



Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Química Fundamental

Caroline Andresa do Carmo de Lima Ramos

O modelo RM1 para Boro e Selênio

Recife

2016

Caroline Andresa do Carmo de Lima Ramos

O modelo RM1 para Boro e Selênio

Dissertação submetida ao Departamento de Química Fundamental como parte dos requisitos necessários à obtenção do diploma de Mestre em Química.

Orientador: Alfredo Mayall Simas

Recife

2016

Catálogo na fonte
Bibliotecário Jefferson Luiz Alves Nazareno CRB 4-1758

R175m Ramos, Caroline Andresa do Carmo de Lima
 O modelo RM1 para boro e selênio / Caroline Andresa do Carmo de
 Lima Ramos. – 2016.
 287 f.: fig., tab.

 Orientador: Alfredo Mayall Simas.
 Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.
 Química Fundamental. Recife, 2016.
 Inclui referências e apêndices.

 1. Físico-química. 2. Modelos semiempíricos. 3. Boro 4. Selênio I.
 Simas, Alfredo Mayall (Orientador). II. Título.

 541.3 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2016-56

CAROLINE ANDRESA DO CARMO DE LIMA RAMOS

O MODELO RM1 PARA BORO E SELÊNIO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação no Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Química.

Aprovado em: 29/02/2016.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Alfredo Mayall Simas

Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Química Fundamental

Prof. Gerd Bruno da Rocha

Universidade Federal da Paraíba
Departamento de Química

Prof. Gustavo Laureano Coelho de Moura

Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Química Fundamental

*Dedico esta dissertação a Deus, por sempre
estar comigo - sem Ele, eu não chegaria a
lugar algum.*

Agradecimentos

Ao prof. Alfredo Mayall Simas, pela orientação, dedicação e paciência no desenvolvimento do trabalho.

Ao prof. Gustavo Laureano Coêlho de Moura, por sempre me ajudar, esclarecendo dúvidas a respeito da pesquisa do mestrado.

A secretária da pós-graduação Patrícia pela imensa gentileza em seu atendimento.

À Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia de Pernambuco, FACEPE, pela bolsa de mestrado.

A todos os que contribuíram direta ou indiretamente para esta monografia.

Resumo

O *Recife Model 1*, RM1, é um modelo semiempírico para cálculo de orbitais moleculares que apresenta a mesma estrutura algébrica e a mesma quantidade de parâmetros que o AM1, sendo, portanto, de fácil implementação em qualquer software de química computacional que já contenha o AM1. Até então, o RM1 estava parametrizado para os átomos de H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I, sendo estes os mais importantes átomos nas pesquisas na área da orgânica, bioquímica e farmácia. É um modelo amplamente utilizado e podemos encontrá-lo em softwares como: *MOPAC 2012*, *HyperChem 8.0*, *Spartan '14*, *ConGener*, *AMBER*, entre outros. Buscando manter o mesmo padrão de qualidade das parametrizações anteriores do modelo RM1, nesta dissertação apresentamos uma nova parametrização do modelo RM1 para o átomo de boro e confirmamos nossa parametrização para o átomo de selênio. Estes elementos foram escolhidos devido à sua grande importância em pesquisas nas áreas da bioquímica, nanotecnologia e farmácia. Na parametrização destes elementos criamos um banco de dados com 1080 estruturas, 296 para o átomo de boro e 784 para o átomo de selênio, para um total agregado de 102 entalpias de formação, 128 potenciais de ionização, 28 momentos de dipolo e 822 de moléculas de referência para geometrias. Os resultados mostraram que ambas as parametrizações levaram a resultados em média melhores do que os obtidos pelos métodos que também usam parâmetros monoatômicos: AM1 e PM3 e tiveram resultados comparáveis, em muitos casos melhores, do que os métodos que usam parâmetros diatômicos, especialmente no que respeita a presença de dados atípicos nas previsões.

Palavras-chaves: Modelos semiempíricos. Boro. Selênio. RM1. AM1. PM3. PM6. PM7.

Abstract

Recife Model 1, RM1, is a semi-empirical model for molecular orbital calculations which has the same algebraic structure and the same number of parameters as AM1. Therefore, RM1 is easy to implement in any computational chemistry software which already contains AM1. Originally, RM1 was parameterized for only H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br and I, which are, nonetheless, the most important atoms for organic chemistry, biochemistry and pharmacy research. RM1 is a widely used model, which can be found in softwares as diverse as MOPAC 2012, HyperChem 8.0, Spartan'14, congenger, and AMBER, among others. Seeking to maintain the same standard of quality displayed by the previous parameterizations of the RM1 model, in this work we present new parameterizations of the RM1 model for the boron atom and confirm our earlier parameterization for the selenium atom. These elements were chosen because of their great importance for research in biochemistry, nanotechnology and pharmacy. For the parameterization of these elements, we created a database with 1080 structures, 296 for boron atom and 784 for selenium atom, for an aggregate of 102 enthalpies of formation, 128 ionization potentials, 28 dipole moments and 822 molecules for the reference geometries. The results showed that both parameterizations led to results which are, on average, better than those obtained by the methods that also use monatomic parameters: AM1 and PM3. Moreover, both parameterizations displayed comparable results, in many cases better, than the semiempirical methods which use diatomic parameters, in particular, with regards to the presence of atypical data in the predictions.

Keywords: Semi-empirical models. Boron. Selenium. RM1. AM1. PM3. PM6. PM7.

Lista de ilustrações

Figura 1.1 Erro médio absoluto para as 1480 entalpias de formação calculadas com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.	22
Figura 1.2 Erro médio absoluto para os 232 potenciais de ionização calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.	23
Figura 1.3 Erro médio absoluto para os 127 momentos de dipolo calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.	23
Figura 1.4 Erro médio absoluto para as 904 distâncias de ligação calculadas com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.	24
Figura 1.5 Erro médio absoluto para os 910 ângulos de diedros calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.	24
Figura 1.6 Estrutura da selenocisteína.	26
Figura 1.7 Algumas propriedades do elemento boro.	26
Figura 1.8 Boro em sua forma metálica.	27
Figura 1.9 Boro em sua forma de pó.	28
Figura 1.10 Gráficos dos números de artigos publicados citando o boro relacionado a pesquisas na área de bioquímica nos últimos 15 anos.	28
Figura 1.11 Gráficos dos números de artigos publicados citando o boro relacionado a pesquisas com semicondutores nos últimos 15 anos.	28
Figura 1.12 Gráficos dos números de artigos publicados citando o boro relacionado a pesquisas em química orgânica nos últimos 15 anos.	29
Figura 2.1 Molécula do 1,4-bis (dibromoboril) benzeno, fórmula $C_6H_4B_4$ e código CSD AYUHUX.	33
Figura 2.2 Molécula difluórborano, fórmula CH_3BF_2 .	34

Figura 2.3 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 80 estruturas contendo boro em função das entalpias de formação conhecidas.	35
Figura 2.4 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 11 estruturas contendo boro em função dos momentos de dipolo conhecidos.	36
Figura 2.5 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 32 estruturas contendo boro em função dos potenciais de ionização conhecidos.	36
Figura 2.6 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 173 estruturas contendo boro em função das geometrias conhecidas.	37
Figura 2.7 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 649 estruturas contendo selênio em função das geometrias conhecidas.	38
Figura 3.1 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos com o boro.	44
Figura 3.2 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos com o boro.	44
Figura 3.3 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos com o boro.	44
Figura 3.4 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos com o boro.	45
Figura 3.5 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos com o boro.	45
Figura 3.6 Estrutura do composto 1,2,4,3,5-trioxaadiborolano.	46
Figura 3.7 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o boro.	47
Figura 3.8 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o boro.	47
Figura 3.9 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o boro.	47

Figura 3.10 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o boro.	48
Figura 3.11 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o boro.	48
Figura 3.12 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o boro.	52
Figura 3.13 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o boro.	52
Figura 3.14 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o boro.	52
Figura 3.15 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o boro.	53
Figura 3.16 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o boro.	53
Figura 3.17 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos com o boro.	55
Figura 3.18 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos com o boro.	55
Figura 3.19 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos com o boro.	55
Figura 3.20 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos com o boro.	56
Figura 3.21 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos com o boro.	56
Figura 3.22 Estrutura da molécula $B_2C_6H_{10}I_4$	57
Figura 3.23 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o boro.	58

Figura 3.24 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o boro.	58
Figura 3.25 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o boro.	58
Figura 3.26 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o boro.	59
Figura 3.27 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o boro.	59
Figura 3.28 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o boro.	61
Figura 3.29 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o boro.	61
Figura 3.30 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o boro.	61
Figura 3.31 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o boro.	62
Figura 3.32 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o boro.	62
Figura 3.33 Erro médio absoluto para as 22 moléculas referente à entalpia de formação, calculadas com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para o selênio.	65
Figura 3.34 Erro médio absoluto para as 17 moléculas referente ao momento de dipolo, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para o selênio.	65
Figura 3.35 Erro médio absoluto para as 96 moléculas referente potencial de ionização, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para o selênio.	66
Figura 3.36 Erro médio absoluto para as 1214 distâncias de ligação, calculadas com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para o selênio.	66

Figura 3.37 Erro médio absoluto para os 1943 ângulos, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para o selênio.	67
Figura 3.38 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos com o selênio.	68
Figura 3.39 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos com o selênio.	68
Figura 3.40 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos com o selênio.	68
Figura 3.41 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos com o selênio.	69
Figura 3.42 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos com o selênio.	69
Figura 3.43 Estrutura da molécula $C_{12}P_2H_{10}Se$	70
Figura 3.44 Estrutura da molécula $C_7NH_8SeO_2$	70
Figura 3.45 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o selênio.	71
Figura 3.46 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o selênio.	71
Figura 3.47 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o selênio.	71
Figura 3.48 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o selênio.	72
Figura 3.49 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o selênio.	72
Figura 3.50 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos com o selênio.	73

Figura 3.51 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos com o selênio. 73

Figura 3.52 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos com o selênio. 73

Figura 3.53 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos com o selênio. 74

Figura 3.54 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos com o selênio. 74

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 Arquivo .mop de entrada para a molécula 1,4-bis (dibromoboril) benzeno, código CSD AYUHUX. A primeira linha é uma linha de comando, a segunda é uma linha de descrição e a terceira contém os códigos indicando as variáveis geométricas a serem parametrizadas.	33
Tabela 2.2 Arquivo .mop de entrada para a molécula metil diflúroborando, CH_3BF_2 cujo momento dipolar foi obtido da referência 43. A terceira linha contém o valor experimental do momento de dipolo, no caso 1,66 D e a indicação de onde foi obtido, que codificamos como SVED.	34
Tabela 3.1 Erros médios absolutos para as propriedades (entalpia de formação, potencial de ionização, momento de dipolo distâncias de ligação e ângulos) para o átomo de boro em relação ao subconjunto com 68 estruturas a partir dos parâmetros originais do AM1 (desprezando os parâmetros diatômicos) e PM3.	40
Tabela 3.2 Descrição e o valor para cada um dos parâmetros finais do modelo RM1 para o átomo de boro.	41
Tabela 3.3 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização do modelo RM1 para o átomo de boro em relação ao conjunto universo de 296 estruturas em comparação com os modelos AM1 e PM3.	42
Tabela 3.4 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização do modelo RM1 para o átomo de boro em relação ao conjunto universo de 296 estruturas em comparação com os modelos PM6 e PM7.	43
Tabela 3.5 Momentos de dipolo experimentais e calculados pelos modelos AM1, PM3, RM1, PM6 e PM7 para os compostos de boro em relação ao conjunto universo de 11 estruturas.	50
Tabela 3.6 Descrição e o valor para cada um dos parâmetros finais do modelo RM1 para o átomo de selênio.	63

Tabela 3.7 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização 64
do modelo RM1 para o átomo de selênio em comparação com os modelos AM1,
PM3, PM6 e PM7.

Lista de Abreviaturas e Siglas

AM1 – *Austin Model 1*

PM3 – *Parametric Model 3*

RM1 – *Recife Model 1*

PM6 – *Parametric Model 6*

PM7 – *Parametric Model 7*

MNDO – *Modified Neglect of Diatomic Overlap*

NDDO – *Neglect of Diatomic Differential Overlap*

CSD – *Cambridge Structural Database*

DIANA – *DIvisive ANAlysis clustering*

NIST – *National Institute for Standards and Technology (online data base)*

Sumário

1. Introdução.....	19
1.1 - Os modelos semiempíricos.....	19
1.2 - Os Modelos AM1 e PM3.....	20
1.3 - Os Modelos PM6 e PM7.....	21
1.4 - O Modelo RM1.....	21
1.5 - O Modelo RM1 para o átomo de selênio.....	25
1.6 - O boro e suas propriedades.....	26
2. Metodologia.....	30
2.1 - Etapas do processo de parametrização de um elemento químico.....	30
2.2 - Construção do banco de dados de referência.....	30
2.2.1 - Banco de dados de referência para entalpia de formação e potencial de ionização.....	30
2.2.2- Banco de dados para o momento de dipolo.....	31
2.2.3- Banco de dados para a geometria.....	31
2.2.3.1- Banco de dados para a geometria – Boro.....	31
2.2.4- Arquivos de entrada para o PARAM.....	32
2.3- Análise de disjunção hierárquica.....	34
2.4- Alocação ótima.....	37
2.5- Confirmação do modelo RM1 para o átomo de selênio.....	38
3. Resultados.....	40
3.1- Comparação dos modelos semiempíricos AM1 e PM3 para o subconjunto de estruturas com o boro.....	40
3.2- Conjunto de parâmetros do modelo RM1 para o boro.....	41

3.3- Comparação do RM1 para boro em relação a outros modelos semiempíricos para o conjunto universo.....	42
3.4- Confirmação da parametrização do modelo RM1 para o átomo de selênio.....	63
4. Conclusões e Perspectivas.....	76
4.1- Conclusões.....	76
4.2- Perspectivas.....	77
Referências.....	78
Apêndice A – Boro.....	81
Apêndice B – Selênio.....	146

1.Introdução

1.1- Os modelos semiempíricos

Atualmente a química teórica e computacional nos disponibiliza uma gama de métodos e formalismos físicos e matemáticos para o cálculo de propriedades químicas. Esses métodos podem ser classificados de acordo com a abordagem teórica e com o custo computacional. Podemos citar, como exemplos, os métodos *ab initio*, métodos semiempíricos e os de mecânica molecular.

Os modelos semiempíricos mais usados, com relação à abordagem teórica, são baseados no formalismo de Hatree-Fock-Roothaan. Para isto, são utilizados parâmetros derivados, ou de resultados experimentais, ou a partir de cálculos *ab initio* mais exatos.

Cálculos semiempíricos quanto ao tempo computacional para um mesmo sistema encontram-se entre os métodos da Mecânica Molecular e os métodos *ab initio*, que são capazes de prever propriedades químicas mais exatamente, porém, com um custo razoável de tempo de cálculo. Estes modelos são de grande relevância, principalmente quando o objeto de estudo corresponde a sistemas moleculares que apresentam uma grande quantidade de átomos, como, por exemplo, o cálculo do pKa¹ e propriedades espectroscópicas de proteínas², o mecanismo de sistemas enzimáticos³, o *design* de drogas⁴, dentre outros^{5, 6}.

Os modelos semiempíricos mais utilizados há cerca de três décadas, os quais são frequentemente aplicados para cálculos de propriedades químicas são: o *Austin Model 1*, AM1⁷ com 14.121 citações e o *Parametric Model 3*, PM3⁸ com 7.495 citações, que foram desenvolvidos na segunda metade década de 80.

Em virtude da ampliação da fronteira da aplicação da química quântica para sistemas com uma grande quantidade de átomos e com o intuito de renovar, aperfeiçoar e expandir a gama de aplicações, foram desenvolvidos posteriormente os modelos semi-empíricos *Recife Model 1*, RM1⁹ com 347 citações, o *Parametric Model 6*, PM6¹⁰ com 1.330 citações, e o *Parametric Model 7*, PM7¹¹ com 146 citações.

1.2- Os Modelos AM1 e PM3

O modelo *Austin Model 1*, AM1, foi desenvolvido por Michael J. S. Dewar e colaboradores, tendo como um dos objetivos principais a melhor descrição de problemas de interesse químico, como o estudo de reações químicas e mecanismos de reação⁷.

A principal diferença do modelo AM1 em relação aos modelos anteriores foi a introdução de funções gaussianas nas integrais de repulsão caroço-caroço⁷ do método *Modified Neglect of Diatomic Overlap* – MNDO, representada pela equação (1.1) abaixo (exceto para NH e OH):

$$E_N^{MNDO}(A,B) = Z_A Z_B \langle s_A s_A | s_B s_B \rangle (1 + e^{-\alpha_A R_{AB}} + e^{-\alpha_B R_{AB}}) \quad (1.1)$$

tornando-se,

$$E_N(A,B) = E_N^{MNDO} + \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \left(\sum_k a_{k_A} e^{-b_{k_A} (R_{AB} - c_{k_A})^2} + \sum_l a_{l_B} e^{-b_{l_B} (R_{AB} - c_{l_B})^2} \right) \quad (1.2)$$

onde $E_N(A,B)$ é a energia de repulsão caroço-caroço, Z_A e Z_B são as cargas dos núcleos, $\langle s_A s_A | s_B s_B \rangle$ é a integral de repulsão eletrônica para os orbitais s , α_A e α_B são parâmetros, R_{AB} é a distância internuclear e a , b , e c são parâmetros ajustáveis que definem as intensidades, larguras e posições das gaussianas.

Foi de grande interesse a inclusão dessas Gaussianas, pois foi possível descrever aspectos das ligações de hidrogênio¹², que em modelos anteriores eram quase impossíveis de se reproduzir, adquirindo, na época, grande importância para a descrição de processos biológicos.

Quatro anos após a publicação do AM1, James J. P. Stewart aperfeiçoou a metodologia e publicou o modelo *Parametric Method 3* - PM3, sendo os dois modelos essencialmente idênticos do ponto de vista do formalismo algébrico, diferentes apenas no tipo de parametrização e no conjunto de parâmetros⁸.

Os modelos AM1 e PM3 estão entre os mais frequentemente utilizados há cerca de três décadas, ultrapassando um número agregado de 20.000 citações em trabalhos na área de química, farmácia, biologia, etc.

1.3- Os Modelos PM6 e PM7

O *Parametric Model 6*, PM6, foi desenvolvido por James J. P. Stewart e a principal diferença em relação aos modelos AM1 e PM3 foi a modificação na equação de repulsão caroço-caroço MNDO que passou a incluir parâmetros diatômicos, os quais afetam o valor da energia total da molécula, diminuindo assim o erro no cálculo da entalpia de formação¹⁰, como mostrado na Eq. 1.3 a seguir:

$$E_N(A, B) = Z_A Z_B \langle s_A s_A | s_B s_B \rangle (1 + x_{AB} e^{-\alpha_{AB} R_{AB}}) \quad (1.3)$$

onde E_N é a energia de repulsão caroço-caroço, Z_A e Z_B são as cargas nucleares, $\langle s_A s_A | s_B s_B \rangle$ é a integral de repulsão eletrônica para os orbitais s , x_{AB} e α_{AB} são parâmetros diatômicos e R_{AB} é a distância internuclear.

Após a publicação do modelo PM6, novos sistemas foram estudados e algumas falhas e limitações tornaram-se aparentes como, por exemplo, a predição incorreta de sistemas Si-O-H, assim como problemas nos cálculos de estruturas que não estavam presentes no banco de dados, como também na modelagem de sistemas de sólidos simples. Então, na tentativa de investigar e corrigir algumas causas de desses erros, James J. P. Stewart desenvolveu e publicou em 2012 o *Parametric Model 7* - PM7¹¹, aperfeiçoando a descrição de ligações não covalentes e corrigindo dois erros do formalismo NDDO para possibilitar o cálculo de cristais e sólidos, o foco do PM7.

1.4- O Modelo RM1

Com o objetivo de produzir um modelo semiempírico mais elaborado, o grupo do Prof. Alfredo Mayall Simas publicou em 2006 o modelo *Recife Model 1*, RM1⁹, uma reparametrização mais robusta do modelo AM1. O RM1 possui a mesma estrutura algébrica do AM1 e apresenta o mesmo número de parâmetros. A ideia de manter a mesma formulação matemática foi para que fosse fácil sua implementação em softwares que já possuísem o AM1. Atualmente, o RM1 conta com parâmetros para 10 elementos químicos: H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I, onde os primeiros quatro elementos englobam a maioria das moléculas importantes para a química orgânica. Com a adição do S e P o modelo expande sua abrangência para pesquisas com moléculas de interesse biológico. Finalmente, acrescentando os halogênios, garantimos a modelagem na área dos fármacos.

No presente momento, o RM1 encontra-se implementado em vários softwares, como por exemplo: MOPAC¹³, HyperChem8.0¹⁴, Amber¹⁵, ConGENER¹⁶, PCGames/Firefly¹⁷, entre outros.

Como resultado de um banco de dados muito mais completo, dos tipos de técnicas utilizadas e da forma de parametrização, o RM1 apresentou melhores resultados em média que os modelos anteriores, AM1 e PM3, como é possível observar nas figuras a seguir (1.1, 1.2, 1.3 e 1.4).

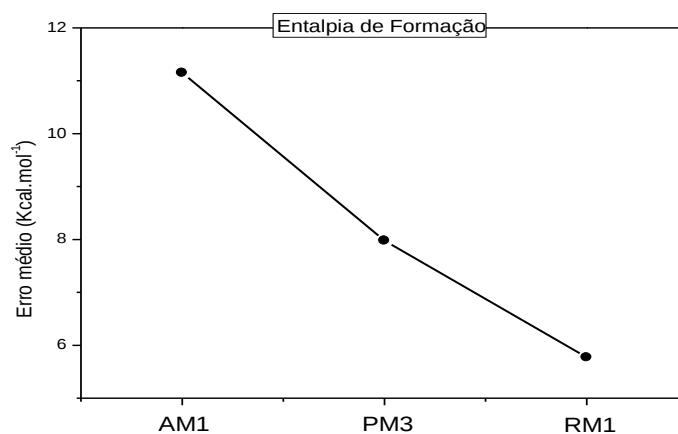


Figura 1.1 Erro médio absoluto para as 1480 entalpias de formação calculadas com os modelos, AM1, PM3 e RM1 para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.

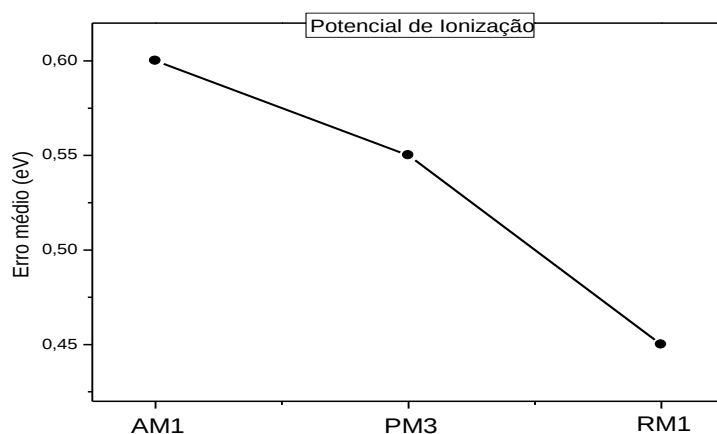


Figura 1.2 Erro médio absoluto para os 232 potenciais de ionização calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1, para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.

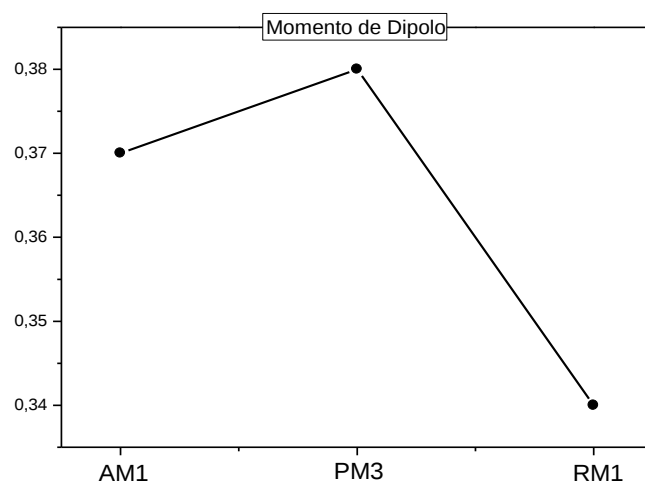


Figura 1.3 Erro médio absoluto para os 127 momentos de dipolo, calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1, para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.

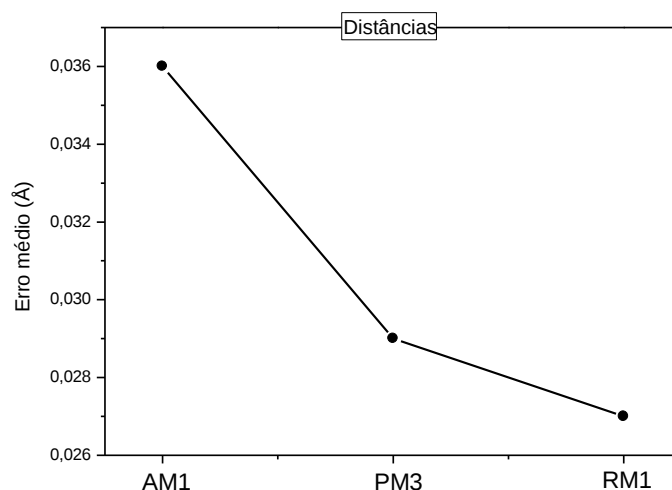


Figura 1.4 Erro médio absoluto para as 904 distâncias de ligação, calculadas com os modelos, AM1, PM3 e RM1, para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I

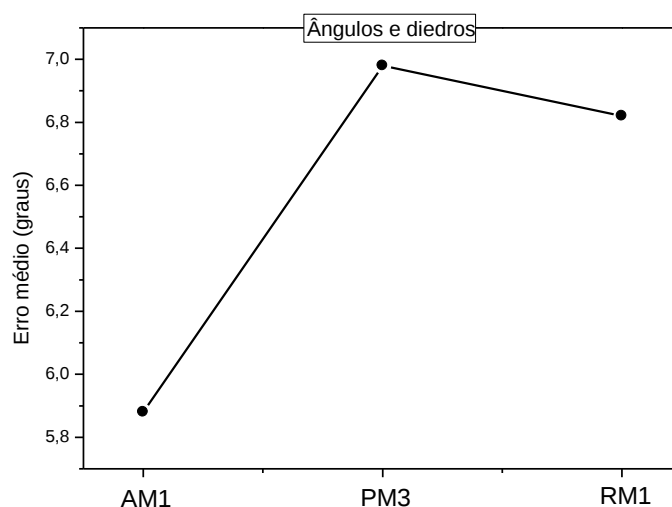


Figura 1.5 Erro médio absoluto para os 910 ângulos e diedros de ligação, calculados com os modelos, AM1, PM3 e RM1, para os átomos H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br e I.

Devido aos bons resultados apresentados pelo modelo RM1 desde a sua publicação, este vem sendo bem citado, tanto em vários artigos que relatam diversas pesquisas na área de Química Teórica, quanto auxiliando pesquisas na área de Química Experimental.

Com o modelo RM1, foi possível efetuar cálculos de *Quantitative Structure Property Relationships* (QSPR) que reproduzissem bons resultados, se equiparando a cálculos do

tipo DFT^{18,19}, aumentando assim a quantidade de estruturas estudadas com esta técnica e com custo computacional reduzido.

O RM1 apresentou também bons resultados em estudos do tipo *Quantitative Structure Activity Relationships* (QSAR), auxiliando na investigação de atividades antimicrobianas em uma série de estruturas da classe dos triazóis²⁰. Assim, como no estudo da predição de atividades anticâncer em algumas estruturas da classe das nitrosoureas alifáticas²¹.

Também temos exemplos da utilização do modelo RM1 em trabalhos de *docking* voltados para o estudo de larvicidas contra o mosquito *aedes aegypti*²².

Após a publicação, algumas complementações ao modelo RM1 foram realizadas, tais como: as correções da ligação de hidrogênio e de energias de dispersão²³ que tiveram como consequência a possibilidade de se chegar a resultados com uma precisão comparável a metodologias mais caras computacionalmente.

Recentemente, o RM1 foi também parametrizado para doze elementos da classe dos lantanídeos: európio, gadolínio, térbio, lantânio, cério, praseodímio, neodímio, promécio, samário, disprósio, hólmio, érbio, tendo apresentado resultados bastante exatos, podendo assim ser utilizado, por exemplo, no design de complexos de íons lantanídeos luminescentes.²⁴⁻²⁸

1.5- O Modelo RM1 para o átomo de Selênio

Baseado no fato de o RM1 apresentar melhores resultados em relação a modelos como o AM1 e o PM3, bem como pelo fato de ser bem aceito na comunidade científica, resolvemos aumentar o número de elementos químicos parametrizados, começando pelo átomo de selênio. Esta escolha deveu-se, principalmente, pelo fato de o selênio ser de fundamental importância em pesquisas na área da bioquímica, como, por exemplo, pela sua presença na enzima glutathione peroxidase. De fato, a selenocisteína (fig.1.6) é um aminoácido que participa do sítio ativo dessa enzima, que é responsável por proteger o organismo de danos oxidativos²⁹.

A origem da palavra vem do árabe *buraq* ou do persa *burah*, que são nomes comuns do mineral *boráx*. Os compostos de boro são conhecidos desde a antiguidade, tendo sido utilizados inicialmente na China, no Egito e na Babilônia³². É minerado como bórax ou quernita: $\text{NaB}_4\text{O}_7 \cdot x\text{H}_2\text{O}$, $x=10$ e 4 respectivamente. No processo de extração, o minério é convertido por ácidos em óxido de boro e reduzido com magnésio até uma forma de boro impura, marrom e amorfa (Eq. 1.4), apresentando duas formas alotrópicas: o boro metálico, que é preto, Fig.1.8, e o boro amorfo, que é um pó marrom fig. 1.9³².

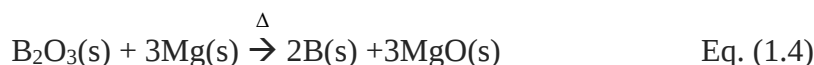


Fig. 1.8 Boro em sua forma metálica³³.



Fig. 1.9 Boro em sua forma de pó³⁴.

Os compostos de boro formam ainda das mais inusitadas estruturas dentre os compostos de todos os elementos. O boro tem uma energia de ionização alta, sendo um metalóide que forma ligações covalentes. Contudo, é um elemento com um raio atômico pequeno que apresenta três elétrons na camada de valência e orbitais p incompletos e vazios, justificando então uma forte tendência para ganhar elétrons. Por isso, seus compostos se comportam como ácidos de Lewis. Essas propriedades incomuns de ligação levam a algumas propriedades notáveis, tornando o boro um elemento essencial na tecnologia contemporânea, principalmente na nanotecnologia.

Ao fazer uma busca na *Web of Science*, verificamos que o boro possui grande relevância e que vem sendo bastante pesquisado, com muitas publicações nos últimos anos, sendo relacionado a pesquisas nas áreas da bioquímica, orgânica, semicondutores, luminescência e nanotecnologia, como podemos observar nos gráficos abaixo.

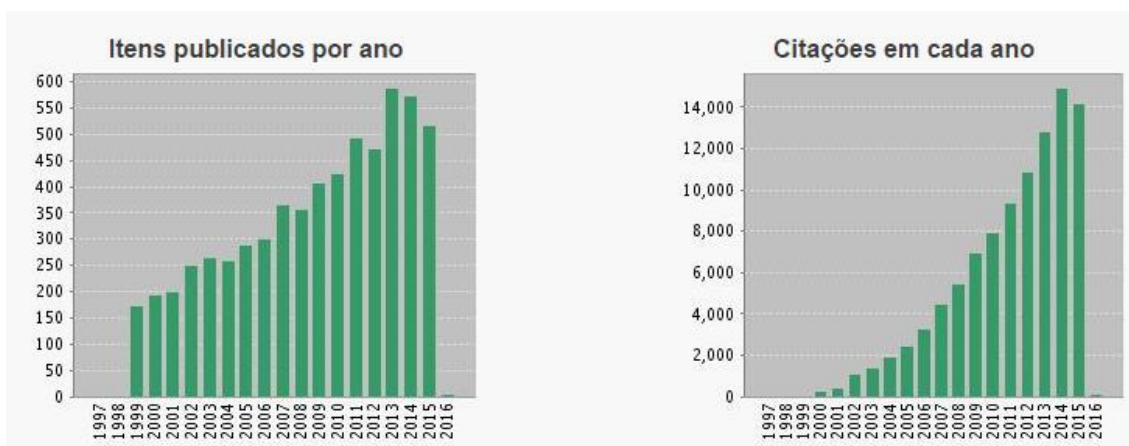


Fig. 1.10 Gráficos dos números de artigos publicados citando o boro relacionado a pesquisas na área de bioquímica nos últimos 15 anos.

