 | 3120.12 |
| 30 | 78.94 | 87 | 137.95 | 144 | 218.03 | 201 | 3125.05 |
| 31 | 79.50 | 88 | 139.92 | 145 | 218.30 | 202 | 3136.42 |
| 32 | 79.63 | 89 | 141.75 | 146 | 223.00 | 203 | 3374.67 |
| 33 | 83.21 | 90 | 142.02 | 147 | 223.23 | 204 | 3420.98 |
| 34 | 83.99 | 91 | 143.36 | 148 | 223.44 | | |
| 35 | 84.08 | 92 | 145.10 | 149 | 223.53 | | |
| 36 | 85.08 | 93 | 145.52 | 150 | 225.29 | | |
| 37 | 85.38 | 94 | 145.83 | 151 | 226.76 | | |
| 38 | 85.49 | 95 | 145.91 | 152 | 226.92 | | |
| 39 | 85.64 | 96 | 145.97 | 153 | 227.58 | | |
| 40 | 87.75 | 97 | 146.02 | 154 | 229.57 | | |
| 41 | 88.08 | 98 | 146.16 | 155 | 229.81 | | |
| 42 | 88.36 | 99 | 147.38 | 156 | 229.86 | | |
| 43 | 91.62 | 100 | 148.67 | 157 | 230.01 | | |
| 44 | 91.71 | 101 | 149.81 | 158 | 230.06 | | |
| 45 | 92.43 | 102 | 151.14 | 159 | 230.67 | | |
| 46 | 100.43 | 103 | 151.24 | 160 | 232.33 | | |
| 47 | 102.71 | 104 | 151.41 | 161 | 265.56 | | |
| 48 | 102.89 | 105 | 152.94 | 162 | 265.64 | | |
| 49 | 103.03 | 106 | 153.03 | 163 | 265.91 | | |
| 50 | 103.26 | 107 | 153.10 | 164 | 272.15 | | |
| 51 | 103.55 | 108 | 153.62 | 165 | 272.75 | | |
| 52 | 103.79 | 109 | 156.24 | 166 | 272.82 | | |
| 53 | 103.98 | 110 | 156.81 | 167 | 272.88 | | |
| 54 | 105.38 | 111 | 157.00 | 168 | 273.45 | | |
| 55 | 105.64 | 112 | 157.60 | 169 | 290.72 | | |
| 56 | 105.76 | 113 | 159.80 | 170 | 297.21 | | |
| 57 | 106.23 | 114 | 159.97 | 171 | 319.88 | | |

2. CussNP-2-propanol [cm**(-1)]

| | | | | | | | |
|----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0,00 | 52 | 104,78 | 103 | 152,37 | 154 | 229,66 |
| 2 | 0,00 | 53 | 105,13 | 104 | 153,02 | 155 | 229,90 |
| 3 | 0,00 | 54 | 105,73 | 105 | 153,09 | 156 | 230,09 |
| 4 | 0,00 | 55 | 106,40 | 106 | 153,32 | 157 | 230,17 |
| 5 | 0,00 | 56 | 106,68 | 107 | 154,10 | 158 | 230,44 |
| 6 | 0,00 | 57 | 108,14 | 108 | 155,60 | 159 | 231,85 |
| 7 | 35,40 | 58 | 108,66 | 109 | 156,57 | 160 | 242,40 |
| 8 | 41,25 | 59 | 109,08 | 110 | 157,51 | 161 | 265,40 |
| 9 | 49,29 | 60 | 109,62 | 111 | 157,68 | 162 | 265,44 |
| 10 | 51,07 | 61 | 110,35 | 112 | 159,02 | 163 | 265,97 |
| 11 | 51,55 | 62 | 110,97 | 113 | 159,57 | 164 | 271,66 |
| 12 | 53,35 | 63 | 111,31 | 114 | 160,54 | 165 | 272,47 |
| 13 | 55,54 | 64 | 111,48 | 115 | 163,00 | 166 | 272,63 |
| 14 | 58,09 | 65 | 112,23 | 116 | 165,89 | 167 | 272,73 |
| 15 | 65,95 | 66 | 112,69 | 117 | 168,00 | 168 | 274,29 |
| 16 | 66,77 | 67 | 113,05 | 118 | 169,02 | 169 | 290,45 |
| 17 | 67,85 | 68 | 113,80 | 119 | 170,25 | 170 | 314,42 |
| 18 | 68,61 | 69 | 116,13 | 120 | 172,65 | 171 | 318,92 |
| 19 | 69,23 | 70 | 120,19 | 121 | 173,32 | 172 | 321,58 |
| 20 | 69,41 | 71 | 121,48 | 122 | 174,77 | 173 | 321,88 |
| 21 | 69,56 | 72 | 122,00 | 123 | 176,14 | 174 | 354,01 |
| 22 | 70,43 | 73 | 122,29 | 124 | 176,42 | 175 | 365,27 |
| 23 | 76,70 | 74 | 122,88 | 125 | 176,50 | 176 | 387,40 |
| 24 | 77,75 | 75 | 125,25 | 126 | 178,87 | 177 | 474,54 |
| 25 | 78,21 | 76 | 125,50 | 127 | 183,58 | 178 | 857,74 |
| 26 | 78,62 | 77 | 125,58 | 128 | 186,21 | 179 | 928,83 |
| 27 | 79,15 | 78 | 126,28 | 129 | 187,31 | 180 | 937,02 |
| 28 | 79,28 | 79 | 129,43 | 130 | 188,28 | 181 | 963,79 |
| 29 | 79,37 | 80 | 130,91 | 131 | 188,59 | 182 | 1060,20 |
| 30 | 79,84 | 81 | 134,58 | 132 | 190,00 | 183 | 1098,70 |
| 31 | 80,60 | 82 | 135,05 | 133 | 201,52 | 184 | 1166,04 |
| 32 | 80,72 | 83 | 135,52 | 134 | 202,80 | 185 | 1219,76 |
| 33 | 84,07 | 84 | 137,15 | 135 | 204,31 | 186 | 1272,78 |
| 34 | 84,59 | 85 | 137,75 | 136 | 210,29 | 187 | 1324,61 |
| 35 | 84,81 | 86 | 138,17 | 137 | 211,35 | 188 | 1354,66 |
| 36 | 85,23 | 87 | 139,28 | 138 | 212,40 | 189 | 1371,88 |
| 37 | 85,70 | 88 | 141,56 | 139 | 213,29 | 190 | 1400,42 |
| 38 | 86,67 | 89 | 142,31 | 140 | 216,08 | 191 | 1420,81 |
| 39 | 88,35 | 90 | 142,94 | 141 | 216,81 | 192 | 1452,12 |
| 40 | 89,08 | 91 | 143,21 | 142 | 217,38 | 193 | 1458,84 |
| 41 | 90,21 | 92 | 144,63 | 143 | 217,57 | 194 | 2187,31 |
| 42 | 91,61 | 93 | 145,55 | 144 | 218,33 | 195 | 2299,98 |
| 43 | 92,06 | 94 | 145,80 | 145 | 219,44 | 196 | 3075,06 |
| 44 | 93,57 | 95 | 145,86 | 146 | 222,77 | 197 | 3105,32 |
| 45 | 98,86 | 96 | 146,24 | 147 | 223,36 | 198 | 3106,32 |
| 46 | 102,18 | 97 | 146,48 | 148 | 223,41 | 199 | 3119,06 |
| 47 | 102,60 | 98 | 147,10 | 149 | 223,80 | 200 | 3137,86 |
| 48 | 102,95 | 99 | 148,34 | 150 | 225,50 | 201 | 3386,55 |
| 49 | 102,99 | 100 | 149,56 | 151 | 226,37 | | |
| 50 | 103,79 | 101 | 150,59 | 152 | 227,81 | | |
| 51 | 104,50 | 102 | 150,99 | 153 | 227,89 | | |

3. Cu₅₅NP-2-propanotiol [cm^{**}(-1)]

| | | | | | | | |
|----|--------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0,00 | 52 | 104,27 | 103 | 152,17 | 154 | 229,93 |
| 2 | 0,00 | 53 | 105,46 | 104 | 152,74 | 155 | 230,10 |
| 3 | 0,00 | 54 | 105,75 | 105 | 153,08 | 156 | 230,46 |
| 4 | 0,00 | 55 | 105,82 | 106 | 153,27 | 157 | 231,03 |
| 5 | 0,00 | 56 | 106,32 | 107 | 155,79 | 158 | 244,96 |
| 6 | 0,00 | 57 | 107,83 | 108 | 156,27 | 159 | 247,31 |
| 7 | 34,42 | 58 | 108,47 | 109 | 156,80 | 160 | 264,93 |
| 8 | 37,51 | 59 | 108,54 | 110 | 157,33 | 161 | 265,05 |
| 9 | 40,20 | 60 | 109,17 | 111 | 158,33 | 162 | 265,43 |
| 10 | 50,91 | 61 | 110,04 | 112 | 159,18 | 163 | 271,96 |
| 11 | 51,13 | 62 | 110,62 | 113 | 159,48 | 164 | 272,12 |
| 12 | 52,14 | 63 | 110,91 | 114 | 160,28 | 165 | 272,88 |
| 13 | 54,23 | 64 | 111,31 | 115 | 165,04 | 166 | 273,10 |
| 14 | 54,26 | 65 | 112,20 | 116 | 166,40 | 167 | 278,23 |
| 15 | 66,27 | 66 | 112,48 | 117 | 167,90 | 168 | 290,02 |
| 16 | 66,87 | 67 | 112,74 | 118 | 171,63 | 169 | 294,51 |
| 17 | 66,94 | 68 | 112,85 | 119 | 172,46 | 170 | 313,97 |
| 18 | 67,34 | 69 | 116,76 | 120 | 173,08 | 171 | 322,58 |
| 19 | 68,75 | 70 | 119,80 | 121 | 175,25 | 172 | 323,13 |
| 20 | 68,91 | 71 | 120,76 | 122 | 175,50 | 173 | 323,36 |
| 21 | 69,23 | 72 | 121,48 | 123 | 175,99 | 174 | 357,10 |
| 22 | 69,39 | 73 | 121,64 | 124 | 176,21 | 175 | 373,21 |
| 23 | 77,13 | 74 | 122,96 | 125 | 183,21 | 176 | 455,12 |
| 24 | 77,43 | 75 | 124,68 | 126 | 186,13 | 177 | 501,82 |
| 25 | 77,87 | 76 | 125,06 | 127 | 186,51 | 178 | 607,13 |
| 26 | 78,35 | 77 | 125,75 | 128 | 187,34 | 179 | 846,32 |
| 27 | 78,39 | 78 | 125,83 | 129 | 187,72 | 180 | 902,37 |
| 28 | 78,97 | 79 | 131,72 | 130 | 188,35 | 181 | 925,07 |
| 29 | 79,04 | 80 | 133,56 | 131 | 202,68 | 182 | 956,74 |
| 30 | 79,22 | 81 | 133,62 | 132 | 202,92 | 183 | 1031,15 |
| 31 | 79,77 | 82 | 135,13 | 133 | 208,79 | 184 | 1106,31 |
| 32 | 81,42 | 83 | 135,24 | 134 | 208,96 | 185 | 1112,61 |
| 33 | 83,57 | 84 | 137,70 | 135 | 211,33 | 186 | 1213,20 |
| 34 | 83,83 | 85 | 137,94 | 136 | 211,64 | 187 | 1260,49 |
| 35 | 84,87 | 86 | 138,77 | 137 | 211,92 | 188 | 1350,53 |
| 36 | 85,41 | 87 | 140,95 | 138 | 215,09 | 189 | 1353,23 |
| 37 | 85,51 | 88 | 141,30 | 139 | 215,82 | 190 | 1411,94 |
| 38 | 85,84 | 89 | 142,44 | 140 | 216,93 | 191 | 1414,17 |
| 39 | 87,10 | 90 | 143,27 | 141 | 217,27 | 192 | 1424,22 |
| 40 | 87,93 | 91 | 143,79 | 142 | 217,52 | 193 | 1429,35 |
| 41 | 88,69 | 92 | 144,48 | 143 | 218,41 | 194 | 2401,37 |
| 42 | 90,94 | 93 | 144,91 | 144 | 221,59 | 195 | 2409,82 |
| 43 | 91,28 | 94 | 145,54 | 145 | 223,05 | 196 | 2421,26 |
| 44 | 92,84 | 95 | 145,57 | 146 | 223,37 | 197 | 3075,02 |
| 45 | 100,80 | 96 | 146,17 | 147 | 223,44 | 198 | 3107,08 |
| 46 | 101,02 | 97 | 146,32 | 148 | 224,89 | 199 | 3115,56 |
| 47 | 102,43 | 98 | 147,25 | 149 | 225,65 | 200 | 3130,55 |
| 48 | 102,71 | 99 | 148,90 | 150 | 227,65 | 201 | 3138,24 |
| 49 | 103,51 | 100 | 150,29 | 151 | 227,82 | | |
| 50 | 103,71 | 101 | 150,63 | 152 | 228,13 | | |
| 51 | 103,76 | 102 | 151,40 | 153 | 229,70 | | |

Apéndice D

Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN1-xTB

1. Cu₅₅NP-2-propanamina [cm^{**(-1)}]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 74.47 | 103 | 111.02 | 154 | 163.50 |
| 2 | 0.00 | 53 | 75.05 | 104 | 111.07 | 155 | 164.17 |
| 3 | 0.00 | 54 | 75.84 | 105 | 111.32 | 156 | 165.48 |
| 4 | 0.00 | 55 | 76.38 | 106 | 111.58 | 157 | 175.69 |
| 5 | 0.00 | 56 | 76.41 | 107 | 113.22 | 158 | 175.76 |
| 6 | 0.00 | 57 | 76.76 | 108 | 115.33 | 159 | 183.74 |
| 7 | 14.59 | 58 | 76.98 | 109 | 115.70 | 160 | 188.99 |
| 8 | 21.38 | 59 | 77.10 | 110 | 115.88 | 161 | 218.03 |
| 9 | 36.50 | 60 | 77.60 | 111 | 116.04 | 162 | 218.46 |
| 10 | 38.43 | 61 | 77.93 | 112 | 116.15 | 163 | 218.57 |
| 11 | 39.11 | 62 | 77.95 | 113 | 116.39 | 164 | 219.79 |
| 12 | 39.17 | 63 | 78.83 | 114 | 116.60 | 165 | 220.05 |
| 13 | 39.96 | 64 | 78.96 | 115 | 116.67 | 166 | 220.59 |
| 14 | 41.32 | 65 | 79.04 | 116 | 116.76 | 167 | 220.67 |
| 15 | 45.61 | 66 | 81.15 | 117 | 117.50 | 168 | 221.02 |
| 16 | 46.63 | 67 | 81.50 | 118 | 119.04 | 169 | 230.21 |
| 17 | 47.14 | 68 | 82.17 | 119 | 119.12 | 170 | 234.54 |
| 18 | 49.15 | 69 | 82.38 | 120 | 120.11 | 171 | 240.56 |
| 19 | 49.53 | 70 | 84.01 | 121 | 120.61 | 172 | 244.47 |
| 20 | 49.91 | 71 | 84.11 | 122 | 121.05 | 173 | 244.57 |
| 21 | 50.06 | 72 | 84.62 | 123 | 121.10 | 174 | 356.98 |
| 22 | 50.27 | 73 | 84.69 | 124 | 121.90 | 175 | 378.92 |
| 23 | 53.20 | 74 | 86.22 | 125 | 124.29 | 176 | 462.50 |
| 24 | 53.85 | 75 | 86.79 | 126 | 125.66 | 177 | 509.77 |
| 25 | 54.21 | 76 | 86.86 | 127 | 126.67 | 178 | 852.68 |
| 26 | 55.80 | 77 | 87.38 | 128 | 127.19 | 179 | 930.19 |
| 27 | 57.08 | 78 | 88.64 | 129 | 127.27 | 180 | 952.27 |
| 28 | 57.42 | 79 | 90.83 | 130 | 127.57 | 181 | 964.29 |
| 29 | 57.64 | 80 | 91.78 | 131 | 128.35 | 182 | 1045.05 |
| 30 | 58.03 | 81 | 92.46 | 132 | 142.87 | 183 | 1075.62 |
| 31 | 58.17 | 82 | 92.87 | 133 | 143.00 | 184 | 1152.73 |
| 32 | 58.37 | 83 | 92.99 | 134 | 143.94 | 185 | 1186.09 |
| 33 | 58.45 | 84 | 94.04 | 135 | 144.29 | 186 | 1234.68 |
| 34 | 58.59 | 85 | 94.20 | 136 | 144.51 | 187 | 1320.72 |
| 35 | 59.11 | 86 | 96.49 | 137 | 144.74 | 188 | 1347.25 |
| 36 | 59.52 | 87 | 99.21 | 138 | 145.03 | 189 | 1378.42 |
| 37 | 59.65 | 88 | 99.30 | 139 | 145.32 | 190 | 1386.01 |
| 38 | 60.23 | 89 | 99.69 | 140 | 146.02 | 191 | 1436.78 |
| 39 | 60.45 | 90 | 99.74 | 141 | 146.19 | 192 | 1453.55 |
| 40 | 60.61 | 91 | 102.01 | 142 | 146.65 | 193 | 1466.62 |
| 41 | 60.95 | 92 | 104.86 | 143 | 147.95 | 194 | 1469.32 |
| 42 | 66.81 | 93 | 105.31 | 144 | 148.12 | 195 | 1556.19 |
| 43 | 68.09 | 94 | 105.63 | 145 | 148.43 | 196 | 2906.86 |
| 44 | 70.03 | 95 | 107.70 | 146 | 148.54 | 197 | 2993.88 |
| 45 | 70.51 | 96 | 107.92 | 147 | 160.00 | 198 | 3035.79 |
| 46 | 71.50 | 97 | 108.31 | 148 | 160.53 | 199 | 3056.94 |
| 47 | 71.70 | 98 | 108.37 | 149 | 160.70 | 200 | 3081.39 |
| 48 | 72.10 | 99 | 109.24 | 150 | 161.47 | 201 | 3087.20 |
| 49 | 72.21 | 100 | 109.97 | 151 | 161.68 | 202 | 3091.45 |
| 50 | 73.51 | 101 | 110.25 | 152 | 163.34 | 203 | 3404.29 |
| 51 | 73.96 | 102 | 110.27 | 153 | 163.37 | 204 | 3464.61 |