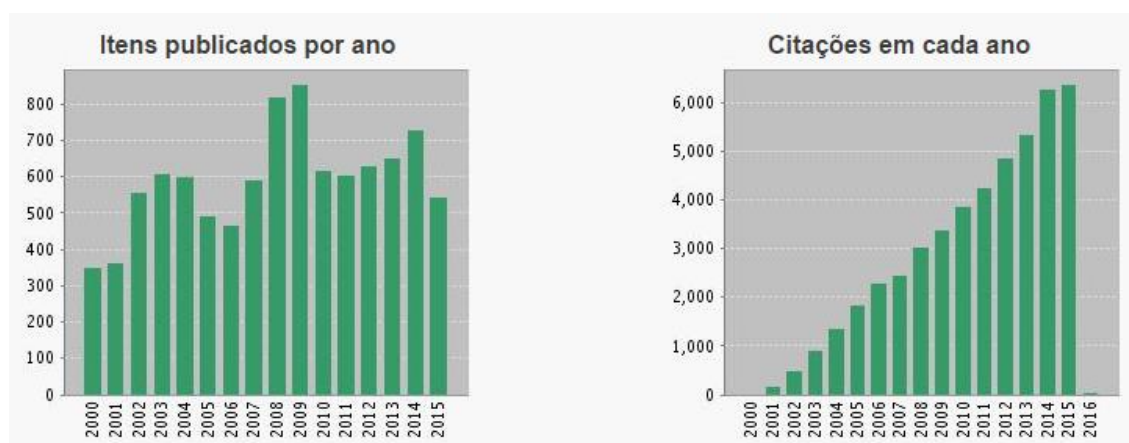


Fig. 1.11 Gráficos dos números de artigos publicados e citando do boro relacionados a pesquisas com semicondutores nos últimos 15 anos.

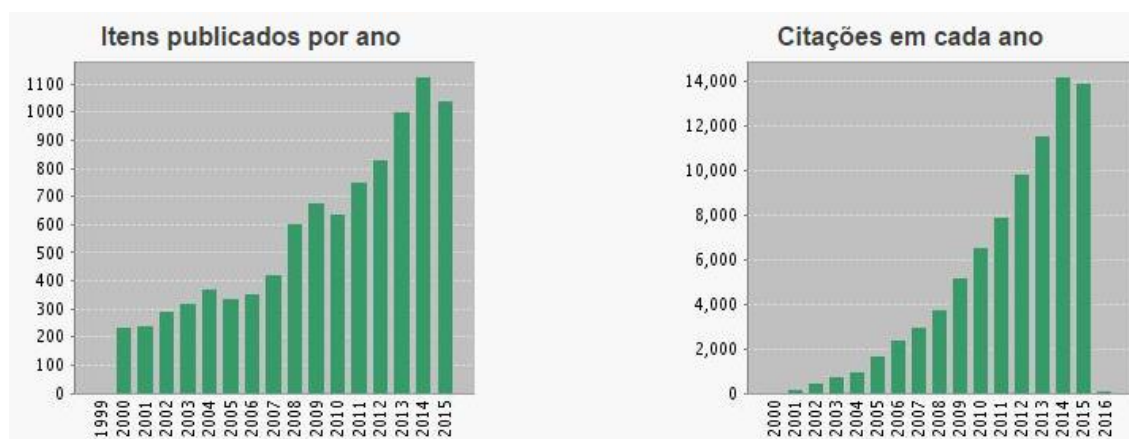


Fig. 1.12 Gráficos dos números de artigos publicados e citando o boro, relacionados a pesquisas em química orgânica nos últimos 15 anos.

Há uma gama de aplicações em compostos com o átomo de boro, como se pode observar nos exemplos abaixo:

- i) Dentre os elementos B, Al, Ga, In e Tl, a química organometálica de boro e de alumínio claramente predominam. A química dos compostos organoboro está intimamente relacionada à química de organoboranas. Dentre os compostos organoboro é possível citar, por exemplo: i) organoboranas e ii) compostos heterocíclicos de boro. Os compostos organoboro são comumente utilizados em sínteses orgânicas.
- ii) São utilizados em reatores nucleares como material de controle e finalização da reação de fissão nuclear em cadeia, já que é um absorvente de nêutrons³⁵.
- iii) Em forma de pó (não cristalina), são utilizados em fogos de artifício por produzir uma coloração verde³⁶.
- iv) Eles também são utilizados como aditivo retardante nas roupas de plástico e borracha³⁷.
- v) O ácido bórico (também conhecido como ácido ortobórico) H_3BO_3 é utilizado na produção de fibras de vidro, nos monitores de computador e na produção de muitos adesivos baseados em acetato de polivinila e álcool polivinílico³⁸.
- vi) O boro também é encontrado em estudos com materiais luminescentes como é o caso dos hidrocarbonetos policíclicos aromáticos dopados com boro que apresentam melhor luminescência do que as estruturas sem o átomo de boro³⁹.

2. Metodologia

2.1- Etapas do processo de parametrização de um elemento químico

Quando tratamos da parametrização de um modelo semiempírico, podemos assegurar que a etapa mais lenta e cara, em relação ao tempo e ao esforço computacional, é a busca por melhores parâmetros. Contudo, existem ainda outras etapas no desenvolvimento de um modelo semiempírico.

Para compostos de boro e de selênio, dividimos o processo de parametrização do RM1 em três etapas:

- (i) A elaboração de um banco de dados de referência;
- (ii) A escolha do conjunto de estruturas que farão parte da parametrização;
- (iii) A procura pelos melhores parâmetros.

2.2- Construção do banco de dados de referência

Para se ter um modelo semiempírico com um alto poder preditivo, inicialmente é necessário um conjunto de dados de referência de propriedades experimentais que sejam representativas do universo de possibilidades que possam vir a ser encontradas durante o uso do método. Além disso, deve-se tomar cuidado com a qualidade do dado experimental que deve estar descrito corretamente. As propriedades escolhidas para a parametrização do método RM1 são: entalpia de formação, potencial de ionização, momento de dipolo e geometria. Estes dados podem ser encontrados em *sites* especializados como o NIST (*National Institute for Standards and Technology*)⁴⁰ e o CSD (*The Cambridge Structural Database*)⁴¹, em *Handbooks* e artigos científicos, bem como através da solicitação a colaboradores.

2.2.1- Banco de dados para entalpia de formação e potencial de ionização

A construção do banco de dados para as propriedades de entalpia de formação e potencial de ionização baseou-se principalmente em duas fontes: o banco de dados *on-line* do NIST e o banco de dados particular do Prof. James J. P. Stewart.

As estruturas que partiram do NIST tiveram que ser inicialmente pré-otimizadas, já que o banco de dados online não fornece as estruturas completas. Para isto, utilizamos o modelo AM1 através do software *MOPAC* para a preparação das estruturas de partida que vieram a integrar o banco de dados.

2.2.2- Banco de dados para o momento de dipolo

A elaboração do banco de dados para a propriedade de momento de dipolo em fase gasosa foi a que apresentou a maior dificuldade, pois o NIST não possui dados de momento de dipolo para estruturas com o boro. Na tentativa de encontrar dados experimentais, fizemos uma busca minuciosa na *Web of Science*⁴², nada novo tendo sido encontrado. Os momentos de dipolo utilizados vieram, portanto, de livros com compilações destas propriedades⁴³⁻⁴⁶ e do banco de dados pessoal do Prof. James J.P. Stewart.

2.2.3- Banco de dados para a geometria

A construção do banco de dados para as propriedades de geometria baseou-se inicialmente no banco de dados particular do Prof. James J. P. Stewart. Contudo, no intuito de ter uma maior diversidade de estruturas, já que a obtenção de dados experimentais de geometria em fase gasosa a 1 bar e 298K é difícil, incorporamos dados de geometria em fase condensada a partir do CSD, através do software ConQuest que nos fornece os valores de distâncias, ângulos e diedros através da cristalografia.

2.2.3.1- Banco de dados para a geometria – Boro

Encontramos no CSD 1200 estruturas contendo átomos de boro. Nestas, o átomo de boro apresentou-se fazendo ou três ou quatro ligações químicas. Agrupamos então todas as 1200 estruturas em categorias classificadas unicamente de acordo com a diversidade de átomos diretamente ligados ao boro. Encontramos então 96 diferentes tipos de átomos de boro tetravalentes e 55 diferentes tipos de átomos de boro trivalente. Dentro de cada uma destas categorias, que podiam conter desde uma única estrutura (no caso do boro tetravalente ligado a outro boro e a três átomos de carbono) a até 214 diferentes estruturas (no caso do boro trivalente ligado a um carbono e a dois átomos de oxigênio). Dentro de cada uma das 151 categorias, escolhemos então a menor das estruturas para participar do conjunto de parametrização, buscando, assim, minimizar o tempo computacional da etapa

da otimização do método. Além destas estruturas obtidas do CSD, utilizamos também outras poucas do banco de dados pessoal do Prof. James J.P. Stewart, para um total de 173.

Na formação do banco de dados de geometria, algumas etapas tiveram que ser realizadas. Como os átomos de hidrogênio não são bem detectados pela cristalografia de raios-X, os mesmos foram automaticamente colocados nas estruturas pelo programa ConQuest do CSD. Subsequentemente suas posições foram otimizadas com o modelo AM1 pelo software MOPAC através do programa escrito na linguagem fortran90, denominado “fila”, e codificado pelo Prof. Dr. Ricardo Freire.

2.2.4- Arquivos de entrada para o PARAM

Antes de se iniciar o processo de parametrização é necessário preparar um conjunto de arquivos de entrada que possam ser lidos pelo programa de parametrização chamado PARAM⁴⁷, desenvolvido e cedido a nós pelo Prof. James J. P. Stewart.

Como pode ser visto no exemplo abaixo, o arquivo de entrada para a molécula de nome 1,4-bis (dibromoboril) benzeno, fórmula $C_6H_4B_2Br_4$, código CSD AYUHUX e figura 2.1. A tabela. 2.1 é um modelo de arquivo de entrada, onde a primeira linha é reservada às palavras chaves de comando e a segunda é a linha destinada ao nome de identificação da estrutura. Após as duas primeiras linhas, surge a linha com os códigos das variáveis geométricas que farão parte da otimização. Assim, à primeira variável geométrica que aparece, é dado o código <B-C>; a segunda não é considerada, recebendo o código genérico de descarte <>; à terceira, um ângulo, é dado o código <C-C-B>, etc. Por isso, é importante que o átomo sendo parametrizado apareça em primeiro lugar no arquivo para que não seja necessário colocar uma sequência muito grande de símbolos <>. A confecção destes inúmeros arquivos .mop é um trabalho exaustivo que requer grande atenção. A colocação do átomo a ser parametrizado em primeiro lugar juntamente com os átomos diretamente a ele ligados é feita primeiro salvando a geometria em coordenadas cartesianas, deslocando estes átomos para as primeiras posições e, em seguida, salvando no formato matriz Z, extensão .zmt no software HyperChem. Este processo foi feito para as 173 estruturas com dados de geometria para o boro.

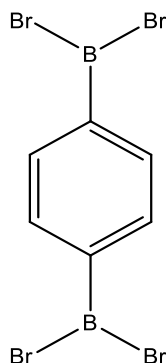


Figura 2.1 Molécula do 1,4-bis (dibromoboril) benzeno, fórmula $C_6H_4B_2Br_4$ e código CSD AYUHUX.

Tabela 2.1. Arquivo .mop de entrada para a molécula 1,4-bis (dibromoboril) benzeno, código CSD AYUHUX. A primeira linha é uma linha de comando, a segunda é uma linha de descrição e a terceira contém os códigos indicando as variáveis geométricas a serem parametrizadas.

AM1 GNORM=0.01 SCFCRT=1.D-9									
AYUHUX									
<B-C><><C-C-B><Br-B><Br-B-C><Br-B-C-C><Br-B> GR=CSD									
B	00000.0000	0	00000.0000	0	00000.0000	0	0	0	0
C	00001.5589	1	00000.0000	0	00000.0000	0	1	0	0
C	00001.4048	1	00120.8878	1	00000.0000	0	2	1	0
Br	00001.9239	1	00121.3683	1	00005.1761	1	1	2	3
Br	00001.9189	1	00122.0322	1	00185.0743	1	1	2	3
C	00001.4128	1	00120.8186	1	00183.2795	1	2	1	4
H	00001.1029	1	00120.2124	1	00358.4669	1	3	2	1
H	00001.1029	1	00119.6669	1	00179.7162	1	6	2	3
C	00001.3853	1	00120.5466	1	00000.6731	1	3	2	6
C	00001.4115	1	00121.1717	1	00179.6457	1	9	3	7
C	00001.3845	1	00121.1432	1	00359.3372	1	6	2	3
H	00001.1030	1	00119.2449	1	00359.9555	1	11	6	8
B	00001.5592	1	00120.8226	1	00178.7912	1	10	9	3
Br	00001.9248	1	00121.3902	1	00354.7638	1	13	10	11
Br	00001.9190	1	00122.0076	1	00174.9599	1	13	10	11
H	00001.1030	1	00119.1234	1	00000.0000	1	9	3	7
0									

Outras propriedades que foram parametrizadas também requerem arquivos .mop separados dos arquivos da geometria, como é o caso do momento de dipolo da molécula de metil difluórborano, CH_3BF_2 , Fig. 2.2, apresentada na Tabela 2.2 abaixo.

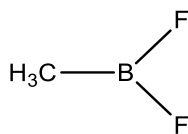


Figura 2.2 metil difluórborano, fórmula CH_3BF_2 .

Tabela 2.2. Arquivo .mop de entrada para a molécula de metil difluórborano, CH_3BF_2 , cujo momento dipolar foi obtido da referência 43. A terceira linha contém o valor experimental do momento de dipolo, no caso 1,66D e a indicação da referência de onde o dado foi obtido da ref. 43, que codificamos como SVED.

AM1 GNORM=0.01 SCFCRT=1.D-9									
Methyl difluoroborane									
D=1.66 DR=SVED									
B	00000.0000	0	00000.0000	0	00000.0000	0	0	0	0
F	00001.3187	1	00000.0000	0	00000.0000	0	1	0	0
F	00001.3183	1	00109.6106	1	00000.0000	0	1	2	0
C	00001.5710	1	00124.8774	1	00179.9999	1	1	2	3
H	00001.0913	1	00111.2782	1	00000.0000	1	4	1	3
H	00001.0925	1	00108.6437	1	00120.6813	1	4	1	3
H	00001.0925	1	00108.6437	1	00239.3180	1	4	1	3
0									

Todo este procedimento foi realizado para as moléculas cujas propriedades: entalpia de formação; potencial de ionização e momento de dipolo foram utilizadas na parametrização. A partir do banco de referências concluído, partimos para a etapa mais demorada e custosa computacionalmente, que é a de encontrar os melhores parâmetros. O programa PARAM busca através do algoritmo de minimização Newton-Raphson, o melhor conjunto de parâmetros para um determinado conjunto de dados de referência. Este programa, em suas várias versões, também foi utilizado no desenvolvimento de outros modelos semiempíricos como o PM3, PM6 e PM7.

2.3- Análise de Disjunção Hierárquica

Para a parametrização do boro construímos um conjunto universo com 296 propriedades experimentais, a saber: 80 estruturas com dados de entalpia de formação,

11 estruturas com dados de momento de dipolo, 32 com dados de potencial de ionização e 173 com dados geométricos. Inicialmente submetemos todo o conjunto universo no programa PARAM. Contudo, o tempo de cálculo se tornou dispendioso e não alcançamos o resultado esperado. No intuito de diminuir o tempo de cálculo da otimização dos inúmeros e repetitivos cálculos feitos pelo PARAM, foi necessário definir um menor subconjunto de estruturas para as propriedades acima que representassem bem o conjunto universo, e consequentemente chegassem aos parâmetros finais com mais agilidade. Para isso, resolvemos aplicar a análise de disjunção hierárquica.

Utilizamos para este processo a análise de disjunção hierárquica empregando o método de *Divisive ANALysis clustering* – DIANA, através do software R⁴⁸, para todas as propriedades acima citadas. O DIANA utiliza hierarquias divisivas, ou seja, produzem agrupamentos considerando inicialmente todos os objetos (erros obtidos pelos cálculos teóricos comparados aos resultados experimentais) em um único grupo, sendo que, a cada passo, ele divide o grupo anterior em dois grupos menores de acordo com suas dissimilaridades, até que todos os grupos contenham apenas um único objeto.

A resposta de uma análise de disjunção hierárquica pode ser apresentada graficamente através de um dendograma como pode ser visto nas figuras 2.3, 2.4 2.5 e 2.6.

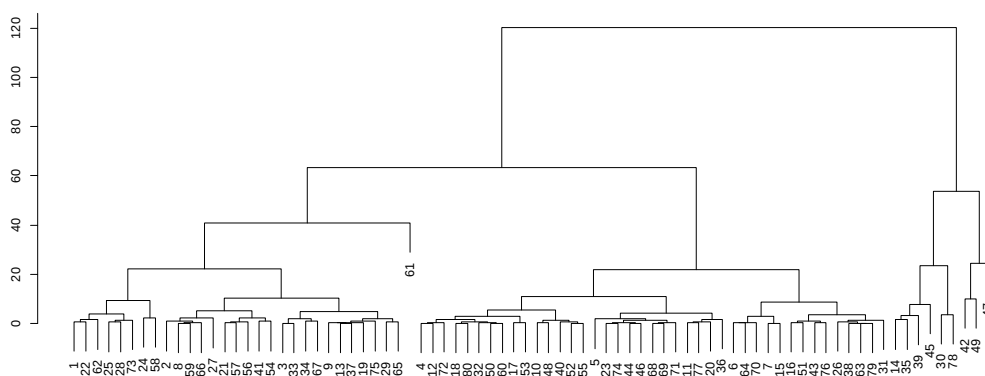


Figura 2.3 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 80 estruturas contendo boro, em função das entalpias de formação conhecidas.

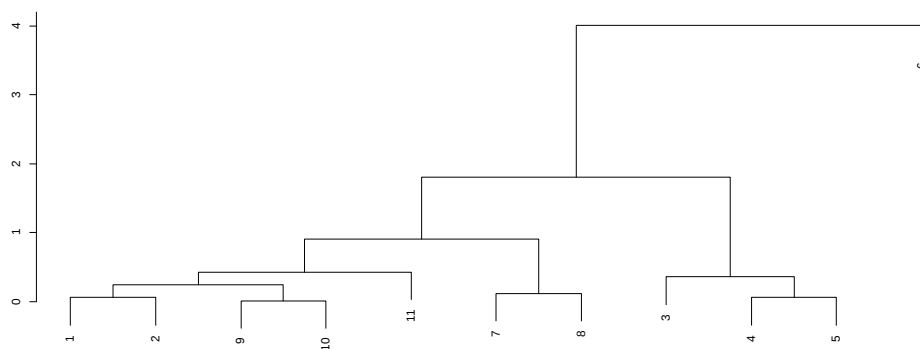


Figura 2.4 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 11 estruturas contendo boro, em função dos momentos de dipolo conhecidos.

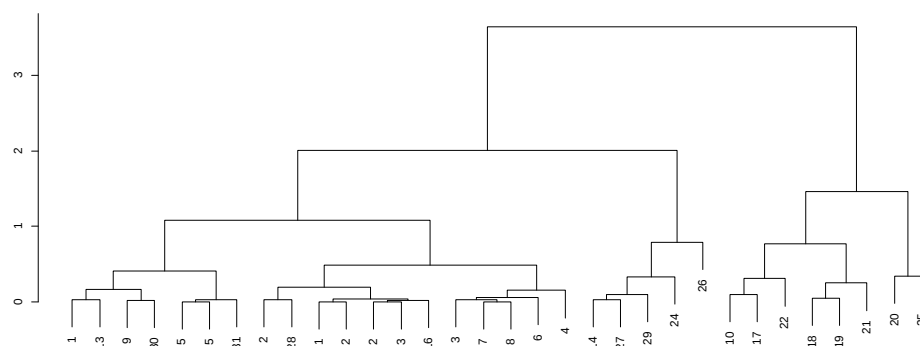


Figura 2.5 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 32 estruturas contendo boro, em função dos potenciais de ionização conhecidos.

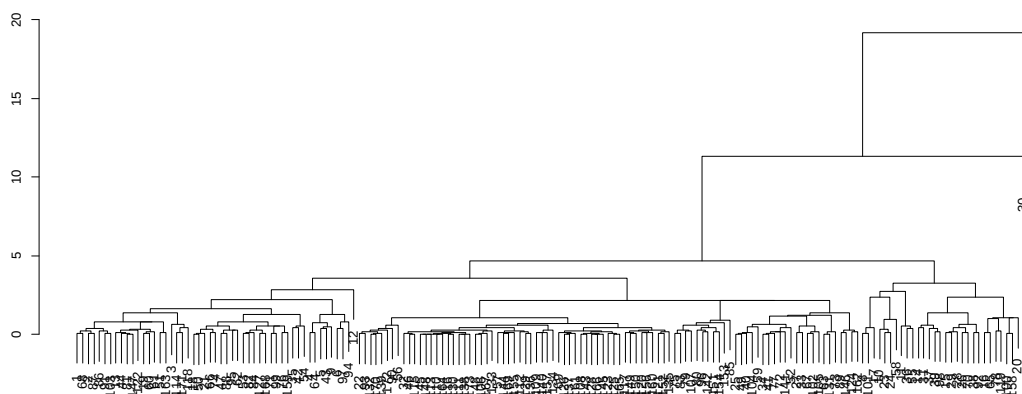


Figura 2.6 Análise de disjunção hierárquica DIANA para as 173 estruturas contendo boro, em função das geometrias conhecidas.

Para cada um dos dendogramas a das figuras (2.3, 2.4 2.5 e 2.6), determinamos uma altura para definir os subgrupos, para posteriormente selecionarmos as estruturas que irão representar cada subgrupo. Para o dendograma da entalpia de formação, cortamos o gráfico mostrado pela figura 2.3 na altura de 17 obtendo assim total de 9 subgrupos. Para o dendograma relacionado ao potencial de ionização, cortamos o gráfico representado pela fig. 2.5 na altura de 0.8 obtendo um total de 7 subgrupos. Para a geometria, fizemos o corte em 3 obtendo 6 subgrupos. Já para a propriedades de momento de dipolo, todas foram escolhidas para fazerem parte do subgrupo devido à pequena quantidade de estruturas.

2.4- Alocação Ótima

Em seguida à estratificação DIANA, utilizamos o método da alocação ótima⁴⁹ para escolher o conjunto de parametrização. A alocação ótima é uma técnica que objetiva obter a maior precisão de reprodução do universo pelo menor custo, no caso pelo menor tamanho de amostra. Menor tamanho, no caso, não se refere apenas ao número de compostos, mas também ao tempo computacional de otimização de geometria envolvido. Ou seja, através da alocação ótima, escolhemos o menor número de estruturas de cálculos mais rápidos, n , que possa vir a reproduzir o universo das estruturas disponíveis. E para definir quantas unidades deverão ser escolhidas de cada um dos estratos, n_h , utilizamos ainda a equação 1.5, abaixo,

$$n_h = n \frac{(N_h S_h)}{\sum_i (N_i S_i)} \quad \text{Eq. (1.5)}$$

onde n é o tamanho da amostra total, n_h é o tamanho da amostra para o estrato h , S_j é o desvio padrão no estrato N_h , N_i é o tamanho do estrato i e S_i é o desvio padrão do estrato i .

Verificamos, através da alocação ótima, que para formar o menor subconjunto de estruturas, que chamamos conjunto de parametrização, precisaríamos de 22 com propriedades de entalpia de formação, 11 de momento de dipolo, 22 de potencial de ionização e 13 com dados de geometria totalizado assim 68 estruturas. Ao conjunto original, com todas as estruturas possíveis, do qual o conjunto de parametrização foi obtido, damos o nome de conjunto universo.

2.5- Confirmação do modelo RM1 para o átomo de selênio

Como trabalho de conclusão do curso de graduação Bacharelado em Química pela autora desta dissertação, foi realizada a parametrização do modelo RM1 para o átomo de selênio, onde contamos com um total de 682 estruturas (sendo 547 com dados geométricos, 96 com seus potenciais de ionização, 17 com seus momentos de dipolo e 22 com suas entalpias de formação). Para isto, também havíamos utilizado a metodologia DIANA para a escolha das moléculas do conjunto de parametrização, na época, nunca antes empregada no desenvolvimento de modelos semiempíricos, no software R, para todas as propriedades de interesse: entalpia de formação, momento de dipolo, potencial de ionização e geometrias.



Figura 2.7 Análise de disjunção hierárquica DIANA para o total das 649 estruturas utilizadas na parametrização das variáveis geométricas para o átomo de selênio, incluindo as novas adicionadas nesta dissertação.

Enriquecemos o conjunto de estruturas de moléculas contendo selênio com mais 102 moléculas com dados de geometrias. Com isto, o conjunto de parametrização do selênio passou a ser de 784 estruturas, sendo 649 com dados geométricos, mantendo as 96 com potenciais de ionização, as 17 com seus momentos de dipolo e as 22 com suas entalpias de formação.

3.Resultados e Discussão

3.1- Comparação dos modelos semiempíricos AM1 e PM3 para o conjunto de parametrização do boro

Como resultado da estratificação obtida com o DIANA nos compostos de boro, seguida do método da alocação ótima, obtivemos um subconjunto com 68 estruturas, que intitulamos conjunto de parametrização para a obtenção dos melhores parâmetros.

Inicialmente testamos dois conjuntos de parâmetros neste conjunto de parametrização para verificar a exatidão das propriedades previstas. Os dois conjuntos testados foram os conjuntos de parâmetros do AM1 e do PM3, desprezando os parâmetros diatômicos empregados no modelo AM1 para o boro.

Como mostrado na tabela 3.1, abaixo, observamos que o modelo AM1 apresenta um menor erro médio absoluto para a maior parte das propriedades. Mesmo assim, fizemos duas parametrizações completas, a partir destes dois pontos iniciais.

Tabela 3.1 Erros médios absolutos das propriedades (entalpia de formação, potencial de ionização, momento de dipolo, distâncias de ligação e ângulos) para o átomo de boro em relação ao subconjunto com 68 estruturas a partir dos parâmetros originais do AM1 (desprezando os parâmetros diatômicos) e PM3.

	AM1	PM3	Espécies
Entalpia de Formação (kcal.mol ⁻¹)	16,66	17,55	22
Momento de dipolo (D)	0,96	0,70	11
Potencial de ionização (eV)	0,93	0,79	22
Distância (Å)	0,070	0,154	40
Ângulo (Graus)	4,32	6,52	43

3.2- Conjunto de parâmetros do modelo RM1 para o boro

A parametrização é a parte mais lenta deste trabalho, que requer paciência e muito tempo de máquina. E baseia-se numa otimização não linear, conforme descrito na seção métodos, onde utilizamos o programa PARAM com a técnica de minimização Newton-Raphson na tentativa de encontrar o melhor conjunto de parâmetros. Na tabela 3.2 apresentamos a descrição e os melhores valores desse conjunto de parâmetros encontrados, o qual define o modelo RM1 para o boro.

Tabela 3.2 Descrição e valor para cada um dos parâmetros finais do modelo RM1 para o átomo de boro.

PARÂMETRO	DESCRIÇÃO	VALOR
$U_{ss}(eV)$	Integral de um elétron e um centro envolvendo orbitais s	-27.69134907
$U_{pp}(eV)$	Integral de um elétron e um centro envolvendo orbitais p	-23.71446859
$\zeta_s(\text{bohr}^{-1})$	Expoente do orbital atômico s tipo Slater	1.26038272
$\zeta_p(\text{bohr}^{-1})$	Expoente do orbital atômico p tipo Slater	1.93900240
$\beta_s(eV)$	Parâmetro da integral de ressonância envolvendo orbitais s	-9.72424526
$\beta_p(eV)$	Parâmetro da integral de ressonância envolvendo orbitais p	-3.14954867
$G_{ss}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais $s-s$	8.35105322
$G_{sp}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais $s-p$	10.81937049
$G_{pp}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais $p-p$	6.92957901
$G_{p^2}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais $p-p'$	7.50516191
$H_{sp}(eV)$	Integral de troca de dois elétrons e um centro para os orbitais $s-p$	1.83035543
$\alpha (\text{\AA}^{-1})$	Parâmetro de repulsão <i>caroço-caroço</i> para o átomo	2.93692317
a_1	Intensidade da função Gaussiana 1	0.31603973
$b_1(\text{\AA}^{-2})$	Largura da função Gaussiana 1	3.00311787
$c_1(\text{\AA})$	Posição da função Gaussiana 1	0.90848034
a_2	Intensidade da função Gaussiana 2	0.04819272
$b_2(\text{\AA}^{-2})$	Largura da função Gaussiana 2	2.74766601
$c_2(\text{\AA})$	Posição da função Gaussiana 2	1.56757246

3.3- Comparação do RM1 para boro com outros modelos semiempíricos para o conjunto universo de compostos

A Tabela 3.3 abaixo apresenta uma comparação entre o modelo RM1 para o boro em relação ao conjunto universo de 296 estruturas colecionadas nesta dissertação e dos demais modelos NDDO disponíveis no programa MOPAC 2012, do AM1 em diante.

Tabela 3.3 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização do modelo RM1 para o átomo de boro em relação ao conjunto universo de 296 estruturas em comparação com os modelos AM1 e PM3.

	RM1	AM1	PM3	Espécies
Entalpia de Formação (kcal.mol ⁻¹)	11,63	81,85	13,33	80
Momento de dipolo (D)	0,69	0,70	0,75	11
Potencial de ionização (eV)	0,75	0,70	0,81	32
Distância (Å)	0,060	0,078	0,078	579
Ângulo (Graus)	5,30	5,36	5,31	664

Os resultados mostram que o modelo RM1 para o boro representa um avanço em relação aos métodos AM1 e PM3 de, respectivamente, 85% e 12,7% para a entalpia de formação; 1,4% e 8% para o momento de dipolo; e 23% e 23% para as distâncias interatômicas.

No artigo “*RM1: A Reparameterization of AM1 for H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, and I*”, Rocha e colaboradores mostraram, com o modelo RM1, que é possível melhorar um método como o AM1 e PM3 sem modificar o formalismo para cálculos de orbitais moleculares. A partir dos resultados da tabela acima podemos confirmar mais uma vez que é de fato possível obter estes melhores resultados sem modificações na estrutura analítica dos modelos AM1 e PM3.

Tabela 3.4 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização do modelo RM1 para o átomo de boro em relação ao conjunto universo de 296 estruturas em comparação com os modelos PM6 e PM7 que utilizam fortemente parâmetros diatômicos.

	RM1	PM6	PM7	Espécies
Entalpia de Formação (kcal.mol ⁻¹)	11,63	8,58	8,87	80
Momento de dipolo (D)	0,69	0,84	0,90	11
Potencial de ionização (eV)	0,75	0,33	0,53	32
Distância (Å)	0,060	0,038	0,045	579
Ângulo (Graus)	5,33	4,66	5,04	664

Pela tabela 3.4 acima observamos que os modelos PM6 e PM7 possuem erros médios absolutos menores para as propriedades calculadas. Este fato se deve principalmente aos parâmetros diatômicos da repulsão caroço-caroço, que afetam diretamente a energia total e a geometria e assim contribuindo para a diminuição do erro absoluto para as demais propriedades.