2. CussNP-2-propanol [cm**(-1)]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 74.55 | 103 | 110.50 | 154 | 163.51 |
| 2 | 0.00 | 53 | 74.88 | 104 | 111.02 | 155 | 163.93 |
| 3 | 0.00 | 54 | 75.49 | 105 | 111.06 | 156 | 165.33 |
| 4 | 0.00 | 55 | 76.19 | 106 | 111.34 | 157 | 175.60 |
| 5 | 0.00 | 56 | 76.33 | 107 | 111.64 | 158 | 175.72 |
| 6 | 0.00 | 57 | 76.48 | 108 | 115.42 | 159 | 180.89 |
| 7 | 12.78 | 58 | 76.80 | 109 | 115.72 | 160 | 185.21 |
| 8 | 19.14 | 59 | 76.95 | 110 | 115.87 | 161 | 216.59 |
| 9 | 35.49 | 60 | 77.36 | 111 | 115.99 | 162 | 218.07 |
| 10 | 38.48 | 61 | 77.63 | 112 | 116.10 | 163 | 218.59 |
| 11 | 38.97 | 62 | 77.94 | 113 | 116.15 | 164 | 218.67 |
| 12 | 39.15 | 63 | 78.33 | 114 | 116.37 | 165 | 219.92 |
| 13 | 39.59 | 64 | 78.98 | 115 | 116.62 | 166 | 220.09 |
| 14 | 40.58 | 65 | 79.08 | 116 | 116.74 | 167 | 220.59 |
| 15 | 45.67 | 66 | 81.29 | 117 | 117.43 | 168 | 220.68 |
| 16 | 46.52 | 67 | 81.45 | 118 | 117.98 | 169 | 229.39 |
| 17 | 47.08 | 68 | 81.80 | 119 | 119.00 | 170 | 232.08 |
| 18 | 49.11 | 69 | 82.15 | 120 | 119.39 | 171 | 239.49 |
| 19 | 49.57 | 70 | 82.40 | 121 | 120.65 | 172 | 244.49 |
| 20 | 49.97 | 71 | 84.06 | 122 | 120.95 | 173 | 244.58 |
| 21 | 50.00 | 72 | 84.13 | 123 | 120.99 | 174 | 335.73 |
| 22 | 50.17 | 73 | 84.57 | 124 | 121.09 | 175 | 363.37 |
| 23 | 53.12 | 74 | 84.63 | 125 | 121.73 | 176 | 434.83 |
| 24 | 53.64 | 75 | 86.38 | 126 | 125.56 | 177 | 479.60 |
| 25 | 54.28 | 76 | 86.74 | 127 | 126.69 | 178 | 858.78 |
| 26 | 55.25 | 77 | 87.08 | 128 | 126.82 | 179 | 927.50 |
| 27 | 55.69 | 78 | 87.27 | 129 | 127.22 | 180 | 950.08 |
| 28 | 57.33 | 79 | 88.73 | 130 | 127.40 | 181 | 957.57 |
| 29 | 57.62 | 80 | 91.75 | 131 | 127.58 | 182 | 1077.07 |
| 30 | 57.97 | 81 | 92.03 | 132 | 142.86 | 183 | 1130.38 |
| 31 | 58.14 | 82 | 92.67 | 133 | 142.91 | 184 | 1147.54 |
| 32 | 58.29 | 83 | 92.78 | 134 | 143.89 | 185 | 1218.59 |
| 33 | 58.38 | 84 | 94.00 | 135 | 144.30 | 186 | 1314.90 |
| 34 | 58.47 | 85 | 94.16 | 136 | 144.52 | 187 | 1353.18 |
| 35 | 58.69 | 86 | 96.28 | 137 | 144.71 | 188 | 1370.59 |
| 36 | 59.47 | 87 | 99.18 | 138 | 144.97 | 189 | 1381.40 |
| 37 | 59.66 | 88 | 99.28 | 139 | 145.20 | 190 | 1440.97 |
| 38 | 59.94 | 89 | 99.67 | 140 | 145.93 | 191 | 1451.63 |
| 39 | 60.11 | 90 | 99.70 | 141 | 146.18 | 192 | 1459.53 |
| 40 | 60.62 | 91 | 101.80 | 142 | 146.45 | 193 | 1465.33 |
| 41 | 60.79 | 92 | 104.85 | 143 | 147.82 | 194 | 2945.06 |
| 42 | 66.21 | 93 | 105.36 | 144 | 148.17 | 195 | 2985.92 |
| 43 | 66.54 | 94 | 105.50 | 145 | 148.31 | 196 | 3038.52 |
| 44 | 69.93 | 95 | 107.43 | 146 | 148.63 | 197 | 3061.67 |
| 45 | 70.78 | 96 | 107.93 | 147 | 159.14 | 198 | 3085.27 |
| 46 | 71.55 | 97 | 108.27 | 148 | 160.47 | 199 | 3095.92 |
| 47 | 71.62 | 98 | 108.52 | 149 | 160.54 | 200 | 3097.20 |
| 48 | 71.85 | 99 | 109.43 | 150 | 161.36 | 201 | 3606.67 |
| 49 | 71.98 | 100 | 109.91 | 151 | 161.67 | | |
| 50 | 72.30 | 101 | 110.16 | 152 | 162.20 | | |
| 51 | 73.63 | 102 | 110.23 | 153 | 163.30 | | |

3. Cu₅₅NP-2-propanotiol [cm^{**}(-1)]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|--------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 74.90 | 103 | 111.18 | 154 | 163.46 |
| 2 | 0.00 | 53 | 75.38 | 104 | 111.29 | 155 | 164.70 |
| 3 | 0.00 | 54 | 75.51 | 105 | 111.53 | 156 | 165.07 |
| 4 | 0.00 | 55 | 76.49 | 106 | 111.73 | 157 | 175.80 |
| 5 | 0.00 | 56 | 76.60 | 107 | 112.45 | 158 | 175.90 |
| 6 | 0.00 | 57 | 77.00 | 108 | 114.57 | 159 | 185.68 |
| 7 | 17.17 | 58 | 77.13 | 109 | 115.59 | 160 | 215.75 |
| 8 | 24.93 | 59 | 77.60 | 110 | 115.75 | 161 | 217.78 |
| 9 | 31.79 | 60 | 77.67 | 111 | 115.99 | 162 | 218.08 |
| 10 | 38.30 | 61 | 77.86 | 112 | 116.01 | 163 | 218.32 |
| 11 | 38.94 | 62 | 78.04 | 113 | 116.21 | 164 | 219.72 |
| 12 | 39.83 | 63 | 78.31 | 114 | 116.48 | 165 | 219.91 |
| 13 | 40.49 | 64 | 78.99 | 115 | 116.72 | 166 | 220.65 |
| 14 | 40.68 | 65 | 79.38 | 116 | 116.82 | 167 | 220.77 |
| 15 | 45.74 | 66 | 80.93 | 117 | 116.87 | 168 | 229.31 |
| 16 | 46.59 | 67 | 81.21 | 118 | 117.65 | 169 | 230.88 |
| 17 | 46.94 | 68 | 82.17 | 119 | 119.29 | 170 | 237.09 |
| 18 | 48.31 | 69 | 82.26 | 120 | 119.34 | 171 | 244.58 |
| 19 | 49.56 | 70 | 84.12 | 121 | 120.49 | 172 | 244.60 |
| 20 | 49.84 | 71 | 84.48 | 122 | 121.01 | 173 | 252.34 |
| 21 | 50.11 | 72 | 84.62 | 123 | 121.17 | 174 | 281.10 |
| 22 | 50.13 | 73 | 84.87 | 124 | 121.23 | 175 | 324.77 |
| 23 | 52.44 | 74 | 86.03 | 125 | 122.20 | 176 | 420.47 |
| 24 | 54.12 | 75 | 86.88 | 126 | 125.73 | 177 | 435.18 |
| 25 | 54.66 | 76 | 87.32 | 127 | 126.62 | 178 | 672.56 |
| 26 | 56.78 | 77 | 87.37 | 128 | 126.97 | 179 | 850.09 |
| 27 | 57.19 | 78 | 88.51 | 129 | 127.36 | 180 | 923.66 |
| 28 | 57.29 | 79 | 91.88 | 130 | 127.56 | 181 | 931.73 |
| 29 | 57.85 | 80 | 92.10 | 131 | 127.85 | 182 | 963.58 |
| 30 | 58.19 | 81 | 92.77 | 132 | 142.65 | 183 | 1054.94 |
| 31 | 58.23 | 82 | 92.89 | 133 | 143.28 | 184 | 1144.38 |
| 32 | 58.50 | 83 | 94.06 | 134 | 143.89 | 185 | 1152.92 |
| 33 | 58.64 | 84 | 94.21 | 135 | 144.51 | 186 | 1234.13 |
| 34 | 58.84 | 85 | 95.51 | 136 | 144.68 | 187 | 1305.86 |
| 35 | 59.42 | 86 | 96.31 | 137 | 144.92 | 188 | 1372.42 |
| 36 | 59.54 | 87 | 99.01 | 138 | 145.01 | 189 | 1377.37 |
| 37 | 59.73 | 88 | 99.23 | 139 | 145.39 | 190 | 1436.43 |
| 38 | 60.14 | 89 | 99.56 | 140 | 146.29 | 191 | 1440.75 |
| 39 | 60.81 | 90 | 100.09 | 141 | 146.44 | 192 | 1447.21 |
| 40 | 60.89 | 91 | 101.73 | 142 | 146.62 | 193 | 1453.26 |
| 41 | 61.59 | 92 | 104.38 | 143 | 148.06 | 194 | 2649.74 |
| 42 | 65.86 | 93 | 105.17 | 144 | 148.10 | 195 | 2924.23 |
| 43 | 69.09 | 94 | 105.41 | 145 | 148.42 | 196 | 2927.53 |
| 44 | 69.44 | 95 | 106.62 | 146 | 148.58 | 197 | 3008.04 |
| 45 | 70.04 | 96 | 106.99 | 147 | 160.07 | 198 | 3053.82 |
| 46 | 71.72 | 97 | 107.84 | 148 | 160.37 | 199 | 3059.59 |
| 47 | 71.83 | 98 | 108.00 | 149 | 160.68 | 200 | 3085.08 |
| 48 | 71.89 | 99 | 109.15 | 150 | 161.67 | 201 | 3092.04 |
| 49 | 72.32 | 100 | 110.00 | 151 | 161.72 | | |
| 50 | 72.88 | 101 | 110.27 | 152 | 163.29 | | |
| 51 | 74.22 | 102 | 110.52 | 153 | 163.44 | | |

Apéndice E

Frecuencias vibracionales de los complejos entre una nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, calculadas con GFN-FF

1. Cu₅₅NP-2-propanamina [cm^{**(-1)}]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|-------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 67.38 | 103 | 100.31 | 154 | 136.67 |
| 2 | 0.00 | 53 | 67.44 | 104 | 100.68 | 155 | 137.54 |
| 3 | 0.00 | 54 | 67.60 | 105 | 100.84 | 156 | 137.83 |
| 4 | 0.00 | 55 | 67.87 | 106 | 101.29 | 157 | 139.55 |
| 5 | 0.00 | 56 | 68.19 | 107 | 101.45 | 158 | 141.93 |
| 6 | 0.00 | 57 | 68.82 | 108 | 101.75 | 159 | 144.34 |
| 7 | 16.78 | 58 | 69.70 | 109 | 102.02 | 160 | 145.02 |
| 8 | 21.57 | 59 | 70.14 | 110 | 102.22 | 161 | 145.38 |
| 9 | 36.78 | 60 | 71.41 | 111 | 102.33 | 162 | 147.71 |
| 10 | 37.14 | 61 | 72.92 | 112 | 102.52 | 163 | 148.59 |
| 11 | 37.29 | 62 | 73.34 | 113 | 102.85 | 164 | 148.73 |
| 12 | 37.83 | 63 | 75.41 | 114 | 103.19 | 165 | 150.40 |
| 13 | 38.09 | 64 | 75.49 | 115 | 103.39 | 166 | 150.81 |
| 14 | 40.81 | 65 | 76.14 | 116 | 104.27 | 167 | 154.85 |
| 15 | 41.80 | 66 | 76.43 | 117 | 104.58 | 168 | 176.18 |
| 16 | 41.95 | 67 | 76.49 | 118 | 106.13 | 169 | 176.41 |
| 17 | 41.99 | 68 | 76.89 | 119 | 109.76 | 170 | 177.06 |
| 18 | 42.16 | 69 | 77.48 | 120 | 111.13 | 171 | 203.64 |
| 19 | 49.17 | 70 | 77.52 | 121 | 111.28 | 172 | 211.27 |
| 20 | 52.07 | 71 | 78.01 | 122 | 111.51 | 173 | 239.37 |
| 21 | 52.67 | 72 | 78.35 | 123 | 111.74 | 174 | 373.02 |
| 22 | 52.89 | 73 | 78.38 | 124 | 112.05 | 175 | 394.23 |
| 23 | 53.84 | 74 | 79.58 | 125 | 112.13 | 176 | 452.87 |
| 24 | 54.06 | 75 | 80.78 | 126 | 112.54 | 177 | 470.15 |
| 25 | 54.48 | 76 | 80.93 | 127 | 113.25 | 178 | 754.16 |
| 26 | 54.67 | 77 | 81.25 | 128 | 114.09 | 179 | 839.41 |
| 27 | 55.07 | 78 | 81.73 | 129 | 114.78 | 180 | 879.69 |
| 28 | 55.45 | 79 | 82.43 | 130 | 114.95 | 181 | 943.10 |
| 29 | 56.16 | 80 | 82.57 | 131 | 115.61 | 182 | 965.62 |
| 30 | 56.63 | 81 | 83.76 | 132 | 116.23 | 183 | 977.99 |
| 31 | 56.87 | 82 | 84.01 | 133 | 117.67 | 184 | 1054.32 |
| 32 | 57.09 | 83 | 85.14 | 134 | 122.39 | 185 | 1076.00 |
| 33 | 57.88 | 84 | 85.39 | 135 | 127.14 | 186 | 1096.76 |
| 34 | 60.71 | 85 | 85.61 | 136 | 127.51 | 187 | 1320.09 |
| 35 | 60.81 | 86 | 85.87 | 137 | 127.92 | 188 | 1334.47 |
| 36 | 61.54 | 87 | 86.40 | 138 | 128.32 | 189 | 1342.14 |
| 37 | 61.63 | 88 | 86.79 | 139 | 128.55 | 190 | 1347.81 |
| 38 | 61.87 | 89 | 88.08 | 140 | 128.87 | 191 | 1353.54 |
| 39 | 62.26 | 90 | 88.35 | 141 | 129.42 | 192 | 1363.11 |
| 40 | 62.84 | 91 | 90.60 | 142 | 129.50 | 193 | 1424.81 |
| 41 | 63.20 | 92 | 90.95 | 143 | 130.36 | 194 | 1435.17 |
| 42 | 63.22 | 93 | 91.26 | 144 | 130.52 | 195 | 1510.20 |
| 43 | 63.38 | 94 | 92.23 | 145 | 130.70 | 196 | 2942.48 |
| 44 | 63.75 | 95 | 93.22 | 146 | 130.93 | 197 | 2944.39 |
| 45 | 63.98 | 96 | 94.89 | 147 | 132.46 | 198 | 2970.33 |
| 46 | 64.24 | 97 | 98.07 | 148 | 132.92 | 199 | 2997.94 |
| 47 | 64.54 | 98 | 98.74 | 149 | 133.29 | 200 | 2998.41 |
| 48 | 64.99 | 99 | 98.93 | 150 | 133.66 | 201 | 2999.65 |
| 49 | 67.21 | 100 | 99.55 | 151 | 134.07 | 202 | 3002.35 |
| 50 | 67.28 | 101 | 99.94 | 152 | 134.90 | 203 | 3254.99 |
| 51 | 67.34 | 102 | 99.95 | 153 | 135.75 | 204 | 3298.55 |

2. Cu₅₅NP-2-propanol [cm^{**(-1)}]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|-------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 67.33 | 103 | 100.21 | 154 | 136.44 |
| 2 | 0.00 | 53 | 67.38 | 104 | 100.47 | 155 | 137.42 |
| 3 | 0.00 | 54 | 67.57 | 105 | 100.58 | 156 | 137.71 |
| 4 | 0.00 | 55 | 67.78 | 106 | 100.88 | 157 | 139.83 |
| 5 | 0.00 | 56 | 68.09 | 107 | 101.24 | 158 | 142.06 |
| 6 | 0.00 | 57 | 68.62 | 108 | 101.55 | 159 | 143.83 |
| 7 | 17.93 | 58 | 69.90 | 109 | 101.69 | 160 | 144.69 |
| 8 | 21.26 | 59 | 70.07 | 110 | 101.86 | 161 | 145.41 |
| 9 | 36.70 | 60 | 71.71 | 111 | 102.10 | 162 | 147.30 |
| 10 | 36.99 | 61 | 72.86 | 112 | 102.31 | 163 | 148.51 |
| 11 | 37.10 | 62 | 73.01 | 113 | 102.40 | 164 | 148.58 |
| 12 | 37.80 | 63 | 75.23 | 114 | 102.99 | 165 | 149.85 |
| 13 | 38.12 | 64 | 75.27 | 115 | 103.30 | 166 | 151.06 |
| 14 | 40.78 | 65 | 75.70 | 116 | 104.13 | 167 | 154.78 |
| 15 | 41.73 | 66 | 76.36 | 117 | 105.05 | 168 | 175.55 |
| 16 | 41.90 | 67 | 76.41 | 118 | 105.57 | 169 | 176.33 |
| 17 | 41.95 | 68 | 76.84 | 119 | 109.92 | 170 | 176.99 |
| 18 | 42.12 | 69 | 77.25 | 120 | 110.83 | 171 | 204.75 |
| 19 | 49.58 | 70 | 77.67 | 121 | 111.15 | 172 | 224.13 |
| 20 | 51.84 | 71 | 77.93 | 122 | 111.33 | 173 | 248.10 |
| 21 | 52.48 | 72 | 78.18 | 123 | 111.54 | 174 | 369.97 |
| 22 | 52.90 | 73 | 78.41 | 124 | 111.84 | 175 | 397.28 |
| 23 | 53.70 | 74 | 79.71 | 125 | 112.05 | 176 | 447.11 |
| 24 | 53.93 | 75 | 80.30 | 126 | 112.71 | 177 | 468.86 |
| 25 | 54.31 | 76 | 80.87 | 127 | 113.08 | 178 | 755.93 |
| 26 | 54.47 | 77 | 81.17 | 128 | 114.39 | 179 | 850.15 |
| 27 | 54.93 | 78 | 81.44 | 129 | 114.72 | 180 | 889.55 |
| 28 | 55.35 | 79 | 82.32 | 130 | 114.97 | 181 | 942.84 |
| 29 | 56.24 | 80 | 82.62 | 131 | 115.73 | 182 | 1018.54 |
| 30 | 56.57 | 81 | 83.56 | 132 | 116.39 | 183 | 1038.02 |
| 31 | 56.86 | 82 | 84.39 | 133 | 117.58 | 184 | 1069.75 |
| 32 | 57.10 | 83 | 84.91 | 134 | 122.47 | 185 | 1297.10 |
| 33 | 58.00 | 84 | 85.33 | 135 | 126.58 | 186 | 1305.31 |
| 34 | 60.62 | 85 | 85.40 | 136 | 127.24 | 187 | 1343.84 |
| 35 | 60.68 | 86 | 85.78 | 137 | 127.76 | 188 | 1348.97 |
| 36 | 61.51 | 87 | 86.21 | 138 | 128.19 | 189 | 1357.27 |
| 37 | 61.52 | 88 | 86.56 | 139 | 128.41 | 190 | 1365.69 |
| 38 | 61.82 | 89 | 86.73 | 140 | 128.61 | 191 | 1399.59 |
| 39 | 62.09 | 90 | 88.99 | 141 | 129.36 | 192 | 1423.09 |
| 40 | 62.71 | 91 | 90.47 | 142 | 129.42 | 193 | 1456.15 |
| 41 | 62.99 | 92 | 90.77 | 143 | 130.09 | 194 | 2943.77 |
| 42 | 63.14 | 93 | 90.95 | 144 | 130.41 | 195 | 2945.96 |
| 43 | 63.31 | 94 | 91.97 | 145 | 130.56 | 196 | 2990.05 |
| 44 | 63.69 | 95 | 92.98 | 146 | 130.87 | 197 | 2999.55 |
| 45 | 64.08 | 96 | 95.32 | 147 | 132.57 | 198 | 3001.26 |
| 46 | 64.31 | 97 | 97.60 | 148 | 132.86 | 199 | 3002.13 |
| 47 | 64.42 | 98 | 97.88 | 149 | 133.00 | 200 | 3004.44 |
| 48 | 65.07 | 99 | 98.69 | 150 | 133.58 | 201 | 3326.22 |
| 49 | 67.06 | 100 | 99.12 | 151 | 133.91 | | |
| 50 | 67.21 | 101 | 99.73 | 152 | 134.74 | | |
| 51 | 67.26 | 102 | 99.89 | 153 | 135.58 | | |