Abaixo, apresentamos os gráficos de regressão linear, onde comparamos a predição dos valores experimentais das propriedades: entalpia de formação, momento de dipolo, potencial de ionização e distâncias, ângulos e diedros de ligação, para estruturas com o boro, pelos modelos RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7.

Gráficos de regressão linear para a Entalpia de Formação

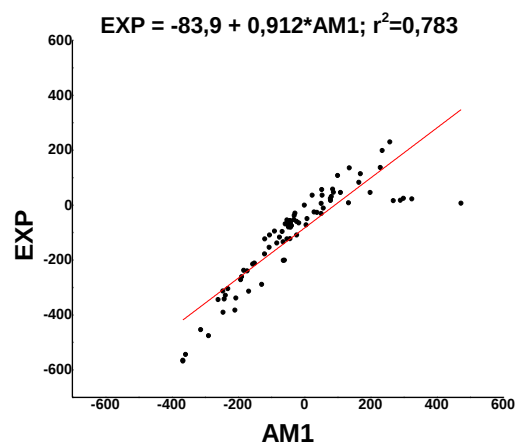


Figura 3.1 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos de Boro.

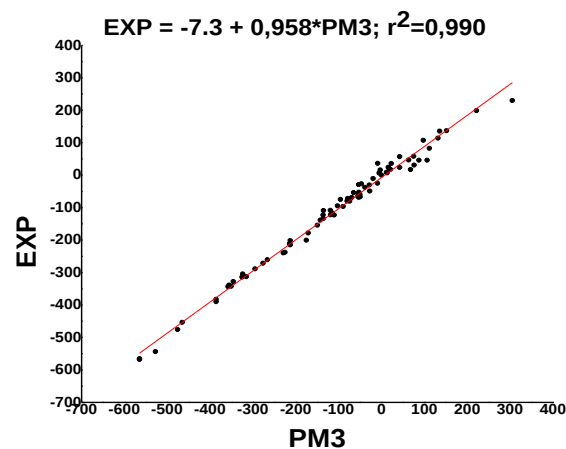


Figura 3.2 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos de Boro.

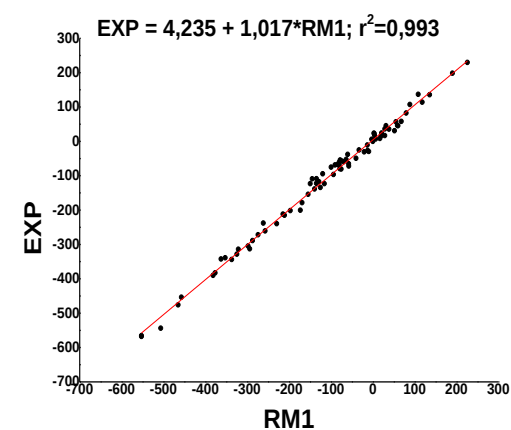


Figura 3.3 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para a Entalpia de Formação

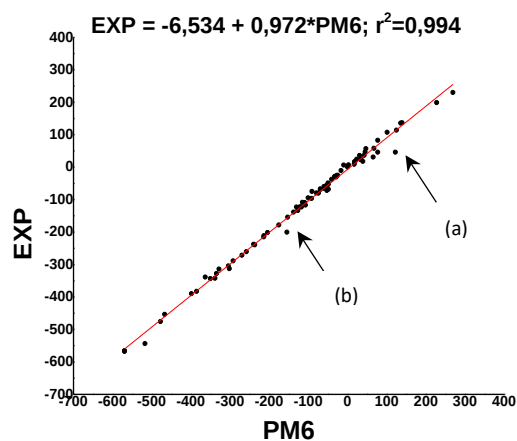


Figura 3.4 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos de Boro.

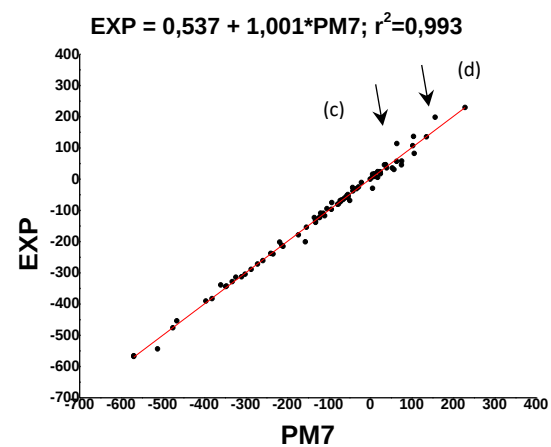


Figura 3.5 Regressão linear entre as entalpias experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos de Boro.

Através dos gráficos de regressão linear para a entalpia de formação (Figs. 3.1-3.5), observamos que, dentre os modelos RM1, AM1 e PM3, esta propriedade foi mais bem descrita pelo RM1, com o quadrado do coeficiente de correlação igual a 0,993. Além disso, a inclinação da reta de regressão pelo RM1 está mais próxima da unidade e a intersecção mais próxima de zero do que para o AM1 e PM3. Já os métodos PM6 e PM7, por possuírem um grande conjunto de parâmetros diatômicos, conseguem um resultado médio melhor do que o RM1, com suas inclinações mais próximas de 1 e suas intersecções mais próximas de zero. Porém, é justamente este fato de utilizar parâmetros diatômicos que faz com que estes dois métodos corram o risco de estarem sobre ajustados para seus respectivos conjuntos de parametrização, o que é evidenciado pela presença de pontos atípicos nas retas de regressão. De fato, nas Figs 3.4 e 3.5 identificamos os pontos atípicos (a) e (b) na regressão para o PM6 e (c) e (d) na reta para o PM7. Identificando estes pontos mais detalhadamente, nota-se um certo padrão. No caso do PM6, o ponto (a) se refere ao composto diborano, B_2H_4 , e o ponto (b) se refere ao composto 1,2,4,3,5-trioxadiborolano – figura 3.6. Já no caso do PM7, o ponto (c) se refere ao composto nitreto de boro, BN, e o ponto (d) se refere à molécula diatômica homonuclear B_2 , por exemplo, importante na forma aleotrópica γ -boro. Ou seja, enquanto no PM6 o que parece atípica é a interação entre dois átomos de boro, no PM7 é a natureza mais peculiar da ligação nas moléculas diatômicas.

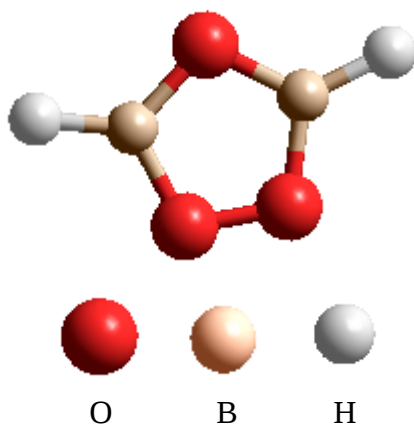


Figura 3.6 Estrutura do composto 1,2,4,3,5-trioxadiborolano

Gráficos de regressão linear para os momentos de dipolo

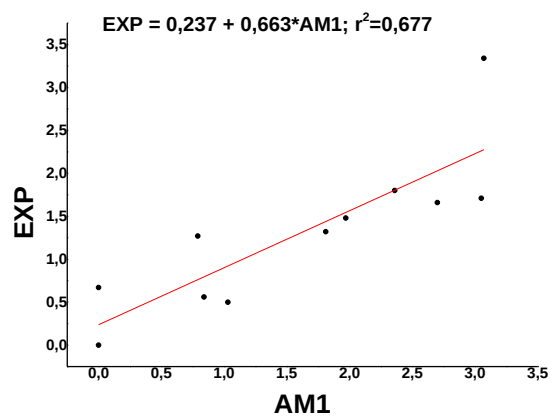


Figura 3.7 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de Boro.

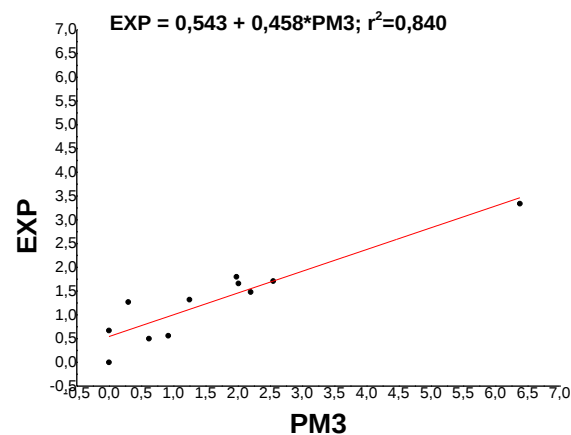


Figura 3.8 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de Boro.

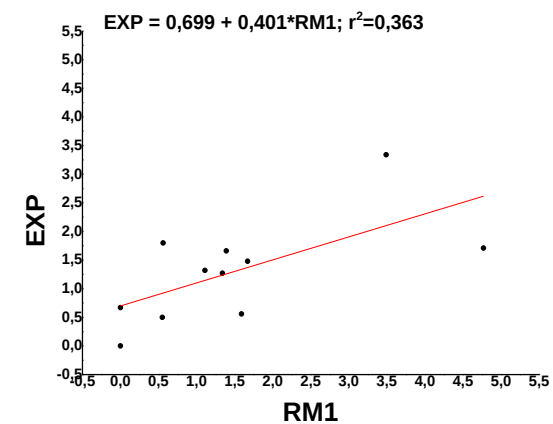


Figura 3.9 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para os momentos de dipolo

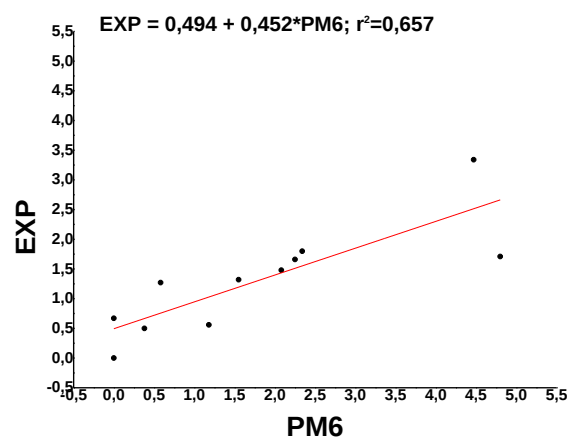


Figura 3.10 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de Boro.

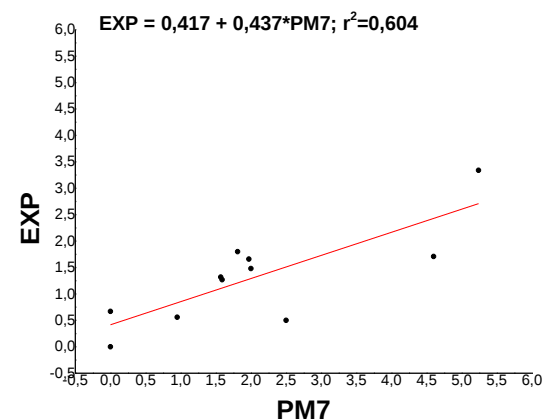


Figura 3.11 Regressão linear entre os momentos de dipolo experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de Boro.

Como podemos perceber pelos gráficos de regressão linear nas (Figs. 3.7-3.11), o momento de dipolo é a propriedade mais difícil de ser prevista por métodos semiempíricos. Tal dificuldade vem do fato de que para esta propriedade estar bem descrita, é importante bastante exatidão na geometria da molécula e na sua densidade eletrônica, o que é mais complicado devido ao fato de que a função de onda semiempírica é construída com um conjunto de base mínima e sem funções de polarização – muito importantes neste caso. A outra parte da dificuldade vem do fato de que o número de moléculas contendo boro, cujos momentos dipolares foram medidos é mínimo. No caso, somente encontramos 11 moléculas, o que torna esta propriedade mais difícil de ser ajustada por regressão simultaneamente às outras. A tabela abaixo mostra com mais detalhes os valores experimentais e os valores calculados para o momento de dipolo das moléculas consideradas. Não há um padrão que se possa comentar muito, exceto o de que as retas de regressão apresentadas nas Figs. 3.7 a 3.10 todas apresentam inclinações bem menores do que 1, variando de 0.363 para o RM1 a 0.840 para o PM3, o que indica que as tendências dos momentos dipolares são subestimadas para todos os semiempíricos. Mais uma vez isto parece indicar a falta de funções de polarização na base semiempírica, pois estas tenderiam a ampliar o valor do momento dipolar.

Tabela 3.5 Momentos de dipolo experimentais e calculados pelos modelos RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para os compostos de boro em relação ao conjunto universo de 11 estruturas

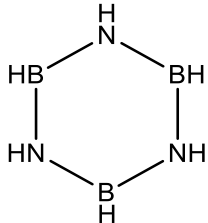
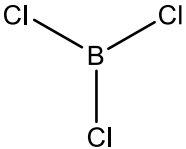
NOME	ESTRUTURA	EXP.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7
Monofluoreto de boro	B-F	0,50	0,55	0,18	0,62	0,38	2,50
Carbonila de borano	H ₃ B=C=O	1,80	0,56	2,19	1,98	2,34	1,81
Borano (1)	B-H	1,27	1,34	0,52	0,30	0,58	1,59
Borazina		0,67	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Tricloreto de boro		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Tabela 3.5 (continuação) Momentos de dipolo experimentais e calculados pelos modelos RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para os compostos de boro em relação ao conjunto universo de 11 estruturas

NOME	ESTRUTURA	EXP.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7
Dimetoxicloroborano		1,71	4,77	4,91	2,55	4,96	4,60
Difluorohidroxiborano		1,48	1,67	1,99	2,20	2,10	2,00
Metildifluoroborano		1,66	1,39	1,99	2,04	2,24	1,97
Dimetil-fluoroborano		1,32	1,11	1,17	1,46	1,66	1,57

Gráficos de regressão linear para os potenciais de ionização

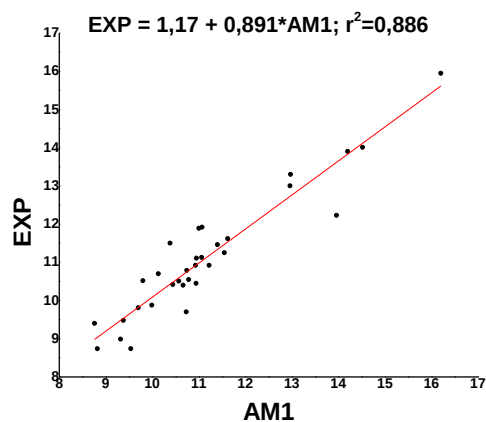


Figura 3.12 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de Boro.

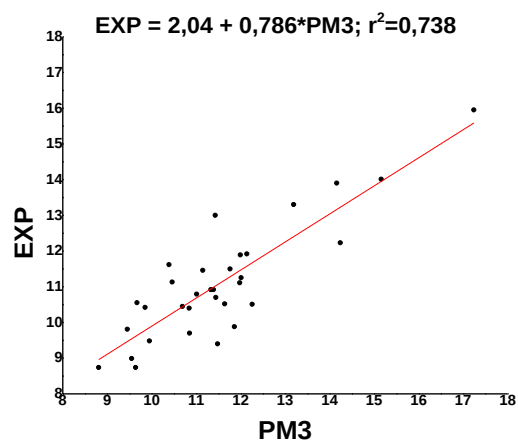


Figura 3.13 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de Boro.

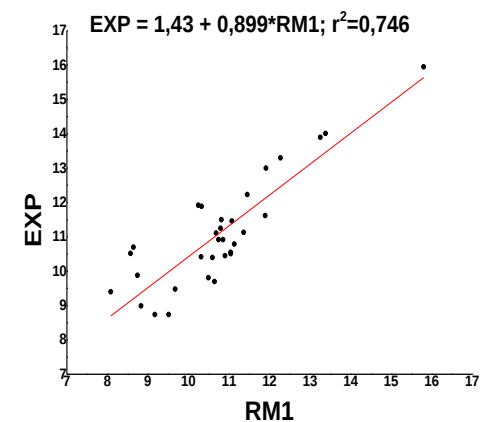


Figura 3.14 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para os potenciais de ionização

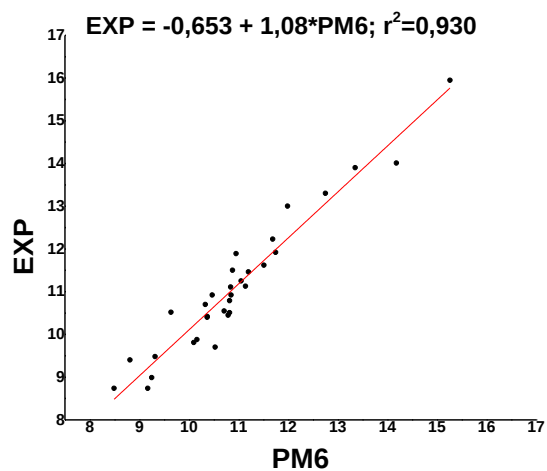


Figura 3.15 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de Boro.

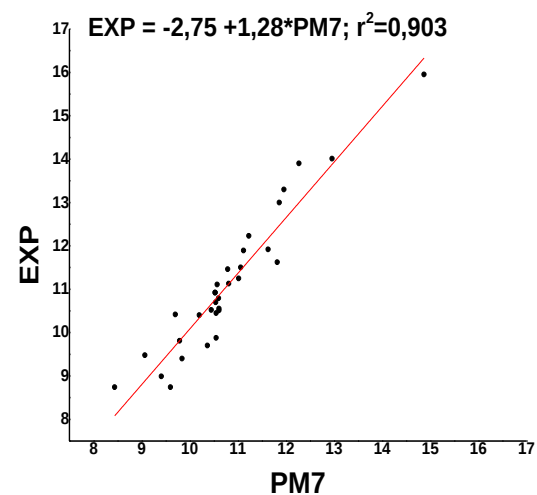


Figura 3.16 Regressão linear entre os potenciais de ionização experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de Boro.

Potenciais de ionização em métodos semiempíricos são tomados como iguais ao negativo da energia do orbital mais alto e ocupado, HOMO. É uma propriedade bem melhor descrita que os momentos dipolares, apesar de os gráficos de regressão (Figs. 3.12 a 3.16) apresentarem uma certa dispersão, especialmente para valores menores desta propriedade. Não há grande diferença entre os métodos com parâmetros monoatômicos. Nos gráficos de regressão linear para a propriedade potencial de ionização (Figs. 3.12 a 3.16), verificamos que há uma dispersão muito grande – o que acontece de forma semelhante para todos os modelos com parâmetros monoatômicos. Os métodos PM6 e PM7, entretanto, apresentaram gráficos de regressão bem melhores, indicando a provável importância dos parâmetros diatômicos para a previsão destas propriedades.

Gráficos de regressão linear para as distâncias de ligação

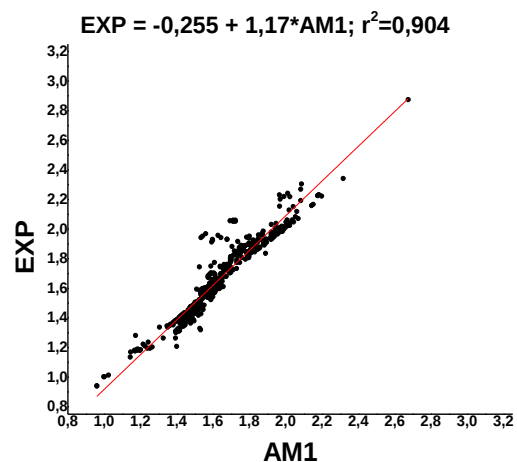


Figura 3.17 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos de Boro.

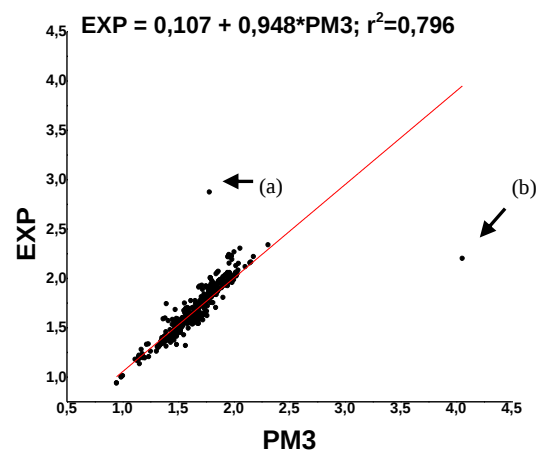


Figura 3.18 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos de Boro.

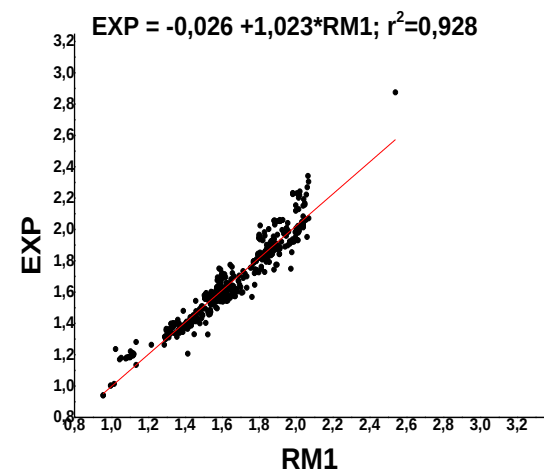


Figura 3.19 Regressão linear entre distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para as distâncias de ligação

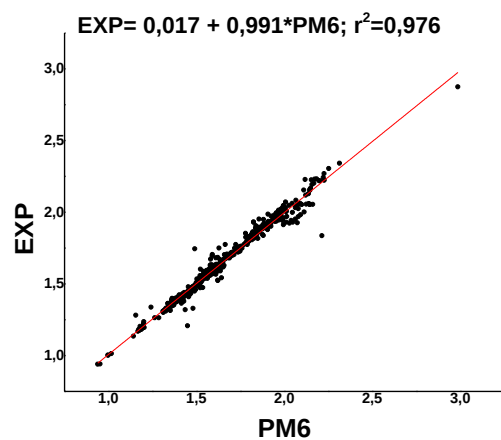


Figura 3.20 Regressão linear entre as distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos de Boro.

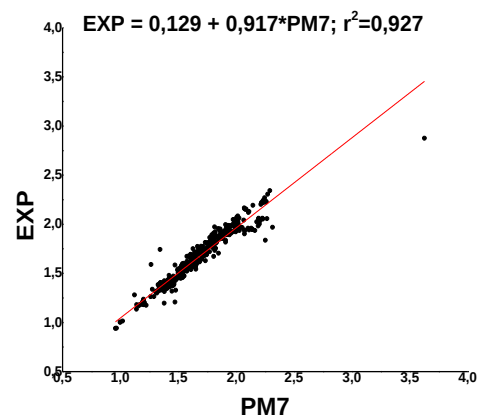


Figura 3.21 Regressão linear entre distâncias de ligação experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos de Boro.

Como apresentado na Tabela 3.3, através desta abordagem, de fato conseguimos um avanço no erro médio absoluto na distância de ligação em relação ao modelo AM1 e PM3, baixando-os de 0.078Å para 0.060Å. No caso do PM3, observa-se a presença de dois pontos atípicos bastante longe da reta de regressão e identificados como pontos (a) e (b) na Fig. 3.18. O ponto (a) refere-se à distância B-N na molécula de F_3BN_2 . Já o ponto (b) refere-se à distância entre o átomo de boro e o átomo de iodo a ele ligado, na molécula de $B_2C_6H_{10}I_4$, vinda do CSD com código AXEPOI – figura 3.22. Se observarmos os gráficos de regressão linear para distâncias de ligação (Figs. 3.17 a 3.21), verificamos essa melhora através da inclinação das retas de regressão, que para o RM1 é 1,023, bem mais próxima do ideal de 1 do que as do AM1 e PM3 que são, respectivamente, 1,17 e 0,948. As intersecções também exemplificam isso, com a do RM1 sendo $-0.03 \text{ kcal.mol}^{-1}$, bem mais próxima do ideal de zero do que as do AM1 e PM3 que são, respectivamente $-0.26 \text{ kcal.mol}^{-1}$ e $0.11 \text{ kcal.mol}^{-1}$. Na comparação com os métodos que empregam parâmetros diatômicos, o PM6 apresenta uma regressão mais interessante, embora ali se note a presença de um número considerável de pontos atípicos. Já o PM7 apresenta um desempenho inferior ao PM6.

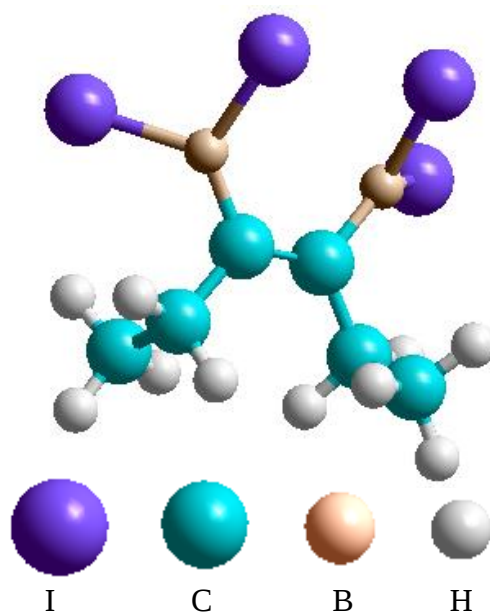


Figura 3.22 Estrutura da molécula $B_2C_6H_{10}I_4$

Gráficos de regressão linear para os ângulos

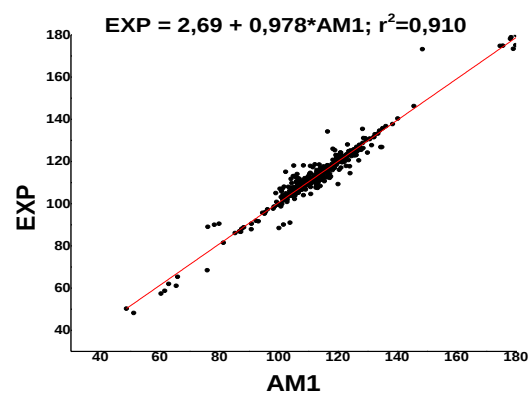


Figura 3.23 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de Boro.

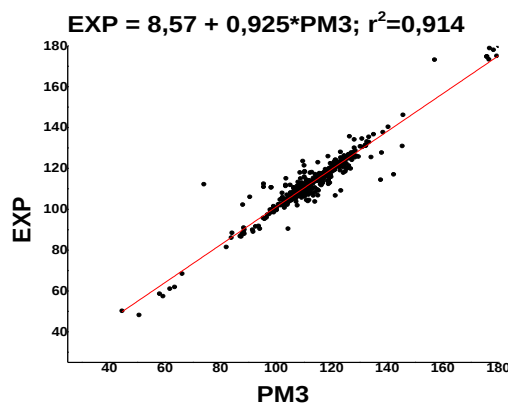


Figura 3.24 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de Boro.

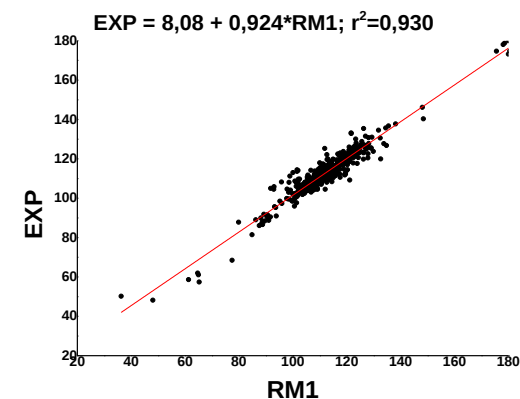


Figura 3.25 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para os ângulos

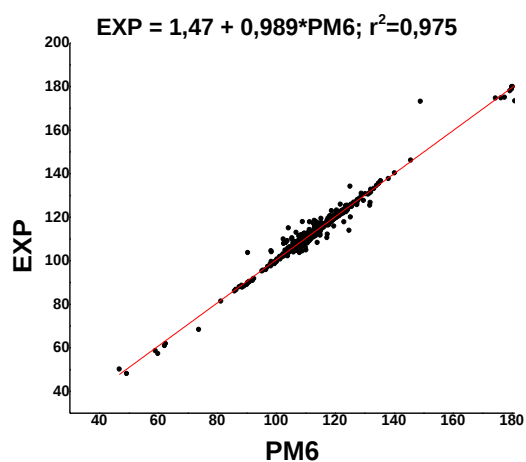


Figura 3.26 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de Boro.

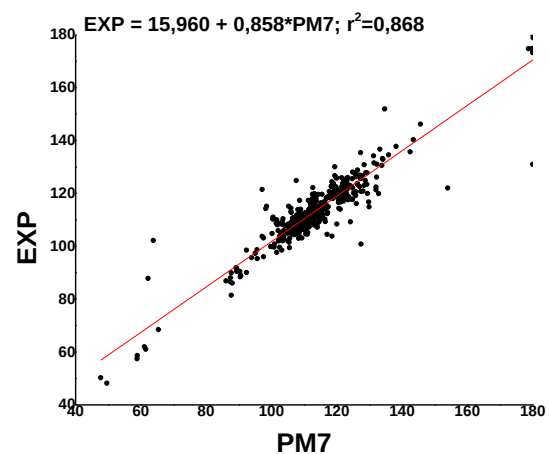


Figura 3.27 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de Boro.

Quando examinamos as figuras relativas aos ângulos de ligação (Figs. 3.23 a 3.27), podemos observar que o RM1 apresentou melhores resultados na forma de uma melhor correlação quando comparado a todos os outros modelos no que se refere à presença de pontos atípicos. Enquanto todos os outros métodos apresentam vários pontos atípicos, com destaque para o PM7, tal não acontece para o RM1. Isto indica um maior poder preditivo para o RM1, algo que não fica claro apenas das estatísticas presentes nas tabelas 3.3 e 3.4. Além disso, pode-se notar os altos valores para as intersecções dos vários métodos, na média 7 graus, o que indica que os semiempíricos parecem subestimar sistematicamente os ângulos de ligação por este valor.

Já no que diz respeito aos diedros representados pelas figuras de 3.28 a 3.32, salta aos olhos a boa correlação do método PM6, bem mais perfeita do que todas as dos demais métodos. E também salta aos olhos como a regressão dos diedros no PM7 piorou com respeito ao PM6, tanto no que se refere à dispersão dos pontos nos dois lados da reta, quanto no que se refere à presença de pontos atípicos. Já para os métodos com parâmetros monoatômicos, o RM1 apresentou a melhor regressão, com desvios homogêneos ao longo da reta e sem pontos atípicos. Já as regressões para AM1 e PM3 foram boas, mas foram um pouco comprometidas com a presença de pontos atípicos nos dois casos. Esta presença indica um potencial preditivo mais duvidoso para compostos com ligações químicas não muito representadas no conjunto de parametrização.

Gráficos de regressão linear para os diedros

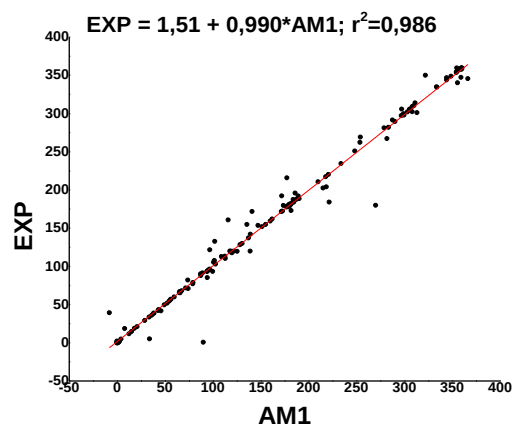


Figura 3.28 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de Boro.

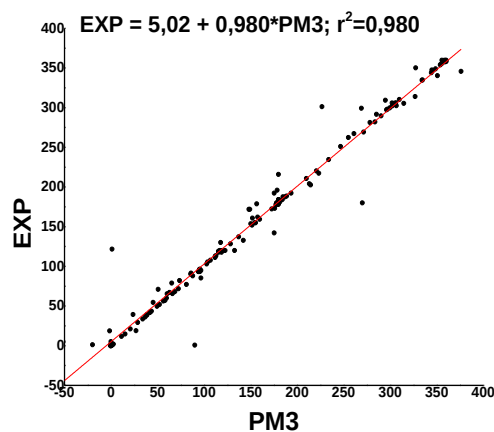


Figura 3.29 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de Boro.

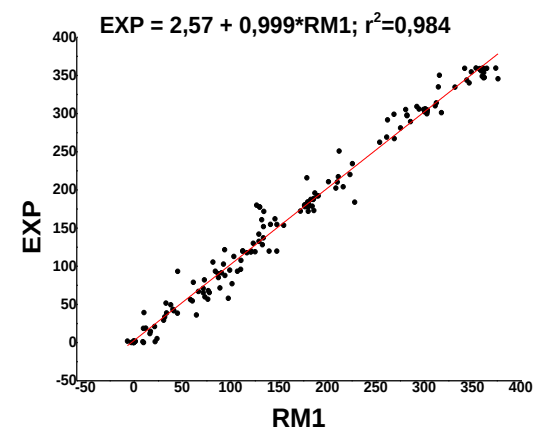


Figura 3.30 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de Boro.

Gráficos de regressão linear para os diedros

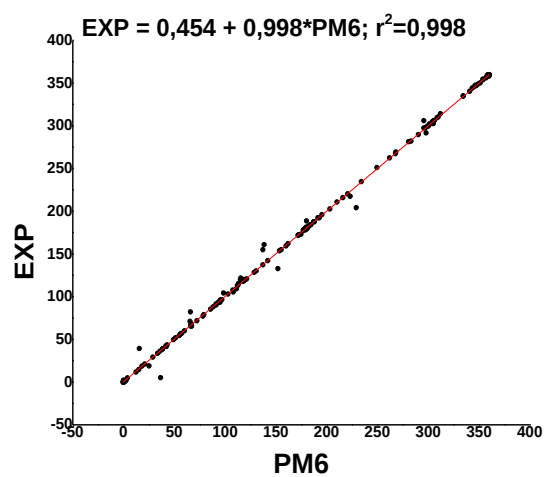


Figura 3.31 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de Boro.

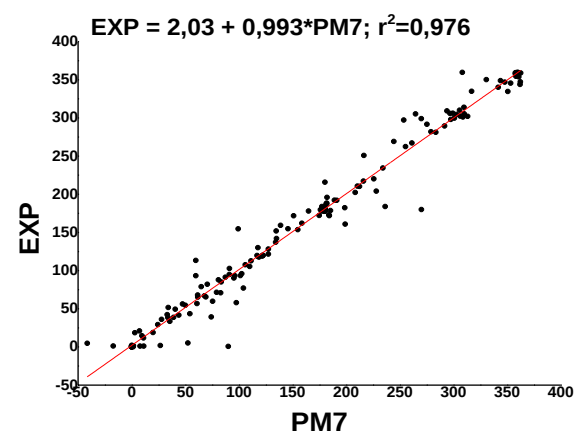


Figura 3.32 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de Boro.

3.4- Confirmação da parametrização do modelo RM1 para o átomo de Selênio

Com o novo conjunto de parametrização para o átomo de selênio, tentamos obter um novo conjunto de parâmetros mais perfeito que o anterior. Entretanto, após inúmeras e longas tentativas, fomos obrigados a reconhecer que a nossa parametrização obtida anteriormente e descrita na monografia de graduação, levou de fato ao melhor conjunto de parâmetros RM1 para o selênio até o momento. A adição, nesta dissertação de mais 102 estruturas que fizemos neste trabalho não mudou este fato.

A Tab. 3.1, abaixo, reproduz então o conjunto de parâmetros para o selênio anteriormente obtido.

Tabela 3.6 Descrição e valor para cada um dos parâmetros do modelo RM1 para o átomo de Selênio.

PARÂMETRO	DESCRIÇÃO	VALOR
$U_{ss}(eV)$	Integral de um elétron e um centro envolvendo orbitais s	-41,882974
$U_{pp}(eV)$	Integral de um elétron e um centro envolvendo orbitais p	-37,679500
$\zeta_s(\text{bohr}^{-1})$	Expoente do orbital atômico s tipo Slater	2,261766
$\zeta_p(\text{bohr}^{-1})$	Expoente do orbital atômico p tipo Slater	2,030956
$\beta_s(eV)$	Parâmetro da integral de ressonância envolvendo orbitais s	-3,870070
$\beta_p(eV)$	Parâmetro da integral de ressonância envolvendo orbitais p	-6,249000
$G_{ss}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais s - s	7,466774
$G_{sp}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais s - p	4,276471
$G_{pp}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais p - p	7,056312
$G_{p2}(eV)$	Integral de repulsão de dois elétrons e um centro para os orbitais p - p'	7,152687
$H_{sp}(eV)$	Integral de troca de dois elétrons e um centro para os orbitais s - p	1,486028
$\alpha (\text{\AA}^{-1})$	Parâmetro de repulsão <i>caroço-caroço</i> para o átomo	2,560205
a_1	Intensidade da função Gaussiana 1	0,060375
$b_1(\text{\AA}^{-2})$	Largura da função Gaussiana 1	5,230395
$c_1(\text{\AA})$	Posição da função Gaussiana 1	1,754632
a_2	Intensidade da função Gaussiana 2	0,009474
$b_2(\text{\AA}^{-2})$	Largura da função Gaussiana 2	5,240474
$c_2(\text{\AA})$	Posição da função Gaussiana 2	2,275835

A Tab. 3.7 apresenta os erros médios absolutos para esta parametrização, comparando-os aos métodos mais recentes disponíveis no software MOPAC. Pode-se detectar claramente que, em termos de entalpias de reação, o método RM1 aqui apresentado possui erros 20% menores que o AM1 e 52% menores que o PM3, ambos métodos NDDO baseados em parâmetros monoatômicos. Já os métodos PM6 e PM7, que possuem parâmetros diatômicos em seu formalismo, possuem erros menores, embora, curiosamente, o método PM7 possua um erro médio para as entalpias de formação maior que o do método PM6.

Por outro lado, parece que, para o selênio, os parâmetros diatômicos do PM6 e PM7 só melhoram a entalpia de formação porque nossa parametrização para o RM1 apresenta exatidões equivalentes ou superiores a todos os outros métodos para todas as demais propriedades: momentos de dipolo, potenciais de ionização, distâncias e ângulos.

Tabela 3.7 Erros médios absolutos das propriedades utilizadas na parametrização do modelo RM1 para o átomo de selênio em comparação com os modelos AM1, PM3, PM6 e PM7.

	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Espécies
Entalpia de Formação (kcal.mol ⁻¹)	19,77	24,62	41,12	6,12	15,22	22
Momento de dipolo (D)	0,46	0,52	0,63	0,48	0,79	17
Potencial de ionização (eV)	0,40	0,77	0,63	0,40	0,41	95
Distância (Å)	0,043	0,043	0,043	0,044	0,073	1214
Ângulo (Graus)	5,70	6,57	8,63	5,81	6,48	1943

As Figs 3.33 a 3.37 apresentam os dados da Tab. 3.7 em formato gráfico, onde, mais uma vez, pode-se notar que o método RM1 é o método com parâmetros monoatômicos mais exato para o cálculo das entalpias de formação. Da mesma forma, pode-se ver nestas figuras que o método RM1 possui exatidões equivalentes ou superiores aos outros métodos para todas as outras propriedades.

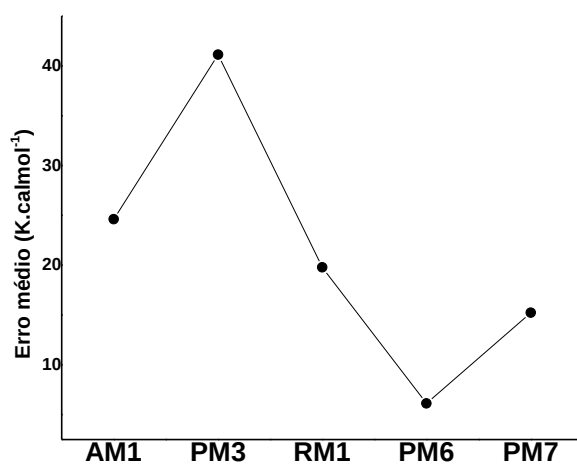


Figura 3.33 Erro médio absoluto para as 22 moléculas referente à entalpia de formação, calculadas com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6, PM7. A linha que conecta os pontos está presente apenas para evidenciar a tendência.

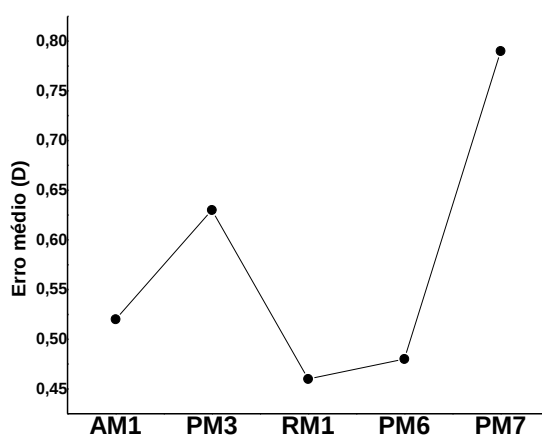


Figura 3.34 Erro médio absoluto para as 17 moléculas referente ao momento de dipolo, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6, PM7. A linha que conecta os pontos está presente apenas para evidenciar a tendência.

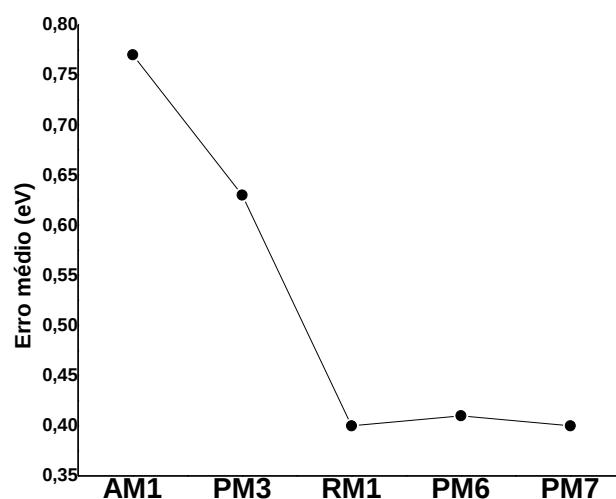


Figura 3.35 Erro médio absoluto para as 96 moléculas referente ao potencial de ionização, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6, PM7. A linha que conecta os pontos está presente apenas para evidenciar a tendência.

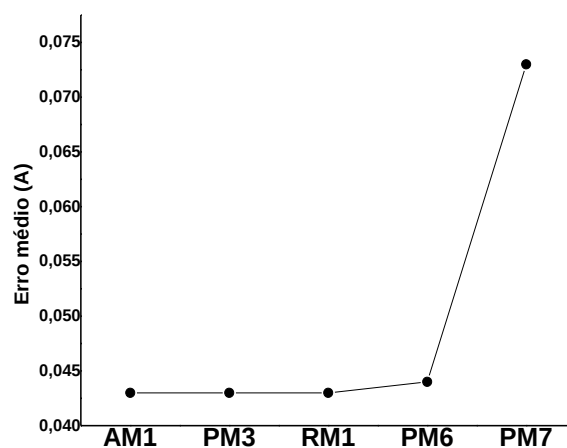


Figura 3.36 Erro médio absoluto para as 1214 distâncias, calculadas com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6, PM7. A linha que conecta os pontos está presente apenas para evidenciar a tendência.

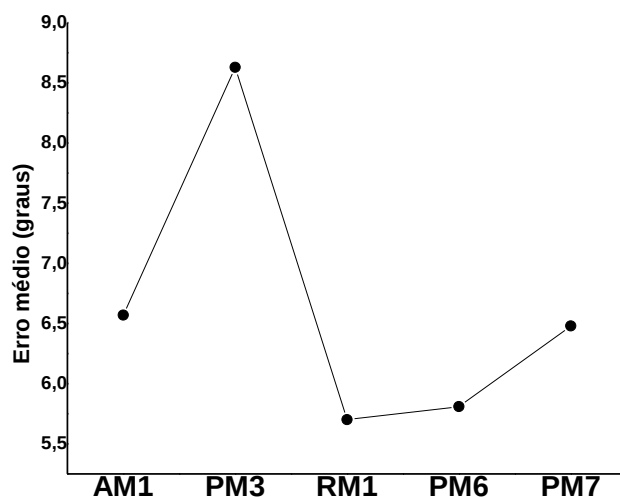


Figura 3.37 Erro médio absoluto para os 1943 ângulos, calculados com os modelos AM1, PM3, RM1, PM6, PM7. A linha que conecta os pontos está presente apenas para evidenciar a tendência.

Abaixo, apresentamos os gráficos de regressão linear, onde comparamos a predição dos valores experimentais das propriedades: entalpia de formação, momento de dipolo, potencial de ionização e distâncias, ângulos e diedros de ligação, para estruturas com o selênio, pelos modelos RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7.

Gráficos de regressão linear para as distâncias de ligação

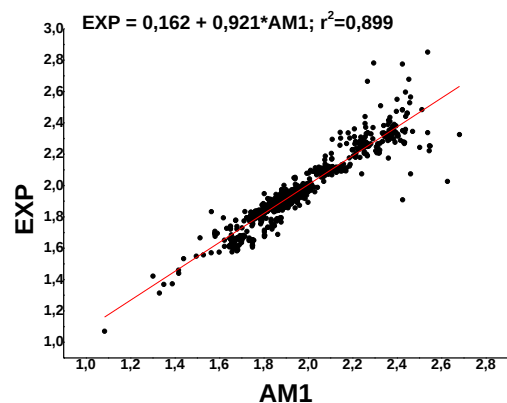


Figura 3.38 Regressão linear entre as distâncias experimentais e as calculadas com o modelo AM1 para compostos de selênio.

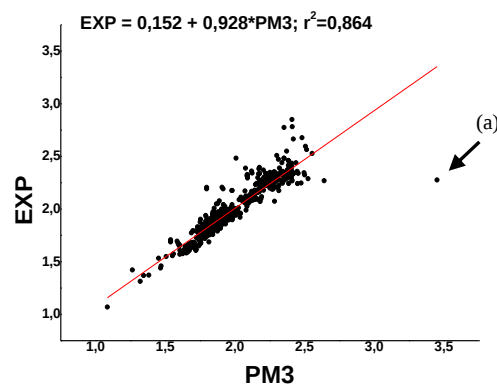


Figura 3.39 Regressão linear entre as distâncias experimentais e as calculadas com o modelo PM3 para compostos de selênio.

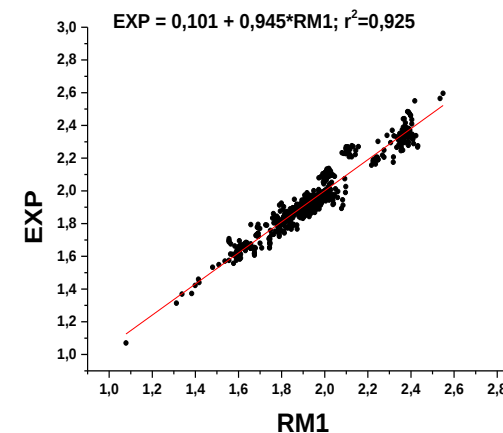


Figura 3.40 Regressão linear entre as distâncias experimentais e as calculadas com o modelo RM1 para compostos de selênio.

Gráficos de regressão linear para as distâncias de ligação

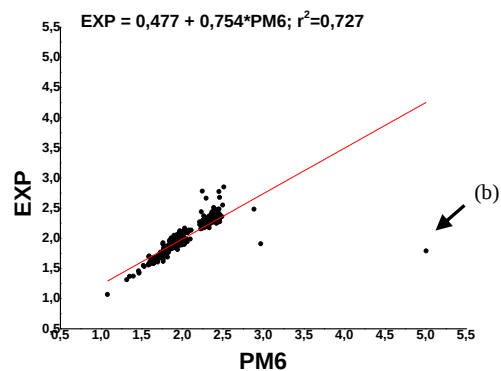


Figura 3.41 Regressão linear entre as distâncias experimentais e as calculadas com o modelo PM6 para compostos de selênio.

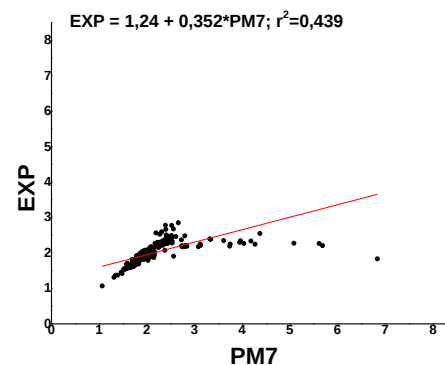


Figura3.42 Regressão linear entre as distâncias experimentais e as calculadas com o modelo PM7 para compostos de selênio.

Na tabela 3.7 podemos observar que os modelos AM1, PM3, RM1 e PM6 apresentaram uma equivalência em relação ao valor do erro médio absoluto em relação à distância de ligação. Entretanto, se observarmos os gráficos de regressão linear para estes modelos para esta propriedade, verificaremos que o modelo RM1 foi o que apresentou melhores resultados na forma de uma melhor correlação quando comparado aos outros modelos.

Em relação ao modelo AM1, observamos na figura 3.38 muitos pontos fora da reta no intervalo de 2,3 Å a 2,7 Å. Já no gráfico de regressão linear do modelo PM3 representado pela figura 3.37 verificamos a presença de um ponto (a) atípico que se refere à distância Se-P na molécula de código CSD QITVOE, de fórmula molecular $C_{12}P_2H_{10}Se_4$ – figura 3.43, assim como, aparecem também vários outros pontos fora da reta no intervalo de 1,7 a 2,7 Å. Já quando analisamos o modelo diatômico PM6, percebemos que este também apresenta vários pontos fora da reta, desta vez no intervalo de 2,2 Å a 3,0 Å, bem como também um ponto atípico (b) que se refere à distância Se-N na molécula de código CSD TAYTES e de fórmula molecular $C_7NH_8SeO_2$ – figura 3.44. O pior modelo para a distância de ligação foi então o PM7, apresentando para o quadrado do coeficiente de correlação um valor igual a 0,439, bem distante do ideal 1 devido a um forte desequilíbrio nas distâncias quando estas são maiores que 3 Å.

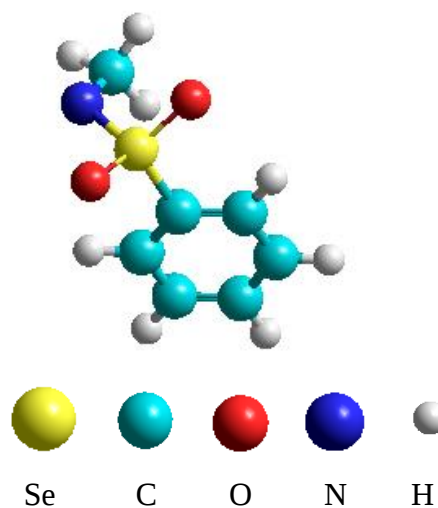
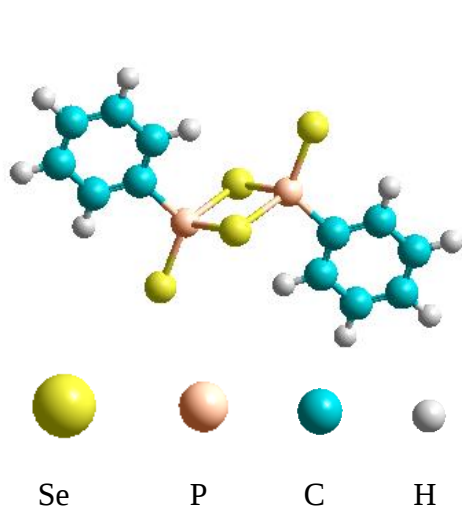


Figura 3.43 Estrutura da molécula $C_{12}P_2H_{10}Se_4$ **Figura 3.44** Estrutura da molécula $C_7NH_8SeO_2$

Gráficos de regressão linear para os ângulos

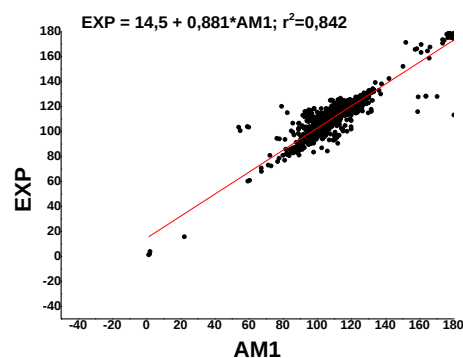


Figura 3.45 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de selênio.

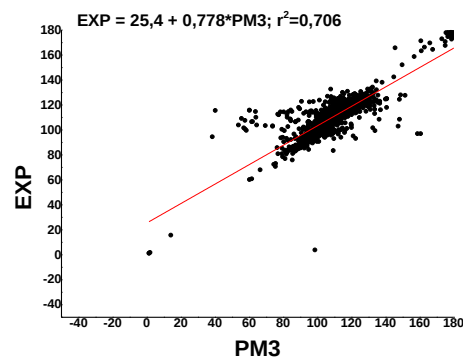


Figura 3.46 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de selênio.

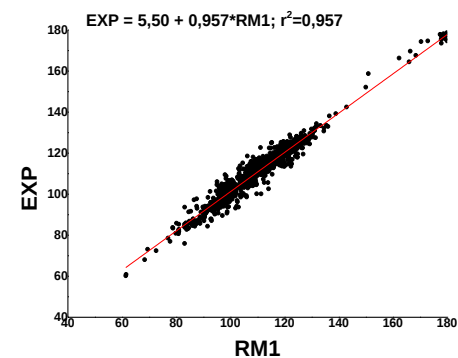


Figura 3.47 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de selênio.

Gráficos de regressão linear para os ângulos

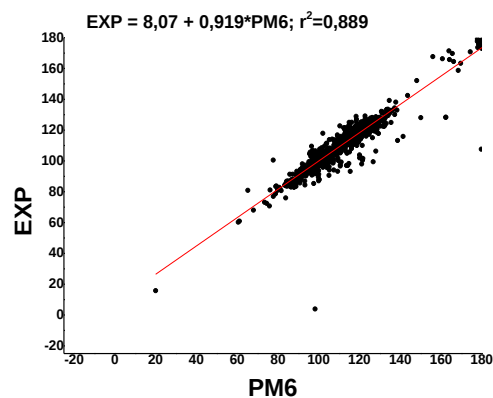


Figura 3.48 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de selênio.

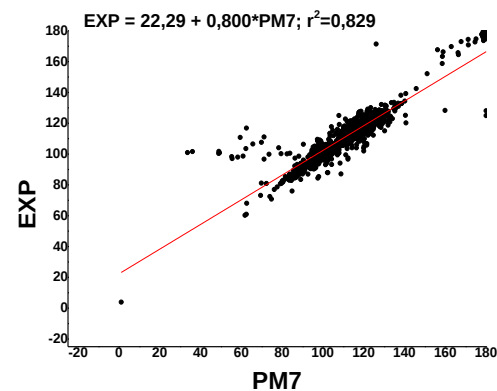


Figura 3.49 Regressão linear entre os ângulos experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de selênio.

Gráficos de regressão linear para os diedros

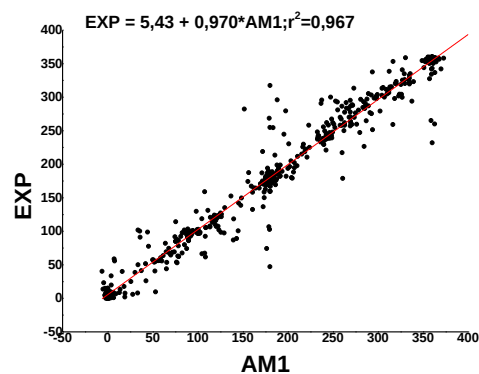


Figura 3.50 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo AM1 para compostos de selênio.

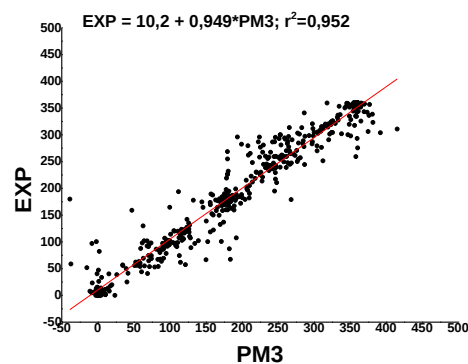


Figura 3.51 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM3 para compostos de selênio.

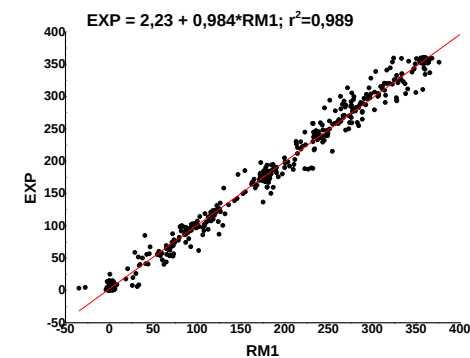


Figura 3.52 Regressão linear entre diedros experimentais e os calculados com o modelo RM1 para compostos de selênio.

Gráficos de regressão linear para os diedros

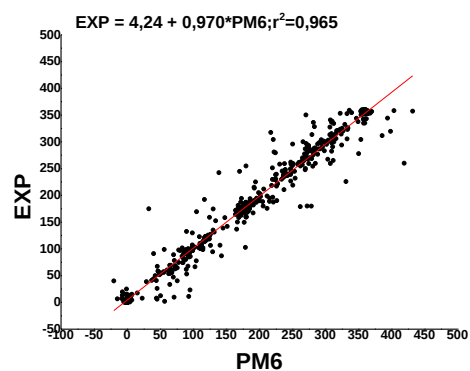


Figura 3.53 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM6 para compostos de selênio.

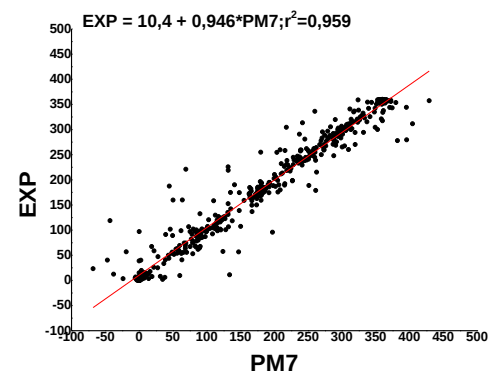


Figura 3.54 Regressão linear entre os diedros experimentais e os calculados com o modelo PM7 para compostos de selênio.

Como apresentado na tabela 3.7, o modelo RM1 para os ângulos foi o que melhor descreveu esta propriedade, o que corrobora com gráfico de regressão linear representado pela figura 3.52 onde observamos que, dentre todos os modelos, foi que apresentou o valor mais próximo de 1 para o quadrado do coeficiente de correlação e maior ausência de pontos atípicos.

Em relação ao diedro o modelo RM1 foi o que também apresentou os melhores resultados com o quadrado do coeficiente de correlação igual a 0,989 diferentemente dos outros modelos que apresentaram uma grande quantidade de pontos totalmente atípicos.

Em decorrência, o modelo RM1 para o selênio se revelou com o mais bem parametrizado de todos, quando se avalia o conjunto de suas predições em comparação a todos os outros métodos.

4. Conclusões e Perspectivas

4.1- Conclusões

Com este trabalho, foi possível confirmar que a metodologia de amostragem para definir o conjunto de moléculas de parametrização empregando a análise de disjunção hierárquica DIANA atua de forma eficiente e que serviu para buscar e garantir que o método RM1 possuísse uma exatidão para geometria comparável, ou melhor, que a dos modelos AM1, PM3, PM6 para o átomo de selênio.

Observamos, mais uma vez, com a parametrização do boro que a utilização da alocação ótima para definir o menor número de estruturas foi a escolha mais eficiente. Ou seja, o mínimo de estruturas definidas pela alocação ótima representou bem o conjunto universo.

O modelo RM1 parametrizado para o átomo de boro neste trabalho conseguiu erros médios menores que o AM1 e PM3 para a maioria das propriedades. Apesar da complexidade de ligações exibida pelo boro obtivemos êxito na parametrização.

Verificamos também que, apesar de o erro médio absoluto da entalpia de formação em relação ao boro para o RM1 ser de $11.63 \text{ kcal.mol}^{-1}$, este modelo, apresentou menos pontos atípicos, com menores desvios da reta: um comportamento diferente do que ocorre com os modelos AM1 e PM3. Então, podemos afirmar que conseguimos um modelo melhor parametrizado para o boro, com dezoito parâmetros unicamente atômicos - bastando apenas, para isso, ter aperfeiçoado as etapas da parametrização.

Em comparação, o PM6 é um modelo que possui 33 parâmetros para o átomo de boro, dos quais 22 são parâmetros diatômicos; já o PM7 possui 33 parâmetros para o átomo de boro, dos quais 18 são parâmetros diatômicos, o que inclusive explica seu menor erro no cálculo das propriedades envolvidas para os dois modelos.

Quanto à parametrização do selênio, enriquecemos o conjunto de estruturas de moléculas contendo selênio com mais 102 moléculas com dados de geometrias. Com isto, o conjunto de parametrização do selênio passou a ser de 784 estruturas, sendo 649 com dados geométricos.

A partir de agora, com estes dois novos átomos parametrizados, abre-se bastante a capacidade do RM1 de calcular moléculas - agora com parâmetros para 12 átomos do bloco p e para os 12 lantanídeos, do La ao Lu, para um total de 27 átomos.

4.2- Perspectivas

O sucesso na técnica de parametrização motiva a pesquisa por maneiras ainda mais eficazes de definir conjuntos de parametrização e também no sentido de desenvolver técnicas mais perfeitas do que as usadas no PARAM.

Com a conclusão desta dissertação, tendo obtido os parâmetros para o átomo de boro neste trabalho, assim como a confirmação dos parâmetros finais para o selênio, buscaremos garantir a implementação dos mesmos nos softwares *Hyperchem*, MOPAC, AMBER, etc, para ampla divulgação.

Prosseguir com a parametrização do RM1 para outros átomos, ampliando assim a capacidade do modelo para calcular moléculas.

A maior perspectiva é realmente a ampliação do uso do método RM1 pela comunidade científica internacional em seus problemas de interesse – o que definirá a real utilidade do mesmo.