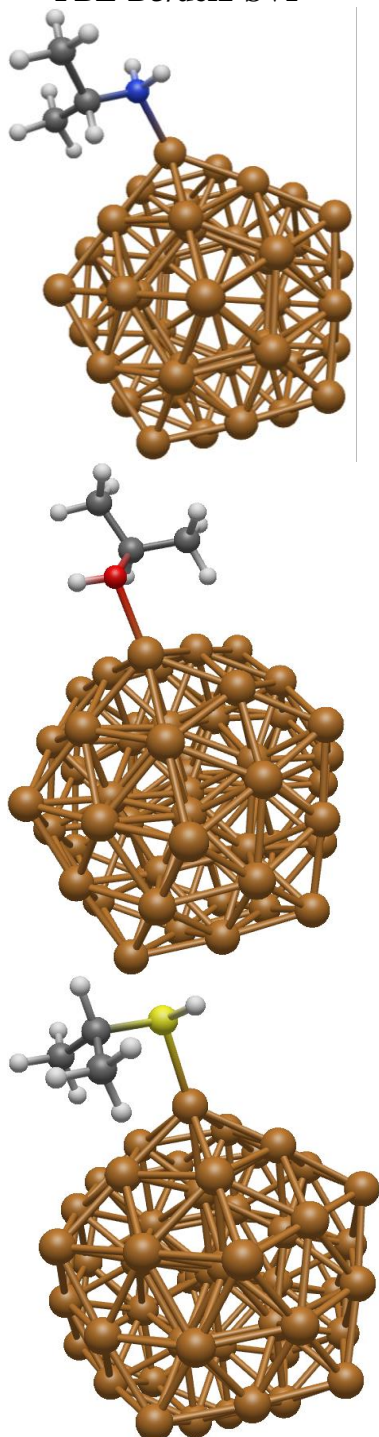
3. Cu₅₅NP-2-propanotiol [cm^{**}(-1)]

| | | | | | | | |
|----|-------|-----|-------|-----|--------|-----|---------|
| 1 | 0.00 | 52 | 67.36 | 103 | 100.25 | 154 | 137.08 |
| 2 | 0.00 | 53 | 67.43 | 104 | 100.63 | 155 | 137.58 |
| 3 | 0.00 | 54 | 67.49 | 105 | 100.81 | 156 | 137.79 |
| 4 | 0.00 | 55 | 67.60 | 106 | 101.00 | 157 | 139.09 |
| 5 | 0.00 | 56 | 67.92 | 107 | 101.57 | 158 | 140.64 |
| 6 | 0.00 | 57 | 68.46 | 108 | 101.82 | 159 | 144.53 |
| 7 | 14.69 | 58 | 69.26 | 109 | 101.92 | 160 | 144.85 |
| 8 | 20.52 | 59 | 70.04 | 110 | 102.18 | 161 | 145.19 |
| 9 | 33.49 | 60 | 70.78 | 111 | 102.35 | 162 | 147.96 |
| 10 | 37.32 | 61 | 71.41 | 112 | 102.66 | 163 | 148.60 |
| 11 | 37.57 | 62 | 73.23 | 113 | 102.75 | 164 | 148.68 |
| 12 | 37.58 | 63 | 74.99 | 114 | 103.22 | 165 | 149.75 |
| 13 | 37.92 | 64 | 75.46 | 115 | 103.47 | 166 | 150.45 |
| 14 | 38.96 | 65 | 75.67 | 116 | 103.96 | 167 | 154.85 |
| 15 | 40.78 | 66 | 76.23 | 117 | 104.42 | 168 | 176.44 |
| 16 | 41.86 | 67 | 76.53 | 118 | 106.47 | 169 | 176.61 |
| 17 | 41.97 | 68 | 77.05 | 119 | 108.98 | 170 | 177.16 |
| 18 | 42.00 | 69 | 77.19 | 120 | 111.09 | 171 | 215.19 |
| 19 | 42.19 | 70 | 77.64 | 121 | 111.27 | 172 | 225.71 |
| 20 | 52.18 | 71 | 77.82 | 122 | 111.72 | 173 | 242.63 |
| 21 | 52.55 | 72 | 77.91 | 123 | 111.91 | 174 | 287.47 |
| 22 | 52.86 | 73 | 78.24 | 124 | 112.16 | 175 | 317.34 |
| 23 | 54.08 | 74 | 78.97 | 125 | 112.33 | 176 | 388.55 |
| 24 | 54.21 | 75 | 80.72 | 126 | 112.51 | 177 | 418.04 |
| 25 | 54.63 | 76 | 80.87 | 127 | 113.46 | 178 | 601.37 |
| 26 | 54.91 | 77 | 81.09 | 128 | 114.63 | 179 | 813.92 |
| 27 | 55.14 | 78 | 81.52 | 129 | 114.93 | 180 | 837.90 |
| 28 | 55.37 | 79 | 82.27 | 130 | 115.06 | 181 | 905.68 |
| 29 | 55.67 | 80 | 82.55 | 131 | 115.59 | 182 | 940.20 |
| 30 | 56.58 | 81 | 83.06 | 132 | 116.26 | 183 | 1009.78 |
| 31 | 56.77 | 82 | 83.91 | 133 | 117.48 | 184 | 1030.38 |
| 32 | 56.87 | 83 | 85.00 | 134 | 123.50 | 185 | 1049.94 |
| 33 | 57.09 | 84 | 85.44 | 135 | 127.22 | 186 | 1222.06 |
| 34 | 60.64 | 85 | 85.55 | 136 | 127.47 | 187 | 1314.20 |
| 35 | 60.97 | 86 | 85.99 | 137 | 128.09 | 188 | 1344.45 |
| 36 | 61.29 | 87 | 86.29 | 138 | 128.33 | 189 | 1351.72 |
| 37 | 61.53 | 88 | 86.44 | 139 | 128.75 | 190 | 1359.98 |
| 38 | 61.71 | 89 | 87.49 | 140 | 129.00 | 191 | 1363.45 |
| 39 | 61.88 | 90 | 87.99 | 141 | 129.46 | 192 | 1425.72 |
| 40 | 62.87 | 91 | 90.49 | 142 | 130.12 | 193 | 1435.65 |
| 41 | 63.19 | 92 | 90.86 | 143 | 130.34 | 194 | 2253.85 |
| 42 | 63.29 | 93 | 91.36 | 144 | 130.45 | 195 | 2942.75 |
| 43 | 63.32 | 94 | 92.08 | 145 | 130.57 | 196 | 2947.34 |
| 44 | 63.56 | 95 | 92.32 | 146 | 131.07 | 197 | 2952.16 |
| 45 | 63.84 | 96 | 96.28 | 147 | 131.94 | 198 | 2996.53 |
| 46 | 63.94 | 97 | 98.37 | 148 | 132.77 | 199 | 2998.31 |
| 47 | 64.17 | 98 | 98.49 | 149 | 133.43 | 200 | 3015.33 |
| 48 | 64.46 | 99 | 99.03 | 150 | 133.61 | 201 | 3022.12 |
| 49 | 66.86 | 100 | 99.47 | 151 | 134.36 | | |
| 50 | 67.29 | 101 | 99.88 | 152 | 134.86 | | |
| 51 | 67.29 | 102 | 99.91 | 153 | 136.05 | | |

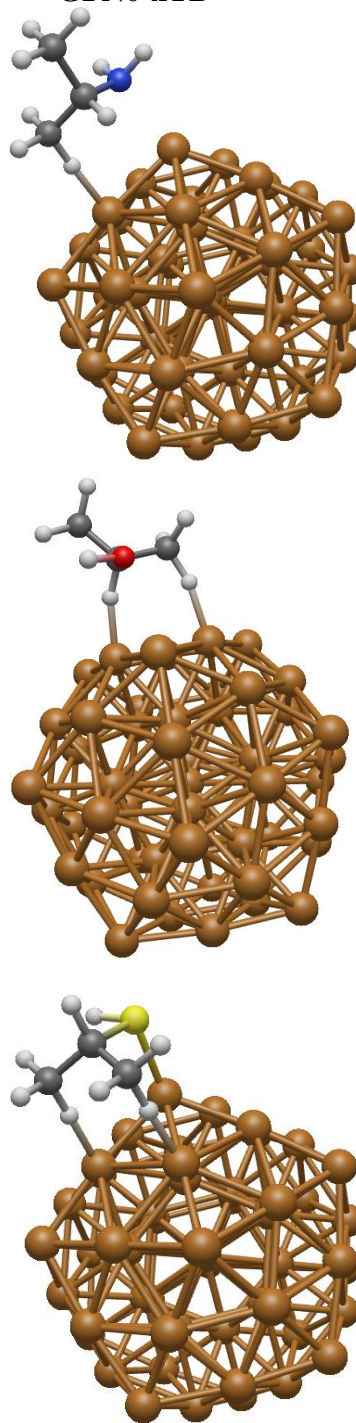
Apéndice F

Geometrías de los complejos entre la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y las moléculas de 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, optimizadas con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SV y con el método semiempírico GFN0-xTB

- PBE-D3/def2-SVP



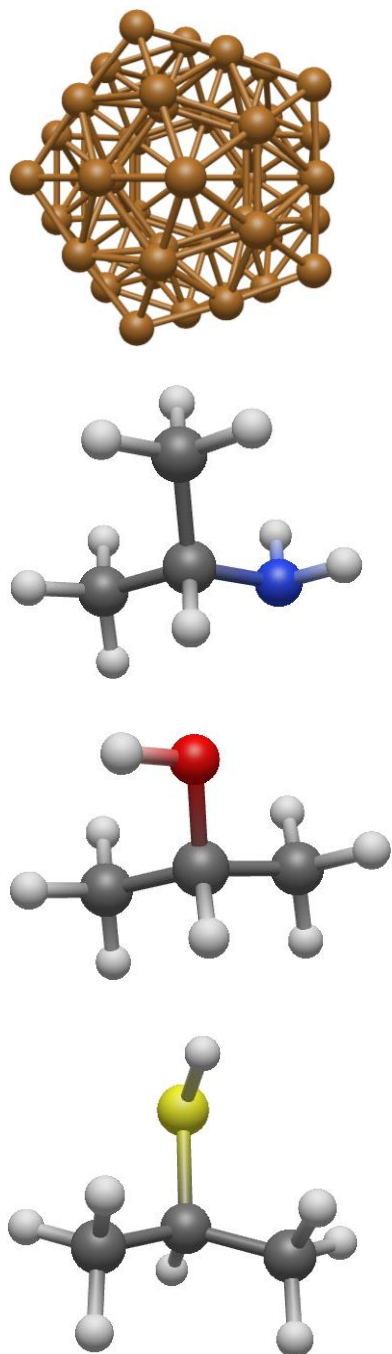
- GFN0-xTB



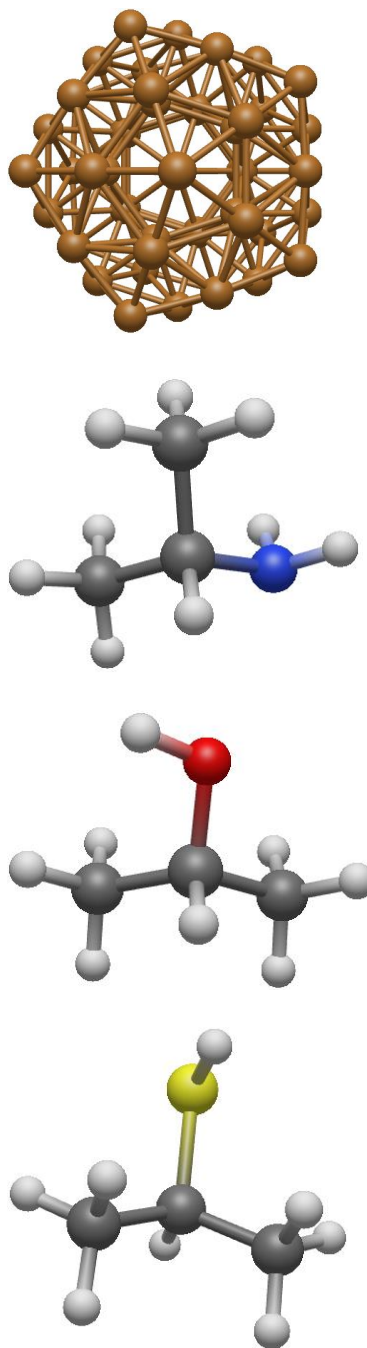
Apéndice G

Geometrías de la nanopartícula de cobre (Cu_{55}NP) y de las moléculas de 2-propanamina, 2-propanol y 2-propanotiol, optimizadas con el nivel de teoría PBE-D3/def2-SVP y con el método semiempírico GFN0-xTB

• PBE-D3/def2-SVP



• GFN0-xTB



Anexo A

Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y la molécula de 2-propanamina, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB

1. PBE-D3

68

| | | | |
|----|-----------|-----------|-----------|
| Cu | 0.025525 | 0.086420 | -0.093435 |
| Cu | -0.079275 | 0.296032 | 2.302421 |
| Cu | -0.186582 | 0.518480 | 4.667169 |
| Cu | 1.566026 | -0.971014 | 3.631858 |
| Cu | 1.649098 | -1.174429 | 1.173594 |
| Cu | 1.792709 | 1.345869 | 0.949851 |
| Cu | -0.569753 | 2.276948 | 0.771286 |
| Cu | -2.171955 | 0.285535 | 0.870362 |
| Cu | -0.802196 | -1.827874 | 1.126017 |
| Cu | 0.621783 | -2.090754 | -0.954979 |
| Cu | 2.226093 | -0.129854 | -1.064298 |
| Cu | 0.855167 | 1.986214 | -1.318697 |
| Cu | -1.596151 | 1.331808 | -1.364934 |
| Cu | -1.739831 | -1.187929 | -1.142490 |
| Cu | 0.131257 | -0.137764 | -2.495151 |
| Cu | 3.246709 | -2.411975 | 2.423744 |
| Cu | 3.522866 | 2.602283 | 1.983695 |
| Cu | -1.176664 | 4.445456 | 1.627604 |
| Cu | -4.339132 | 0.500396 | 1.828203 |
| Cu | -1.616406 | -3.708696 | 2.328575 |
| Cu | 1.206279 | -4.230732 | -1.801724 |
| Cu | 4.392370 | -0.338497 | -2.018665 |
| Cu | 1.664626 | 3.872783 | -2.512427 |
| Cu | -3.194836 | 2.574615 | -2.609657 |
| Cu | -3.478194 | -2.437122 | -2.173517 |
| Cu | 0.236035 | -0.354883 | -4.859268 |
| Cu | 1.709405 | 1.593298 | 3.405959 |
| Cu | -0.688628 | 2.502359 | 3.211327 |
| Cu | -2.318695 | 0.518483 | 3.330015 |
| Cu | -0.923873 | -1.634212 | 3.582637 |
| Cu | 3.466264 | 0.095242 | 2.258252 |
| Cu | 0.833256 | -3.132586 | 2.434767 |
| Cu | 2.278714 | -3.401231 | 0.320908 |
| Cu | 3.908784 | -1.407900 | 0.210434 |
| Cu | 1.205510 | 3.574439 | 1.839338 |
| Cu | 4.053032 | 1.155859 | -0.014958 |
| Cu | 2.658677 | 3.308902 | -0.271620 |
| Cu | -2.801899 | 2.480220 | 1.756819 |
| Cu | 0.256341 | 4.224202 | -0.545711 |
| Cu | -2.221761 | 3.553868 | 0.510179 |
| Cu | -3.049982 | -1.645287 | 2.129420 |
| Cu | -3.859373 | 1.573579 | -0.399042 |
| Cu | -4.003461 | -0.993321 | -0.174989 |
| Cu | -2.609093 | -3.147271 | 0.081631 |
| Cu | -0.210131 | -4.066226 | 0.271324 |
| Cu | 2.864219 | -2.338754 | -1.952355 |
| Cu | -1.162785 | -3.415324 | -2.032523 |
| Cu | 0.737761 | -2.348107 | -3.406964 |
| Cu | 3.101072 | 1.807305 | -2.319252 |
| Cu | 2.367933 | -0.354279 | -3.517816 |
| Cu | -0.781154 | 3.294596 | -2.625412 |
| Cu | 0.974615 | 1.798236 | -3.773055 |
| Cu | -3.417060 | 0.068438 | -2.446718 |
| Cu | -1.515374 | 1.133648 | -3.821299 |
| Cu | -1.660847 | -1.429408 | -3.597103 |
| N | -2.027124 | 5.995351 | 2.695532 |
| C | -3.275227 | 5.565162 | 3.391665 |
| H | -1.327925 | 6.298437 | 3.389312 |
| H | -2.221735 | 6.824133 | 2.112426 |
| H | -3.009926 | 4.606825 | 3.894293 |
| C | -4.351899 | 5.268912 | 2.351410 |
| C | -3.727977 | 6.582457 | 4.438785 |
| H | -5.256639 | 4.845755 | 2.828510 |
| H | -4.647805 | 6.187837 | 1.800717 |
| H | -3.976708 | 4.530112 | 1.602487 |
| H | -2.935547 | 6.770191 | 5.192621 |
| H | -4.623299 | 6.216750 | 4.980152 |
| H | -3.993305 | 7.551834 | 3.965516 |