Referências

1. Ohno, K., Kamiya, N., Asakawa, N., Inoue, Y. & Sakurai, M. Application of an integrated MOZYME+DFT method to pKa calculations for proteins. *Chem. Phys. Lett.* **341**, 387–392 (2001).
2. Ren, L. *et al.* Molecular mechanism of spectral tuning in sensory rhodopsin II. *Biochemistry* **40**, 13906–13914 (2001).
3. Titmuss, S. J., Cummins, P. L., Rendell, A. P., Bliznyuk, A. a. & Gready, J. E. Comparison of linear-scaling semiempirical methods and combined quantum mechanical/molecular mechanical methods for enzymic reactions. II. An energy decomposition analysis. *J. Comput. Chem.* **23**, 1314–1322 (2002).
4. Xu, H.-J. *et al.* Porphyrin-templated synthetic G-quartet (PorphySQ): a second prototype of G-quartet-based G-quadruplex ligand. *Org. Biomol. Chem.* **10**, 5212–8 (2012).
5. Linnanto, J. M. & Korppi-Tommola, J. E. I. Semiempirical PM5 molecular orbital study on chlorophylls and bacteriochlorophylls: comparison of semiempirical, ab initio, and density functional results. *J. Comput. Chem.* **25**, 123–38 (2004).
6. Bliznyuk, A. A., Rendell, A. P., Allen, T. W. & Chung, S. The Potassium Ion Channel: Comparison of Linear Scaling Semiempirical and Molecular Mechanics Representations of the Electrostatic Potential. *Computer (Long. Beach. Calif.)*. 12674–12679 (2001).
7. Dewar, M. J. S., Zoebisch, E. G., Healy, E. F. & Stewart, J. J. P. Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model. *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 3902–3909 (1985).
8. Stewart, J. J. P. *Comput Chem.* 209 (1989).
9. Rocha, G B; Freire R O; Simas, A M; Stewart, J. J. P. RM1: A Reparameterization of AM1 for H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, and I. *J. Comput. Chem.* **31**, 1101–1111(2006).
10. Stewart, J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. *J. Mol. Model.* **13**, 1173–1213 (2007).
11. Stewart, J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. *J. Mol. Model.* **19**, 1–32 (2013).
12. Dannenberg, J. J. Hydrogen bonds: a comparison of semiempirical and ab initio treatments. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **401**, 279–286 (1997).
13. openmopac.net
14. [Http://www.hyper.com](http://www.hyper.com)
15. [Http://ambermd.org](http://ambermd.org)

16. [Http://congener.sourceforge.net](http://congener.sourceforge.net)
17. [Http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/pcgamess_home.html](http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/pcgamess_home.html)
18. Puzyn, T., Suzuki, N., Haranczyk, M. & Rak, J. Calculation of quantum-mechanical descriptors for QSPR at the DFT level: Is it necessary? *J. Chem. Inf. Model.* **48**, 1174–1180 (2008).
19. Piliszek S., W.-P. A. J. F. J. N-octanol-water partition coefficients (log KOW) of 399 congeners of polychlorinated azoxybenzenes (PCAOBs) determined by QSPR- and ANN-based approach. *J. Environ. Sci. Heal. - Part A Toxic/Hazardous Subst. Environ. Eng.* **46**, 1748–1762 (2011).
20. Siwek, A., Wujec, M., Stefańska, J. & Paneth, P. Antimicrobial Properties of 4-Aryl-3-(2-methyl-furan-3-yl)- Δ^2 -1,2,4-triazoline-5-thiones. *Phosphorus. Sulfur. Silicon Relat. Elem.* **184**, 3149–3159 (2009).
21. Noorbatches, I. A.; Hamzah, F., Salleh, H. M; and Idid, S. Z. Prediction of anticancer activity of aliphatic nitrosoureas using quantum chemical quantitative structure activity relation (QSAR) methods. 18863–18868 (2011). doi:10.5897/AJB11.2766
22. Silva, P. *et al.* European Journal of Medicinal Chemistry Thiosemicarbazones as *Aedes aegypti* larvicidal. **100**, 162–175 (2015).
23. Jan, R. Advanced Corrections of Hydrogen Bonding and Dispersion for Semiempirical Quantum Mechanical Methods. 141–151 (2012).
24. Freire, R. O. RM1 Model for the Prediction of Geometries of Complexes of the Trications of Eu, Gd, and Tb. (2014).
25. Dutra, D. L., Rocha, G. B., Simas, A. M., Freire, R. O. & Filho, M. A. M. Semiempirical Quantum Chemistry Model for the Lanthanides : RM1 (Recife Model 1) Parameters for Dysprosium , Holmium and Erbium. **9**, (2014).
26. Freire, R. O. RSC Advances. **1**, 12403–12408 (2015).
27. Dutra, J. D. L., Filho, M. A. M., Rocha, G. B. & Simas, A. M. RM1 Semiempirical Quantum Chemistry : Parameters for Trivalent Lanthanum , Cerium and Praseodymium. 1–17 (2015). doi:10.1371/journal.pone.0124372
28. Simas, A. M. RSC Advances quantum chemical calculation of lanthanide complexes 3. 16747–16755 (2013). doi:10.1039/c3ra41406j
29. Cowie, D. B., Cohen, G. N., Bolton, E. T. & De Robichon-Szulmajster, H. Amino acid analog incorporation into bacterial proteins. *Biochim. Biophys. Acta* **34**, 39–46 (1959).
30. Rousseeuw, P J; Kaufman, L. *diana02*. (Finding Groups in Data: An Introduction to Cluster Analysis, 1990).
31. MacNaughton-Smith, P., Williams, W. T., Dale, M. B. & Mockett, L. G. Dissimilarity Analysis: a new Technique of Hierarchical Sub-division. *Nature* **202**, 1034–1035 (1964).
32. Helvacı, C. Borates. *Encycl. Geol.* 2003 (2004).
33. [Http://www.quimilab.com.br/guiadoselementos/boro.htm](http://www.quimilab.com.br/guiadoselementos/boro.htm)

34. [Http://www.hcstarck.com/boron_amorphous](http://www.hcstarck.com/boron_amorphous)
35. [Http://www.nuctec.com.br/educacional/funcionam.html](http://www.nuctec.com.br/educacional/funcionam.html)
36. Peixoto, E. M. A. A seção 'Elemento químico' traz informações científicas e tecnológicas sobre as diferentes formas sob as quais os elementos químicos se manifestam na natureza e sua importância na história da humanidade, destacando seu papel no contexto de nosso país. *QUÍMICA Nov. NA Esc.* (1996).
37. Horrocks, R. ref-materiais retardantes. (2006).
38. Portantiolo, C. S., Portantiolo, C. S. & Farias, F. D. S. Ficha técnica. 12–13 (2013).
39. Hertz, V. M., Bolte, M., Lerner, H. & Wagner, M. Angewandte Boron-Containing Polycyclic Aromatic Hydrocarbons : Facile Synthesis of Stable , Redox-Active Luminophores **. 8800–8804 (2015). doi:10.1002/anie.201502977
40. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>. (2015).
41. Allen, F. H. research papers The Cambridge Structural Database : a quarter of a million crystal structures and rising research papers. 380–388 (2002).
42. <http://app.webofknowledge.com>.
43. Jr, R. D. N. Selected Values of Electric Dipole Moments for Molecules in the Gas Phase. (1967).
44. Wesson, L. . *Tables of Electric Dipole Moments*.
45. Thomas, G. . M. J. D. R. *Dipole Moments in Inorganic Chemistry*. (1971).
46. McClellan, A. L. *Tables of Experimental dipole moments*. (1963).
47. [Http://openmopac.net/param_manual](http://openmopac.net/param_manual)
48. Compunting., R. Development Core Team. R: A Language and Environment for Statistical.
49. Thompson, S. K. *Sampling*. (2012).

Apêndice A: BORO

Tabela 1 – Entalpia de formação experimental (em ΔH_f em kcal.mol⁻¹) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC2H6OF3	(CH3)2O-BF3	-328.20	3.61	89.85	2.85	-6.48	-4.37	a
BC2H9S	(CH3)2S-BH3	-10.60	-2.46	67.81	-9.18	-6.24	-10.58	b
BC4H10OF3	(CH3CH2)2O-BF3	-343.80	6.87	83.68	-14.40	-6.64	-4.55	b
BC4H13S	(CH3CH2)2S-BH3	-30.50	9.81	81.69	2.13	1.60	-2.40	b
B3O3F3	Trifluoroboroxine	-565.30	12.85	198.70	0.71	-4.16	-4.29	c
BBr2Cl	Dibromochloroborane	-65.00	7.31	48.75	9.98	5.04	-0.22	c
BBr2F	Dibromofluoroborane	-123.00	7.28	70.74	12.57	5.17	0.59	c
B2F4	DiboronTetrafluoride	-342.20	-20.37	100.34	-8.39	3.47	-4.23	c
B2OF4	Bis (difluoroboryl)oxide	-453.65	-3.60	141.06	-11.49	-12.08	-12.27	c
BBrCl2	Bromodichloroborane	-80.50	4.92	39.34	6.26	6.25	2.05	c
BClF2	Chlodiflouroborane	-211.60	-2.90	61.30	-2.77	-1.69	-1.59	c
B2Cl4	B2Cl4	-117.10	-11.64	41.99	2.08	9.64	7.49	a
B2O3	B2O3	-201.50	4.33	138.38	-9.31	-2.73	-16.60	a
B2H2O3	B2O3H2	-200.40	27.30	140.84	24.96	45.72	44.06	d
B3N3H3Cl3	B3N3Cl3H3	-237.70	-23.78	55.01	12.47	-2.11	-1.91	a
B3H3O6	B3O3(OH)3	-543.60	37.11	185.29	15.96	26.09	31.26	a
B3Cl3O3	B3O3Cl3	-390.10	8.49	145.01	4.26	-8.31	-5.96	a
B3O3F3	B3O3F3	-567.70	15.25	201.10	3.11	-1.76	-1.89	a
B3H2ClO3	B3O3H2Cl	-313.80	-7.32	146.06	-11.72	-14.44	-9.90	a
B3H2O3F	B3O3H2F	-382.60	6.06	173.38	-3.46	-2.63	1.43	a
B3H3O3	B3O3H3	-288.80	1.47	160.55	-6.41	-3.51	1.99	a
B3HCl2O3	B3O3HCl2	-338.70	-13.77	132.00	-17.05	-24.89	-21.39	a

Tabela 1 – Entalpia de formação experimental (em ΔH_f em kcal.mol⁻¹) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B3HO3F2	B3O3HF2	-475.80	10.86	132.00	-0.16	-1.83	0.36	a
BF	BF	-475.80	19.56	1.24	-23.87	-3.99	34.88	a
BCH3O	BH3CO	-29.20	14.27	64.64	-20.36	-2.96	-15.77	a
BN	BN	-26.60	3.95	55.42	17.66	11.11	-49.83	e
BO2	BO2.	114.00	14.34	77.10	-13.46	12.61	0.26	a
BClO	BOCl	-71.70	-24.57	36.29	-20.86	-15.97	-17.66	a
BH	Borane(1)	-75.00	-18.83	-6.85	-9.70	-6.49	-4.85	a
BH2	Borane(2)	107.40	-14.16	63.37	40.26	31.18	29.72	f
BH3	Borane	45.70	-21.15	54.80	18.39	8.86	-0.36	a
B3N3H6	Borazole	23.90	-12.71	79.27	3.44	0.31	0.57	a
BBr	Boronbromide	-122.20	-1.74	-4.13	-14.36	-10.04	6.89	a
BCl	Boronchloride	56.90	2.97	-11.90	-12.65	-5.11	17.57	a
B2	Borondimer	35.70	-8.17	36.57	23.52	29.34	-42.03	a
BHO2	Boron oxide hydroxide	198.40	8.74	70.15	-1.87	6.99	2.19	c
BO	Boron oxide	-134.00	-8.76	45.11	-13.83	-16.47	12.11	a
BS	Boronsulfide	6.00	9.96	27.31	10.96	7.80	17.70	g
BBr3	Borontribromide	58.10	8.98	57.17	21.65	-0.67	-4.61	a
BCl3	Borontrichloride	-49.10	2.55	29.70	6.83	4.30	2.95	a
BF3	Borontrifluoride	-96.40	-2.42	79.45	-4.92	1.70	0.28	a
BI3	Borontriiodide	-271.60	11.56	62.28	50.91	1.35	-6.95	a
B	Boron, 2D(g) - 2s(1)2p(2)	17.00	-28.28	92.60	15.22	2.21	-32.48	c
B	Boron, 2P(u) - 2s(2)2p(1)	136.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	c
B	Boron, 4P(g) - 2s(1)2p(2)	0.00	-2.95	82.06	29.42	-1.83	23.42	c

Tabela 1 – Entalpia de formação experimental (em ΔH_f em kcal.mol⁻¹) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B	Boron, atom	135.70	-0.00	0.00	-0.00	-0.00	-0.15	h
B	Boron, cation	229.74	-3.96	28.68	75.35	39.27	-1.14	c
B10H14	Decaborane(14)	7.10	-0.25	465.70	6.13	-14.06	-1.67	f
B2H4	Diborane(4)	45.70	14.62	153.38	60.88	76.48	-11.42	i
B2H6	Diborane	8.50	8.39	124.84	3.25	5.59	4.14	b
BHBr2	Dibromoborane (1)	-25.00	-8.04	54.91	15.66	-0.65	-3.00	c
BHCl2	Dichloroborane (1)	-59.30	-10.29	35.98	7.23	4.04	5.45	c
BCl2F	Dichlorofluoroborane	-154.00	-0.54	47.93	4.66	0.99	0.43	c
BC2H7O2	Dimethoxyborane	-138.40	-0.84	55.53	-4.10	0.60	6.81	a
BC2H6ClO2	Dimethoxychloroborane	-178.20	9.22	58.24	7.34	2.65	5.17	b
BHOF2	F2BOH	-260.70	3.59	71.54	-5.76	1.98	2.11	a
B6H10	Hexaborane(10)	22.60	-19.29	302.21	-6.14	3.35	1.41	b
B2O2	O-B-B-O	-109.00	-35.78	86.13	-26.33	-0.43	-4.03	j
B5H11	Pentaborane(11)	24.30	-3.52	274.87	-13.95	-4.76	-6.19	f
B5H9	Pentaborane(9)	17.50	-13.18	272.26	-1.34	12.74	7.20	b
B2S2	S-B-B-S	36.10	-7.39	17.88	-45.07	5.94	3.58	b
B4H10	Tetraborane(10)	15.80	4.04	253.00	-21.41	-5.42	-10.20	b
BC12H27	Tri-isobutylborane	-67.00	-17.41	25.77	13.19	-5.65	-2.31	k
BC9H21	Tri-isopropylborane	-60.10	-19.81	18.18	9.17	-0.12	-1.36	k
BC21H45	Tri-n-heptylborane	-108.70	-25.92	4.09	-12.14	-7.52	-10.74	k
BC18H39	Tri-n-hexylborane	-94.40	-25.22	4.60	-10.14	-6.81	-9.71	k
BC24H51	Tri-n-octylborane	-123.00	-26.60	3.69	-14.15	-8.23	-11.76	k
BC9H21S3	Tri-n-propylthioborane	-79.50	0.67	31.61	-0.00	-0.46	3.16	k

Tabela 1 – Entalpia de formação experimental (em ΔH_f em kcal.mol⁻¹) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC12H27	Tributylborane	-68.60	-21.61	11.04	-3.45	-1.48	-3.78	k
BC6H15O3	Triethoxyborane	-239.50	10.09	66.93	10.05	-0.20	5.32	a
BC6H15	Triethylborane	-37.70	-22.36	7.55	-1.40	-2.88	-3.95	a
BC3H9O3	Trimethoxyborane	-214.90	4.07	59.38	1.81	0.76	4.75	a
BC3NH9F3	Trimethylamine-Borontrifluoride	-304.40	6.63	73.68	-19.54	-0.20	3.07	b
BC6NH18	Trimethylborane-Trimethylamine	-52.60	-11.08	21.04	-3.81	2.28	-3.56	a
BC3NH12	Trimethylborane-Ammoniaadduct	-54.10	-23.88	2.06	-12.47	3.12	0.90	a
BC6PH18	Trimethylborane-Trimethylphosphine	-68.30	-11.76	15.28	9.43	13.25	18.98	b
BC3PH9F3	Trimethylphosphine-Borontrifluoride	-312.60	18.62	67.00	-4.28	-3.90	2.74	b
BC18H15	Triphenylborane	31.10	20.74	50.65	44.48	33.28	26.14	k
BC18H15S3	Triphenylthioborane	46.30	12.50	41.67	11.20	-4.36	-9.08	k
BC9H21	Tripropylborane	-56.60	-18.82	13.26	2.01	1.62	-0.07	l

Código	Referências para a Entalpia de Formação
a	M. D. Harmony, V. W. Laurie, R. L. Kuczkowsky, R. H. Schwendeman, D. A. Ramsay, F. J. Lovas, W. J. Lafferty, A. G. Maki, J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 3 (1979).
b	D. D. Wagman, W. H. Evans, V. B. Parker, R. H. Schumm, I. Halow, S. M. Bailey, K. L. Churney, R. L. Nuttall, J. Phys. Chem. Ref. Data Suppl. 11, 2 (1982).
c	NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database, No. 69; W. G. Mallard, P. J. Linstrom, Eds., National Institute of Standards and Technology, Gaithersberg, http://webbook.nist.gov/chemistry .
d	L. Barton, S. K. Watson, R. F. Porter, J. Phys. Chem., 69, 3160 (1965).
e	M. W. Chase, C. A. Davies, J. R. Downey, D. R. Frurip, R. A. McDonald, A. N. Syverud, JANAF Thermochemical Tables, Third Edition, J. Phys. Chem. Ref. Data 14, Suppl. 1 (1985).
f	M. F. Guest, J. B. Pedley, M. Horn, J. Chem. Thermodyn., 1, 345 (1969).
g	I. Barin, O. Knacke, O. Kubaschewski, "Thermochemical Properties of Inorganic Compounds", Springer-Verlag, Berlin, 1977.
h	"CRC Handbook of Chemistry and Physics," 60th Edition, R. C. Weast, (Ed.), CRC Press, Boca Raton, FL, 1980.
i	L. A. Curtiss, J. A. Pople, J. Chem. Phys., 90, 4314 (1989).
j	R. Thomson, F. W. Dalby, Can J. Phys., 47, 1155 (1969)
k	J. O. Cox, G. Pilcher, "Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds," Academic Press, New York, N.Y., 1970.
l	G. M. Kolyakova, I. B. Rabinovich, E. N Zoria, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 209, 616 (1973).

Tabela 2 – Momento de dipolo experimental (em Debye) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BF	BF	0.50	0.05	0,32	0.12	-0.12	2.00	a
BCH3O	BH3CO	1.80	-1.24	0,39	0.18	0.54	0.01	b
BH	Borane(1)	1.27	0.07	0,75	-0.97	-0.69	0.32	c
B3N3H6	Borazole	0.67	-0.67	0,67	-0.67	-0.67	-0.67	a
BCl3	Borontrichloride	0.61	-0.61	0,61	-0.61	-0.61	-0.61	a
B10H14	Decaborane(14)	3.34	0.15	0,37	3.04	1.13	1.90	a
BC2H6ClO2	Dimethoxychloroborane	1.71	3.06	3,2	0.84	3.25	2.89	a
BHOF2	F2BOH	1.48	0.19	0,51	0.72	0.62	0.52	b
B4H10	Tetraborane(10)	0.56	1.03	0,42	0.58	0.71	0.39	e
BCH3F2	Methyldifluoroborane	1.66	-0.27	0,33	0.38	0.58	0.31	f
BC2H6F	Dimethyl fluoro borane	1.32	-0.21	0,15	0.14	0.34	0.25	f

Código	Referências para o momento de dipolo
a	A. L. McClellan, "Tables of Experimental Dipole Moments," Vol 2, Rahara Enterprises, El Cerrito, (1974).
b	M. W. P. Strandberg, C. S. Pearsall, M. T. Weiss, J. Chem. Phys., 17, 429 (1949).
c	R. Thomson, F. W. Dalby, Can J. Phys., 47, 1155 (1969).
e	J. R. Weaver, C. W. Hertsch, R. W. Parry, J. Chem. Phys, 30, 1075 (1959).
f	Ralph D. Nelson Jr., David R. Lide and Arthur A. Maryott, "Selected Values of Electric Dipole Moments for Molecules in the Gas Phase, National Bureau of Standards.

Tabela 3 – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC4N2H13	Hydrazine,N,N-dimethyl-N'-dimethylboryl-	8.74	0.77	0.80	0.90	0.43	0.86	a
BC3H9S2	Boronicacid,methyldithio-,dimethyl ester	8.74	0.43	0.08	0.07	-0.25	-0.30	a
BC3H9O2	Boronic acid methyl-,dimethyl ester	10.40	0.19	0.26	0.44	-0.03	-0.20	a
B3C3N3H12	Borazine,1,3,5-trimethyl-	8.99	-0.16	0.33	0.56	0.26	0.40	a
BC2H7O2	Borane,dimethoxy-	9.70	0.94	1.03	1.15	0.83	0.67	a
BC3H9O	Boronicacid,dimethyl-,methyl ester	10.92	-0.18	0.01	0.47	-0.48	-0.39	a
BC2H6I	Borane,iododimethyl-	9.48	0.19	-0.10	0.47	-0.16	-0.41	a
BC2H6O2F	Fluorodimethoxyborane	10.92	-0.07	0.30	0.47	-0.07	-0.39	a
BC2H6F	Borane,fluorodimethyl-	11.25	-0.46	0.30	0.82	-0.23	-0.23	a
BIF2	Difluoroiodoborane	10.42	-0.11	0.02	-0.57	-0.05	-0.72	a
B3O3F3	Trifluoroboroxine	13.90	-0.65	0.30	0.26	-0.55	-1.63	a
BBr2Cl	Dibromochloroborane	10.79	0.34	-0.05	0.22	0.03	-0.19	a
BBr2F	Dibromofluoroborane	11.11	-0.43	-0.16	0.87	-0.27	-0.54	a
B2F4	DiboronTetrafluoride	12.23	-0.78	1.73	2.01	-0.54	-1.00	a
B2OF4	Bis (difluoroboryl)oxide	14.01	-0.63	0.51	1.15	-0.38	-1.05	a
BC6H14ClO2	Chloro-bis(n-propyloxy) borane	10.45	0.45	0.49	0.24	0.34	0.10	a
BBrCl2	Bromodichloroborane	11.13	0.23	-0.07	-0.67	0.01	-0.32	a
BBrClF	Bromochlorofluoroborane	11.46	-0.39	-0.06	-0.31	-0.26	-0.67	a
BIBrCl	Bromochlorofluoroborane	9.81	0.68	-0.11	-0.36	0.29	-0.02	a
BClF2	Chlodiflouroborane	13.00	-1.09	-0.04	-1.57	-1.01	-1.14	a
B2O3	B2O3	13.30	-1.03	-0.33	-0.16	-0.51	-1.34	a
B3N3H3Cl3	B3N3Cl3H3	10.55	0.49	0.23	-0.88	0.16	0.06	b
BCH3O	BH3CO	11.92	-1.68	-0.85	0.22	-0.17	-0.29	c
BBr3	Borontribromide	10.51	0.53	0.06	1.75	0.31	0.10	a
BCl3	Borontrichloride	11.62	0.27	0.00	-1.23	-0.11	0.20	d

Tabela 3 (continuação) – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BF3	Borontrifluoride	15.95	0.27	0.25	1.29	-0.69	-1.08	b
B10H14	Decaborane(14)	9.88	-0.15	0.11	1.98	0.34	0.67	d
B2H6	Diborane	11.89	-1.14	-0.89	0.10	-0.51	-0.77	b
B6H10	Hexaborane(10)	9.40	-1.57	-0.64	2.08	0.01	0.44	d
B5H11	Pentaborane(11)	9.40	-1.32	-0.57	0.87	-0.28	-0.16	d
B5H9	Pentaborane(9)	10.70	-2.06	-0.72	1.37	-0.63	-0.07	e
B4H10	Tetraborane(10)	10.52	-1.95	-1.12	0.50	-0.32	-0.44	e

Código	Referências para o Potencial de Ionização
a	NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database, No. 69; W. G. Mallard, P. J. Linstrom, Eds., National Institute of Standards and Technology, Gaithersberg, http://webbook.nist.gov/chemistry .
b	K. Siegbahn, D. A. Allison, J. H. Allison, Handbook of Spectroscopy, W. J. Robinson, Ed., CRC Press, Cleveland, Oh, (1974).
c	D. R. Lloyd, N. Lynaugh, Chem. Comm. 1545 (1970).
d	R. D. Levin, S. G. Lias, "Ionization Potentials and Appearance Potential Measurements," 1971-1981, Natl. Stand. Ref. Data Ser., Natl. Bur. Stand. 71, (1982), Cat. No. C13.48:71.
e	D. R. Lloyd, N. Lynaugh, P. J. Roberts, M. F. Guest, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1, 1382 (1975).

Tabela 4 – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC6N4H9	ABEMEZ	B-C	1.584	-0.038	-0.045	-0.051	-0.016	-0.016	a
		B-C	1.585	-0.039	-0.046	-0.052	-0.017	-0.016	
		C-B-C	109.637	1.645	1.444	0.905	-0.381	-1.222	
		N-B	1.596	0.074	0.026	0.107	0.011	0.036	
		C-N-B	109.623	-1.959	-1.794	-1.199	0.113	0.929	
		N-C-B	178.871	-0.247	-0.457	-2.094	1.090	1.235	
BC13H22BrO	ACACEN	B-O	1.618	0.343	0.021	0.079	0.034	-0.007	a
		B-C	1.604	-0.031	-0.018	-0.001	0.016	0.037	
		C-B-O	110.260	-0.401	0.139	-0.340	1.082	6.070	
		C-B	1.588	-0.019	-0.006	0.011	0.031	0.058	
		C-B-O	108.378	-6.456	-1.336	-4.578	-5.032	-3.226	
		C-B	1.599	-0.026	-0.012	0.003	0.023	0.047	
		C-B-O	107.972	-6.526	-4.640	-1.171	-5.421	-3.142	
B2C6H4O4	AGAFAP	B-O	1.386	0.036	0.088	0.024	0.038	0.056	a
		B-O	1.382	0.040	0.092	0.028	0.042	0.060	
		O-B-O	111.848	-0.971	-4.888	-1.228	-0.355	0.425	
		C-O-B	104.962	-0.364	1.074	0.751	-0.261	-1.976	
		C-O-B-O	2.059	-2.061	-2.066	-2.058	-2.060	-2.060	
		C-O-B	105.077	-0.477	0.956	0.639	-0.373	-2.088	
		C-O-B-O	358.172	1.829	1.827	1.827	1.828	1.829	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C56H40Br2	AVIHAP	Br-B	1.922	0.067	-0.048	-0.042	0.001	-0.007	a
		C-B	1.582	-0.035	-0.016	-0.805	-0.010	0.007	
		C-B-Br	120.496	-1.442	-0.598	-0.026	-2.343	1.994	
		B-C	1.589	-0.025	-0.005	3.477	0.010	0.029	
		B-C-B	103.761	1.462	1.783	-20.198	-13.413	-6.655	
		B-C-B-Br	70.992	0.715	3.271	-0.132	-5.317	11.896	
		Br-B	1.909	0.058	-0.066	-2.353	-0.003	-0.021	
		Br-B-C	123.299	-0.291	0.871	-8.289	-2.760	3.120	
		Br-B-C-B	82.096	-9.189	-8.197	-0.210	-16.132	-11.624	
BC48NH51Br	AVIJAR	B-Br	2.071	-0.001	-0.002	-0.210	-0.064	-0.065	a
		C-B	1.634	-0.040	-0.053	-0.036	-0.024	0.004	
		Br-C-B	106.749	-0.756	-0.462	0.171	2.274	0.152	
		C-B	1.637	-0.039	-0.053	-0.027	-0.022	0.006	
		Br-C-B	105.363	0.880	1.163	1.806	2.941	1.803	
		C-C-B	108.104	-0.492	0.108	-0.847	-1.683	-0.135	
BC32H28BrO	AVIJEV	Br-B	2.047	-0.006	-0.045	-0.205	-0.052	-0.073	a
		C-B	1.610	-0.035	-0.035	-0.033	-0.009	0.008	
		C-B-Br	114.039	1.690	2.259	-1.967	0.834	2.641	
		C-B	1.588	-0.012	-0.014	-0.012	0.019	0.038	
		C-B-Br	109.937	1.870	3.407	1.166	1.672	1.381	
		O-B	1.571	0.071	0.037	0.048	0.028	0.027	
		O-B-Br	105.109	0.519	0.196	-3.176	-1.332	0.975	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C12H20I2	AXEPIC	I-B	2.154	-0.154	-0.188	-0.196	-0.044	-0.068	a
		C-B	1.523	0.020	0.066	-0.009	0.100	0.051	
		C-B-I	126.791	7.915	8.027	-0.660	5.134	1.051	
		C-B	1.526	0.014	0.062	-0.012	0.096	0.048	
		C-B-I	126.787	-0.015	7.630	-0.851	5.095	0.404	
		B-C	1.705	-0.012	-0.115	0.132	-0.114	0.143	
		B-C-B	68.465	8.955	7.482	-2.320	5.267	-3.120	
		B-C-B-I	119.867	19.914	19.187	12.995	37.863	17.948	
B2C6H10I4	AXEPOI	B-I	2.202	-0.186	-0.233	1.371	-0.034	0.010	a
		B-I	2.231	-0.225	-0.266	1.330	-0.059	-0.001	
		I-B-I	112.240	7.003	5.022	-37.175	5.123	1.968	
		C-B	1.571	-0.059	-0.039	-0.343	0.002	0.056	
		C-B-I	117.034	3.194	4.019	14.327	-4.273	-3.710	
		C-C-B	123.553	0.685	0.509	-87.708	-0.752	-1.756	
		C-C-B-O	121.688	-27.883	-24.917	2.384	-6.180	5.645	
BC11NH15I3	AXEPUO	I-B	2.269	-0.207	-0.186	-0.266	-0.044	-0.023	a
		I-B	2.305	-0.236	-0.219	-0.249	-0.054	-0.033	
		I-B-I	106.063	-4.850	-2.308	-15.546	1.628	4.152	
		N-B	1.586	-0.014	-0.012	0.035	-0.041	-0.010	
		N-B-O	111.762	-6.195	-7.589	-0.073	3.210	3.607	
		C-B	1.602	-0.061	-0.049	-0.064	-0.015	0.035	
		C-B-O	109.222	-0.090	1.466	5.968	-5.494	-5.928	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C6H4Br4	AYUHUX	B-C	1.559	-0.051	-0.027	-0.092	-0.012	-0.006	a
		C-C-B	120.888	-1.032	-0.862	-0.778	-1.240	-0.877	
		Br-B	1.924	0.043	-0.078	-0.174	-0.019	-0.019	
		Br-B-C	121.368	1.217	0.215	4.716	-0.738	-1.839	
		Br-B-C-C	5.176	18.754	28.700	-5.174	31.410	47.145	
		Br-B	1.919	0.048	-0.073	-0.169	-0.014	-0.014	
B2Cl4	B2Cl4	B-B	1.750	-0.166	-0.162	-0.194	-0.122	-0.124	b
		B-Cl	1.730	0.056	-0.061	-0.057	-0.006	-0.018	
B2H4	B2H4 (C2v)	B-B	1.459	0.076	0.047	-0.069	0.036	-0.025	c
		B-H(b)	1.337	0.006	-0.032	-0.106	-0.095	-0.061	
		B-H(t)	1.176	-0.098	-0.006	-0.046	0.000	0.046	
		H(t)-B-B	173.200	6.779	-24.679	-16.170	-24.225	6.800	
B2H4	B2H4 D2d	B-B	1.744	-0.152	0.047	-0.350	0.254	-0.401	c
		B-H	1.196	-0.080	-0.032	-0.014	0.007	0.182	
		B-B-H	122.000	-3.957	-0.006	2.528	0.774	31.931	
B2H5Cl	Chlorodiborane	BB	1.775	0.118	-0.080	-0.123	-0.051	-0.078	d
		BHb	1.331	0.118	0.079	-0.116	-0.004	0.021	
		B-Cl	1.775	0.123	-0.045	-0.079	0.014	-0.004	
		B-B-Cl	120.900	-2.351	0.057	1.815	-0.990	7.152	
B2H6	Diborane	B-B	1.743	0.139	-0.045	-0.086	-0.018	-0.063	d
		B-H(b)	1.314	0.041	0.102	0.077	0.038	0.065	
		B-H(t)	1.184	-0.087	0.014	-0.037	0.003	0.012	
		H(t)-B-H(t)	121.500	-8.165	-0.458	-11.453	0.284	-24.389	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2H2O3	B2O3H2	B-O(a)	1.380	0.010	0.077	0.017	0.011	0.029	e
		B-O(a)-B	104.000	1.737	4.399	7.440	1.925	-0.595	
		B-O(b)	1.365	0.048	0.112	0.001	0.050	0.061	
		O(a)-B-O(b)	113.000	-4.719	-8.058	-3.690	-2.146	-0.462	
		B-H	1.182	-0.099	-0.014	-0.044	-0.010	-0.013	
		H-B-O(a)	126.300	1.447	2.226	-1.844	0.859	-0.363	
B2O3	Diborontrioxide	B-O	1.329	0.194	0.198	0.157	0.152	0.149	d
		B=O	1.195	-0.077	0.058	0.005	0.001	-0.010	
		O=B-O	173.400	8.758	5.729	3.191	7.631	6.685	
		B-O-B	134.200	-25.355	-17.677	-6.125	-9.125	-2.953	
B2	Borondimer	B-B	1.590	-0.282	0.002	-0.225	0.046	-0.325	e
B4Cl4	B4Cl4	B-B	1.700	-0.035	-0.058	-0.035	-0.026	-0.044	b
		B-Cl	1.700	0.034	-0.047	-0.075	-0.005	-0.025	
B4H10	B4H10	B-B	1.854	0.124	-0.115	-0.012	-0.036	0.003	d
		B-B	1.718	0.006	-0.058	0.003	-0.018	-0.001	
		B-H	1.428	0.040	0.105	0.121	0.036	0.028	
B5H11	B5H11	B1-B2	1.852	-0.046	-0.135	-0.029	-0.073	-0.010	f
		B1-B3	1.721	0.055	-0.043	0.041	0.016	0.049	
		B2-B1-B3	57.410	7.804	2.951	1.857	2.421	1.433	
		B3-B1-B4	61.970	2.687	1.004	1.508	0.477	-0.919	
		B2-H(b)	1.319	0.344	0.212	0.247	0.117	0.126	
		H(b)-B2-B3	50.230	-13.963	-1.494	-5.708	-3.487	-2.505	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B5H9	B5H9	B-H	1.181	-0.096	-0.002	-0.047	-0.001	0.021	g
		B-B	1.690	0.025	-0.047	0.048	0.004	0.055	
		B-B-B	131.025	-1.720	-2.352	1.231	0.628	1.252	
		B-H	1.352	-0.045	0.094	0.081	0.020	0.052	
		H-B-B	48.180	-0.168	3.034	2.521	1.042	1.419	
		B-H	1.186	-0.092	-0.006	-0.043	-0.001	0.025	
B6H10	B6H10	B1-B2	1.757	0.003	-0.069	0.035	-0.014	0.044	h
		B2-B3	1.755	-0.000	-0.083	0.057	-0.016	0.067	
		B-B-B	61.060	3.879	4.421	0.688	1.038	0.457	
		B-B	1.808	0.010	-0.050	0.096	0.008	0.018	
B2C39N2H48Cl2	BAJPIN	Cl-B	1.899	-0.013	-0.103	-0.074	-0.055	-0.087	a
		Cl-B	1.906	-0.027	-0.107	-0.016	-0.069	-0.095	
		Cl-B	103.491	4.499	4.222	2.608	1.399	6.188	
		Cl-B	1.774	-0.130	-0.167	-0.160	-0.110	-0.109	
		B-B	108.327	-4.100	4.517	-17.172	3.304	1.624	
		B-B-Cl	1.610	-0.057	-0.050	-0.035	-0.045	-0.048	
BBr3	Borontribromide	B-Br	1.890	0.052	-0.073	-0.171	-0.045	0.015	b
BCl3	Borontrichloride	B-Cl	1.740	0.048	-0.073	-0.063	-0.015	-0.022	b

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BNH2F2	Aminodifluoroborane	B-F	1.325	-0.013	0.088	0.011	0.011	0.009	e
		F-B-F	117.900	-4.163	-7.164	-5.701	-6.531	-4.246	
		B-N	1.402	0.031	0.042	0.009	0.010	-0.009	
		N-H	1.003	-0.007	-0.005	-0.016	-0.004	-0.006	
		H-N-H	116.900	-0.737	1.942	-1.082	-1.811	-4.237	
BHOF2	F2BOH	B-F	1.310	-0.018	0.084	0.008	0.003	-0.003	a
		B-O	1.340	0.030	0.088	0.010	0.007	0.039	
		F-B-O	123.000	-5.453	-3.658	-7.951	-4.256	-4.415	
		F-B-F	118.000	1.590	-1.617	-0.418	0.775	0.774	
		O-H	0.940	0.015	0.020	0.006	-0.001	0.017	
		H-O-B	114.000	-4.504	-7.741	1.977	10.722	7.082	
BOF2	Borondifluoride oxide radical	B-O	1.400	-0.033	0.033	-0.051	-0.028	-0.016	d
		B-F	1.300	-0.006	0.095	0.021	0.020	0.015	
		F-B-F	126.000	-5.130	-7.672	-7.861	-6.438	-6.240	
BN2F3	BF3 - N2	B-N	2.875	-0.335	-0.200	-1.095	0.111	0.751	d
		N-B-F	90.500	1.151	0.380	13.769	0.284	-0.228	
BPH3F3	PH3-BF3	P-B	1.836	0.731	0.053	0.006	0.377	0.416	e
		P-H	1.207	0.207	0.192	0.028	0.242	0.265	
		H-P-H	115.100	-19.214	-12.690	-11.598	-10.919	-9.851	
BF3	Borontrifluoride	B-F	1.309	-0.015	0.085	0.003	0.001	-0.004	i
BH2O2F	Fluorodihydroxyborane	B-O	1.360	0.005	0.067	0.000	-0.002	0.029	d
		B-O	1.365	0.011	0.070	0.005	0.000	0.029	
		O-B-O	120.800	-1.885	1.496	2.034	0.464	-1.160	
		B-F	1.323	-0.025	0.080	0.006	0.000	-0.007	
		F-B-O	118.200	-0.115	-1.703	-5.397	-0.700	0.032	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BF	BF	B-F	1.263	0.015	0.019	0.041	0.011	0.026	e
BNH4	BH2-NH2	B-N	1.403	0.016	0.042	-0.034	-0.011	-0.037	a
		B-H	1.184	-0.082	0.016	-0.050	0.005	-0.002	
		H-B-N	120.700	1.826	-2.362	2.296	-1.214	6.701	
		N-H	1.003	-0.006	-0.002	-0.014	-0.006	-0.004	
		H-N-B	117.900	4.471	4.905	6.259	5.089	6.640	
BH2	BH2	B-H	1.180	-0.127	0.016	-0.060	-0.003	-0.040	j
		H-B-H	131.000	48.855	-1.760	9.614	-2.125	49.029	
BCH3O	BCH3O	C-B	1.534	0.285	0.010	-0.087	-0.031	-0.041	d
		B-H	1.222	-0.118	-0.008	-0.073	-0.022	-0.023	
		C-B-H	103.800	-0.589	-0.137	10.119	4.143	14.720	
		C-O	1.135	-0.001	0.009	0.017	0.007	0.004	
BNH6	BH3-NH3	B-N	1.672	0.016	-0.056	-0.083	-0.092	-0.072	d
		B-H	1.210	-0.093	0.014	-0.066	-0.014	-0.018	
		H-B-N	104.530	4.597	1.129	7.293	4.322	12.465	
		N-H	1.014	0.002	0.010	-0.014	0.003	0.005	
		H-N-B	109.850	-1.109	1.004	1.886	0.048	0.974	
BHF2	HBF2	B-H	1.190	-0.087	-0.005	-0.042	-0.010	0.003	b
		B-F	1.310	0.001	0.101	0.016	0.016	0.011	
		F-B-F	118.000	-8.044	-12.861	-9.476	-9.080	-5.454	
BH	BH	B-H	1.236	-0.213	0.007	1.178	-0.035	-0.036	e
BHS	S=B-H	B-H	1.170	-0.125	-0.024	-0.042	-0.002	-0.011	d
		B=S	1.598	0.003	-0.057	-0.216	-0.014	-0.018	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC21N3H17O4F	BIHGAC	F-B	1.388	-0.060	0.047	-0.030	-0.029	-0.032	a
		O-B	1.450	0.042	0.061	0.037	0.040	0.069	
		O-B-F	110.056	-2.209	-4.048	-3.583	-4.643	-3.017	
		N-B	1.545	0.042	0.015	0.087	0.011	0.008	
		N-B-F	108.381	6.080	5.681	5.628	5.583	4.760	
		O-B	1.456	0.036	0.055	0.031	0.033	0.063	
		O-B-O	110.501	-2.683	-4.511	-4.074	-5.121	-3.498	
BC6PN3H21	BINPAP	B-P	1.912	-0.273	-0.320	-0.229	0.082	0.047	a
		N-P-N	114.911	-0.930	-0.175	2.055	0.138	2.501	
		N-P-N	112.719	-0.236	1.252	3.953	-3.079	-1.316	
		N-P-N	111.788	0.680	2.176	4.455	-2.212	-0.442	
BN	BN	B-N	1.281	-0.147	-0.108	-0.114	-0.126	-0.159	b
BO2	BO2	B-O	1.263	-0.046	0.062	-0.007	0.004	-0.002	b
BC3H9O3	Trimethoxyborane	B-O	1.380	-0.001	0.066	0.009	0.009	0.029	e
B4C2H12S4	BOKPIA	B-S	1.930	0.081	-0.253	-0.090	-0.106	-0.070	a
		S-B	1.932	0.079	-0.255	-0.092	-0.107	-0.071	
		B-S-B	105.854	1.781	-4.838	-3.580	-1.832	-3.828	
		C-S-C	107.077	3.472	-6.635	-3.200	-1.323	-1.563	
		S-C-S-B	302.428	-1.952	5.885	4.257	2.608	3.799	
BO	BO	B-O	1.204	-0.082	0.061	-0.015	-0.023	0.003	e

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C4H14S2	BUFRUP	B-P	1.952	0.110	-0.151	-0.062	-0.095	-0.090	a
		C-P-B	102.284	-2.339	-0.720	1.695	1.614	1.533	
		C-P-B	102.026	-2.024	-0.573	0.872	-0.377	1.330	
		B-C	1.612	-0.011	-0.027	-0.020	-0.003	0.014	
		B-C-P	110.011	-3.965	-2.031	-2.547	-7.585	-8.381	
		B-C-P-B	65.302	6.439	0.685	-4.998	1.910	-3.735	
		C-B	1.612	-0.011	-0.027	-0.020	-0.003	0.014	
		C-B-P	108.105	-3.665	0.400	4.650	0.320	5.769	
		C-B-P-C	188.472	-2.778	1.704	0.431	-8.212	-6.737	
B2C10N4H14S4	BUGGIT	B-S	1.894	-0.016	-0.090	-0.025	-0.033	0.025	a
		B-S	1.895	-0.023	-0.098	-0.029	-0.034	0.027	
		S-B-S	107.609	0.655	4.993	2.301	2.175	-0.724	
		N-B	1.569	0.012	0.011	0.076	-0.023	-0.017	
		N-B-S	109.601	-1.611	-1.431	0.362	-1.886	-1.312	
		N-N-B	122.517	0.079	2.073	2.694	1.189	0.256	
		N-N-B-S	204.098	12.166	14.560	9.006	24.257	23.844	
B2C6N4H6Cl4	BUGGUF	B-Cl	1.843	0.018	-0.111	-0.065	-0.031	-0.043	a
		B-Cl	1.843	0.031	-0.096	-0.058	-0.022	-0.043	
		Cl-B-Cl	111.346	-0.093	3.045	1.064	-1.425	-0.059	
		N-B	1.538	0.029	0.037	0.089	0.026	0.029	
		N-B-Cl	109.237	0.250	0.503	0.454	0.513	-1.028	
		N-B	1.538	0.029	0.036	0.088	0.026	0.029	
		N-B-Cl	108.898	0.714	0.946	0.885	0.937	-0.617	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC10H9O2F2	BZACBF02	B-F	1.363	-0.051	0.055	-0.017	-0.025	-0.024	a
		B-F	1.363	-0.042	0.058	-0.017	-0.026	-0.022	
		F-B-F	110.640	6.868	4.823	3.337	6.594	5.038	
		O-B	1.472	0.065	0.054	0.047	0.049	0.076	
		O-B-F	108.647	-1.681	-1.641	-1.293	-2.121	-1.511	
		O-B	1.478	0.057	0.048	0.045	0.041	0.069	
		O-B-F	108.784	-1.659	-1.629	-1.948	-2.367	-1.473	
		C-O-B	122.464	-5.804	-2.930	-2.872	-2.158	-2.668	
BC8NH16O4	CAGFAT	C-O-B-F	119.784	27.894	5.561	-1.627	-4.911	1.632	a
		B-O	1.449	0.002	0.056	0.019	0.021	0.041	
		B-O	1.474	-0.010	0.037	0.013	0.008	0.030	
		O-B-O	112.529	-4.290	-6.684	-3.253	-3.037	0.189	
		B-N	1.669	0.021	-0.028	0.088	-0.033	-0.030	
		N-B-O	102.474	1.827	0.368	-1.055	1.485	1.368	
		C-B	1.606	-0.014	-0.030	-0.020	0.009	0.034	
		C-B-O	113.985	-0.009	0.808	0.955	-2.576	-5.054	
BC15NH18O	CAGPEF	C-N-B	103.666	-1.757	1.399	-0.481	0.515	0.114	a
		B-O	1.478	-0.019	0.036	-0.003	-0.002	0.019	
		N-B	1.638	0.025	-0.013	0.100	-0.010	-0.003	
		N-B-O	104.849	-0.479	-2.408	-1.448	-1.865	0.019	
		C-B	1.615	-0.038	-0.042	-0.026	-0.016	-0.005	
		C-B-O	113.883	0.455	-0.875	4.652	1.224	0.640	
		C-O-B	116.975	-5.390	-2.822	-0.182	-2.168	-3.409	
		C-O-B-N	305.904	-11.172	-8.663	-3.858	-10.289	-9.279	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C6NH16Cl3	CAQEN		1.704	-0.092	-0.100	-0.123	-0.045	0.001	a
		B-B	1.864	-0.027	-0.102	-0.091	-0.043	-0.093	
		Cl-B	118.538	0.429	-4.791	6.358	-5.586	2.963	
		Cl-B-B	1.890	0.004	-0.111	-0.024	-0.054	-0.031	
		Cl-B	102.218	-20.433	3.159	-14.236	0.398	-38.431	
		Cl-B-B	1.792	0.064	-0.062	-0.033	-0.002	-0.020	
		Cl-B	113.826	-3.988	0.743	0.747	-0.265	1.146	
		Cl-B-B	154.889	-13.739	-19.288	-0.564	-17.688	-9.206	
B3C2N4H9Cl2	CICTIS	Cl-B-B-Cl							a
		B-Cl	1.804	0.036	-0.109	-0.081	-0.010	-0.034	
		N-B	1.412	0.014	0.060	0.050	0.021	0.025	
		N-B-Cl	119.036	-0.698	0.508	0.668	-1.298	-0.001	
		B-N	1.420	0.006	0.052	0.042	0.013	0.018	
		B-N-B	119.487	-3.246	-0.531	0.018	-4.259	-1.239	
		B-N-B-Cl	178.873	0.548	1.317	0.811	1.487	1.078	
		Cl-B	1.793	0.046	-0.098	-0.070	0.001	-0.023	
B2C28P2H46	CISVEG	Cl-B-N	118.461	-0.151	1.056	1.228	-0.745	0.534	a
		Cl-B-N-B	181.038	-0.492	-1.260	-0.738	-1.456	-0.922	
		B-P	1.926	-0.059	-0.104	0.018	0.147	0.053	
		P-P-B	116.131	-1.183	0.343	0.982	-2.937	9.956	
		B-P	1.926	-0.059	-0.104	0.018	0.147	0.053	
		B-P-P	116.130	-1.229	0.385	0.962	-3.001	9.879	
		B-P-P-P	132.602	-3.373	-30.464	9.761	19.473	-29.458	
		C-B	1.611	-0.024	-0.026	-0.020	-0.003	0.035	
		C-B-P	120.483	7.340	6.591	5.557	0.219	1.080	
		C-B-P-P	345.548	30.687	20.888	30.666	-0.445	7.680	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C24P2H26	CITQEB	B-P	1.943	-0.273	-0.300	-0.113	0.096	0.127	a
		B-P	1.923	-0.306	-0.326	-0.229	0.106	0.074	
		P-B-P	109.225	11.871	10.853	14.444	1.532	14.968	
		B-P	1.931	-0.325	-0.335	-0.210	0.078	0.024	
		B-P-B	113.033	-13.014	-7.778	6.211	0.754	1.010	
		B-P-B-P	39.359	-28.895	-47.457	-7.522	-23.738	34.854	
		C-P-B	108.174	2.494	4.536	-1.965	-2.442	-1.827	
		C-P-B-P	160.852	-8.730	-44.875	0.162	-22.279	38.207	
BC5NH5Cl3	CLBNPY	B-Cl	1.836	0.020	-0.097	-0.048	-0.032	-0.037	a
		B-Cl	1.840	0.026	-0.090	-0.052	-0.025	-0.033	
		Cl-B-Cl	110.208	3.445	2.872	1.678	0.722	0.574	
		Cl-B	1.835	0.031	-0.085	-0.047	-0.021	-0.029	
		Cl-B-Cl	109.769	3.876	3.296	1.567	1.158	1.005	
		N-B	1.593	0.004	0.013	0.080	-0.001	0.016	
		N-B-Cl	110.490	-0.989	-1.203	-2.723	0.648	0.773	
B2C12N2H18O2	CODFUY	B-B	1.694	-0.118	-0.114	-0.126	-0.054	-0.088	a
		N-B	1.434	0.022	0.051	0.029	0.014	0.010	
		N-B-B	127.202	-1.178	0.128	-0.131	-1.560	-1.505	
		N-B	1.435	0.021	0.049	0.027	0.013	0.009	
		N-B-B	127.765	-2.063	-0.441	-0.890	-2.369	-2.379	
		O-B	1.379	0.005	0.080	0.018	0.013	0.025	
		O-B-B	124.678	-1.264	1.763	0.553	-0.771	-1.623	
		O-B-B-N	215.892	-37.141	-38.469	-35.890	-35.881	-35.877	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC6NH6O6	CODLUC	B-N	1.622	0.040	0.010	0.137	0.019	0.034	a
		O-B	1.447	0.007	0.049	0.019	0.022	0.042	
		O-B-N	105.573	1.639	1.121	-0.823	0.963	-0.119	
		O-B	1.450	0.004	0.046	0.016	0.019	0.039	
		O-B-N	105.201	2.021	1.497	-0.439	1.343	0.263	
		O-B	1.451	0.003	0.045	0.015	0.018	0.038	
		O-B-N	105.419	1.794	1.276	-0.667	1.120	0.037	
B2C5N2H13Cl3	COFVOI	B-B	1.699	-0.092	-0.093	-0.111	-0.035	0.004	a
		B-Cl	1.814	0.001	-0.118	-0.106	-0.043	-0.080	
		B-B-Cl	119.619	-1.143	1.822	-0.456	0.279	-5.252	
		Cl-B	1.886	-0.013	-0.113	-0.057	-0.053	-0.073	
		Cl-B-B	108.733	-7.978	-0.290	-2.346	-1.506	-7.333	
		Cl-B-B-Cl	281.158	-5.656	-2.231	-2.728	2.699	2.306	
		Cl-B	1.874	-0.020	-0.119	-0.081	-0.056	-0.077	
		Cl-B-B	115.740	-0.201	-0.129	3.476	-1.370	-3.715	
		Cl-B-B-Cl	41.630	-0.163	4.364	0.376	3.017	2.279	
BC27N2H31F6	CUJSAC	B-N	1.543	0.062	0.026	0.089	0.012	0.009	a
		B-N	1.539	0.065	0.030	0.092	0.016	0.012	
		N-B-N	106.594	-0.399	0.936	-0.655	3.426	3.564	
		F-B	1.398	-0.058	0.058	-0.020	-0.008	-0.011	
		F-B-N	109.822	1.264	-0.621	-2.281	-2.062	-0.711	
		C-N-B	125.634	1.246	1.878	1.603	1.623	1.647	
		C-N-B-N	179.771	-3.422	-5.933	-0.000	-2.700	-3.790	
		C-C-N-B	357.786	-0.256	-1.135	1.127	1.164	-0.167	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC6NH13F3	DABZAJ	F-B	1.423	-0.063	0.032	-0.038	-0.046	-0.044	a
		F-B	1.394	-0.042	0.055	-0.015	-0.023	-0.022	
		F-B-F	107.779	1.046	-2.596	-1.452	-0.831	1.056	
		F-B	1.400	-0.054	0.043	-0.029	-0.037	-0.035	
		F-B-F	107.927	1.406	-1.537	-0.480	0.388	2.024	
		C-B	1.628	0.106	-0.010	0.061	0.067	0.106	
		C-B-F	109.291	0.775	3.523	2.172	1.607	-0.195	
		N-C-B	114.562	-5.212	-3.842	-3.699	-2.900	-2.502	
		N-C-B-F	91.370	-0.776	-2.149	-5.272	-7.632	-4.066	
BC19PNH29	DAHZOB	B-P	1.958	-0.303	-0.331	-0.143	0.094	0.059	a
		C-B	1.616	0.001	-0.006	0.028	-0.000	0.068	
		C-B-P	112.862	3.032	4.754	0.385	-0.413	4.353	
		C-P-B	113.138	0.879	1.627	3.612	-2.869	-4.393	
		C-P-B-C	192.130	-2.653	-2.843	1.443	6.714	-1.000	
		C-C-P-B	359.647	1.027	0.126	-1.208	-55.689	-51.477	
BC19N2H22O2F	DAJFID	B-F	1.402	-0.068	0.047	-0.034	-0.027	-0.029	a
		C-B	1.602	-0.020	-0.035	-0.028	-0.006	0.011	
		C-B-F	112.427	4.803	3.927	6.382	4.183	1.275	
		O-B	1.494	0.015	0.038	0.008	0.024	0.040	
		O-B-F	108.030	-3.522	-6.139	-5.887	-6.249	-2.103	
		N-B	1.579	0.084	0.021	0.144	0.014	0.004	
		N-B-F	109.640	1.057	-1.201	-2.372	-0.904	0.773	
		C-C-B	123.230	1.385	-0.046	-1.584	-0.275	-1.224	
		C-C-B-F	142.129	-12.920	-2.930	33.289	-9.092	-7.229	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC12NH10Cl2	DCLPAB	B-Cl	1.762	0.051	-0.084	-0.056	-0.006	-0.017	a
		B-Cl	1.748	0.065	-0.070	-0.043	0.008	-0.003	
		Cl-B-Cl	116.090	-0.456	4.382	1.045	-0.741	0.523	
		N-B	1.380	0.020	0.088	0.056	0.030	0.003	
		N-B-Cl	122.830	-0.635	-3.058	-1.404	-0.499	-1.131	
		C-N-B	1.444	-0.020	-0.013	0.013	-0.002	-0.013	
		C-N-B-Cl	119.865	1.415	2.052	2.796	0.893	2.566	
BC2NH2ClF3	DECJEB	B-F	1.357	-0.058	0.073	-0.002	-0.008	-0.002	a
		B-F	1.355	-0.057	0.075	-0.000	-0.006	-0.000	
		F-B-F	113.630	6.020	-1.728	-1.359	-0.433	-0.971	
		B-F	1.365	-0.067	0.065	-0.010	-0.016	-0.010	
		F-B-F	112.287	7.226	-0.303	-0.044	0.803	0.320	
		N-B	1.649	0.770	-0.035	0.051	0.005	-0.021	
		N-B-F	105.852	-12.851	0.682	0.514	-0.746	0.037	
		C-N-B	175.104	6.507	4.819	5.269	5.470	5.576	
		C-N-B-F	11.735	4.872	0.734	1.414	8.457	-1.444	
BC14N2H27S2	DENDIJ	B-N	1.453	0.043	0.010	0.067	0.012	0.009	a
		S-B	1.892	-0.013	-0.010	-0.100	0.003	0.050	
		S-B-N	91.865	-2.648	0.573	1.816	-0.850	-2.681	
		C-N-B	97.659	3.691	0.573	-0.202	2.458	3.938	
		C-N-B-S	1.112	-1.346	0.573	-1.180	-1.257	10.072	
		S-C-N-B	178.088	2.265	0.573	2.011	2.133	-13.240	
		N-B	1.413	0.047	0.010	0.073	0.023	-0.028	
		N-B-N	135.709	-1.260	-0.573	-9.326	0.446	6.721	
		N-B-N-C	182.406	-2.974	-0.573	-2.568	-2.700	16.201	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C18N2H36S2	DENDOP	S-B	1.859	-0.019	-0.094	-0.035	-0.036	0.021	a
		S-B	1.856	-0.015	-0.091	-0.031	-0.032	0.025	
		S-B-S	98.506	-3.344	0.093	-0.567	-0.681	-6.167	
		B-S	1.857	-0.016	-0.091	-0.032	-0.033	0.024	
		B-S-B	81.475	3.363	-0.071	0.585	0.701	6.187	
		B-S-B-S	0.000	0.020	0.009	0.040	-0.026	-0.026	
		N-B	1.399	0.007	0.062	0.032	-0.002	-0.035	
		N-B-S	130.567	1.848	0.125	0.461	0.517	3.215	
BC7H6O3F	DEWYAG	B-O	1.344	0.025	0.093	1.372	0.033	0.052	a
		B-O	1.350	0.009	0.083	1.367	0.014	0.038	
		O-B-O	118.603	-4.318	-6.364	110.289	-4.678	-1.401	
		C-B	1.589	-0.047	-0.047	1.540	-0.018	-0.014	
		C-B-O	115.872	0.749	2.349	119.786	1.528	-0.412	
		C-C-B	128.055	-4.570	-4.806	123.177	-4.418	-3.210	
		C-C-B-O	171.773	-37.425	-30.689	148.166	-25.814	-20.810	
		C-C-B	114.799	1.469	1.843	117.030	0.664	0.267	
		C-C-B-O	350.158	-34.375	-28.015	327.409	-23.865	-19.611	
BC11NH12	DIHGUY	B-C	1.505	-0.017	-0.004	-0.036	0.007	-0.007	a
		B-C	1.508	-0.014	0.000	-0.034	0.010	-0.000	
		C-B-C	112.279	4.932	2.985	3.724	4.860	4.815	
		B-C	1.582	-0.048	-0.044	-0.055	-0.024	-0.016	
		C-B-C	125.124	-2.781	-0.871	-1.375	-1.998	-3.011	
		C-C-B	121.857	-2.049	-1.219	-1.418	-1.756	-1.976	
		C-C-B-C	184.007	44.207	37.552	-4.015	49.778	52.160	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC4H8SCI3	DIMBEG10	B-Cl	1.821	0.027	-0.084	-0.036	-0.013	-0.016	a
		B-Cl	1.832	0.009	-0.099	-0.064	-0.034	-0.038	
		Cl-B-Cl	111.138	2.245	1.884	0.801	0.033	0.230	
		B-Cl	1.827	0.010	-0.095	-0.038	-0.029	-0.032	
		Cl-B-Cl	112.274	1.240	0.851	-1.857	-1.105	-0.958	
		S-B	1.959	-0.011	-0.090	0.025	-0.023	0.034	
		S-B-Cl	111.484	-2.762	-1.151	-3.930	-1.226	-2.632	
		C-S-B	105.738	-3.467	-1.524	3.376	-0.661	-0.911	
		C-S-B-Cl	301.179	16.600	12.137	-74.990	5.067	7.579	
BC4H8SI3	DIMBOQ10	B-I	2.220	-0.205	-0.231	-0.274	-0.046	-0.004	a
		B-I	2.219	-0.199	-0.196	-0.263	-0.036	0.014	
		I-B-I	110.733	-5.404	-3.352	-12.481	2.795	2.502	
		B-I	2.242	-0.220	-0.230	-0.285	-0.060	-0.008	
		I-B-I	110.708	2.084	-2.676	-12.526	2.810	2.486	
		S-B	1.916	-0.054	-0.180	-0.144	-0.082	0.003	
		S-B-I	114.461	5.790	9.635	23.066	-0.082	-2.012	
		C-S-B	106.752	-1.830	1.236	6.642	1.359	3.243	
		C-S-B-I	192.219	-1.669	-20.229	-14.583	-5.409	-3.241	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C13N2H20Cl2	DIQXUW	B-N	1.619	-0.000	0.017	0.085	-0.023	0.017	a
		N-B	1.566	0.015	0.014	0.064	-0.006	0.013	
		B-N-B	99.636	-1.482	1.162	-0.663	-1.875	1.158	
		Cl-B	1.861	0.010	-0.106	-0.059	-0.030	-0.059	
		Cl-B-N	110.672	-1.354	-1.265	-1.568	-0.496	1.313	
		Cl-B-N-B	202.453	6.345	12.715	12.179	6.998	5.869	
		Cl-B	1.881	0.004	-0.116	-0.071	-0.045	-0.068	
		Cl-B-N	108.254	-0.598	-0.316	0.351	2.011	2.674	
		Cl-B-N-B	85.198	2.187	9.082	11.420	6.052	-1.778	
		N-B	1.376	0.027	0.078	0.039	0.020	-0.017	
		N-B-N	123.425	2.644	0.454	0.489	1.563	5.754	
		N-B-N-B	210.355	-0.067	-5.699	-5.636	-1.922	1.995	
B2C20N2H26Cl2	ODIQYEH	B-Cl	1.884	0.006	-0.112	-0.066	-0.043	-0.068	a
		B-Cl	1.855	0.012	-0.104	-0.059	-0.028	-0.058	
		Cl-B-Cl	107.839	2.799	2.961	0.484	-0.387	3.599	
		N-B	1.626	-0.011	0.010	0.078	-0.030	0.012	
		N-B-Cl	108.631	-1.378	-1.224	-0.781	0.233	1.341	
		B-N	1.560	0.020	0.019	0.067	-0.003	0.018	
		B-N-B	99.874	-2.190	0.789	-1.483	-3.437	-0.148	
		B-N-B-Cl	153.652	1.181	-6.507	-3.686	2.792	1.115	
		N-B	1.378	0.024	0.075	0.035	0.016	-0.021	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC6H12SCl	DONXIN	B-Cl	1.883	-0.017	-0.179	-0.094	-0.054	-0.087	a
		C-B	1.604	-0.025	-0.043	-0.002	0.007	0.052	
		C-B-Cl	113.439	-0.052	3.698	-1.251	-1.323	-1.292	
		C-B	1.595	-0.018	-0.037	0.001	0.015	0.058	
		C-B-Cl	114.125	-0.482	3.141	-2.277	-2.538	-1.584	
		C-C-B	110.975	-2.863	1.391	0.647	-1.372	-3.066	
		C-C-B-Cl	267.248	1.827	14.728	-6.153	-3.466	-6.134	
BC9N2H11S2	DUDMAQ	B-S	1.818	-0.010	-0.111	-0.058	-0.017	0.014	a
		C-S-B	91.604	-1.068	1.607	0.973	-0.395	-2.321	
		S-C-S-B	179.710	-1.297	-0.543	-1.635	0.084	0.356	
		C-B	1.555	-0.037	-0.020	-0.037	-0.006	0.007	
		C-B-S	124.215	-0.071	5.768	3.048	-0.148	-1.473	
		C-B-S-C	180.571	-3.728	0.315	-0.422	-0.356	-0.766	
		N-C-S-B	359.685	-6.129	-4.858	-4.138	-3.329	0.213	
B2C24NH21	DUXHUZ	B-N	1.431	-0.003	0.037	0.029	-0.007	-0.016	a
		B-N	1.440	-0.012	0.028	0.020	-0.016	-0.025	
		B-B-N	135.408	-9.176	-7.117	-2.077	-8.450	-8.096	
		C-B	1.579	-0.033	-0.030	-0.045	-0.006	-0.002	
		C-B-N	117.758	0.727	-0.630	-0.573	-0.275	2.704	
		C-B-N-B	195.939	-8.926	-10.006	-17.243	-13.478	-13.917	
		C-B	1.559	-0.023	-0.017	-0.034	0.004	0.014	
		C-B-N	120.653	3.607	2.954	3.636	4.861	5.253	
		C-B-N-B	18.674	-8.777	-10.752	-19.899	-14.714	-15.739	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC15N2H24SCl	EBERUY	B-Cl	1.872	0.012	-0.128	-0.083	-0.057	-0.084	a
		S-B	2.008	-0.005	-0.061	-0.041	-0.009	-0.021	
		S-B-Cl	109.839	-0.096	1.371	3.131	3.648	4.869	
		N-B	1.546	0.046	0.042	0.128	0.020	0.038	
		N-B-Cl	113.327	-4.425	-3.038	-5.450	-1.344	-1.614	
		C-N-B	99.827	0.851	1.320	-2.020	0.441	0.396	
		C-N-B-Cl	112.780	-9.403	-3.648	-0.580	1.024	-1.585	
		N-C-N-B	173.057	12.983	8.665	2.859	5.432	10.757	
BC6H4ClO2	EBONEO	B-Cl	1.745	0.036	-0.105	-0.078	-0.031	-0.060	a
		O-B	1.380	0.020	0.093	0.046	0.046	0.069	
		O-B-Cl	122.963	0.475	2.627	1.515	0.483	1.076	
		O-B	1.380	0.020	0.093	0.046	0.046	0.069	
		O-B-Cl	122.961	0.253	2.564	1.376	0.324	0.873	
		C-O-B	103.666	-0.304	0.771	0.887	-0.466	-0.959	
		C-O-B-Cl	179.894	0.106	0.113	0.107	0.108	0.105	
		C-C-O-B	0.279	-0.278	-0.280	-0.279	-0.280	-0.279	
BC6H4BrO2	EBONIS	Br-B	1.898	0.058	-0.098	-0.132	-0.010	-0.020	a
		O-B	1.380	0.022	0.095	0.026	0.046	0.062	
		O-B-Br	123.061	0.578	3.090	0.468	0.684	0.694	
		O-B	1.380	0.022	0.095	0.026	0.046	0.062	
		O-B-Br	123.057	0.393	3.023	0.335	0.527	0.470	
		C-O-B	103.839	-0.213	1.385	0.016	-0.211	-1.350	
		C-O-B-Br	180.114	-0.105	-0.116	-0.108	-0.103	-0.106	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC12NH19ClO2	EBOPIU	B-N	1.642	0.014	-0.018	0.106	-0.032	-0.014	a
		Cl-B	1.876	0.033	-0.131	-0.076	-0.048	-0.092	
		Cl-B-N	106.884	-3.294	1.103	-1.779	2.307	3.901	
		O-B	1.459	0.001	0.060	0.040	0.045	0.066	
		O-B-N	110.313	1.774	-0.734	-0.605	-1.108	-1.960	
		O-B	1.452	0.008	0.066	0.047	0.048	0.072	
		O-B-N	109.794	0.647	-1.404	-0.853	0.201	-1.414	
		C-O-B	105.900	-1.375	-0.233	-1.141	-1.050	-2.157	
		C-O-B-N	119.053	6.280	-0.615	-3.543	6.321	2.536	
BC13N4H8ClF2	EDOCUX	B-F	1.375	-0.041	0.069	-0.011	-0.008	-0.010	a
		B-F	1.381	-0.047	0.063	-0.017	-0.014	-0.015	
		F-B-F	112.060	-1.439	-5.562	-3.562	-3.181	-2.048	
		N-B	1.563	0.082	0.016	0.078	0.029	0.031	
		N-B-F	111.169	1.442	0.981	0.807	0.343	-0.378	
		N-B	1.573	0.099	0.018	0.085	0.032	0.031	
		N-B-F	107.371	0.857	1.237	1.444	0.036	0.333	
		C-N-B	121.549	1.347	-0.528	0.120	-1.524	-1.511	
		C-N-B-F	117.688	-0.811	2.383	1.126	1.138	0.895	
B2C16P2H36Cl4	ENIQIC	P-B	2.056	-0.174	-0.363	-0.097	0.100	0.209	a
		P-B	2.056	-0.172	-0.363	-0.097	0.100	0.209	
		P-B-P	90.961	2.861	12.912	-2.657	1.183	-1.490	
		P-B	2.056	-0.170	-0.363	-0.096	0.100	0.209	
		B-P-B	89.038	-2.811	-12.912	2.655	-1.185	1.490	
		B-P-B-P	0.000	-2.421	-0.006	0.006	0.022	0.011	
		Cl-B	1.845	-0.023	-0.121	-0.037	-0.003	-0.050	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C20P2H46Cl2	ESINOJ	B-P	2.053	-0.151	-0.329	-0.100	0.089	0.177	a
		B-P	2.054	-0.139	-0.337	-0.104	0.089	0.172	
		B-P-B	90.504	-0.121	-10.558	3.381	-1.625	-1.128	
		Cl-B	1.903	-0.040	-0.105	-0.065	-0.033	-0.088	
		Cl-B-P	104.657	-6.803	-0.916	0.850	4.192	5.844	
		Cl-B-P-B	269.232	-7.931	-15.147	2.603	-22.647	-24.895	
		P-B	2.060	-0.131	-0.337	-0.103	0.077	0.166	
		P-B-P	88.453	1.106	11.702	-4.067	2.331	1.993	
		P-B-P-B	347.290	14.878	12.037	-2.743	15.308	14.910	
B2C20P2H46Br2	ESIPOL	Br-B	2.062	-0.007	-0.055	0.002	0.002	-0.037	a
		P-B	2.054	-0.139	-0.342	0.075	0.075	0.140	
		P-B-Br	105.006	-13.256	-5.910	3.973	3.973	3.251	
		B-P	2.060	-0.147	-0.349	0.068	0.068	0.134	
		B-P-B	89.961	-1.836	-11.636	-2.210	-2.210	-2.293	
		B-P-B-Br	105.435	-23.751	-4.499	5.380	5.380	4.556	
		P-B	2.053	-0.140	-0.343	0.076	0.076	0.141	
		P-B-P	90.062	0.968	11.635	2.185	2.185	2.263	
		P-B-P-P	0.000	10.097	0.705	0.130	0.130	0.094	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C12H8S4	FARQUK	B-B	1.675	-0.101	-0.103	-0.073	-0.073	-0.091	a
		S-B	1.787	-0.016	-0.088	-0.023	-0.023	-0.002	
		S-B-B	123.376	-2.088	-2.451	-0.254	-0.254	-1.241	
		S-B	1.797	-0.026	-0.098	-0.033	-0.033	-0.012	
		S-B-B	124.169	-3.047	-3.345	-2.528	-2.528	-2.191	
		S-B	1.787	-0.016	-0.088	-0.023	-0.023	-0.002	
		S-B-B	123.363	-2.345	-2.574	-0.835	-0.835	-1.491	
		S-B-B-S	179.946	90.041	90.074	33.136	33.136	90.044	
		S-B	1.796	-0.025	-0.097	-0.032	-0.032	-0.011	
		S-B-B	124.158	-2.770	-3.202	-1.729	-1.729	-1.922	
		S-B-B-S	0.678	9.295	89.346	33.275	33.275	89.312	
B2C16N8H22	FAVGIS	B-N	1.576	0.037	0.012	0.013	0.013	-0.001	a
		N-N-B	125.968	-1.219	-0.043	-0.210	-0.210	-2.596	
		B-N	1.557	0.046	0.028	0.027	0.027	0.015	
		B-N-N	124.974	-0.406	1.124	0.211	0.211	-1.841	
		B-N-N-B	340.145	6.365	15.434	25.183	25.183	1.586	
		N-B	1.549	0.022	0.018	0.001	0.001	-0.009	
		N-B-N	107.570	-0.820	-1.861	-0.944	-0.944	1.482	
		N-B-N-N	262.416	-8.428	-8.606	-19.619	-19.619	-7.285	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC21NH32Cl2O	FITWAH	B-Cl	1.861	0.020	-0.116	-0.033	-0.033	-0.066	a
		Cl-B	1.891	0.001	-0.137	-0.056	-0.056	-0.078	
		Cl-B-Cl	107.449	2.312	5.730	1.020	1.020	3.980	
		O-B	1.390	0.014	0.101	0.036	0.036	0.072	
		O-B-Cl	107.809	0.338	-0.424	-0.580	-0.580	-2.931	
		N-B	1.625	0.009	0.001	-0.006	-0.006	0.018	
		N-B-Cl	109.562	-3.319	-1.373	0.089	0.089	1.297	
		C-N-B	112.071	-4.102	-3.236	-2.882	-2.882	-1.686	
		C-N-B-O	187.528	-4.654	-3.504	-3.965	-3.965	-6.108	
BC4NH7F7	FOHSIE	B-C	1.610	0.048	0.045	0.040	0.040	0.054	a
		B-C	1.613	0.044	0.041	0.032	0.032	0.050	
		C-B-C	111.870	-2.895	-1.020	-1.391	-1.391	-4.086	
		N-B	1.574	0.093	0.036	0.045	0.045	0.067	
		N-B-C	109.125	-1.459	0.208	1.201	1.201	2.066	
		F-C-B	116.409	-1.573	-1.295	-0.447	-0.447	-1.246	
		F-C-B-C	313.944	-1.397	-2.675	-3.581	-3.581	-4.253	
B3N3H12	FUZPAR	B-N	1.569	0.037	0.023	0.002	0.002	0.029	a
		B-N	1.573	0.033	0.019	-0.002	-0.002	0.025	
		B-N-B	115.801	-5.519	-0.563	-3.324	-3.324	-3.806	
		N-B	1.568	0.038	0.025	0.004	0.004	0.030	
		N-B-N	107.213	1.022	0.662	3.850	3.850	6.803	
		N-B-N-B	54.631	5.887	-0.062	-0.784	-0.784	-4.568	
		N-B	1.569	0.037	0.023	0.002	0.002	0.029	
		N-B-N	107.296	0.952	0.587	3.770	3.770	6.721	
		N-B-N-B	305.414	-5.915	0.015	0.720	0.720	4.507	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC35H36SF	GAGYOE	B-F	1.480	-0.089	0.017	-0.049	-0.049	-0.060	a
		C-B	1.651	-0.013	-0.050	-0.026	-0.026	-0.014	
		C-B-F	104.302	1.397	-0.141	0.866	0.866	2.709	
		C-B	1.653	-0.018	-0.051	-0.026	-0.026	-0.019	
		C-B-F	105.471	0.040	-1.354	-1.689	-1.689	1.049	
		C-B	1.660	-0.038	-0.066	-0.036	-0.036	-0.015	
		C-B-F	106.581	2.263	0.731	0.666	0.666	-0.499	
B2C8N4H12S2	GAVDOW	S-B	1.940	-0.058	-0.142	1.869	-0.071	-0.013	a
		N-B	1.560	0.041	0.035	1.567	0.007	0.005	
		N-B-S	107.567	0.288	-0.351	104.926	-2.642	-0.338	
		N-B	1.566	0.035	0.029	1.567	0.001	-0.000	
		N-B-S	107.380	0.456	0.439	104.917	-2.463	-0.165	
		N-N-B	118.280	-1.426	-0.160	118.148	-0.132	-1.523	
		N-N-B-S	66.966	-0.258	-1.506	67.170	0.203	0.824	
		S-S-B	100.815	0.590	2.052	102.079	1.264	0.097	
		S-S-B-N	304.600	-1.262	0.810	303.822	-0.778	-1.906	
		B-N	1.566	0.035	0.029	1.567	0.001	-0.000	
BC33P2H31	GIRYUB	P-B	1.901	-0.060	-0.024	0.134	0.134	0.171	a
		P-B	1.879	-0.036	-0.019	0.165	0.165	-0.043	
		P-B-P	119.947	12.634	1.034	1.075	1.075	9.440	
		C-B	1.569	-0.041	-0.005	-0.029	-0.029	0.022	
		C-B-S	117.368	-3.550	0.223	1.752	1.752	-6.076	
		C-C-B	119.257	1.607	0.109	-0.272	-0.272	0.509	
		C-C-B-P	94.873	4.195	0.193	-2.268	-2.268	-3.933	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B3N3Cl6	GOHREA06	B-N	1.411	0.032	0.010	0.033	0.033	0.030	a
		Cl-B	1.726	0.073	-0.015	0.030	0.030	0.011	
		Cl-B-N	121.692	-0.369	0.526	-0.735	-0.735	0.412	
		Cl-N-B	118.752	-0.061	0.534	0.313	0.313	-0.846	
		Cl-N-B-Cl	1.121	-1.137	-0.667	-1.122	-1.122	-1.121	
		N-B	1.436	0.008	0.011	0.009	0.009	0.005	
		N-B-N	117.616	-0.249	0.553	0.495	0.495	-1.814	
B2C12N4H12	GUDSEE	B-B	1.649	-0.066	-0.018	-0.014	-0.014	0.016	a
		N-B	1.418	0.015	0.010	0.012	0.012	-0.004	
		N-B-B	116.171	0.729	0.556	1.734	1.734	0.046	
		N-B	1.417	0.016	0.023	0.013	0.013	-0.003	
		N-B-B	116.553	0.339	0.558	1.342	1.342	-0.345	
		N-B-B-N	1.380	-1.371	-0.794	-1.381	-1.381	-1.379	
		N-B	1.417	0.016	0.023	0.013	0.013	-0.003	
		N-B-B	116.182	0.703	1.094	1.705	1.705	0.018	
		N-B-B-N	179.981	0.028	0.667	0.016	0.016	0.020	
B2C20N4H26O2	HIWTIS		1.560	0.033	-0.016	-0.027	-0.027	-0.029	a
		B-C	118.695	-0.018	-0.016	-3.203	-3.203	-5.125	
		B-C-O	1.585	1.159	-0.591	-0.086	-0.086	-0.114	
		B-B	126.648	-0.050	-0.011	-0.275	-0.275	-7.282	
		B-B-C	4.817	0.931	0.587	-62.140	-62.140	-46.303	
		B-B-C-O	1.565	0.191	-0.546	-0.033	-0.033	-0.035	
		C-B	130.080	5.675	0.546	-3.528	-3.528	-10.703	
		C-B-B	178.056	-2.807	-0.549	-3.424	-3.424	-1.058	
		C-B-B-C		8.245	0.623				