2. PBEh-3c

68

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.00585189821804 | -0.05249087991619 | -0.13489825349581 |
| Cu | -0.25014577153211 | 0.03113240011464 | 2.31674677188377 |
| Cu | -0.50405658152020 | 0.14997802205548 | 4.70765420014957 |
| Cu | 1.43388220204499 | -1.22870208033078 | 3.66194194265155 |
| Cu | 1.66798136321089 | -1.31774832042046 | 1.19104962312157 |
| Cu | 1.66711739471210 | 1.27450145603577 | 1.10087222041261 |
| Cu | -0.80258804946408 | 2.10515372364031 | 0.82034664617005 |
| Cu | -2.31735623913263 | -0.04259110506628 | 0.72432049506621 |
| Cu | -0.80106217498334 | -2.12458135062046 | 0.98004020754994 |
| Cu | 0.78333295397362 | -2.19157947902701 | -1.08414761600573 |
| Cu | 2.31459309229102 | -0.08859480999638 | -1.00612333003206 |
| Cu | 0.79555289351967 | 1.99644989234779 | -1.25905784514522 |
| Cu | -1.67260273865329 | 1.19084627734695 | -1.47053660500581 |
| Cu | -1.67382391460638 | -1.40170089283403 | -1.38330151242674 |
| Cu | 0.24341458474485 | -0.15336032864004 | -2.59910681406942 |
| Cu | 3.30725047620326 | -2.55547571571820 | 2.48169693332244 |
| Cu | 3.30179114670704 | 2.58159213818068 | 2.30943814077728 |
| Cu | -1.62468398864134 | 4.22210271608727 | 1.75192423531333 |
| Cu | -4.58689531746598 | 0.01287889331042 | 1.57387707553092 |
| Cu | -1.58861669744797 | -4.13332571341061 | 2.06626943098677 |
| Cu | 1.57232665495196 | -4.26676824005085 | -2.01211707761119 |
| Cu | 4.58501051344351 | -0.12950086790547 | -1.85265025998088 |
| Cu | 1.58096323291653 | 4.00973498563729 | -2.34027040044958 |
| Cu | -3.31287493359245 | 2.43399711056161 | -2.75665263045501 |
| Cu | -3.31828779668896 | -2.70204236933630 | -2.58933975792184 |
| Cu | 0.49180471374533 | -0.25379884437916 | -4.99428882923573 |
| Cu | 1.44066774991761 | 1.37330300293227 | 3.5804305323548 |
| Cu | -1.06423031635809 | 2.18614284805412 | 3.27118096104124 |
| Cu | -2.58919359566466 | 0.07522962482643 | 3.20059761559047 |
| Cu | -1.06375834027460 | -2.03875726826974 | 3.44741830699255 |
| Cu | 3.37198107960851 | 0.01763723839758 | 2.43407297071806 |
| Cu | 0.87606291456550 | -3.40459978899404 | 2.31568617864945 |
| Cu | 2.48639100937421 | -3.46057112443246 | 0.24062063050795 |
| Cu | 4.01851998179046 | -1.36249536737579 | 0.32160293829375 |
| Cu | 0.86343363304903 | 3.41916165696510 | 2.06268536199412 |
| Cu | 4.02209688689899 | 1.24507035688409 | 0.23558927544570 |
| Cu | 2.48395113852422 | 3.34202320029204 | -0.01145708130044 |
| Cu | -3.11656711103053 | 2.10804416293027 | 1.66963731455921 |
| Cu | 0.00010721654525 | 4.14088316477695 | -0.30353026010836 |
| Cu | -2.48552126121840 | 3.33371141124036 | -0.51936780876338 |
| Cu | -3.15422036650076 | -2.10371023635021 | 1.85096150022018 |
| Cu | -4.02534985047708 | 1.23838174619003 | -0.60087202591878 |
| Cu | -4.02992972759226 | -1.36979430276707 | -0.5111719379154 |
| Cu | -2.49405702048899 | -3.46627978007913 | -0.26563965784262 |
| Cu | -0.01153046627557 | -4.27326968848637 | 0.02740849219645 |
| Cu | 3.12654861213207 | -2.23040431597116 | -1.96441336863953 |
| Cu | -0.88837425181182 | -3.54745573726470 | -2.35071779655972 |
| Cu | 1.04695862576593 | -2.29519570394431 | -3.57276134217987 |
| Cu | 3.14577899786199 | 1.98045826219514 | -2.12849831493402 |
| Cu | 2.58262877677863 | -0.19159434392496 | -3.48161255793986 |
| Cu | -0.88240926607525 | 3.28337717091202 | -2.59355829535871 |
| Cu | 1.05706737732182 | 1.92186410924873 | -3.72573228275058 |
| Cu | -3.38012780860591 | -0.13886803678627 | -2.71215445664863 |
| Cu | -1.44450610755398 | 1.10997946234232 | -3.94092944835811 |
| Cu | -1.45379059553786 | -1.49095816835352 | -3.86419525930419 |
| N | -2.27130495197426 | 6.18145062846172 | 2.39285906320236 |
| C | -3.04390872316250 | 6.26250207899917 | 3.64277309590276 |
| H | -1.43307315494230 | 6.75365619305986 | 2.47821567531886 |
| H | -2.80671895656598 | 6.61762428493927 | 1.64224873017736 |
| H | -2.44184464054541 | 5.75762338478526 | 4.41432062331279 |
| C | -4.35306260764485 | 5.50688210466333 | 3.49537946891753 |
| C | -3.27167127529805 | 7.70408105369724 | 4.08021787288812 |
| H | -4.94350337623151 | 5.57131754490884 | 4.41563418620532 |
| H | -4.96581174727119 | 5.92119296310734 | 2.68278795756408 |
| H | -4.18895077807842 | 4.44500452076100 | 3.28229953958445 |
| H | -2.32508956987500 | 8.24639365961851 | 4.19860054428150 |
| H | -3.79393772568202 | 7.74687639610698 | 5.04265791510763 |
| H | -3.88400552790558 | 8.25181501403738 | 3.35039802738990 |

3. B97-3c

68

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | 0.01764808403737 | -0.00136910231400 | 0.02475176362613 |
| Cu | 0.08517455026862 | 0.00187080699970 | 2.38357858291538 |
| Cu | 0.14798135962764 | 0.02043322732831 | 4.74748103521102 |
| Cu | 1.85240794619536 | -1.27373792290357 | 3.47404097168860 |
| Cu | 1.7480098702062 | -1.25770136833789 | 1.03677356618223 |
| Cu | 1.76846952083108 | 1.22489482823008 | 1.02493996785809 |
| Cu | -0.59168676540568 | 2.03145392333459 | 1.09743230419526 |
| Cu | -2.06350741241408 | 0.01331816235950 | 1.13705520300866 |
| Cu | -0.62086344519174 | -2.00693899105871 | 1.10544174655443 |
| Cu | 0.62509975942127 | -2.02427066318288 | -1.04334405563157 |
| Cu | 2.10179753902108 | -0.02703737021320 | -1.09396602968999 |
| Cu | 0.65896359427698 | 1.99308077423033 | -1.06245395441606 |
| Cu | -1.70949464610778 | 1.24364553469288 | -0.99310391508892 |
| Cu | -1.73108983897213 | -1.23772009719703 | -0.98173500844754 |
| Cu | -0.04808148260573 | -0.01445326356375 | -2.34078567998898 |
| Cu | 3.47856813513590 | -2.51163722837405 | 2.05125588148512 |
| Cu | 3.51057398256555 | 2.46617973827210 | 2.03246554488552 |
| Cu | -1.21182176334209 | 4.07677703866771 | 2.17316663758628 |
| Cu | -4.14947534468777 | 0.04274324474276 | 2.25501987021605 |
| Cu | -1.26095336295797 | -4.0095691455422 | 2.18813438788617 |
| Cu | 1.23135830721282 | -4.04318237448516 | -2.10996873892469 |
| Cu | 4.18728119710181 | -0.04994613187429 | -2.21012744409834 |
| Cu | 1.29455510037564 | 4.00050160245383 | -2.13950837948676 |
| Cu | -3.44069784593171 | 2.50357368155943 | -2.00189118061741 |
| Cu | -3.48131103707055 | -2.47210743316837 | -1.98614109372722 |
| Cu | -0.11388963148641 | -0.02504677931417 | -4.70511111447953 |
| Cu | 1.87157723719020 | 1.2672997289328 | 3.46332026484040 |
| Cu | -0.53734800302221 | 2.06840551164646 | 3.51683686339813 |
| Cu | -2.04482103271271 | 0.02815381221749 | 3.57876573780817 |
| Cu | -0.56804244207603 | -2.03915480694899 | 3.54411418483057 |
| Cu | 3.57304817169468 | -0.02325321022998 | 2.08582285244149 |
| Cu | 1.13225057047539 | -3.33051535564083 | 2.16651096914693 |
| Cu | 2.40560719906478 | -3.34764600899648 | -0.02945177700653 |
| Cu | 3.91577413603547 | -1.30631231798713 | -0.08062368949857 |
| Cu | 1.17567667076202 | 3.31678645629388 | 2.13403294764481 |
| Cu | 3.93466694497351 | 1.23338288287583 | -0.09047996482331 |
| Cu | 2.45902509198056 | 3.30113366881575 | -0.05743978671953 |
| Cu | -2.72574295749816 | 2.07487358237435 | 2.24584685026050 |
| Cu | 0.04873381950312 | 4.09565888100464 | 0.00803077615067 |
| Cu | -2.36172434355912 | 3.32521165775066 | 0.07376458470925 |
| Cu | -2.76461819584474 | -2.02694359962174 | 2.26917504339144 |
| Cu | -3.87945808216455 | 1.30031101400415 | 0.12833704991393 |
| Cu | -3.89883625947307 | -1.24087257031726 | 0.13683039322854 |
| Cu | -2.42319926952652 | -3.30998458865677 | 0.10282611573274 |
| Cu | -0.01547973131428 | -4.11420830545744 | 0.03993497515265 |
| Cu | 2.76835913680282 | -2.09038298313218 | -2.20686170875580 |
| Cu | -1.14982219606438 | -3.32892069349502 | -2.09361415397816 |
| Cu | 0.57055215817898 | -2.07834849697687 | -3.48203608079421 |
| Cu | 2.80065345541058 | 2.01851265638182 | -2.22360478464555 |
| Cu | 2.08042259819389 | -0.03660478568194 | -3.53291145228506 |
| Cu | -1.09605334211087 | 3.32189509653425 | -2.11980788780522 |
| Cu | 0.60392352855002 | 2.03141179850773 | -3.49868955185508 |
| Cu | -3.53767444938916 | 0.01616936252587 | -2.03901210144778 |
| Cu | -1.81706121507977 | 1.26615460041161 | -3.42833988308855 |
| Cu | -1.83779073061313 | -1.27429186030599 | -3.41867692099989 |
| N | -2.03797891841657 | 5.71627341791556 | 3.08606203114804 |
| C | -3.49677624761459 | 5.86067914219126 | 2.85291939868021 |
| H | -1.85689670732429 | 5.60909448131206 | 4.07617683750132 |
| H | -1.56063982436474 | 6.56263714653725 | 2.79958629140193 |
| H | -3.92324572416104 | 4.87790163404146 | 3.06440010542277 |
| C | -3.73758639975852 | 6.18481891187142 | 1.39483173206211 |
| C | -4.11759882051670 | 6.88813911869394 | 3.78334106622099 |
| H | -4.80247385833177 | 6.24683795120402 | 1.18679832043386 |
| H | -3.28153673283863 | 7.13741760180512 | 1.12207339435182 |
| H | -3.31034785634186 | 5.4113378056117 | 0.75058184692014 |
| H | -3.93830798442651 | 6.63648393103036 | 4.82829509520012 |
| H | -5.19473187760243 | 6.93961504908591 | 3.63554112027404 |
| H | -3.70757393707845 | 7.88131575511319 | 3.59675202673366 |

4. GFN0-xTB

68

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|--------------------|
| Cu | 0.04121518756244 | 0.10639010637968 | -0.15894393113459 |
| Cu | -0.11504750699681 | 0.39241593343366 | 2.22104679714532 |
| Cu | -0.27271429737540 | 0.68172220054742 | 4.58511181524165 |
| Cu | 1.47917859785393 | -0.90385425699263 | 3.68733320891421 |
| Cu | 1.59013421953733 | -1.16142877919508 | 1.18009714166529 |
| Cu | 1.81224646368236 | 1.34335124601125 | 0.89088586769497 |
| Cu | -0.51805122438077 | 2.31966037286339 | 0.62558912828325 |
| Cu | -2.16853276523918 | 0.40645764256427 | 0.74091850419099 |
| Cu | -0.86929808134747 | -1.74009708026992 | 1.08776378099785 |
| Cu | 0.59356717260336 | -2.10770964068490 | -0.94004314241175 |
| Cu | 2.25263715844773 | -0.20519817160334 | -1.06302023729223 |
| Cu | 0.95603327631126 | 1.94151506204975 | -1.40930712119323 |
| Cu | -1.50151432600204 | 1.36112321415285 | -1.50622277537875 |
| Cu | -1.72580813504347 | -1.14175147607318 | -1.21394424273210 |
| Cu | 0.20492391670795 | -0.19392680281062 | -2.54299702031361 |
| Cu | 3.12529342021747 | -2.41543778330660 | 2.51494772922802 |
| Cu | 3.57606166224004 | 2.56993115755201 | 1.93486856972595 |
| Cu | -1.01773151130532 | 4.52657070164109 | 1.37426364254304 |
| Cu | -4.36426769684700 | 0.68756398215991 | 1.63068061264060 |
| Cu | -1.77518760514315 | -3.56939397143757 | 2.33067780047127 |
| Cu | 1.14011358215986 | -4.30246753777320 | -1.71375974549129 |
| Cu | 4.44715984058939 | -0.51368782066734 | -1.95945203612768 |
| Cu | 1.86868061008998 | 3.76240786378073 | -2.65780458912599 |
| Cu | -3.03498478556884 | 2.61099573949485 | -2.84207199445185 |
| Cu | -3.48329034883802 | -2.37678668956320 | -2.26216756337638 |
| Cu | 0.36344844963257 | -0.48752636513452 | -4.90958413021208 |
| Cu | 1.71615941908701 | 1.67668002969578 | 3.38953623689937 |
| Cu | -0.68358794273062 | 2.68735928705418 | 3.10452970529421 |
| Cu | -2.40347160183078 | 0.70714006135092 | 3.23102721263012 |
| Cu | -1.05966969329883 | -1.50423880124166 | 3.59293263329437 |
| Cu | 3.47688991351166 | 0.07560557278766 | 2.30839510045560 |
| Cu | 0.69877717105696 | -3.10829622188388 | 2.51673035417342 |
| Cu | 2.20983709494193 | -3.48897774737654 | 0.42212655273784 |
| Cu | 3.92516784584718 | -1.52385461445518 | 0.29247170032622 |
| Cu | 1.31351736495144 | 3.66430435583024 | 1.73597489833581 |
| Cu | 4.15832399773267 | 1.06491606222295 | -0.00787234434887 |
| Cu | 2.81826825490775 | 3.28299690533470 | -0.36633020243483 |
| Cu | -2.82405290627224 | 2.70414679005841 | 1.57275330979817 |
| Cu | 0.42680467771941 | 4.28694936945002 | -0.65955321332137 |
| Cu | -2.11756665415931 | 3.68782584455907 | -0.75014362749972 |
| Cu | -3.18159004292406 | -1.49474335797966 | 2.06164465790675 |
| Cu | -3.83954328693349 | 1.70871615580341 | -0.625442223418675 |
| Cu | -4.0688854270871 | -0.87548557137365 | -0.32347551699538 |
| Cu | -2.72976510213551 | -3.08595615335606 | 0.04241819438486 |
| Cu | -0.33317159322250 | -4.08755345878932 | 0.32549326779648 |
| Cu | 2.89567988408255 | -2.50039661084865 | -1.89795450807737 |
| Cu | -1.21869766084420 | -3.46918715826195 | -2.05350111077373 |
| Cu | 0.77670756410365 | -2.48827867478327 | -3.42904586716343 |
| Cu | 3.27326988543778 | 1.68260844674243 | -2.3864498900422 |
| Cu | 2.49349520010562 | -0.52461254879920 | -3.55564463329682 |
| Cu | -0.60599590512786 | 3.29935742088110 | -2.85057004437313 |
| Cu | 1.15981722160527 | 1.69326524229996 | -3.91683322317635 |
| Cu | -3.38027045592954 | 0.11658718656882 | -2.64435580328050 |
| Cu | -1.38584938129739 | 1.09676988445475 | -4.01483974151108 |
| Cu | -1.61878850576250 | -1.49005729171551 | -3.71216270778851 |
| N | -2.40787225832621 | 6.23820917411735 | 2.67418167343072 |
| C | -3.20587296705627 | 5.62946392865286 | 3.71487189922274 |
| H | -1.73124110053840 | 6.89500555691996 | 3.04796425412537 |
| H | -2.98999835281478 | 6.71809548044691 | 1.99498006697555 |
| H | -2.54389314464332 | 5.02027886481315 | 4.32583644679390 |
| C | -4.24238697848635 | 4.74922670076017 | 3.06501138009913 |
| C | -3.86188390195546 | 6.69212293379895 | 4.57610900309387 |
| H | -4.85948252959937 | 4.26526462835670 | 3.81679625556501 |
| H | -4.86715713747657 | 5.33494066007030 | 2.39333791717321 |
| H | -3.71606988780677 | 3.94669655942099 | 2.45823265655758 |
| H | -3.10240443305743 | 7.33408496223625 | 5.01804580079275 |
| H | -4.44649740427456 | 6.22819538826156 | 5.36740198881671 |
| H | -4.51945739742610 | 7.29782591079700 | 3.95388243596815 |

5. GFN1-xTB

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| 68 | | | |
| Cu | 0.02785004591705 | 0.00463395400366 | -0.13565742738021 |
| Cu | -0.14009367786133 | 0.13924458319189 | 2.36591487969040 |
| Cu | -0.30646169052575 | 0.27977298923022 | 4.76446506953939 |
| Cu | 1.59115250465864 | -1.19718292365802 | 3.79279145787462 |
| Cu | 1.72827930858732 | -1.31962177903369 | 1.18960924917337 |
| Cu | 1.81405942617131 | 1.32647491570868 | 1.02920411594013 |
| Cu | -0.70213232538363 | 2.27733099011486 | 0.82680942107659 |
| Cu | -2.29513782866253 | 0.13315119490279 | 0.81663786620419 |
| Cu | -0.81503056063144 | -2.05801480243555 | 1.05883108072822 |
| Cu | 0.73374904018389 | -2.24157207558968 | -1.07996650547076 |
| Cu | 2.36105079941402 | -0.15569247470915 | -1.10149766584616 |
| Cu | 0.87965819615637 | 2.03093425279126 | -1.34528760158929 |
| Cu | -1.65701369392118 | 1.28326841702884 | -1.48841830448646 |
| Cu | -1.74906688124773 | -1.35381720377074 | -1.31439615226413 |
| Cu | 0.21625158001276 | -0.17975667966103 | -2.65201452148857 |
| Cu | 3.34663302666667 | -2.57053431046380 | 2.46285636952955 |
| Cu | 3.52534045996623 | 2.59844395292142 | 2.14725370479542 |
| Cu | -1.36417808108225 | 4.44317357374840 | 1.72181567253453 |
| Cu | -4.52226489295707 | 0.23455795764217 | 1.72322265838237 |
| Cu | -1.61840364492445 | -4.02043502437559 | 2.20327742506836 |
| Cu | 1.40400156398889 | -4.37624371046297 | -1.97752818062961 |
| Cu | 4.58516257611913 | -0.29004616545975 | -2.01659869609493 |
| Cu | 1.69566801279523 | 3.97797769571845 | -2.50281954473589 |
| Cu | -3.27441878104334 | 2.51752642926251 | -2.77720424238493 |
| Cu | -3.44583045173828 | -2.64279532067344 | -2.43952492956549 |
| Cu | 0.38976915485862 | -0.34109545655645 | -5.04973974843722 |
| Cu | 1.69172778593385 | 1.50525765739069 | 3.62930846144045 |
| Cu | -0.83331364949742 | 2.40856552108356 | 3.39277876801796 |
| Cu | -2.52740044759306 | 0.28338502808865 | 3.40493345258649 |
| Cu | -1.01618668852774 | -1.95373195575379 | 3.65621462567214 |
| Cu | 3.59908795946323 | 0.01710886511036 | 2.42163609513681 |
| Cu | 0.90255093416179 | -3.44914157443737 | 2.45125239395637 |
| Cu | 2.48633607623254 | -3.63802183638767 | 0.26193355216912 |
| Cu | 4.15249756173938 | -1.49458470742831 | 0.24203862258453 |
| Cu | 1.14651761781040 | 3.62958559338600 | 2.01694985825165 |
| Cu | 4.24529172241389 | 1.21145835737597 | 0.07568829316422 |
| Cu | 2.73128925116232 | 3.44683050141700 | -0.17823430771184 |
| Cu | -3.09369121610110 | 2.39538362816648 | 1.80035962318163 |
| Cu | 0.18616713161487 | 4.35459666661921 | -0.42511693374605 |
| Cu | -2.40065085239706 | 3.59112888176424 | -0.59140758738592 |
| Cu | -3.21556641823471 | -1.97543780503632 | 2.06602388450829 |
| Cu | -4.08094054382506 | 1.45233601021983 | -0.54234136913527 |
| Cu | -4.17360526113005 | -1.25383890957163 | -0.36787951477481 |
| Cu | -2.65492215340290 | -3.4887576724635 | -0.11642700760613 |
| Cu | -0.11483290460102 | -4.39712862446115 | 0.12537725631563 |
| Cu | 3.13503043776282 | -2.44425282741558 | -2.08538767067055 |
| Cu | -1.07169415832896 | -3.67551984758885 | -2.30609048755589 |
| Cu | 0.93714626009821 | -2.46999820816963 | -3.67404541675754 |
| Cu | 3.28727340947268 | 1.93381829905857 | -2.35889642555437 |
| Cu | 2.60345192571021 | -0.32648330846478 | -3.69363352503236 |
| Cu | -0.82471714543618 | 3.40193146030066 | -2.76742947509488 |
| Cu | 1.09231780475404 | 1.90726951916572 | -3.94912106688985 |
| Cu | -3.52522530065405 | -0.06214214754992 | -2.71957019339522 |
| Cu | -1.51244367771354 | 1.14224380674563 | -4.09237229163023 |
| Cu | -1.60302913361268 | -1.56002650752338 | -3.91448425541636 |
| N | -2.23696541329669 | 6.22155908033627 | 2.63823912000797 |
| C | -3.24383322333005 | 6.06153659929354 | 3.71004983926766 |
| H | -1.47829747205054 | 6.76861058130181 | 3.03318474019702 |
| H | -2.65562825432701 | 6.81159946333147 | 1.92509504899677 |
| H | -2.77417760087477 | 5.48303869066601 | 4.51621015426235 |
| C | -4.45118749293417 | 5.30405562260267 | 3.17484311723712 |
| C | -3.64359703560615 | 7.44025058135972 | 4.23341096089013 |
| H | -5.19507196969755 | 5.17682534323995 | 3.95979737102053 |
| H | -4.90442229964275 | 5.83259309352069 | 2.33631068240354 |
| H | -4.14625984626414 | 4.3047946930689 | 2.82988574752658 |
| H | -2.76796390383966 | 7.96720568547506 | 4.61183930244606 |
| H | -4.36489800332673 | 7.33567965566343 | 5.04306164956631 |
| H | -4.09283799760116 | 8.03456927162401 | 3.43733945738663 |