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C10N2H16Br2	HOCCAE	B-Br	1.980	0.034	-0.059	-0.054	-0.054	-0.029	a
		B-N	1.389	0.003	0.048	-0.014	-0.014	-0.037	
		Br-B-N	118.585	2.467	0.082	-3.759	-3.759	3.859	
		C-N-B	121.988	-0.821	-0.616	-2.040	-2.040	0.701	
		C-N-B-Br	179.032	0.325	-0.865	0.930	0.930	1.161	
		C-B	1.570	-0.043	-0.035	-0.010	-0.010	0.007	
		C-B-Br	115.280	-2.175	-0.516	3.086	3.086	-1.943	
		C-C-B	122.258	-2.634	0.043	-2.911	-2.911	-2.681	
		C-C-B-N	299.128	-30.355	-0.036	-29.429	-29.429	-29.110	
BC5H13SO3	HOTPAH	B-O	1.411	-0.003	0.051	-0.022	-0.022	-0.009	a
		S-O-B	127.720	6.010	3.684	-2.477	-2.477	1.571	
		O-S-O-B	78.913	-17.432	0.312	-14.189	-14.189	-14.242	
		O-S-O-B	309.241	-16.809	-0.790	-14.433	-14.433	-15.542	
		C-B	1.563	-0.003	-0.005	0.020	0.020	0.032	
		C-B-O	120.779	-2.538	-1.616	-1.192	-1.192	1.698	
		C-B-O-S	357.889	3.793	1.532	2.172	2.172	2.192	
BC6N3H4O2	HOVDOL	B-O	1.380	0.034	0.115	0.063	0.063	0.079	a
		B-O	1.378	0.034	0.013	0.051	0.051	0.077	
		O-B-O	113.254	-0.096	-0.005	0.056	0.056	-1.054	
		N-B	1.433	0.056	0.007	0.014	0.014	-0.019	
		N-B-O	126.739	-1.885	-0.032	-1.643	-1.643	0.035	
		N-N-B	119.105	-1.799	0.099	5.523	5.523	6.694	
		N-N-B-O	179.904	0.093	-0.003	0.087	0.087	0.093	
		N-N-N-B	184.101	-4.101	-0.129	-4.099	-4.099	-4.101	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC6PH9Cl3	HUVRAR	B-Cl	1.847	-0.014	-0.059	-0.035	-0.035	-0.043	a
		B-Cl	1.844	-0.011	-0.059	-0.033	-0.033	-0.040	
		Cl-B-Cl	111.463	4.267	1.397	-1.254	-1.254	-0.518	
		B-Cl	1.841	-0.008	-0.059	-0.029	-0.029	-0.036	
		Cl-B-Cl	112.486	3.223	2.875	-2.315	-2.315	-1.557	
		P-B	1.969	-0.272	-0.410	0.245	0.245	0.343	
		P-B-Cl	106.309	-4.180	-0.941	2.488	2.488	1.694	
		C-P-B	110.375	-1.712	0.849	-1.440	-1.440	-6.851	
		C-P-B-Cl	171.906	8.310	-0.305	-12.680	-12.680	12.377	
BC6PH9Br3	HUVREV	B-Br	2.004	-0.055	-0.062	-0.008	-0.008	0.011	a
		B-Br	2.008	-0.059	-0.050	-0.012	-0.012	0.007	
		Br-B-Br	111.895	3.761	-0.321	-2.307	-2.307	-2.209	
		B-Br	2.005	-0.056	-0.062	-0.009	-0.009	0.010	
		Br-B-Br	111.400	4.224	0.610	-1.819	-1.819	-1.736	
		P-B	1.952	-0.282	-0.410	0.210	0.210	0.155	
		P-B-Br	106.829	-4.581	-0.833	2.593	2.593	2.469	
		C-P-B	110.597	-0.456	1.118	-2.652	-2.652	-4.128	
BC6PH9I3	HUVRIZ	B-I	2.228	-0.244	-0.049	-0.065	-0.065	0.030	a
		B-I	2.225	-0.241	-0.049	-0.061	-0.061	0.033	
		I-B-I	112.514	2.377	-2.750	3.230	3.230	-1.944	
		B-I	2.232	-0.249	-0.049	-0.069	-0.069	0.025	
		I-B-I	110.980	3.219	-2.700	4.734	4.734	-0.432	
		P-B	1.943	-0.292	-0.410	0.064	0.064	0.169	
		P-B-I	106.748	-2.923	2.379	-4.622	-4.622	1.624	
		C-P-B	109.663	-0.529	1.134	0.212	0.212	-3.238	
		C-P-B-I	298.030	-15.809	1.622	-3.922	-3.922	-0.561	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC9N3H12OF2	HUXZIK	B-F	1.378	-0.050	0.014	-0.025	-0.025	-0.025	a
		B-F	1.374	-0.047	0.014	-0.021	-0.021	-0.021	
		F-B-F	110.627	2.343	0.526	0.758	0.758	1.354	
		O-B	1.456	0.073	0.089	0.048	0.048	0.081	
		O-B-F	110.743	-4.505	-0.554	-5.127	-5.127	-3.959	
		N-B	1.581	0.066	0.010	0.011	0.011	0.013	
		N-B-F	108.895	1.786	-0.542	2.834	2.834	1.889	
		C-N-B	119.601	-0.752	0.523	-1.046	-1.046	-0.839	
		C-N-B-F	130.051	-6.689	0.529	-12.757	-12.757	-12.412	
BC32N2H33O	IDIDEG	B-N	1.647	0.048	0.001	-0.018	-0.018	-0.024	a
		B-N	1.496	0.077	0.005	0.034	0.034	0.027	
		N-B-N	101.484	0.398	0.086	2.817	2.817	3.932	
		O-B	1.465	0.019	0.012	0.037	0.037	0.054	
		O-B-N	102.444	-1.483	-0.078	0.080	0.080	1.540	
B2C21PH31Cl2	IFICEH	B-Cl	1.955	-0.076	-0.034	-0.082	-0.082	-0.109	a
		B-B	1.721	-0.066	-0.021	-0.067	-0.067	0.024	
		B-B-Cl	87.839	-7.991	2.993	1.145	1.145	-25.616	
		Cl-B	1.812	0.025	-0.022	-0.048	-0.048	-0.060	
		Cl-B-B	114.348	-2.064	-0.439	4.466	4.466	6.272	
		Cl-B-B-Cl	95.955	14.454	0.453	-3.885	-3.885	6.594	
		P-B	1.970	-0.315	-0.101	0.139	0.139	0.065	
		P-B-Cl	100.787	0.648	-1.429	9.082	9.082	26.603	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C39N2H48Br2	IFIDIM	B-B	1.761	-0.108	-0.100	-0.100	-0.100	-0.090	a
		Br-B	2.061	-0.009	-0.025	-0.047	-0.047	-0.049	
		Br-B-B	114.149	0.676	-0.247	1.236	1.236	2.466	
		Br-B	2.083	-0.043	-0.030	-0.083	-0.083	-0.069	
		Br-B-B	98.651	1.000	2.181	1.812	1.812	-3.093	
		C-B	1.652	-0.065	-0.028	-0.046	-0.046	-0.023	
		C-B-B	125.757	1.304	0.955	2.767	2.767	-5.722	
		N-C-B	122.574	5.277	-0.131	-1.292	-1.292	4.469	
		N-C-B-B	43.475	-3.127	0.042	23.525	23.525	10.712	
BC15N2H28Cl	IFIFAG	Cl-B	1.973	-0.038	-0.014	-0.109	-0.109	-0.160	a
		C-B	1.656	-0.025	-0.010	-0.023	-0.023	-0.025	
		C-B-Cl	103.007	-4.597	-0.554	-0.021	-0.021	2.580	
		N-C-B	146.192	1.836	-0.558	0.158	0.158	-0.556	
		N-C-B-Cl	289.489	-3.632	0.855	0.060	0.060	2.140	
		C-N-C-B	172.234	-0.112	0.555	5.815	5.815	2.550	
BC5N2H9Cl2	IQASAV	B-Cl	1.874	0.038	-0.108	-0.041	-0.041	-0.065	a
		B-Cl	1.883	0.032	-0.110	-0.049	-0.049	-0.071	
		Cl-B-Cl	109.168	1.450	0.341	-0.380	-0.380	5.372	
		C-B	1.606	-0.005	-0.023	0.008	0.008	0.013	
		C-B-Cl	109.731	-7.266	-5.288	-3.869	-3.869	-1.629	
		N-C-B	128.786	-3.190	-0.409	-0.152	-0.152	-2.424	
		N-C-B-Cl	310.216	1.205	-0.170	2.374	2.374	-4.618	
		N-C-B	125.685	1.820	-0.350	-0.792	-0.792	1.726	
		N-C-B-Cl	128.204	4.590	0.222	4.823	4.823	-0.809	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C26P2H28	IRITIM	B-C	1.645	-0.017	-0.017	-0.021	-0.021	0.057	a
		B-C-P	112.059	-1.652	-1.059	2.212	2.212	3.458	
		B-P	1.937	-0.295	-0.025	0.106	0.106	0.091	
		B-P-C	110.380	-4.423	-1.038	-0.094	-0.094	-1.601	
		B-P-C-B	302.135	1.042	1.102	1.800	1.800	11.024	
		C-B	1.645	-0.017	-0.015	-0.021	-0.021	0.057	
		C-B-P	109.349	4.159	-0.957	0.191	0.191	7.132	
		C-B-P-C	56.283	2.196	-0.643	-3.175	-3.175	-8.858	
B2C12N8H14	JAWPEC	B-N	1.559	0.069	0.012	0.024	0.024	0.014	a
		B-N	1.502	0.066	0.025	0.027	0.027	0.033	
		N-B-N	109.860	-1.866	0.429	0.939	0.939	1.433	
		N-B	1.556	0.074	0.013	0.028	0.028	0.018	
		N-B-N	105.283	0.522	0.568	1.128	1.128	5.857	
		N-N-B	121.206	1.068	-0.369	-1.070	-1.070	0.582	
		N-N-B-N	154.754	-6.952	0.503	4.423	4.423	-55.452	
		B-N	1.546	0.085	0.046	0.034	0.034	0.022	
		B-N-N	122.219	0.999	0.596	0.733	0.733	-0.232	
		B-N-N-B	1.965	-1.911	0.476	-6.465	-6.465	24.671	
B4C16N12H32	JILFOZ	B-N	1.595	0.027	0.000	-0.003	-0.003	-0.023	a
		N-N-B	119.734	1.555	-0.056	3.264	3.264	1.458	
		C-N	1.345	0.042	0.001	0.045	0.045	0.036	
		C-N-B	130.794	-2.710	-0.044	-3.378	-3.378	-2.416	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC36P2H44Br	KAGSAM	B-Br	1.999	-0.048	-0.022	-0.031	-0.031	-0.027	a
		P-B	1.817	-0.024	-0.020	0.215	0.215	0.091	
		P-B-Br	114.440	-12.911	-0.437	2.001	2.001	1.271	
		P-B	1.837	-0.043	-0.032	0.196	0.196	0.071	
		P-B-Br	113.640	-12.093	-0.421	2.799	2.799	2.148	
		C-P-B	120.014	-7.045	-0.546	-9.462	-9.462	-0.209	
		C-P-B-Br	36.107	28.524	0.275	13.124	13.124	-8.229	
B2C10N2H21Br3	OKAWFEU	B-Br	2.012	0.014	-0.021	-0.071	-0.071	-0.027	a
		B-Br	2.013	0.010	-0.018	-0.069	-0.069	-0.019	
		Br-B-Br	107.816	-2.642	-1.238	5.890	5.890	1.807	
		N-B	1.579	0.010	0.007	-0.022	-0.022	0.022	
		N-B-Br	115.528	-0.805	0.459	-2.997	-2.997	-0.189	
		N-B	1.579	0.008	-0.008	-0.022	-0.022	0.022	
		N-B-Br	115.635	-1.388	0.452	-3.246	-3.246	-0.459	
		B-N	1.618	0.011	0.009	-0.023	-0.023	0.013	
		B-N-B	88.038	0.643	-0.460	-3.310	-3.310	-0.632	
		B-N-B-N	346.888	14.469	-2.558	7.078	7.078	0.836	
B2C6N2H6Cl4	KECCOK	B-Cl	1.808	0.030	-0.012	-0.021	-0.021	-0.045	a
		B-Cl	1.808	0.029	-0.013	-0.022	-0.022	-0.046	
		Cl-B-Cl	114.024	2.349	0.583	-0.479	-0.479	1.386	
		N-B	1.594	0.070	0.010	0.033	0.033	0.046	
		N-B-Cl	113.564	-2.319	-0.559	-1.309	-1.309	-1.039	
		N-B	1.574	0.017	-0.010	0.007	0.007	0.048	
		N-B-Cl	114.699	1.427	-0.558	1.591	1.591	0.593	
		B-N	1.371	0.023	0.011	0.037	0.037	0.009	
		B-N-Cl	137.737	0.376	0.690	0.001	0.001	0.413	
		B-N-Cl-N	180.006	0.290	-0.557	0.157	0.157	0.012	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC9N2H16Cl3	KIXQAL	Cl-B	1.866	0.016	-0.056	-0.044	-0.044	-0.054	a
		Cl-B	1.869	0.009	-0.056	-0.052	-0.052	-0.060	
		Cl-B-Cl	110.790	1.453	0.536	0.963	0.963	2.401	
		Cl-B	1.858	0.003	-0.054	-0.052	-0.052	-0.064	
		Cl-B-Cl	106.292	2.665	0.623	1.536	1.536	3.347	
		C-B	1.628	-0.045	-0.023	-0.004	-0.004	0.018	
		C-B-Cl	107.893	-3.072	0.315	-1.100	-1.100	-3.771	
		N-C-B	122.601	-0.464	-0.459	-0.032	-0.032	0.252	
		N-C-B-Cl	187.501	-2.164	-0.380	0.501	0.501	-5.891	
BC17N2H7I2F10	KIYHUW	B-I	2.222	-0.165	-0.025	0.038	0.038	0.009	a
		B-I	2.341	-0.275	-0.025	-0.071	-0.071	-0.051	
		I-B-I	108.038	-9.480	0.138	-3.161	-3.161	2.583	
		N-B	1.532	0.005	0.001	-0.000	-0.000	0.021	
		N-B-I	112.567	-1.136	-0.024	-1.027	-1.027	0.026	
		N-B	1.523	0.014	0.001	0.009	0.009	0.030	
		N-B-I	112.898	-1.342	-0.020	-1.373	-1.373	-0.302	
		C-N-B	118.282	1.495	0.027	3.150	3.150	0.306	
		C-N-B-I	162.077	-16.193	0.006	-19.729	-19.729	-3.643	
BC25PNH31	KOLFIC	B-N	1.386	0.047	0.015	0.009	0.009	-0.031	a
		C-N-B	122.847	-0.330	0.541	-0.126	-0.126	-0.156	
		C-B	1.593	-0.002	-0.011	0.006	0.006	0.027	
		C-B-N	124.827	-2.320	-1.163	-2.685	-2.685	3.899	
		C-B-N-C	353.782	7.852	0.694	5.556	5.556	6.995	
		C-C-B	113.832	-5.759	0.591	-7.277	-7.277	-5.753	
		C-C-B-N	159.343	5.927	0.666	-16.186	-16.186	-20.616	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B4C20P4H48O12	LEJVON	B-C	1.581	0.014	0.001	0.017	0.017	0.067	a
		O-B	1.498	-0.008	0.032	-0.016	-0.016	0.014	
		O-B-C	110.968	-0.210	0.008	-0.389	-0.389	-10.434	
		O-B	1.492	-0.003	0.012	-0.010	-0.010	0.020	
		O-B-C	110.385	4.556	-0.026	0.090	0.090	-10.044	
		O-B	1.491	-0.014	0.001	-0.009	-0.009	0.021	
		O-B-C	110.315	2.282	-0.032	0.206	0.206	-9.890	
B3N3H6	LIKSIH01	B-N	1.428	0.022	0.010	0.008	0.008	0.008	a
		B-N	1.431	0.019	0.010	0.005	0.005	0.005	
		N-B-N	117.049	1.551	0.560	2.657	2.657	4.171	
		B-N	1.431	0.019	0.010	0.005	0.005	0.005	
		B-N-B	123.064	-1.668	0.560	-2.773	-2.773	-4.287	
		B-N-B-N	358.471	1.530	-0.545	1.526	1.526	1.526	
		N-B	1.431	0.019	0.060	0.005	0.005	0.005	
		N-B-N	116.764	1.840	0.560	2.944	2.944	4.458	
		N-B-N-B	0.794	-0.794	0.625	-0.797	-0.797	-0.796	
B2C21P2H47SO3	FLURHUC	B-P	2.031	-0.145	-0.110	0.064	0.064	0.172	a
		B-P-B	1.986	-0.006	-0.075	0.083	0.083	0.117	
		O-B	87.805	2.316	-3.313	-0.585	-0.585	-1.128	
		O-B-P	1.549	-0.043	-0.037	-0.077	-0.077	-0.065	
		O-B-P-B	107.622	3.125	-5.962	-7.792	-7.792	-1.788	
		C-B	228.383	9.689	-1.427	5.563	5.563	4.398	
		C-B-P	1.609	-0.035	-0.035	-0.006	-0.006	0.040	
		C-B-P-B	118.625	2.346	1.980	2.867	2.867	-1.021	
		P-B	98.022	3.274	0.005	5.225	5.225	3.622	
		P-B-P	1.974	-0.014	-0.067	0.089	0.089	0.129	
		P-B-P-B	90.259	-3.314	-2.914	1.566	1.566	4.998	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C12N2H30Cl2	LUYJOE	B-Cl	1.842	0.069	-0.036	-0.000	-0.000	-0.044	a
		N-B	1.600	0.024	0.012	-0.011	-0.011	0.017	
		N-B-Cl	115.318	-4.790	-1.453	-2.479	-2.479	1.554	
		B-N	1.607	0.017	0.009	-0.017	-0.017	0.011	
		B-N-B	86.622	2.127	0.638	0.137	0.137	0.755	
		B-N-B-Cl	119.798	-7.353	-1.041	-3.466	-3.466	2.079	
		Cl-B	1.842	0.069	-0.031	-0.000	-0.000	-0.044	
		Cl-B-N	115.040	-4.502	-2.203	-2.190	-2.190	1.847	
		Cl-B-N-B	120.023	-7.444	-2.203	-3.409	-3.409	2.193	
BC16H18ClO	MARSED	B-Cl	1.893	0.015	-0.069	-0.054	-0.054	-0.103	a
		B-O	1.569	0.194	0.007	0.055	0.055	0.055	
		Cl-B-O	104.118	-5.041	-2.674	-0.443	-0.443	4.245	
		C-B	1.599	-0.053	-0.043	-0.014	-0.014	0.001	
		C-B-Cl	111.122	1.006	-1.194	1.435	1.435	3.550	
		C-C-B	120.788	0.341	-0.069	-0.644	-0.644	-1.238	
		C-C-B-Cl	38.588	6.531	-0.110	-2.172	-2.172	-4.859	
B2C10N2H16O2	MEMSUS	B-B	1.707	-0.111	-0.010	-0.049	-0.049	-0.061	a
		B-O	1.410	0.010	0.013	0.028	0.028	0.052	
		B-B-O	113.724	1.142	-0.516	1.601	1.601	-1.425	
		B-O	1.410	0.010	0.073	0.028	0.028	0.052	
		B-B-O	113.754	1.064	-0.515	1.559	1.559	-1.475	
		O-B-B-O	334.940	-20.244	-1.298	-9.546	-9.546	-18.075	
		N-B	1.391	0.024	0.014	0.006	0.006	-0.030	
		N-B-B	131.532	-4.593	0.600	-0.128	-0.128	-0.125	
		N-B	1.391	0.024	0.014	0.006	0.006	-0.030	
		N-B-B	131.530	-4.593	0.612	-0.133	-0.133	-0.121	
		N-B-B-O	151.889	-17.956	-0.516	-8.537	-8.537	-17.171	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC4H10Cl3O	MEQDOC	B-Cl	1.829	0.015	-0.110	-0.041	-0.041	-0.052	a
		B-Cl	1.825	0.017	-0.110	-0.035	-0.035	-0.048	
		Cl-B-Cl	110.126	3.152	3.201	1.726	1.726	2.454	
		B-Cl	1.837	0.023	-0.110	-0.035	-0.035	-0.052	
		Cl-B-Cl	111.542	2.616	2.374	1.741	1.741	2.054	
		O-B	1.543	0.082	0.055	0.069	0.069	0.109	
		O-B-Cl	107.258	-2.484	-2.040	-0.422	-0.422	-0.613	
		C-O-B	117.445	-6.295	-0.811	-5.941	-5.941	-3.941	
BC14NH16S	MIGYAE	B-N	1.619	0.017	0.009	-0.017	-0.017	0.006	a
		B-S	1.966	-0.066	-0.045	-0.088	-0.088	-0.051	
		N-B-S	99.465	1.002	0.536	-0.015	-0.015	6.049	
		C-B	1.605	-0.040	-0.012	-0.013	-0.013	0.007	
		C-B-N	111.761	0.427	-0.511	-0.608	-0.608	2.798	
		C-C-B	125.940	-3.430	0.503	-4.616	-4.616	-4.412	
		C-C-B-N	1.238	20.760	-1.233	30.463	30.463	-18.408	
BC21NH28Br2	MIYKEM	B-Br	1.936	0.046	-0.088	-0.037	-0.037	0.004	a
		B-Br	1.921	0.061	-0.047	-0.022	-0.022	0.020	
		Br-B-Br	115.887	-3.793	-2.975	7.473	7.473	0.328	
		N-B	1.373	0.030	0.100	0.010	0.010	-0.004	
		N-B-Br	121.737	1.862	0.399	-4.049	-4.049	-0.114	
		C-N-B	119.288	0.132	-0.043	0.085	0.085	2.177	
		C-N-B-Br	29.264	1.598	-0.321	-2.331	-2.331	-4.973	
		C-C-N-B	234.387	-8.603	-0.442	-0.106	-0.106	-0.256	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC11N3H12SO	MORSUI	B-N	1.472	0.052	0.002	0.021	0.021	-0.014	a
		N-N-B	122.425	-2.567	0.007	-1.835	-1.835	-0.840	
		C-B	1.545	-0.007	-0.003	0.018	0.018	0.024	
		C-B-N	115.430	0.631	0.031	1.166	1.166	1.123	
		C-B-N-N	354.504	-5.818	-0.014	5.461	5.461	3.678	
BC37P2H33	MUGLEG	B-C	1.672	0.425	-0.059	-0.029	-0.029	0.134	a
		P-C-B	117.331	-17.763	-5.730	-8.494	-8.494	-8.698	
		P-C-B	111.219	-12.357	-4.172	3.304	3.304	-3.224	
		C-P-C-B	299.727	3.135	-0.314	-2.611	-2.611	1.034	
BC4N2H9Br2	NAXPEI	B-Br	2.013	0.027	-0.025	-0.039	-0.039	-0.005	a
		B-Br	2.019	0.021	-0.040	-0.046	-0.046	-0.011	
		Br-B-Br	109.207	-1.145	0.353	3.532	3.532	0.856	
		N-B	1.592	0.031	0.007	-0.015	-0.015	0.028	
		N-B-Br	111.178	-2.941	-1.227	-4.893	-4.893	-0.976	
		C-B	1.594	-0.080	-0.086	-0.036	-0.036	-0.033	
		C-B-Br	108.595	1.322	-0.166	0.912	0.912	-0.853	
B2C32PH36Cl	NIHLUM	B-B	1.687	-0.087	-0.044	-0.063	-0.063	-0.080	a
		Cl-B	1.774	0.063	-0.029	-0.022	-0.022	-0.062	
		Cl-B-B	119.861	-4.940	0.139	-3.408	-3.408	3.101	
		P-B	1.845	-0.050	-0.036	0.196	0.196	-0.042	
		P-B-B	119.864	-1.209	0.058	4.737	4.737	12.931	
		P-B-B-Cl	59.828	13.535	-0.106	29.534	29.534	15.565	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC18PH6F12	ODUKAB	P-B	2.041	-0.086	-0.021	0.105	0.105	0.023	a
		C-B	1.632	-0.059	-0.021	-0.046	-0.046	-0.014	
		C-B-P	105.152	-3.062	-0.558	-1.043	-1.043	3.311	
		C-B	1.630	-0.057	-0.027	-0.043	-0.043	-0.012	
		C-B-P	106.424	-4.330	0.528	-2.303	-2.303	2.104	
		C-B	1.632	-0.059	-0.017	-0.045	-0.045	-0.014	
		C-B-P	102.949	-0.921	-0.601	1.095	1.095	5.364	
B3N3H3F3	OFINEX	B-N	1.417	0.036	0.010	0.026	0.026	0.024	a
		F-B	1.337	-0.014	0.012	0.019	0.019	0.013	
		F-B-N	120.502	-0.705	0.559	-2.145	-2.145	-0.911	
		B-N	1.418	0.035	0.010	0.025	0.025	0.024	
		B-N-B	120.960	-1.402	0.573	-4.278	-4.278	-1.812	
		B-N-B-F	180.000	0.000	-0.559	-0.000	-0.000	0.000	
		N-B	1.418	0.034	0.010	0.024	0.024	0.023	
		N-B-N	119.043	1.391	0.572	4.267	4.267	1.802	
BC4N2H10ClO	OQAQUT	B-N	1.598	0.115	0.037	-0.020	-0.020	-0.061	a
		B-C	1.588	-0.040	-0.062	-0.035	-0.035	-0.054	
		B-C-N	108.388	-1.442	-2.195	3.071	3.071	11.611	
		O-N-B	115.066	1.352	-0.156	1.309	1.309	-0.797	
		O-N-B-C	305.274	-24.347	0.652	-26.616	-26.616	-40.670	