6. GFN-FF

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| 68 | | | |
| Cu | -0.01867731119252 | 0.19527693311400 | -0.14557327355059 |
| Cu | -0.19534274628024 | 0.58142554973770 | 2.18092718307618 |
| Cu | -0.38687408433542 | 1.02438733703247 | 4.57557570997468 |
| Cu | 1.38332449676551 | -0.55746505383335 | 3.69881850746506 |
| Cu | 1.52294289063109 | -0.94432875482625 | 1.25191947175378 |
| Cu | 1.68892806102304 | 1.51278641796310 | 0.84157065542482 |
| Cu | -0.59578698808119 | 2.40427573321517 | 0.48668467344676 |
| Cu | -2.20319997138721 | 0.46706060196921 | 0.71293862788748 |
| Cu | -0.88840523235149 | -1.57849441489685 | 1.17795203486299 |
| Cu | 0.57224287113745 | -2.00722041992607 | -0.79259455577068 |
| Cu | 2.16796968067599 | -0.10060027831171 | -1.00266628989202 |
| Cu | 0.85003044970807 | 1.96379334623818 | -1.46742201816238 |
| Cu | -1.56604168838605 | 1.33644991448320 | -1.53504150010207 |
| Cu | -1.73324164606123 | -1.12180663414639 | -1.12529492888242 |
| Cu | 0.15447164779755 | -0.20976505864200 | -2.47173880738176 |
| Cu | 3.10180211094306 | -2.10800955131624 | 2.68550862205432 |
| Cu | 3.44422392043505 | 2.86137670487404 | 1.84581276442013 |
| Cu | -1.23976615014223 | 4.65067104403497 | 1.17739939958606 |
| Cu | -4.45182923900195 | 0.80711102478488 | 1.60272017687960 |
| Cu | -1.78310522279554 | -3.38047577867098 | 2.53749737461339 |
| Cu | 1.18051661645821 | -4.26397306126736 | -1.45858512885321 |
| Cu | 4.41165263280462 | -0.40512635489890 | -1.88485621258869 |
| Cu | 1.73852126738208 | 3.77556825938676 | -2.82055446726647 |
| Cu | -3.14778958075593 | 2.50267437171835 | -2.96830961265391 |
| Cu | -3.49172733819635 | -2.46674714884803 | -2.12630615086395 |
| Cu | 0.33566353376265 | -0.62631400741524 | -4.85936027839700 |
| Cu | 1.56144304843059 | 1.96907779923879 | 3.26938467457741 |
| Cu | -0.79067580254706 | 2.82691101293701 | 2.88169910082434 |
| Cu | -2.45956157519671 | 0.94109348527694 | 3.13928567446463 |
| Cu | -1.10534818625670 | -1.20141279522849 | 3.62135708369377 |
| Cu | 3.33023483991995 | 0.37864953582811 | 2.30606332746141 |
| Cu | 0.67136814092215 | -2.79525787678129 | 2.65969312989667 |
| Cu | 2.17867821902950 | -3.24603743125287 | 0.62666459024059 |
| Cu | 3.82299279758346 | -1.28288563528034 | 0.40884983153034 |
| Cu | 1.13030626984250 | 3.82685874487831 | 1.53828084749418 |
| Cu | 3.99557641333124 | 1.24568074640440 | -0.01713552740065 |
| Cu | 2.63456810708622 | 3.37167990250923 | -0.49258135046146 |
| Cu | -2.83200794127781 | 2.70616386671438 | 1.35306112208947 |
| Cu | 0.26127113551775 | 4.29395852546249 | -0.83849173428418 |
| Cu | -2.22612142267811 | 3.64649190280359 | -0.91390572311818 |
| Cu | -3.17410726586029 | -1.31423708991973 | 2.11280659390440 |
| Cu | -3.87030856657450 | 1.66776623384610 | -0.70097175050309 |
| Cu | -4.04561128793228 | -0.85429939158734 | -0.26289704746913 |
| Cu | -2.68296715241720 | -2.97783613018814 | 0.21174098741901 |
| Cu | -0.30534121329683 | -3.89579865868352 | 0.55084772000034 |
| Cu | 2.84471590800859 | -2.37852670402809 | -1.69826672234759 |
| Cu | -1.17530425207165 | -3.42861814786473 | -1.82082254657477 |
| Cu | 0.77147772294908 | -2.49101797034093 | -3.21104070561752 |
| Cu | 3.12928969764699 | 1.71073098235837 | -2.39057201934384 |
| Cu | 2.41499273640970 | -0.52898922192610 | -3.42788046647221 |
| Cu | -0.71665733826826 | 3.18902344385265 | -2.93980686715030 |
| Cu | 1.05494999408843 | 1.59802468946117 | -3.90403258302716 |
| Cu | -3.37470937946015 | 0.01303862070266 | -2.59018916139791 |
| Cu | -1.42973552748111 | 0.95080451478473 | -3.97730565102347 |
| Cu | -1.60414760732157 | -1.57789048481834 | -3.55212670408284 |
| N | -1.83100661621557 | 5.52521908867208 | 2.90829291779604 |
| C | -3.13642906667826 | 5.03351316264388 | 3.41779750549176 |
| H | -1.10415301655446 | 5.39701964625579 | 3.63131079148662 |
| H | -1.89750296613462 | 6.54495310330234 | 2.75975912849441 |
| H | -3.05615379661666 | 3.93825617443098 | 3.52033589372088 |
| C | -4.24379909550277 | 5.35013642837798 | 2.41900756644013 |
| C | -3.44060713555473 | 5.6185758571331 | 4.79439796442723 |
| H | -5.19704113922121 | 4.90527384691818 | 2.71770900904974 |
| H | -4.39271772933131 | 6.42957617648958 | 2.34300371269961 |
| H | -4.00190822851172 | 4.98907125534345 | 1.41676457175336 |
| H | -2.65615444539387 | 5.37428942053595 | 5.51556476565193 |
| H | -4.38951436904278 | 5.24491649266558 | 5.18882509994949 |
| H | -3.51085588783125 | 6.70736213613786 | 4.74186099954812 |

Anexo B

Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y la molécula de 2-propanol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB

1. PBE-D3

67

| | | | |
|----|-----------|-----------|-----------|
| Cu | 0.055511 | 0.019767 | 0.158218 |
| Cu | 0.089838 | -0.268527 | 2.549727 |
| Cu | 0.117898 | -0.535101 | 4.908435 |
| Cu | 1.802825 | -1.769380 | 3.493357 |
| Cu | 1.743979 | -1.460482 | 1.044882 |
| Cu | 1.884315 | 1.054791 | 1.336973 |
| Cu | -0.485178 | 1.971152 | 1.493077 |
| Cu | -2.082765 | 0.003780 | 1.266634 |
| Cu | -0.708017 | -2.110246 | 1.001174 |
| Cu | 0.594594 | -1.926062 | -1.167379 |
| Cu | 2.197396 | 0.027675 | -0.959038 |
| Cu | 0.822327 | 2.137891 | -0.694959 |
| Cu | -1.628028 | 1.488735 | -0.738987 |
| Cu | -1.769859 | -1.024112 | -1.029888 |
| Cu | 0.024923 | 0.298343 | -2.242273 |
| Cu | 3.406153 | -2.915968 | 1.919764 |
| Cu | 3.679515 | 2.082963 | 2.505322 |
| Cu | -1.014409 | 3.906590 | 2.804923 |
| Cu | -4.189126 | -0.001197 | 2.365001 |
| Cu | -1.460579 | -4.204651 | 1.834021 |
| Cu | 1.126145 | -3.838272 | -2.471155 |
| Cu | 4.304563 | 0.038030 | -2.056799 |
| Cu | 1.571967 | 4.237073 | -1.525763 |
| Cu | -3.290684 | 2.949929 | -1.611111 |
| Cu | -3.568952 | -2.047345 | -2.197073 |
| Cu | -0.007286 | 0.576096 | -4.601752 |
| Cu | 1.944518 | 0.786553 | 3.790293 |
| Cu | -0.459500 | 1.711801 | 3.926133 |
| Cu | -2.084482 | -0.280021 | 3.718926 |
| Cu | -1.680740 | -2.428591 | 3.649082 |
| Cu | 3.625388 | -0.426767 | 2.260986 |
| Cu | 0.994142 | -3.642510 | 1.919635 |
| Cu | 2.317769 | -3.456725 | -0.284926 |
| Cu | 3.945023 | -1.471910 | -0.072324 |
| Cu | 1.363655 | 3.047739 | 2.695965 |
| Cu | 4.085924 | 1.085023 | 0.225949 |
| Cu | 2.691454 | 3.234346 | 0.497305 |
| Cu | -2.660770 | 1.981161 | 2.626860 |
| Cu | 0.292602 | 4.130209 | 0.629121 |
| Cu | -2.198647 | 3.474894 | 0.584408 |
| Cu | -2.893666 | -2.153310 | 2.145888 |
| Cu | -3.832710 | 1.507397 | 0.382067 |
| Cu | -3.971955 | -1.048573 | 0.082536 |
| Cu | -2.575539 | -3.198636 | -0.188638 |
| Cu | -0.172534 | -4.114743 | -0.328520 |
| Cu | 2.777729 | -1.945721 | -2.321106 |
| Cu | -1.251959 | -3.012894 | -2.393215 |
| Cu | 0.571477 | -1.671546 | -3.623842 |
| Cu | 3.007828 | 2.188009 | -1.837891 |
| Cu | 2.198156 | 0.315095 | -3.411151 |
| Cu | -0.881841 | 3.682445 | -1.607005 |
| Cu | 0.799274 | 2.463729 | -3.140177 |
| Cu | -3.512133 | 0.461281 | -1.952413 |
| Cu | -1.688838 | 1.805426 | -3.183198 |
| Cu | -1.831329 | -0.752400 | -3.482366 |
| C | -2.306787 | 7.993323 | 2.042973 |
| C | -1.448457 | 6.740339 | 1.985906 |
| C | 0.045743 | 7.002171 | 2.054862 |
| O | -1.770638 | 5.866691 | 3.115040 |
| H | -2.082491 | 8.651207 | 1.179856 |
| H | -3.387758 | 7.744463 | 1.994989 |
| H | -2.116289 | 8.561919 | 2.975824 |
| H | -1.664240 | 6.166251 | 1.048662 |
| H | 0.315923 | 7.548997 | 2.980946 |
| H | 0.600601 | 6.033207 | 2.051021 |
| H | 0.377217 | 7.588619 | 1.176244 |
| H | -2.739337 | 5.725723 | 3.116155 |

2. PBEh-3c

67

| | | | |
|----|--------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.17920015783693 | 0.07531695677140 | 0.10013725807527 |
| Cu | -0.48944267552649 | 0.12044390558009 | 2.58210569992628 |
| Cu | -0.76618583436151 | 0.17114468378497 | 5.03083164359506 |
| Cu | 1.27076420161617 | -0.98763839199724 | 3.90042871130348 |
| Cu | 1.57932038994744 | -1.03114980460939 | 1.43956659132726 |
| Cu | 1.32093198403753 | 1.55665006608007 | 1.37191150777078 |
| Cu | -1.19210689528919 | 2.11542234733599 | 1.04363080226857 |
| Cu | -2.49147960725507 | -0.13116933822431 | 0.92328523520547 |
| Cu | -0.77495688158975 | -2.06842844754045 | 1.18477710939099 |
| Cu | 0.83834368524271 | -1.96728666695970 | -0.86206352684053 |
| Cu | 2.14034081060652 | 0.28273257451689 | -0.73943063266479 |
| Cu | 0.42004012410247 | 2.22187580139040 | -1.00448968513507 |
| Cu | -1.93401261367177 | 1.18123942760740 | -1.26222737771319 |
| Cu | -1.674070696878612 | -1.40805531259996 | -1.19654320951470 |
| Cu | 0.12979476810968 | 0.03166264267416 | -2.36567858779355 |
| Cu | 3.29086505736514 | -2.09596301850263 | 2.78005211850585 |
| Cu | 2.77666060882231 | 3.02138355054566 | 2.62308429464088 |
| Cu | -2.18056240049578 | 4.10874872293068 | 1.99345568005376 |
| Cu | -4.75140535019866 | -0.32407602074617 | 1.74638107596041 |
| Cu | -1.37229048739197 | -4.16035917578337 | 2.24926061188625 |
| Cu | 1.82889400602570 | -3.96595776455667 | -1.80199448811264 |
| Cu | 4.40811538029813 | 0.47834481956075 | -1.54981736864184 |
| Cu | 1.01627460855041 | 4.31707890053792 | -2.06101821383336 |
| Cu | -3.64838270666553 | 2.24547272021719 | -2.59556875719404 |
| Cu | -3.13470503322971 | -2.87478385380273 | -2.43699388400851 |
| Cu | 0.43625729452201 | -0.00898434969204 | -4.76927372552178 |
| Cu | 1.02344107297290 | 1.60810464438238 | 3.84147706486427 |
| Cu | -1.49723910231199 | 2.16501222712441 | 3.53103165951318 |
| Cu | -2.79465855516061 | -0.08087471253144 | 3.40927581558483 |
| Cu | -1.07895636381142 | -2.03213052210336 | 3.65942672947903 |
| Cu | 3.09510199598019 | 0.47129153510766 | 2.75444304636992 |
| Cu | 0.98401502921532 | -3.19864736004079 | 2.55838773705046 |
| Cu | 2.60791085269100 | -3.09157145805884 | 0.49054167450811 |
| Cu | 3.92043701968902 | -0.82432966499519 | 0.61998632951684 |
| Cu | 0.30537818437625 | 3.62317322640501 | 2.34919442905811 |
| Cu | 3.66538106319975 | 1.77409023566739 | 0.54197005920203 |
| Cu | 1.93860319083158 | 3.71412963464165 | 0.28387001368222 |
| Cu | -3.52291106018564 | 1.92397612026463 | 1.90205457048022 |
| Cu | -0.59300286242194 | 4.28189100918950 | -0.03732458018662 |
| Cu | -2.96127348183036 | 3.24032118204764 | -0.30384367290326 |
| Cu | -3.10590136205527 | -2.28127203246588 | 2.04141655404687 |
| Cu | -4.27287978053064 | 0.97452647508278 | -0.43040046867682 |
| Cu | -4.01872670157005 | -1.61981780409003 | -0.35364961734153 |
| Cu | -2.29386751884760 | -3.56151403525204 | -0.09691256483602 |
| Cu | 0.23594341877477 | -4.13167908239481 | 0.22636779343909 |
| Cu | 3.17460188897088 | -1.77523855738661 | -1.71195748740644 |
| Cu | -0.66014843745776 | -3.47659701995034 | -2.16251125047820 |
| Cu | 1.15592758894290 | -2.02562474845626 | -3.34177995967964 |
| Cu | 2.75326204939772 | 2.43753460649872 | -1.85188632948764 |
| Cu | 2.46359593175339 | 0.23538968115340 | -3.21244443952603 |
| Cu | -1.34136350521924 | 3.34758622802184 | -2.37281989796699 |
| Cu | 0.72616547575547 | 2.19465392151971 | -3.47868801585208 |
| Cu | -3.44932162451358 | -0.32305598924579 | -2.56638244934844 |
| Cu | -1.63377196099976 | 1.13500756447986 | -3.73501345350382 |
| Cu | -1.37312567579218 | -1.47172137765162 | -3.67204039530994 |
| C | 1.62513578178481 | -0.25457411720070 | 7.74056685437524 |
| C | 0.30293471832967 | 0.44292158105025 | 8.00740420443316 |
| C | 0.38347800461480 | 1.94205556854113 | 7.81309135161511 |
| O | -0.73067361230879 | -0.06988737943239 | 7.16148289738224 |
| H | 2.39131575187959 | 0.08882828432646 | 8.44521896235661 |
| H | 1.54500355352377 | -1.34346485589767 | 7.851831854445616 |
| H | 1.98554556797164 | -0.04522023339273 | 6.72492184021649 |
| H | 0.00440473124253 | 0.25152058667964 | 9.05328494701260 |
| H | 0.71031415002043 | 2.20311167786250 | 6.79852613188808 |
| H | -0.58276428596193 | 2.42484188662301 | 7.99624357736583 |
| H | 1.11112312353330 | 2.37020408946243 | 8.51151332692960 |
| H | -0.96331899741964 | -0.95424599010451 | 7.45071627471360 |

3. B97-3c

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.05790884459661 | 0.01301486946521 | 0.02743487463579 |
| Cu | -0.03958254283717 | -0.04409181495865 | 2.38775249109762 |
| Cu | -0.02644523553069 | -0.08571860276151 | 4.75161014341219 |
| Cu | 1.77233141000748 | -1.25055897406431 | 3.48349375975810 |
| Cu | 1.71777119032363 | -1.17392144957876 | 1.04580151125341 |
| Cu | 1.60222241144603 | 1.30557901812116 | 1.09747076108084 |
| Cu | -0.80235462319609 | 1.97506327740492 | 1.13905239203397 |
| Cu | -2.16060376858210 | -0.11404825682677 | 1.09331865440259 |
| Cu | -0.60808842134959 | -2.05223618724827 | 1.04210841108519 |
| Cu | 0.68391481398221 | -1.94334552638788 | -1.07814977520793 |
| Cu | 2.04933803181500 | 0.13196258139503 | -1.04385263318993 |
| Cu | 0.49644887456299 | 2.06799089070051 | -0.99283207554701 |
| Cu | -1.82857178338828 | 1.19163043508668 | -0.99539964655719 |
| Cu | -1.71338565097306 | -1.28951675670674 | -1.04900595713394 |
| Cu | -0.07167264545207 | 0.06031825999833 | -2.33838020936024 |
| Cu | 3.49279555397993 | -2.35842956773943 | 2.06567540193395 |
| Cu | 3.25591114885007 | 2.61127785981584 | 2.17498903767871 |
| Cu | -1.54515582211893 | 3.94790823065120 | 2.24981471586030 |
| Cu | -4.26426396603573 | -0.22644088166935 | 2.16465663568622 |
| Cu | -1.15932579802292 | -4.11521010606433 | 2.05802226883897 |
| Cu | 1.42473040205131 | -3.89730214397044 | -2.1822500124367 |
| Cu | 4.15505962360904 | 0.25378140835962 | -2.11325032987686 |
| Cu | 1.04611978688077 | 4.13521665401266 | -2.00537987547767 |
| Cu | -3.60261281379299 | 2.38108915320064 | -2.01116840311273 |
| Cu | -3.37144394438161 | -2.58881726868696 | -2.12492866271013 |
| Cu | -0.08765228649614 | 0.11066693590490 | -4.70307148924558 |
| Cu | 1.65285444719197 | 1.2865588889615 | 3.53815767080449 |
| Cu | -0.7947986307236 | 1.9579695243380 | 3.56063743665599 |
| Cu | -2.19057591304542 | -0.16485947727737 | 3.53234989185628 |
| Cu | -0.60365646553577 | -2.14802802647811 | 3.48013574945940 |
| Cu | 3.45023183626635 | 0.12861811450550 | 2.16591173649489 |
| Cu | 1.19282100779806 | -3.30623938180730 | 2.10712545879223 |
| Cu | 2.51345530397200 | -3.19638257734762 | -0.06013657914193 |
| Cu | 3.90791218086479 | -1.07422896023626 | -0.02396828822487 |
| Cu | 0.88049220802158 | 3.32370167450161 | 2.24395175018985 |
| Cu | 3.78839697960438 | 1.46345192891589 | 0.03108005191330 |
| Cu | 2.19948649082918 | 3.44716118060392 | 0.08671808032406 |
| Cu | -2.95582517974894 | 1.88745603218103 | 2.24289759503505 |
| Cu | -0.24569030897036 | 4.10139776630845 | 0.11028293578823 |
| Cu | -2.61810476088101 | 3.21492023743800 | 0.11238634177715 |
| Cu | -2.77176228003319 | -2.21999605160836 | 2.15646098061545 |
| Cu | -4.01906816074841 | 1.09767679148517 | 0.07622389341123 |
| Cu | -3.90114717807244 | -1.43999549124840 | 0.02030925817648 |
| Cu | -2.31423691871986 | -3.42395492799729 | -0.03402071039095 |
| Cu | 0.13627914333402 | -4.09311290196955 | -0.06363451305711 |
| Cu | 2.85164244144208 | -1.86218630630013 | -2.19548244470225 |
| Cu | -0.99365180868059 | -3.31353043962896 | -2.20072830538751 |
| Cu | 0.68439970444614 | -1.93500978829952 | -3.51851854319272 |
| Cu | 2.65866030407929 | 2.24205107313627 | -2.10481423138262 |
| Cu | 2.07888358370698 | 0.18624402088501 | -3.48237117892236 |
| Cu | -1.30584368590504 | 3.32863403451143 | -2.05570885585110 |
| Cu | 0.49093043098366 | 2.16905237475862 | -3.42822265785311 |
| Cu | -3.56229920789665 | -0.10640899162374 | -2.11404338996417 |
| Cu | -1.88481449064718 | 1.27254718667083 | -3.43102908755470 |
| Cu | -1.76570309740177 | -1.26520999612173 | -3.48748108994721 |
| C | -1.36063833994205 | 8.28071129343774 | 2.42608631019784 |
| C | -0.86019550347589 | 6.85626924662698 | 2.41200495290527 |
| C | 0.25996156481499 | 6.59811899115962 | 3.38418143449764 |
| O | -1.94501123848977 | 5.94927809029057 | 2.77443472132272 |
| H | -0.56053620298895 | 8.96031075996632 | 2.13918041112419 |
| H | -2.17766971700029 | 8.42178826482109 | 1.71786414259012 |
| H | -1.70868222827723 | 8.55908426756621 | 3.41936257448146 |
| H | -0.53104415887735 | 6.58386760815208 | 1.40228804721267 |
| H | -0.04865635300346 | 6.82351342067575 | 4.40309311964908 |
| H | 0.56807098512133 | 5.55067652069530 | 3.34042708265791 |
| H | 1.12238965596752 | 7.20982612399681 | 3.13050802710555 |
| H | -2.72273030778478 | 6.18753735387068 | 2.25873322043897 |

4. GFN0-xTB

67

| | | | |
|----|--------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | 0.13626474214188 | 0.09080457870594 | 0.24898881272815 |
| Cu | 0.17178078900371 | -0.34420505932012 | 2.60914888284325 |
| Cu | 0.20942662383689 | -0.79295993597794 | 4.95808733403724 |
| Cu | 1.80157373026195 | -2.07283055942819 | 3.48319596385616 |
| Cu | 1.71223484937112 | -1.56462049451704 | 1.01534867047501 |
| Cu | 2.04270013668978 | 0.90467805092443 | 1.46135942583317 |
| Cu | -0.24470252855431 | 2.00066977977200 | 1.68322953041730 |
| Cu | -1.97824715504990 | 0.16293950251259 | 1.38449031268987 |
| Cu | -0.77195597655019 | -2.02270358583961 | 0.96850622996205 |
| Cu | 0.51427801300347 | -1.80522298155028 | -1.19675843669037 |
| Cu | 2.25397065933831 | 0.00202335744108 | -0.89233990285226 |
| Cu | 1.04953733368327 | 2.19412542530420 | -0.47388534626604 |
| Cu | -1.44165870901500 | 1.73216402233435 | -0.52568375906697 |
| Cu | -1.76651169666289 | -0.74049330626371 | -0.96958357622247 |
| Cu | 0.10427572912532 | 0.50947766140252 | -2.11989587215781 |
| Cu | 3.27748542673237 | -3.20549890947539 | 1.77557658914407 |
| Cu | 3.94253105524168 | 1.71125267254849 | 2.66439643652635 |
| Cu | -0.59437081918841 | 3.81105201833250 | 3.18960835120164 |
| Cu | -4.08131215229152 | 0.23508641475967 | 2.51271508132572 |
| Cu | -1.67578574572437 | -4.11873870794342 | 1.68197971152535 |
| Cu | 0.88827487502578 | -3.68512020493040 | -2.62781218806457 |
| Cu | 4.35865997271381 | -0.08370804898453 | -2.02443721406725 |
| Cu | 1.96270066565624 | 4.26821571002885 | -1.21294164391666 |
| Cu | -3.00901584747319 | 3.34762554443393 | -1.31784534297885 |
| Cu | -3.65873827250084 | -1.56547827441721 | -2.17722050578655 |
| Cu | 0.07246618023230 | 0.93231806304708 | -4.47297479187771 |
| Cu | 2.14728621523537 | 0.47642696959486 | 3.94422960299830 |
| Cu | -0.20979496096409 | 1.56382582125535 | 4.19237074941096 |
| Cu | -2.01400925597853 | -0.28826711601097 | 3.86513349104430 |
| Cu | -0.76545275131731 | -2.54579565081968 | 3.43471988522143 |
| Cu | 3.73710431209921 | -0.77801843124807 | 2.29567728496995 |
| Cu | 0.82529731837576 | -3.80053088385638 | 1.78194279988027 |
| Cu | 2.15489541991633 | -3.57275102907636 | -0.45170025081027 |
| Cu | 3.95348275555477 | -1.70866474477261 | -0.13841839001881 |
| Cu | 1.73094732962400 | 2.87302583757423 | 2.99773867800047 |
| Cu | 4.30024587890902 | 0.83647786547087 | 0.32502075410088 |
| Cu | 3.06779616213776 | 3.09625100537529 | 0.74304726457842 |
| Cu | -2.43980523959546 | 2.10978260600680 | 2.91465837128709 |
| Cu | 0.73247162451861 | 4.22437987602151 | 1.00594705086283 |
| Cu | -1.92584559656337 | 3.73119629605704 | 0.93761828114424 |
| Cu | -2.98956284994031 | -2.01734845964871 | 2.16883813353000 |
| Cu | -3.691344493918955 | 1.84812755906741 | 0.61090329441557 |
| Cu | -4.01886480553184 | -0.69779079919107 | 0.16663765519292 |
| Cu | -2.77102726420042 | -2.94830670091494 | -0.26462450312629 |
| Cu | -0.41560556408029 | -0.40690896948524 | -0.50043583480932 |
| Cu | 2.71430568762109 | -1.95414191929992 | -2.42480112183404 |
| Cu | -1.44120570104419 | -2.72274476917962 | -2.50313416799257 |
| Cu | 0.49318741413172 | -1.43052939738395 | -3.69417658661829 |
| Cu | 3.27237197680482 | 2.16615992995109 | -1.68232313907205 |
| Cu | 2.29201338918641 | 0.43823093566934 | -3.37755469151757 |
| Cu | -0.54645591103080 | 3.93983588211949 | -1.31943823224752 |
| Cu | 1.05038091136142 | 2.69123526826666 | -2.95441208341281 |
| Cu | -3.46139295174729 | 0.92042072192913 | -1.81532113032689 |
| Cu | -1.52843090762969 | 2.21156711211481 | -3.00865140725413 |
| Cu | -1.86364243492938 | -0.33405216033913 | -3.45858391187827 |
| C | -2.87420912309657 | 7.43474144474861 | 1.59785508354287 |
| C | -1.75390548928330 | 6.45721392788693 | 1.84751678076618 |
| C | -0.44374714522843 | 6.85944533665871 | 1.22936102640247 |
| O | -1.50176779555518 | 6.27730838467199 | 3.21315393805543 |
| H | -3.06517823377993 | 7.52673179968724 | 0.53040345771003 |
| H | -3.78017370139301 | 7.09383557251635 | 2.09599796675071 |
| H | -2.59714628817067 | 8.41100608561305 | 1.99589120467962 |
| H | -2.03312736684974 | 5.43862124182312 | 1.38436904282685 |
| H | 0.08576724596660 | 7.56374330325755 | 1.86728241506971 |
| H | 0.17918504708873 | 5.90895605071325 | 1.12977254774415 |
| H | -0.58770469708656 | 7.28078945153053 | 0.23812304725624 |
| H | -2.34107959339253 | 6.15080199312486 | 3.67030288822794 |

5. GFN1-xTB

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | 0.06170583457512 | -0.06912002425639 | 0.06832189066029 |
| Cu | -0.00248261587091 | -0.24409907668341 | 2.57102439500000 |
| Cu | -0.06533261196190 | -0.40925733850889 | 4.97213158363949 |
| Cu | 1.76223003425370 | -1.78096876410197 | 3.73851931816785 |
| Cu | 1.78992310920478 | -1.57553035142516 | 1.13834272368910 |
| Cu | 1.92724856771175 | 1.06220538200931 | 1.31106486922060 |
| Cu | -0.56414975072917 | 2.08086240404582 | 1.32884802437228 |
| Cu | -2.21267582258857 | -0.03945629106874 | 1.12917366957540 |
| Cu | -0.76470517295707 | -2.26056590880754 | 1.02517923351093 |
| Cu | 0.68600604581093 | -2.18281881414368 | -1.18659005648848 |
| Cu | 2.34695019394212 | -0.12964818172793 | -1.01291788901728 |
| Cu | 0.898334358123102 | 2.09063794034889 | -0.90862643994625 |
| Cu | -1.65968421927429 | 1.39297036161024 | -1.02952473733414 |
| Cu | -1.78711251453226 | -1.24589058865932 | -1.19537343127467 |
| Cu | 0.13656468339177 | 0.07393924285954 | -2.45510291198733 |
| Cu | 3.43824668594614 | -2.99891732196731 | 2.16831418934944 |
| Cu | 3.70998521627049 | 2.15618664746761 | 2.50524884956698 |
| Cu | -1.16722154702351 | 4.08827720358038 | 2.56443659937045 |
| Cu | -4.39340398539116 | -0.00760670802102 | 2.14782507237836 |
| Cu | -1.55958250583920 | -4.33776554591672 | 1.94962145192331 |
| Cu | 1.27976756011406 | -4.19232646688981 | -2.37872282651313 |
| Cu | 4.52643160430021 | -0.18048655185719 | -2.03872315363645 |
| Cu | 1.70534131210802 | 4.15232781451239 | -1.85427934815987 |
| Cu | -3.30833342105223 | 2.80386619986452 | -2.07386101737995 |
| Cu | -3.55680933759301 | -2.35489485837748 | -2.39597746485935 |
| Cu | 0.20368048669471 | 0.21687805442362 | -4.85921315327782 |
| Cu | 1.90916465966713 | 0.91288263387870 | 3.91757840994313 |
| Cu | -0.63096254826485 | 1.88804811950720 | 3.90801123017183 |
| Cu | -2.33880057495191 | -0.21492762926351 | 3.72655689942363 |
| Cu | -0.85439163246294 | -2.48076858870787 | 3.62280152174372 |
| Cu | 3.74001404558952 | -0.43645748865730 | 2.44609086951032 |
| Cu | 0.98003537562273 | -3.83613796290099 | 2.15628449746584 |
| Cu | 2.46857944795649 | -3.76181741324418 | -0.11382227866881 |
| Cu | 4.16756690265144 | -1.65904903782241 | 0.06617316522746 |
| Cu | 1.35206215340496 | 3.21218639030099 | 2.62623941824303 |
| Cu | 4.30807594537540 | 1.04623254504324 | 2.03994908025158 |
| Cu | 2.82488033343192 | 3.31404341322040 | 0.34748294463689 |
| Cu | -2.90341013715565 | 2.10030685915748 | 2.42337624973747 |
| Cu | 0.30418307427791 | 4.29618485211842 | 0.31702362203845 |
| Cu | -2.34848726858743 | 3.55766005572265 | 0.20807717481020 |
| Cu | -3.12171409637514 | -2.27100992181124 | 2.14298944031200 |
| Cu | -4.04140479240053 | 1.46489992013843 | 0.03534266698458 |
| Cu | -4.16826203861309 | -1.23309937978133 | -0.13120303173706 |
| Cu | -2.68396452335853 | -3.49910170857321 | -0.23500251652074 |
| Cu | -0.14873954011026 | -4.46368881005286 | -0.22868610123765 |
| Cu | 3.03798275113141 | -2.28604180262600 | -2.31706578217087 |
| Cu | -1.19572856075325 | -3.42498415476075 | -2.50400356597542 |
| Cu | 0.77469270689446 | -2.07753123810029 | -3.79418364304279 |
| Cu | 3.25885368007121 | 2.08684076109916 | -2.03562969862794 |
| Cu | 2.47415018894130 | 0.02368104334647 | -3.61534252132849 |
| Cu | -0.84706657776163 | 3.65303585062802 | -2.04812946847166 |
| Cu | 0.99157961492711 | 2.29562949884364 | -3.51460812387389 |
| Cu | -3.59993586316529 | 0.24001320017757 | -2.34213906941657 |
| Cu | -1.62616273301227 | 1.59254358130749 | -3.63178013654785 |
| Cu | -1.75936698095797 | -1.11393142091149 | -3.80109798491089 |
| C | -2.25165181079183 | 8.38206829072882 | 3.23058779788138 |
| C | -1.70761348754037 | 7.22328411478304 | 2.40376268498624 |
| C | -0.41265443432698 | 7.58688316453585 | 1.68293662298488 |
| O | -1.48829572054928 | 6.09147446104336 | 3.26046709760703 |
| H | -2.48632856458241 | 9.22321937099949 | 2.58027537487245 |
| H | -3.15753350533689 | 8.07144533053644 | 3.74928587524034 |
| H | -1.51478438416338 | 8.70110935913318 | 3.96832989808037 |
| H | -2.45943464271914 | 6.89630829194825 | 1.67159838525878 |
| H | 0.36167906547655 | 7.86495085145857 | 2.39709814295790 |
| H | -0.06122337874848 | 6.72020070909223 | 1.10862804429753 |
| H | -0.58207747082673 | 8.41310015958891 | 0.99483348794836 |
| H | -1.04231608864457 | 6.3766526984780 | 4.06796387936976 |

6. GFN-FF

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | 0.07473759624949 | 0.06538100261599 | 0.22547898922669 |
| Cu | 0.15750746956713 | -0.30381490346338 | 2.56742159565025 |
| Cu | 0.24321335669218 | -0.68056568196053 | 4.96553925035692 |
| Cu | 1.85305862836855 | -1.88273593584100 | 3.43262959095491 |
| Cu | 1.71753947663856 | -1.45508102520313 | 0.99757934145457 |
| Cu | 1.92291616535393 | 1.00363577141039 | 1.37968699807852 |
| Cu | -0.36851519779314 | 1.92131460519212 | 1.63460668082192 |
| Cu | -2.00230600962631 | 0.07136072452108 | 1.36896745391117 |
| Cu | -0.70936957764057 | -2.03280721134061 | 0.99255060264121 |
| Cu | 0.52283352103143 | -1.80333827271724 | -1.16494048105809 |
| Cu | 2.15003897724447 | 0.06953243493436 | -0.92574635717210 |
| Cu | 0.85569528558834 | 2.15319592938713 | -0.5584777566910 |
| Cu | -1.56401574205065 | 1.56715227587297 | -0.57396506290239 |
| Cu | -1.77502270582616 | -0.86861149364767 | -0.9352266592487 |
| Cu | -0.00674779454468 | 0.43233669631885 | -2.12403387602381 |
| Cu | 3.40184944197645 | -3.01769810255424 | 1.79147933960581 |
| Cu | 3.82115156671046 | 1.95544055632704 | 2.56480569448598 |
| Cu | -0.83597095733901 | 3.88898454621360 | 3.02038130706098 |
| Cu | -4.12965647851760 | 0.06410163881913 | 2.54711149213544 |
| Cu | -1.51185018054538 | -4.18714546517216 | 1.78189041140462 |
| Cu | 0.98268266423973 | -3.72067705042797 | -2.58649463099606 |
| Cu | 4.27602995233136 | 0.07851540453544 | -2.10293586532493 |
| Cu | 1.65036841635078 | 4.32996060706273 | -1.32509234201211 |
| Cu | -3.25295905383672 | 3.16093081808724 | -1.34473844558088 |
| Cu | -3.67213967064682 | -1.81698002331163 | -2.12024386173356 |
| Cu | -0.09502377699835 | 0.82372615037223 | -4.51873103724269 |
| Cu | 2.06500184368974 | 0.64710461084582 | 3.824529975521393 |
| Cu | -0.30050239850578 | 1.62133310262972 | 4.07373531104005 |
| Cu | -1.97642815490708 | -0.31491092236934 | 3.81579520478983 |
| Cu | -0.64672301984940 | -2.47790395711386 | 3.42766099809305 |
| Cu | 3.67130739585001 | -0.54092100945547 | 2.21060283212541 |
| Cu | 0.96009226021657 | -3.66602539658914 | 1.81277847661573 |
| Cu | 2.22858232722731 | -3.42853977377707 | -0.40837794371533 |
| Cu | 3.90451340293615 | -1.49828445312657 | -0.16283571427585 |
| Cu | 1.52137419878208 | 2.96218339288438 | 2.85393076245551 |
| Cu | 4.11691973739922 | 1.02998849654388 | 0.23058077559901 |
| Cu | 2.79465252233665 | 3.18788538814192 | 0.61805142800073 |
| Cu | -2.52645630286743 | 1.992727034414260 | 2.84289798020704 |
| Cu | 0.43702698182167 | 4.07059301947919 | 0.85591101255088 |
| Cu | -2.05484117842402 | 3.46486732431171 | 0.82797136657969 |
| Cu | -2.86959549128701 | -2.09663915573621 | 2.19670017499281 |
| Cu | -3.76369546780071 | 1.63059467148955 | 0.60476833958845 |
| Cu | -3.96793803205003 | -0.89450456276299 | 0.21299899422725 |
| Cu | -2.63796709684349 | -3.05708651536663 | -0.17591697987713 |
| Cu | -0.27049675215390 | -4.02351773777150 | -0.41336630147745 |
| Cu | 2.67361992175297 | -1.85426235152975 | -2.39044206363748 |
| Cu | -1.36898811727314 | -2.81881656431619 | -2.39960459332859 |
| Cu | 0.45062563858530 | -1.47799733505434 | -3.62135809798674 |
| Cu | 3.01624158251622 | 2.24150042726224 | -1.75442123117736 |
| Cu | 2.12570527357915 | 0.45808192657096 | -3.37218889961320 |
| Cu | -0.81571344816516 | 3.81264836219904 | -1.34183598312611 |
| Cu | 0.78851834771371 | 2.62316731579728 | -2.97847399667511 |
| Cu | -3.52793565551824 | 0.68058832484652 | -1.77129698624150 |
| Cu | -1.70324674320189 | 2.02911769641654 | -2.98831375190149 |
| Cu | -1.91783118052737 | -0.50593064126655 | -3.38095567179949 |
| C | -2.39077258117011 | 7.61642345731040 | 1.40082535180918 |
| C | -1.41828950101553 | 6.47745987353879 | 1.67631436497835 |
| C | -0.05837077816632 | 6.98811985340954 | 2.12627201165848 |
| O | -1.97198743022532 | 5.55898099085937 | 2.70878183127406 |
| H | -2.00330567196533 | 8.30155664320074 | 0.64209715434087 |
| H | -3.35773071921090 | 7.24099217839052 | 1.05644598651178 |
| H | -2.56726320500143 | 8.19209859256324 | 2.31161955891168 |
| H | -1.29824187539647 | 5.88537355434891 | 0.7567579596615 |
| H | -0.16197176794283 | 7.57938180938407 | 3.03821280846084 |
| H | 0.62647775348432 | 6.1680440092127 | 2.35203067845418 |
| H | 0.40749343939239 | 7.62185125836641 | 1.36687326543464 |
| H | -2.96578543079577 | 5.34170543796705 | 2.54092778094757 |

Anexo C

Coordenadas del complejo entre la nanopartícula de cobre (Cu₅₅NP) y la molécula de 2-propanotiol, calculadas con PBE-D3/def2-SVP, B97-3c/def2-TZVP (con SmearTemp de 3100 K), PBEh-3c/def2-SVP (con SmearTemp de 4000 K), el campo de fuerza GFN-FF y los métodos semiempíricos GFN1-xTB y GFN0-xTB

1. PBE-D3

67

| | | | |
|----|-------------------|--------------------|-------------------|
| Cu | -0.20524043888539 | 0.22748371321770 | 0.03311749042994 |
| Cu | -0.45316263035129 | 0.44703757821018 | 2.41868725097466 |
| Cu | -0.70423381078731 | 0.68338506037339 | 4.77331018457019 |
| Cu | 1.16485596360465 | -0.73843243281552 | 3.85397854503985 |
| Cu | 1.39443329896310 | -0.95363353835385 | 1.40485657201727 |
| Cu | 1.44403117026096 | 1.56752818454123 | 1.16680271240613 |
| Cu | -0.94356070619289 | 2.39648746616515 | 0.83508989098145 |
| Cu | -2.45897967688642 | 0.34484922383314 | 0.87357525212246 |
| Cu | -1.02081334687435 | -1.71021819285581 | 1.22396613502280 |
| Cu | 0.52991076244012 | -1.92785378229460 | -0.77101402664786 |
| Cu | 2.05399043950625 | 0.09872879827779 | -0.80711450669268 |
| Cu | 0.61362257103645 | 2.15369818158735 | -1.15885535151409 |
| Cu | -1.80191549730670 | 1.39719149537803 | -1.33965319349645 |
| Cu | -1.85278300836188 | -1.12474420811370 | -1.10001454479638 |
| Cu | 0.04763695789206 | -0.00794428080151 | -2.35573714828733 |
| Cu | 2.96873151553013 | -2.11375188855171 | 2.75494372195171 |
| Cu | 3.06174664122730 | 2.90321336125783 | 2.28580256082054 |
| Cu | -1.67867762145041 | 4.53397464273099 | 1.65628845888822 |
| Cu | -4.68292493560375 | 0.47769472373512 | 1.70500612574248 |
| Cu | -1.82504796636395 | -3.61464835192373 | 2.39583137110307 |
| Cu | 1.25268120560596 | -4.04791473143825 | -1.55976746501691 |
| Cu | 4.27850842199773 | -0.02549079906275 | -1.63462106296512 |
| Cu | 1.41190612769439 | 4.06365863724449 | -2.32349277894414 |
| Cu | -3.37596692445592 | 2.56375919828154 | -2.68331311789574 |
| Cu | -3.47641735056828 | -2.45383981243503 | -2.21635207407311 |
| Cu | 0.29526150174275 | -0.23606721409246 | -4.70845786638051 |
| Cu | 1.21564409898415 | 1.83061797674604 | 3.61650092872204 |
| Cu | -1.19434126713802 | 2.62091616306572 | 3.26037751396385 |
| Cu | -2.75515384657812 | 0.58782996654661 | 3.31720121389006 |
| Cu | -1.29012528836243 | -1.50722071476397 | 3.67073643063246 |
| Cu | 3.09260934279899 | 0.39854942159779 | 2.57920714303112 |
| Cu | 0.58955507710562 | -2.93586991870175 | 2.63693070201812 |
| Cu | 2.16489324897991 | -3.157947936719923 | 0.61055831502815 |
| Cu | 3.71367317847766 | -1.09814690978449 | 0.57351692688504 |
| Cu | 0.72038144738722 | 3.76867360414926 | 1.99915847485031 |
| Cu | 3.76223830843432 | 1.46695585160725 | 0.33256254636032 |
| Cu | 2.29742149030350 | 3.55684232704915 | -0.02316099979484 |
| Cu | -3.23339101876844 | 2.52774936719923 | 1.69690963123095 |
| Cu | -0.12679927263939 | 4.37105115912250 | -0.35338006249171 |
| Cu | -2.57096423423825 | 3.60629750025088 | -0.53708693871243 |
| Cu | -3.32712362406184 | -1.61181694037974 | 2.09832797094967 |
| Cu | -4.12197748087347 | 1.54667706698113 | -0.50596491658449 |
| Cu | -4.17150526216508 | -1.01793095897832 | -0.26251326998437 |
| Cu | -2.70911018887804 | -3.10934294002369 | 0.09192834704826 |
| Cu | -0.28827929603316 | -3.92607544593194 | 0.42628544540733 |
| Cu | 2.83518190269092 | -2.08845678485594 | -1.63546285367529 |
| Cu | -1.13374346755341 | -3.33138660735629 | -1.93325679421442 |
| Cu | 0.79642213855051 | -2.19504540779734 | -3.20736986548514 |
| Cu | 2.91795513430685 | 2.06132089377362 | -2.02861985391416 |
| Cu | 2.34529039973233 | -0.13715665202190 | -3.24630774219115 |
| Cu | -0.99905071999470 | 3.38323465587264 | -2.56715326624511 |
| Cu | 0.88046860471057 | 1.95342184352673 | -3.60086186801154 |
| Cu | -3.50258145485200 | 0.05053278317572 | -2.50989341312098 |
| Cu | -1.57263916479437 | 1.18497925337061 | -3.78441046955085 |
| Cu | -1.62418414737535 | -1.38011971597768 | -3.54404939699535 |
| C | -3.35205147975772 | 4.68008520422844 | 4.78881505794702 |
| C | -2.38361403547576 | 5.84129230687232 | 4.61243928168240 |
| S | -2.33179932132789 | 6.44299049336222 | 2.83579567856625 |
| H | -4.39352231786695 | 4.95604595933148 | 4.52741268016273 |
| H | -3.05698454931200 | 3.81882165711958 | 4.13960758921251 |
| C | -0.94969462903247 | 5.50345813988718 | 5.01000450864768 |
| H | -2.73299266768240 | 6.72657836532292 | 5.18392165021075 |
| H | -3.68166943517143 | 6.46083521058414 | 2.62828014638813 |
| H | -3.34007284718589 | 4.33134845427459 | 5.84207806125388 |
| H | -0.26526443634624 | 6.36693539414295 | 4.89122173878485 |
| H | -0.55645335947019 | 4.66659101766671 | 4.38183411941343 |
| H | -0.91997422290474 | 5.17533340291106 | 6.06825647332389 |

2. PBEh-3c

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.07566413131356 | -0.03129277050975 | 0.09298070233482 |
| Cu | -0.30854133416048 | -0.07454265172533 | 2.58136705281585 |
| Cu | -0.53956575352026 | -0.10950451440377 | 5.02245170897257 |
| Cu | 1.34916222584939 | -1.43729415439311 | 3.81767084447811 |
| Cu | 1.56668510610754 | -1.39741636521141 | 1.33565450817373 |
| Cu | 1.63364718865077 | 1.19297542292515 | 1.38464524593938 |
| Cu | -0.80220375684172 | 2.06933417358954 | 1.16973438091807 |
| Cu | -2.38226601829194 | 0.01931618373593 | 0.96591332975814 |
| Cu | -0.91582082089616 | -2.12158094324962 | 1.07867185761514 |
| Cu | 0.65422029882237 | -2.13274735991189 | -1.00470548801808 |
| Cu | 2.23440022721552 | -0.08214861989347 | -0.80093729000256 |
| Cu | 0.76831066069964 | 2.05960465513466 | -0.91169963006730 |
| Cu | -1.71663012349195 | 1.33607590044599 | -1.17182058618202 |
| Cu | -1.78370233908829 | -1.25868495627099 | -1.21737460160838 |
| Cu | 0.14957663278887 | 0.01437515093468 | -2.37785223539614 |
| Cu | 3.17885396165021 | -2.72541307658099 | 2.56200355697783 |
| Cu | 3.30741570378232 | 2.39284485046792 | 2.6610425964223 |
| Cu | -1.51462744530842 | 4.11627336056392 | 2.23513028367167 |
| Cu | -4.63976969780921 | 0.06154569860392 | 1.84022342483877 |
| Cu | -1.75515284717383 | -4.15392457409441 | 2.06308823831145 |
| Cu | 3.16875309969763 | -4.18242370268275 | -2.06123955634762 |
| Cu | 4.49421108760972 | -0.12487835341783 | -1.66754686049568 |
| Cu | 1.60816309264118 | 4.09603155286577 | -1.88480535734892 |
| Cu | -3.33611903139845 | 2.66894084516311 | -2.38182196795583 |
| Cu | -3.46233916290164 | -2.46220466968734 | -2.48307480474749 |
| Cu | 0.37588433061140 | 0.05902071075097 | -4.77735700240449 |
| Cu | 1.41721278562531 | 1.14675356997170 | 3.86350483009817 |
| Cu | -1.03476075255373 | 2.03444435600139 | 3.65075702748016 |
| Cu | -2.61946852324439 | -0.02952074134848 | 3.44543759964548 |
| Cu | -1.15058289400244 | -2.17077055419245 | 3.567311016447291 |
| Cu | 3.30689949296960 | -0.17134394884065 | 2.65432044769944 |
| Cu | 0.72842397665046 | -3.50870369365693 | 2.36071926491096 |
| Cu | 2.32005844113811 | -3.50192459605262 | 0.25354842048384 |
| Cu | 3.91403520406519 | -1.44554800875912 | 0.45161916157176 |
| Cu | 0.91518444592286 | 3.31445083588065 | 2.49160992560207 |
| Cu | 3.97609532113989 | 1.15239475916229 | 0.50177457858468 |
| Cu | 2.50522355980481 | 3.29462651029196 | 0.39003301732799 |
| Cu | -3.13179846856506 | 2.12657829531054 | 2.07247755297124 |
| Cu | 0.04096712439767 | 4.17633175015013 | 0.17326591250066 |
| Cu | -2.46680050492969 | 3.44090649490862 | -0.08087407208773 |
| Cu | -3.24987627753781 | -2.08436446816901 | 1.98542594322178 |
| Cu | -4.06269060455407 | 1.38177800012478 | -0.27828509795845 |
| Cu | -4.12537911698904 | -1.21690585091418 | -0.32789186497379 |
| Cu | -2.65139260218838 | -3.36101361393613 | -0.21707572231838 |
| Cu | -0.18817683545056 | -4.23886784950263 | 0.00158586853336 |
| Cu | 2.98423854717633 | -2.18909544713778 | -1.90261215739113 |
| Cu | -1.06437957419502 | -3.38041242400830 | -2.31942022635800 |
| Cu | 0.88576338943600 | -2.10567126475529 | -3.48186138587738 |
| Cu | 3.10302453931519 | 2.02323818323236 | -1.81461135581311 |
| Cu | 2.47756636544705 | -0.02841557304681 | -3.27661799369280 |
| Cu | -0.8786731639700 | 3.44751349422292 | -2.18415211289968 |
| Cu | 1.00257775495609 | 2.12261094478964 | -3.39813664092638 |
| Cu | -3.45920818082019 | 0.10757630372055 | -2.47632688671210 |
| Cu | -1.5195069517837 | 1.38197003323821 | -3.65549690441930 |
| Cu | -1.58195648841420 | -1.22012640392924 | -3.69667583155067 |
| C | 1.91397386403083 | -0.50419879316431 | 7.73682579874624 |
| C | 0.61579521959265 | -1.23427535936907 | 8.02422931648522 |
| S | -0.84802952531490 | -0.33191966383748 | 7.37708906735754 |
| H | 2.05736011161070 | -0.32809653320405 | 6.66532677523700 |
| H | 1.95126785885282 | 0.46633153055150 | 8.24853645009533 |
| C | 0.42317596902495 | -1.55101763185424 | 9.49663318663782 |
| H | 0.58909007157400 | -2.16681631615982 | 7.44004511755994 |
| H | -0.58127126370544 | 0.86759565460855 | 7.92556674138168 |
| H | 2.76470298791428 | -1.09756926662440 | 8.09406666553115 |
| H | -0.51028282515205 | -2.09353288576858 | 9.67797013557191 |
| H | 0.40512108525652 | -0.63635986391060 | 10.10296032759484 |
| H | 1.25195217936035 | -2.17034575717248 | 9.86166690166774 |

3. B97-3c

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.17405865623318 | 0.20788026398396 | 0.04223350420346 |
| Cu | -0.38221210416495 | 0.42033498771135 | 2.38371819365633 |
| Cu | -0.59807910074136 | 0.65275926869013 | 4.73026800025303 |
| Cu | 1.22913707274223 | -0.75255876941131 | 3.78488713395834 |
| Cu | 1.41067773502976 | -0.95366725466208 | 1.36006757826193 |
| Cu | 1.46104290614994 | 1.51775692144929 | 1.13064108828833 |
| Cu | -0.88182037975563 | 2.32738512535637 | 0.84866934887680 |
| Cu | -2.37102580171768 | 0.32540533259795 | 0.89786885272123 |
| Cu | -0.95912051661668 | -1.69116682697323 | 1.21598682737324 |
| Cu | 0.53087530573761 | -1.90202624173605 | -0.76189304374215 |
| Cu | 2.02640508507498 | 0.08218691629032 | -0.81464565926409 |
| Cu | 0.61229916109718 | 2.09903088990493 | -1.13181822291690 |
| Cu | -1.75674332846104 | 1.36138964545225 | -1.27615420403744 |
| Cu | -1.80766563541326 | -1.11074021099627 | -1.04674348241101 |
| Cu | 0.03754577261647 | -0.01535366134308 | -2.30210613646557 |
| Cu | 2.99547531637718 | -2.11364763303005 | 2.67781113585777 |
| Cu | 3.08981961305492 | 2.84155882528844 | 2.22374029826386 |
| Cu | -1.60049222658829 | 4.45108334382561 | 1.67883730232722 |
| Cu | -4.57172375099479 | 0.45791115574634 | 1.75868989388029 |
| Cu | -1.74511571720006 | -3.58801226624483 | 2.38991649499948 |
| Cu | 1.23511234607863 | -4.00990018293486 | -1.56353202997504 |
| Cu | 4.22792779947232 | -0.04155099481656 | -1.67137224252331 |
| Cu | 1.39225261961619 | 4.00245039627157 | -2.29708527067535 |
| Cu | -3.34203530368481 | 2.52865077841326 | -2.58589409050705 |
| Cu | -3.44217942495438 | -2.42798077004774 | -2.13783141017123 |
| Cu | 0.24883870454095 | -0.23650573241824 | -4.64754681338666 |
| Cu | 1.28027998037800 | 1.77842782718396 | 3.55370328296552 |
| Cu | -1.09984640857056 | 2.56923554251008 | 3.24568555102938 |
| Cu | -2.63719599785869 | 0.56100152522937 | 3.31398159712219 |
| Cu | -1.19301655824016 | -1.50600781042523 | 3.63828320655055 |
| Cu | 3.11381609872533 | 0.36711255092111 | 2.50259233659756 |
| Cu | 0.64179072354262 | -2.91589474618637 | 2.58938045914174 |
| Cu | -2.16489927187620 | -3.13209323130382 | 0.56848992780443 |
| Cu | 3.69393409493353 | -1.10381480709164 | 0.51385546385754 |
| Cu | 0.77082683816566 | 3.6956639651907 | 1.97660264434359 |
| Cu | 3.74302361463273 | 1.42567655251294 | 0.28158268007525 |
| Cu | 2.29579143587223 | 3.48900760635534 | -0.04079379539124 |
| Cu | -3.13171913628045 | 2.47818519804017 | 1.73463749662657 |
| Cu | -0.09764350224318 | 4.29169637985001 | -0.32526941838694 |
| Cu | -2.50806138638028 | 3.54229875183696 | -0.47309786003420 |
| Cu | -3.22441729056317 | -1.60470449456612 | 2.11677128366949 |
| Cu | -4.04104815196583 | 1.51781333908303 | -0.42707644105338 |
| Cu | -4.09106094975483 | -1.01209775399587 | -0.19451037669756 |
| Cu | -2.64702761812863 | -3.07678097919388 | 0.12824910784857 |
| Cu | -0.25742611873971 | -3.88551885709259 | 0.42037944081457 |
| Cu | 2.79492259328064 | -2.07316876429410 | -1.65323242788117 |
| Cu | -1.12437487260526 | -3.29269274301395 | -1.89195877928764 |
| Cu | 0.76166022205457 | -2.17187442875343 | -3.17355722028175 |
| Cu | 2.87554705582761 | 2.01900849643444 | -2.03075885057845 |
| Cu | 2.29054795750782 | -0.14476762003553 | -3.22847293331685 |
| Cu | -0.99116595196803 | 3.32954178760448 | -2.49953503826400 |
| Cu | 0.84431169976986 | 1.91953135510638 | -3.55009075777299 |
| Cu | -3.46215811910028 | 0.04656180465657 | -2.41589576835922 |
| Cu | -1.57742391115065 | 1.16576944475292 | -3.69727747351559 |
| Cu | -1.62833775071633 | -1.36412169059745 | -3.46666448163218 |
| C | -3.53493405408027 | 4.82198117444328 | 4.67999681203893 |
| C | -2.50525990312629 | 5.91701018543021 | 4.51772628700119 |
| S | -2.22650485186761 | 6.36409760869725 | 2.74417825309307 |
| H | -4.49352647109188 | 5.09504983086376 | 4.24371181830477 |
| H | -3.19779292531088 | 3.89838387800800 | 4.20476760641634 |
| C | -1.15731636676401 | 5.55816460671098 | 5.10992818348571 |
| H | -2.86575340077099 | 6.84150075889753 | 4.96789923780648 |
| H | -3.51667597378467 | 6.45716252875783 | 2.39219822739731 |
| H | -3.68946067040319 | 4.61953708927713 | 5.73975521244069 |
| H | -0.42714374372425 | 6.35342724618472 | 4.97629611617481 |
| H | -0.75776095584679 | 4.65201820620000 | 6.44708759275314 |
| H | -1.26822603659209 | 5.36959964811474 | 6.17607875024810 |

4. GFN0-xTB

67

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| Cu | -0.09965752648588 | 0.30436239774430 | 0.11550744007726 |
| Cu | -0.12209587308936 | 0.51344739204897 | 2.50060977384246 |
| Cu | -0.14521780481524 | 0.71730200906963 | 4.87634033974126 |
| Cu | 1.58251020950961 | -0.79679489937632 | 3.83595155981708 |
| Cu | 1.54988360288931 | -0.98197860538201 | 1.32112734566856 |
| Cu | 1.70904423426628 | 1.53227144431004 | 1.08437039800807 |
| Cu | -0.66631612855063 | 2.51075413562388 | 1.00785726252905 |
| Cu | -2.25473569438712 | 0.51686395387669 | 1.13638951596767 |
| Cu | -0.89356634697579 | -1.60977929898944 | 1.35184664639250 |
| Cu | 0.45600727384877 | -1.89380296558748 | -0.75877177188917 |
| Cu | 2.06401773710159 | 0.03906067644245 | -0.92862619069612 |
| Cu | 0.70828247712406 | 2.16855646574582 | -1.14391091459637 |
| Cu | -1.73496953225379 | 1.53799308903946 | -1.11802344053464 |
| Cu | -1.88885181013520 | -0.97684839797008 | -0.87807937560587 |
| Cu | -0.06017377569064 | 0.04203199253088 | -2.28704946182452 |
| Cu | 3.18730214284148 | -2.23731509766355 | 2.53354644458855 |
| Cu | 3.50491508022065 | 2.76828283886652 | 2.05561470926987 |
| Cu | -1.17721701696068 | 4.71097257319639 | 1.79439765992892 |
| Cu | -4.40145466327079 | 0.72416996550564 | 2.15426016958245 |
| Cu | -1.69132148891160 | -3.49325168819847 | 2.59471782511045 |
| Cu | 1.00268200886823 | -4.06136697799388 | -1.61840451036410 |
| Cu | 4.21253353723514 | -0.20234716146509 | -1.95573907744861 |
| Cu | 1.51250051111380 | 4.03414010408200 | -2.39706396505397 |
| Cu | -3.36717436190671 | 2.77870323540284 | -2.33952223946808 |
| Cu | -3.67845900242263 | -2.22793022251617 | -1.85758275528393 |
| Cu | -0.02887170564925 | -0.19702276197482 | -4.66854999367925 |
| Cu | 1.75686005836832 | 1.79193901030464 | 3.5937364637696 |
| Cu | -0.66908821754836 | 2.77339218028523 | 3.48891653414824 |
| Cu | -2.35371538115149 | 0.73533166663793 | 3.64108869920111 |
| Cu | -0.94728250281483 | -1.45082098717551 | 3.8679830246272 |
| Cu | 3.47989591292910 | 0.26226232030412 | 2.37046880583834 |
| Cu | 0.77968017133194 | -2.98383946526674 | 2.65407257698115 |
| Cu | 2.17774129112809 | -3.28084487499419 | 0.47185490170201 |
| Cu | 3.84023968302676 | -1.27702604321514 | 0.29450789356712 |
| Cu | 1.21081828447607 | 3.82203807439103 | 2.00697846628006 |
| Cu | 4.00746718936012 | 1.32006378739413 | 0.04535382936441 |
| Cu | 2.61093233785137 | 3.51438975021110 | -0.18516284779860 |
| Cu | -2.91739623045087 | 2.77460576795248 | 2.05217615117307 |
| Cu | 0.17640622959902 | 4.48321786145718 | -0.30552963198593 |
| Cu | -2.35934050001043 | 3.82842100530054 | -0.27774765103228 |
| Cu | -3.15522809360623 | -1.44741371950712 | 2.45545451311171 |
| Cu | -4.03190229375552 | 1.80180591305661 | -0.10843259782424 |
| Cu | -4.18497370040690 | -0.78760018774739 | 0.14698624974710 |
| Cu | -2.78006409830794 | -2.97928799199135 | 0.37715037152440 |
| Cu | -0.35427267450036 | -3.93260896163585 | 0.50432483537451 |
| Cu | 2.71119028104408 | -2.22271192988674 | -1.85750940622205 |
| Cu | -1.38571557727674 | -3.27580056046796 | -1.80677816879452 |
| Cu | 0.50766536159186 | -2.21951351569668 | -3.26713608061812 |
| Cu | 2.97196183138880 | 1.97471891572182 | -2.26714468115168 |
| Cu | 2.17293314700988 | -0.22038928331184 | -3.43902616332995 |
| Cu | -0.95669947572101 | 3.51927728033153 | -2.4677923055119 |
| Cu | 0.77803129111912 | 1.97738039047523 | -3.67040958525325 |
| Cu | -3.64792242127513 | 0.27271050329531 | -2.18828965792516 |
| Cu | -1.75716727583217 | 1.32728447975051 | -3.64107451557314 |
| Cu | -1.91770611528628 | -1.26966928881296 | -3.38817511206858 |
| C | -3.95112434299621 | 4.81012280318551 | 3.86282747733318 |
| C | -2.80251246748724 | 5.63320666928905 | 4.39964819077210 |
| S | -1.87826001115598 | 6.48389028584729 | 3.04773930022258 |
| H | -4.64164515750552 | 5.43373691914677 | 3.29981656567636 |
| H | -3.53584379122997 | 4.02041655297463 | 3.26701767648130 |
| C | -1.87341136818531 | 4.77445046377553 | 5.22762104966523 |
| H | -3.20119047320840 | 6.43140409256394 | 5.02520754483103 |
| H | -2.99678202599998 | 6.72040110816256 | 2.37001767648130 |
| H | -4.47382580152161 | 4.30770179277620 | 4.67420997576625 |
| H | -1.06858918381680 | 5.37020731592135 | 6.55093869240621 |
| H | -1.41349525593507 | 3.98716490350390 | 4.55141773235953 |
| H | -2.42205471681441 | 4.26911079918140 | 6.01934054783915 |

5. GFN1-xTB

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| 67 | | | |
| Cu | -0.06784387531992 | 0.19092836760826 | 0.05492087124081 |
| Cu | -0.09259398403180 | 0.35722966467035 | 2.56176851280824 |
| Cu | -0.11201837207499 | 0.49658450196945 | 4.96503737503235 |
| Cu | 1.68652509888125 | -1.02659340526636 | 3.89605025440495 |
| Cu | 1.66769952340694 | -1.16760439083949 | 1.29470519633962 |
| Cu | 1.82166940335784 | 1.46717930602748 | 1.10013065461279 |
| Cu | -0.68007737612401 | 2.49446315789506 | 1.05212274743723 |
| Cu | -2.32885925254911 | 0.38099883163847 | 1.13374513976708 |
| Cu | -0.89310356225763 | -1.84009822417088 | 1.31387030062710 |
| Cu | 0.52411915486733 | -2.08152254714716 | -0.90938302396984 |
| Cu | 2.20032029524478 | -0.04226243603051 | -1.04376861432646 |
| Cu | 0.76496684048009 | 2.18330371292974 | -1.21728466455279 |
| Cu | -1.79198409064482 | 1.50485034108043 | -1.20721688641917 |
| Cu | -1.94283546963345 | -1.12988376073922 | -1.01047514050948 |
| Cu | -0.02896897804312 | -0.01898920443493 | -2.46710181863863 |
| Cu | 3.32531713248060 | -2.45621776457191 | 2.47889910158639 |
| Cu | 3.62832893744102 | 2.69896336605969 | 2.10820303002324 |
| Cu | -1.23605732881814 | 4.70206416415358 | 1.93543567487101 |
| Cu | -4.49875579589494 | 0.54195943255611 | 2.16400276973385 |
| Cu | -1.67924139689511 | -3.77769527846957 | 2.51366355917561 |
| Cu | 1.08601715836540 | -4.24042790265014 | -1.82460853188756 |
| Cu | 4.36469529208852 | -0.24457328929805 | -2.08293688583148 |
| Cu | 1.56533163774584 | 4.09695465937852 | -2.43977785763722 |
| Cu | -3.44884412420394 | 2.77169723737478 | -2.41124545012044 |
| Cu | -3.73322235963361 | -2.38287076564122 | -2.02796855667795 |
| Cu | 0.00061458305481 | -0.19963358519211 | -4.86963574600408 |
| Cu | 1.84579493984455 | 1.67514348741090 | 3.70331253949833 |
| Cu | -0.66702714266428 | 2.64072626499669 | 3.62421894555597 |
| Cu | -2.40932672112785 | 0.53533044339530 | 3.72814174105216 |
| Cu | -0.93790902166523 | -1.72131405780626 | 3.91515050970712 |
| Cu | 3.64257073528113 | 0.12263706572254 | 2.40609641206529 |
| Cu | 0.86470794271325 | -3.27260330662589 | 2.61363394285424 |
| Cu | 2.31355656454950 | -3.51483819613436 | 0.34208096982279 |
| Cu | 4.02980726186364 | -1.41886685846160 | 0.20741781361196 |
| Cu | 1.27883386887445 | 3.79340572801897 | 2.12601339544072 |
| Cu | 4.18953961146956 | 1.27861712559641 | 0.01141206856476 |
| Cu | 2.72622881078106 | 3.55069109252666 | -0.17891901899230 |
| Cu | -3.01630057926967 | 2.66383784323454 | 1.71628989860323 |
| Cu | 0.18945686484211 | 4.52923127816054 | -0.28169955887549 |
| Cu | -2.43367523699385 | 3.83348600154999 | -0.27821168319377 |
| Cu | -3.23213126099513 | -1.69764763411557 | 2.44988724548076 |
| Cu | -4.15989427883979 | 1.73944140766135 | -0.13080323323060 |
| Cu | -4.30817960809738 | -0.96392396061019 | 0.06817366715208 |
| Cu | -2.83237507326626 | -3.23459103753111 | 0.25269856578758 |
| Cu | -0.30835820946710 | -4.20660249694223 | 0.35952876882612 |
| Cu | 2.85784422145980 | -2.35738560051203 | -2.04852001614540 |
| Cu | -1.38485143907434 | -3.47674499836037 | -2.01921411338841 |
| Cu | 0.57167100816514 | -2.33381194133282 | -3.50829076924008 |
| Cu | 3.10771516334681 | 2.01145256432678 | -2.37136302887056 |
| Cu | 2.28912660997077 | -0.23629226598866 | -3.64340762981127 |
| Cu | -0.98212416086194 | 3.58943133157613 | -2.54789190824543 |
| Cu | 0.82396019771126 | 2.03505099341362 | -3.82966785976703 |
| Cu | -3.76261383686205 | 0.19939622783463 | -2.32174389352636 |
| Cu | -1.80332082438319 | 1.34038400066817 | -3.81533919518474 |
| Cu | -1.95346994949222 | -1.35704993909361 | -3.61307001271894 |
| C | -4.14763903473218 | 5.31319276553477 | 4.17024350583703 |
| C | -2.92027661151281 | 6.10805505212525 | 4.58419949396044 |
| S | -1.90659864888101 | 6.63923781900440 | 3.15741610145061 |
| H | -4.78140581697481 | 5.89367936015081 | 3.50105571609585 |
| H | -3.85317577982687 | 4.38934076233716 | 3.65325525109782 |
| C | -2.01572451317737 | 5.33556011916404 | 5.53057797739345 |
| H | -3.24446963645002 | 7.03118810936742 | 5.07682184875779 |
| H | -2.88800753860787 | 7.10933554370469 | 2.40566670226792 |
| H | -4.72590024092703 | 5.03923254270395 | 5.05301204808286 |
| H | -1.14491961331384 | 5.93069842146233 | 5.80131874366591 |
| H | -1.66659910548882 | 4.40700579297342 | 5.05755577746731 |
| H | -2.56152900920756 | 5.07166887566535 | 6.43612209187604 |

6. GFN-FF

| | | | |
|----|-------------------|-------------------|-------------------|
| 67 | | | |
| Cu | -0.29783023135911 | 0.19552472821899 | 0.06280270365060 |
| Cu | -0.60752545565842 | 0.32244066310659 | 2.40478196808944 |
| Cu | -0.94605845559255 | 0.49001469872594 | 4.81549738871814 |
| Cu | 1.03734948779715 | -0.77387533392955 | 3.88414693011394 |
| Cu | 1.31852401839418 | -0.89197614705466 | 1.42185828085337 |
| Cu | 1.20804892718434 | 1.58053107336903 | 1.25129233649927 |
| Cu | -1.19282219598556 | 2.22732760385760 | 0.87371267240337 |
| Cu | -2.54016940777058 | 0.14722195010962 | 0.83850685305783 |
| Cu | -0.99551727796755 | -1.78682815214989 | 1.16147866825091 |
| Cu | 0.58850855283843 | -1.84051929037390 | -0.76278998625297 |
| Cu | 1.94580375481491 | 0.24943789082700 | -0.70532442768456 |
| Cu | 0.40370846866309 | 2.17974150839292 | -1.02961841537625 |
| Cu | -1.91154522020257 | 1.28443221943229 | -1.29447891393440 |
| Cu | -1.79589120518435 | -1.20032960489396 | -1.12432426140110 |
| Cu | 0.02203984470674 | 0.05729290634164 | -2.27907507191021 |
| Cu | 2.97080726761758 | -1.99828727887112 | 2.81599627971673 |
| Cu | 2.73061047129719 | 3.03793957838289 | 2.4857656237628 |
| Cu | -2.0723135363927 | 4.31195333306153 | 1.75077164937322 |
| Cu | -4.83992243189743 | 0.09381880063244 | 1.62775002458451 |
| Cu | -1.71011367167310 | -3.81764526625385 | 2.28757993084712 |
| Cu | 1.49591844158974 | -3.92872965991249 | -1.61204183892833 |
| Cu | 4.24339125991888 | 0.30806994742830 | -1.49091275696709 |
| Cu | 1.11834611097695 | 4.21717062293797 | -2.15466811999877 |
| Cu | -3.56686562332788 | 2.39671527406299 | -2.68406926552907 |
| Cu | -3.33056091461072 | -2.63559770909409 | -2.34539788839062 |
| Cu | 0.35010629018525 | -0.08791828421519 | -2.15466811999877 |
| Cu | 0.90975698919341 | 1.78706560866127 | 3.70927216428516 |
| Cu | -1.54014503591937 | 2.38458549799471 | 3.27825938489473 |
| Cu | -2.93981860196415 | 0.28072755264459 | 3.2755253218907 |
| Cu | -1.34436433941582 | -1.70132151396489 | 3.61545984998982 |
| Cu | 2.90775680091655 | 0.52404933311836 | 2.69620243510800 |
| Cu | 0.64663177574965 | -2.96310055778065 | 2.59440749765018 |
| Cu | 2.27877007311991 | -3.02031859014384 | 0.61055055874732 |
| Cu | 3.67519988555329 | -0.86299913304583 | 0.67256513126822 |
| Cu | 0.33651325750664 | 3.67630880592330 | 2.11460912935091 |
| Cu | 3.55607773127491 | 1.69935501208973 | 0.50334809245937 |
| Cu | 1.95746751788620 | 3.69027053994089 | 0.16900312515668 |
| Cu | -3.52680766086692 | 2.25138781938157 | 1.71628989860323 |
| Cu | -0.49336255132104 | 4.32992807031011 | -0.22374316439661 |
| Cu | -2.88104164199615 | 3.41963453505463 | -0.47918457328971 |
| Cu | -3.32625612135698 | -1.90028680879496 | 1.98820057657246 |
| Cu | -4.26832037885396 | 1.26282474416394 | -0.53677825941397 |
| Cu | -4.14976863173400 | -1.29704681298414 | -0.36612343544019 |
| Cu | -2.55834858825015 | -3.28711641919326 | -0.03175829134236 |
| Cu | -0.10320240729688 | -3.94445816830822 | 0.34254326501947 |
| Cu | 2.92557425737329 | -1.84652609884345 | -1.58000659105317 |
| Cu | -0.9280082889742 | -3.34237206712984 | -2.01403512025077 |
| Cu | 0.94430021851313 | -2.04636805458113 | -3.20264806795111 |
| Cu | 2.73175450896340 | 2.29789440384672 | -1.85317079517231 |
| Cu | 2.34215743300475 | 0.10748367887378 | -3.14215350022271 |
| Cu | -1.24117940210844 | 3.35773703365890 | -2.46459669810080 |
| Cu | 0.75203009315084 | 2.09590908946836 | -3.47844471665147 |
| Cu | -3.50276655882173 | -0.12562230324790 | -2.55878432522054 |
| Cu | -1.63065933877996 | 1.16942186023357 | -3.74919171327244 |
| Cu | -1.51034380025015 | -1.39010143250020 | -3.57585288471938 |
| C | -3.09704133131600 | 5.19995524919245 | 4.59497381223548 |
| C | -1.79596922717595 | 5.96090056360358 | 4.36321078042827 |
| S | -1.49288082014146 | 6.31673998826245 | 2.59210887803102 |
| H | -3.95653482405374 | 5.72777422964769 | 4.17335363044265 |
| H | -3.06529488445760 | 4.21180672447750 | 4.13437377975508 |
| C | -0.60492819378706 | 5.24147482898650 | 4.98410516643565 |
| H | -1.88108445487115 | 6.95370740738130 | 4.83807206558687 |
| H | -2.79769974664887 | 6.73380235404209 | 2.48704424166214 |
| H | -3.28772268669215 | 5.05129320946038 | 5.66168247951702 |
| H | 0.32494095973512 | 5.79124136701489 | 4.81427653144265 |
| H | -0.47736678276158 | 4.24949418128451 | 4.55054249987784 |
| H | -0.72983993063947 | 5.11053819950930 | 6.06290192068199 |