		N-C-B	178.074	-0.034	0.070	0.925	0.925	2.864	
		N-C-B-N	210.667	-9.538	-0.691	-1.492	-1.492	-0.258	
BC15PH24Cl2	OSUYIL	B-Cl	1.881	-0.034	-0.047	-0.052	-0.052	-0.068	a
		B-Cl	1.858	-0.027	-0.047	-0.029	-0.029	-0.049	
		Cl-B-Cl	108.091	4.487	0.880	-2.557	-2.557	1.403	
		P-B	2.025	-0.218	-0.003	0.119	0.119	0.152	
		P-B-Cl	109.657	-7.680	0.031	5.058	5.058	5.025	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC21N2H25F2	PATCAQ	B-F	1.397	-0.073	0.049	-0.031	-0.031	-0.035	a
		B-F	1.399	-0.075	0.046	-0.033	-0.033	-0.037	
		F-B-F	109.736	0.913	-3.350	-2.736	-2.736	0.865	
		C-B	1.634	-0.037	-0.047	-0.018	-0.018	0.004	
		C-B-F	114.813	4.100	-0.224	2.125	2.125	-0.009	
		C-B	1.681	0.263	-0.009	0.029	0.029	0.046	
		C-B-F	110.742	-4.846	-0.173	-2.273	-2.273	-1.022	
		N-C-B	140.324	8.104	-0.173	3.533	3.533	3.105	
		N-C-B-F	306.164	-5.037	-0.167	-0.302	-0.302	-6.837	
B4C26P2N4H60	PELFER	B-P	1.930	-0.109	-0.010	0.121	0.121	0.142	a
		B-P	1.960	-0.128	-0.086	0.112	0.112	0.142	
		B-P-B	88.752	2.258	-0.481	-5.379	-5.379	1.880	
		C-B	1.589	-0.028	-0.010	-0.004	-0.004	0.065	
		C-B-P	103.107	3.653	-0.484	4.063	4.063	-5.511	
		C-B-P-B	38.806	-4.971	-0.529	-7.340	-7.340	0.188	
		N-B	1.406	0.019	0.015	-0.006	-0.006	-0.058	
		N-B-P	126.119	-3.269	1.347	-2.095	-2.095	6.081	
		N-B-P-B	220.239	3.132	0.552	-1.572	-1.572	5.453	
B3C27N3H30O3	PERTIQ	B-O	1.373	0.037	0.017	0.048	0.048	0.074	a
		B-N	1.429	0.033	0.043	0.029	0.029	0.036	
		O-B-N	112.356	-1.252	-0.557	-1.216	-1.216	-1.829	
		N-B	1.419	0.005	0.010	0.003	0.003	-0.024	
		N-B-O	127.818	0.324	-0.560	-1.693	-1.693	1.057	
		B-N	1.428	0.033	0.010	0.029	0.029	0.037	
		B-N-B	120.109	-0.870	0.556	-3.561	-3.561	-0.691	
		B-N-B-O	183.981	-4.545	0.545	-13.921	-13.921	-6.725	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC13HOF10	PIWFUY	B-C	1.602	0.063	-0.013	-0.030	-0.030	-0.055	a
		O-C-B	174.730	0.796	-0.061	-0.710	-0.710	4.108	
		C-B	1.616	-0.032	-0.024	-0.027	-0.027	-0.019	
		C-B-C	107.843	-6.554	-1.327	-3.312	-3.312	0.938	
		C-B-C-O	93.325	-47.983	0.698	-19.436	-19.436	-61.793	
B3C9N3H24O6	POHTEN	O-B	1.509	-0.019	0.011	-0.003	-0.003	0.001	a
		N-B	1.594	0.025	0.010	-0.001	-0.001	0.019	
		N-B-O	104.788	-0.484	-0.533	-5.315	-5.315	-4.614	
		N-B	1.603	0.022	0.009	-0.010	-0.010	0.011	
		N-B	100.421	0.441	-0.532	-0.347	-0.347	1.965	
		N-B-O	250.299	-1.276	-0.538	-1.476	-1.476	-1.754	
		B-N	118.180	-5.015	-2.562	-5.287	-5.287	-3.247	
		B-N-B	203.391	-5.628	-0.535	-2.625	-2.625	-4.623	
BC2NH10	PUBDIA	B-N-B-O	1.595	0.012	0.010	-0.006	-0.006	0.014	a
		N-B	1.596	0.110	0.029	-0.030	-0.030	-0.013	
		C-N-B	112.027	-3.221	0.027	-2.156	-2.156	-1.611	
BC18N2H20I	PUHJEH	C-N-B	112.724	-3.917	-0.344	-2.851	-2.851	-2.308	a
		I-B	2.119	-0.119	-0.058	0.024	0.024	-0.013	
		N-B	1.418	0.026	0.101	0.022	0.022	0.027	
		N-B-I	126.580	-0.206	0.004	-0.430	-0.430	0.307	
		C-N-B	107.544	-0.812	0.153	-1.005	-1.005	0.023	
		C-N-B-I	180.133	-0.488	-0.044	-0.300	-0.300	-0.155	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC9NH12Cl2	PUPHOX01	Cl-B	1.867	0.009	-0.018	-0.040	-0.040	-0.063	a
		Cl-B	1.846	0.019	-0.017	-0.029	-0.029	-0.054	
		Cl-B-Cl	108.985	2.198	1.080	-0.820	-0.820	2.976	
		N-B	1.634	0.014	-0.009	-0.007	-0.007	0.022	
		N-B-Cl	107.824	-0.679	-1.141	1.131	1.131	2.148	
		C-B	1.578	-0.032	-0.010	0.004	0.004	0.025	
		C-B-Cl	111.069	-0.092	0.534	-0.076	-0.076	-3.405	
BC5H11O3	PUPSAU	B-O	1.351	0.028	0.013	0.035	0.035	0.056	a
		B-O	1.353	0.014	0.027	0.022	0.022	0.051	
		O-B-O	116.814	-3.839	-0.807	-0.277	-0.277	-0.675	
		B-O	1.363	0.024	0.014	0.029	0.029	0.045	
		O-B-O	123.773	6.064	0.447	3.106	3.106	2.508	
		C-O-B	119.654	-4.660	0.442	-3.538	-3.538	-4.159	
		C-O-B-O	181.216	-2.868	0.432	-2.816	-2.816	-3.290	
BC3N2H13O3	QEJJOJF	B-O	1.444	-0.002	0.043	0.010	0.010	0.034	a
		B-O	1.430	0.012	0.052	0.018	0.018	0.047	
		O-B-O	104.685	-0.884	-0.696	11.330	11.330	3.396	
		B-O	1.452	-0.008	0.036	-0.002	-0.002	0.018	
		O-B-O	116.562	0.294	1.334	-1.246	-1.246	3.943	
		N-B	1.619	0.060	0.016	0.025	0.025	0.061	
		N-B-O	108.092	-0.261	-1.082	-4.544	-4.544	-6.301	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C8N2H16Br4	QOGQUY	Br-B	2.014	0.005	-0.037	-0.072	-0.072	-0.028	a
		Br-B	1.990	0.028	-0.017	-0.048	-0.048	0.002	
		Br-B-BR	107.032	-2.667	-5.730	4.497	4.497	1.224	
		N-B	1.597	-0.001	-0.006	-0.030	-0.030	0.016	
		N-B-Br	113.942	0.588	0.126	-0.963	-0.963	1.455	
		N-B	1.601	-0.001	-0.002	-0.034	-0.034	0.016	
		N-B-Br	116.079	-0.047	0.102	-2.163	-2.163	0.285	
		B-N	1.605	-0.009	-0.003	-0.038	-0.038	0.008	
		B-N-B	86.863	1.455	-0.026	-3.859	-3.859	-0.823	
		B-N-B-N	348.834	11.083	0.079	-0.724	-0.724	-5.036	
BC22PN2H18	QOMCAY	P-B	1.945	-0.146	-0.014	0.119	0.119	0.193	a
		N-B	1.413	0.011	0.042	0.017	0.017	-0.002	
		P-B-N	124.369	-3.554	0.000	-3.888	-3.888	-5.852	
		N-B	1.411	0.019	0.042	0.019	0.019	-0.003	
		N-B-P	118.752	-1.850	0.000	-0.932	-0.932	-1.443	
		C-P-B	102.053	-0.391	-0.277	-1.801	-1.801	0.027	
		C-P-B-N	1.933	-8.574	0.105	7.604	7.604	-1.827	
BC17N4H17	QONCEC	B-N	1.522	0.025	0.008	0.013	0.013	0.009	a
		B-N	1.521	0.031	0.013	0.020	0.020	0.018	
		N-B-N	110.522	1.070	-0.194	0.908	0.908	0.947	
		B-N	1.530	0.022	0.006	0.009	0.009	0.007	
		N-B-N	112.660	0.142	-0.275	0.291	0.291	0.054	
		B-N	1.632	0.069	0.003	0.027	0.027	0.032	
		N-B-N	109.051	-1.522	-0.195	-1.537	-1.537	-1.134	
		C-N-B	125.496	-0.682	-0.058	-0.977	-0.977	-0.750	
		C-N-B-N	33.494	-1.566	0.013	0.523	0.523	2.008	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C26N4H28S2	REBBEH	B-B	1.734	-0.020	-0.004	-0.021	-0.021	0.082	a
		B-N	1.555	-0.005	-0.006	-0.033	-0.033	-0.038	
		B-B-N	105.822	-2.549	-0.073	1.397	1.397	-0.060	
		S-B	1.996	-0.070	-0.034	-0.105	-0.105	-0.088	
		S-B-B	103.982	3.517	0.027	1.150	1.150	-0.531	
		C-N-B	116.011	0.949	-0.720	-1.371	-1.371	0.543	
		C-N-B-B	358.837	-1.373	0.031	3.384	3.384	3.673	
B3C4H8I5	REYVOG	I-B	2.151	-0.111	-0.110	0.074	0.074	-0.070	a
		C-B	1.569	-0.038	-0.014	0.021	0.021	0.039	
		C-B-I	117.140	-2.437	-1.655	-2.255	-2.255	4.952	
		B-C	1.550	-0.027	-0.008	0.007	0.007	0.055	
		B-C-B	104.564	7.425	6.303	-15.928	-15.928	-0.984	
		B-C-B-O	281.925	81.234	1.560	15.029	15.029	-2.945	
		I-B	2.129	-0.114	-0.110	0.042	0.042	-0.019	
		I-B-C	120.695	-1.067	-0.388	-16.093	-16.093	-3.003	
		I-B-C-B	291.655	-29.487	-3.898	21.542	21.542	-16.515	
BC3NH7Br3O	RUGXUM	B-Br	2.030	0.010	-0.017	-0.245	-0.036	-0.041	a
		B-Br	2.038	0.002	-0.091	-0.256	-0.044	-0.048	
		Br-B-Br	108.020	-1.861	-0.623	-2.319	2.535	5.103	
		B-Br	1.983	0.014	-0.045	-0.208	-0.020	-0.011	
		Br-B-Br	110.951	2.033	1.162	-4.000	3.357	3.470	
		B-O	1.474	0.056	0.067	0.037	0.084	0.076	
		B-O-Br	111.649	-3.654	-1.197	1.950	-3.996	-3.693	
		C-O-B	125.314	-13.488	-6.303	-5.553	-7.228	-3.166	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC8H6O3F3	RUGYEX	B-F	1.355	-0.046	0.010	-0.005	-0.011	-0.009	a
		B-F	1.347	-0.037	0.010	0.004	-0.002	-0.000	
		F-B-F	114.733	2.767	-0.573	-1.049	-0.581	-0.710	
		B-F	1.356	-0.056	0.010	-0.014	-0.023	-0.021	
		F-B-F	111.825	7.442	0.573	3.664	4.675	3.927	
		O-B	1.567	0.347	0.010	0.044	0.049	0.084	
		O-B-F	108.254	-12.481	0.573	-2.341	-5.278	-4.941	
		C-O-B	123.752	-5.057	0.573	-0.875	-2.451	-4.774	
		C-O-B-F	113.316	-53.618	-0.573	-52.306	-53.554	-53.551	
BC12P2NH20	RUWPEE	P-B	1.936	-0.130	-0.012	-0.077	0.137	0.225	a
		P-B	1.946	-0.141	-0.162	-0.097	0.119	0.196	
		P-B-P	108.532	-2.251	-0.496	0.697	-0.376	-6.002	
		B-N	1.383	0.000	0.018	0.028	-0.010	-0.054	
		B-N-P	123.338	1.468	-0.432	-0.761	0.746	3.035	
		C-P-B	95.995	4.560	-0.485	2.955	-1.464	1.587	
		C-P-B-P	343.828	0.075	0.479	17.372	16.893	18.097	
B3C12P2N3H24	RUWPUU	B-B	1.704	-0.103	-0.011	-0.115	-0.068	-0.036	a
		B-B	1.694	-0.093	-0.083	-0.105	-0.057	-0.011	
		B-B-B	115.118	-5.296	0.483	0.065	-9.266	-16.645	
		P-B	1.960	-0.160	-0.110	-0.100	0.105	0.170	
		P-B-B	112.730	-0.460	-0.483	3.744	2.004	-6.641	
		P-B-B-B	297.296	-14.949	-0.498	-7.953	-15.350	-43.754	
		P-B	1.966	-0.165	-0.012	-0.106	0.100	0.085	
		P-B-B	111.928	0.317	-0.468	4.564	2.786	-1.155	
		P-B-B-B	65.591	12.504	-0.483	5.250	12.591	3.529	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C13N2H29Cl	SACDEF	Cl-B	1.809	0.022	-0.019	-0.095	-0.025	-0.061	a
		N-B	1.375	0.018	0.097	0.054	0.020	-0.014	
		N-B-Cl	123.024	3.166	0.529	0.406	1.255	5.382	
		C-B	1.538	0.006	0.046	0.002	0.031	0.071	
		C-B-Cl	122.627	-2.941	0.530	0.843	-4.453	-4.363	
		B-C	1.587	-0.017	-0.015	-0.028	0.001	0.037	
		B-C-B	102.026	-1.377	-0.529	0.237	-4.281	0.213	
		B-C-B-N	358.628	1.371	0.537	1.484	1.427	1.382	
B2C18H22I2	SOZZUC	B-B	1.663	-0.071	-0.014	-0.117	-0.077	-0.061	a
		B-I	2.166	-0.117	-0.014	-0.174	0.343	-0.096	
		B-B-I	114.862	0.107	0.601	-1.886	-53.426	15.007	
		I-B	2.158	-0.109	-0.014	-0.166	0.348	-0.087	
		I-B-B	116.744	-1.871	0.549	-3.765	-55.186	13.014	
		C-B	1.558	-0.051	-0.011	-0.055	-0.045	-0.000	
		C-B-B	124.875	2.323	0.619	6.380	23.852	-17.289	
		C-C-B	120.889	0.624	-0.822	2.788	3.028	0.353	
		C-C-B-B	87.970	6.116	-0.580	7.586	101.405	-7.134	
B2C18H22Br2	SUBDOI	B-B	1.673	-0.080	-0.100	-0.112	-0.062	-0.099	a
		B-Br	1.929	0.064	-0.041	-0.128	-0.011	-0.031	
		B-B-Br	118.799	-5.293	-0.791	-7.565	-7.393	4.791	
		Br-B	1.933	0.060	-0.040	-0.131	-0.015	-0.035	
		Br-B-B	117.608	-4.098	-2.418	-6.805	-6.174	5.897	
		Br-B-B-Br	71.620	17.320	0.161	17.091	15.147	7.591	
		C-B	1.557	-0.048	-0.012	-0.057	-0.026	-0.008	
		C-B-B	119.847	6.315	2.340	13.243	6.171	-6.693	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC11NH13Cl	TANGEV	Cl-B	1.922	0.000	-0.100	-0.082	-0.058	-0.102	a
		N-B	1.623	-0.003	-0.026	0.060	-0.035	-0.048	
		N-B-Cl	103.096	-0.989	-2.237	-0.004	3.140	6.226	
		C-N-B	120.683	-1.305	-0.195	-0.344	0.789	-0.779	
		C-N-B-Cl	49.516	-11.401	-0.151	-10.457	-16.719	-8.925	
		C-C-N-B	180.112	-0.007	-0.051	-2.819	-3.431	-2.573	
B2C14N4H18	TIDBOX	B-N	1.400	0.079	0.022	0.051	0.072	0.053	a
		N-N-B	110.323	-1.915	0.566	-0.439	-3.095	-1.533	
		B-N	1.403	0.108	0.012	0.060	0.067	0.032	
		B-N-N	109.651	-4.275	0.577	-0.456	-3.562	-0.380	
		B-N-N-B	359.352	-17.557	0.520	1.836	-14.821	1.104	
		N-B	1.432	0.016	0.069	0.055	0.014	0.024	
		N-B-N	104.818	4.293	0.585	1.255	5.493	3.580	
		N-B-N-N	359.598	14.376	0.591	-0.499	13.582	-0.422	
B2C19N2H32S	VAJKIA	S-B	1.985	-0.025	-0.001	-0.036	-0.082	-0.056	a
		S-B	1.988	-0.028	-0.023	-0.040	-0.085	-0.059	
		B-S-B	95.278	-1.658	-0.035	3.846	2.189	0.344	
		N-B	1.574	0.024	0.007	0.090	-0.010	-0.017	
		N-B-S	98.492	1.407	-0.026	1.860	-0.248	4.672	
		N-B-S-B	334.679	-2.890	-0.608	7.936	-1.132	15.896	
		N-N-B	119.712	-1.761	-0.093	-1.542	-1.252	-1.269	
		N-N-B-S	21.036	0.455	-0.081	-8.335	-1.515	-13.855	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B4C8H24O2	VALWAG	B-O	1.378	0.014	0.053	0.012	-0.008	-0.000	a
		B-O	1.580	-0.030	-0.010	0.003	-0.013	-0.017	
		B-O-B	132.870	-11.229	-0.358	-3.112	0.257	1.269	
		O-B	1.581	-0.031	-0.007	0.007	-0.015	-0.018	
		O-B-O	86.076	1.450	-0.716	-5.508	-0.093	1.939	
		O-B-O-B	177.651	-47.608	-0.398	1.594	1.995	2.468	
		B-O	1.377	0.014	0.044	0.012	-0.008	-0.000	
		B-O-B	133.185	-11.570	0.301	-4.377	0.318	0.786	
		B-O-B-O	177.596	-47.590	-0.459	6.602	2.094	1.610	
B2C4N2H12I2	VESSOD	B-N	1.374	0.001	0.048	0.026	-0.003	-0.022	a
		B-B	1.684	-0.102	-0.110	-0.145	-0.070	0.012	
		B-B-N	125.505	3.542	2.347	7.400	7.574	-2.570	
		N-B	1.373	0.002	0.052	0.026	-0.002	-0.021	
		N-B-B	125.494	3.494	1.387	7.373	7.563	-2.594	
		N-B-B-N	77.058	24.414	1.992	16.918	16.585	27.020	
		I-B	2.193	-0.150	-0.110	-0.185	-0.030	-0.049	
		I-B-N	120.129	-2.270	-1.261	-2.911	7.640	4.977	
BC11N7H5F5	VIDQEE	B-N	1.613	0.042	0.002	0.062	-0.002	0.005	a
		B-N	1.545	0.036	0.016	0.045	0.009	0.008	
		N-B-N	108.956	-2.153	0.061	-2.674	-2.320	-2.976	
		N-N-B	121.510	-4.312	1.160	3.952	2.333	1.688	
		N-N-B-N	250.936	-38.852	-2.509	-25.694	-31.936	-34.494	
		C-B	1.633	-0.040	-0.038	-0.040	-0.010	0.001	
		C-B-N	107.659	-0.608	-3.347	3.060	3.007	3.033	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC27N2H36Br3	VISGUA	B-Br	2.022	-0.010	-0.013	-0.237	-0.047	-0.019	a
		B-Br	2.013	-0.002	-0.013	-0.232	-0.039	-0.010	
		Br-B-Br	105.943	1.951	0.678	-2.136	5.497	2.550	
		B-Br	2.029	-0.004	-0.012	-0.238	-0.038	-0.014	
		Br-B-Br	106.881	2.106	0.575	-2.984	4.353	2.990	
		C-B	1.623	-0.052	-0.011	-0.077	-0.021	0.005	
		C-B-Br	114.951	-2.788	-0.721	-0.955	-6.045	-2.727	
		N-C-B	126.878	-0.208	-0.567	1.688	-0.437	0.029	
		N-C-B-Br	51.689	-18.463	0.551	-7.310	-19.389	-17.596	
BC24N6BrF12	WACGOY	B-Br	2.048	-0.015	-0.005	-0.224	-0.142	-0.067	a
		B-N	1.476	0.060	0.000	0.078	0.032	0.042	
		B-N-Br	113.041	-0.800	-0.653	-1.724	-4.388	-1.557	
		N-B	1.471	0.065	0.002	0.086	0.034	0.047	
		N-B-Br	113.925	-1.806	-0.020	-2.558	-4.849	-2.513	
		N-B	1.473	0.063	0.001	0.082	0.035	0.046	
		N-B-Br	110.447	1.948	-0.622	0.933	-1.719	1.110	
		C-N-B	122.598	-1.106	0.009	-0.820	-1.270	-0.697	
		C-N-B-N	137.207	-3.412	0.002	-5.524	-2.344	-2.978	
	XAMXUG	B-S	1.808	-0.024	-0.018	-0.063	-0.022	0.005	a
		B-S	1.808	-0.024	-0.018	-0.063	-0.022	0.005	
		S-B-S	119.323	0.678	0.029	0.680	0.680	0.681	
		B-S	1.797	-0.012	-0.018	-0.051	-0.010	0.017	
		S-B-S	120.972	-0.963	-0.094	-0.966	-0.953	-0.965	
		C-S-B	101.892	1.696	1.043	10.063	2.118	3.246	
		C-S-B-S	356.027	2.882	-0.036	3.488	3.399	3.267	
		C-C-S-B	102.863	-10.257	-0.010	-9.674	-11.090	-11.761	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B4CCl6O	XAYYIF	B-B	1.695	-0.076	-0.012	-0.087	-0.081	-0.055	a
		C-B	1.544	-0.087	0.011	-0.019	-0.025	-0.044	
		C-B-B	107.333	15.530	-0.551	3.476	0.009	4.217	
		O-C-B	180.000	0.119	0.010	0.045	0.077	0.068	
		O-C-B-B	0.000	-0.228	-0.551	0.000	0.000	0.000	
		Cl-B	1.749	0.224	0.010	-0.069	-0.037	-0.045	
		Cl-B-B	122.007	-25.874	0.549	1.149	4.246	2.862	
		Cl-B-B-C	179.988	-53.066	0.731	-0.139	-0.056	-0.119	
B3N3H3Br3	XEHNUV	Br-B	1.949	0.048	-0.110	-0.173	-0.062	-0.011	a
		N-B	1.406	0.024	0.030	0.041	0.016	0.026	
		N-B-Br	119.678	-0.692	0.009	-0.740	-2.569	-0.621	
		N-B	1.407	0.023	0.075	0.040	0.015	0.025	
		N-B-Br	119.658	-0.680	0.573	-0.734	-2.575	-0.622	
		B-N	1.419	0.011	-0.110	0.028	0.003	0.013	
		B-N-B	120.279	-2.315	-0.326	-2.417	-6.086	-2.186	
		B-N-B-N	1.205	-1.211	0.667	-1.207	-1.207	-1.209	
BC17N2H21O4	XIBLID	B-O	1.478	0.006	0.002	0.032	0.036	0.060	a
		B-O	1.481	0.003	0.005	0.030	0.038	0.058	
		O-B-O	104.544	3.726	0.055	2.981	2.297	1.746	
		N-B	1.541	0.050	0.002	0.078	0.008	-0.007	
		N-B-O	111.823	-1.490	-0.072	-1.079	-1.123	-1.832	
		N-B	1.548	0.043	0.002	0.071	0.001	-0.014	
		N-B-O	111.553	-1.158	-0.069	-0.759	-0.796	-1.519	
		C-O-B	107.521	-3.188	0.048	-3.052	-2.395	-3.349	
		C-O-B-O	0.372	-0.324	0.003	-0.361	-0.313	-0.320	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 E PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
BC24N6H6Cl7	XOGXIC	Cl-B	1.840	0.024	-0.090	-0.072	-0.028	-0.056	a
		N-B	1.479	0.057	0.021	0.098	0.052	0.050	
		N-B-Cl	113.385	-1.284	-0.201	0.215	-0.862	-0.647	
		N-B	1.484	0.051	0.007	0.092	0.049	0.045	
		N-B-Cl	113.673	-1.583	-0.098	-0.436	-1.612	-0.941	
		N-B	1.486	0.049	0.065	0.089	0.047	0.043	
		N-B-Cl	113.100	-0.953	-0.095	0.187	-0.981	-0.307	
BC22H35O	XUGDUY	O-B	1.651	0.901	-0.011	0.068	-0.002	0.001	a
		C-B	1.579	-0.075	-0.013	-0.069	-0.039	-0.052	
		C-B-O	104.540	-11.652	-0.574	2.502	3.727	6.498	
		C-C-B	174.808	5.665	0.793	8.381	6.085	4.931	
		C-C-B-O	42.280	-1.349	0.578	-41.839	-0.584	-13.413	
		C-C-C-B	57.979	39.598	0.592	74.091	38.967	39.157	
B2C4N2H12Br2	YAGLUN	Br-B	1.973	0.030	-0.038	-0.164	-0.056	-0.027	a
		B-B	1.682	-0.089	-0.110	-0.131	-0.060	-0.039	
		B-B-Br	114.375	-4.265	-0.984	-3.666	-3.560	-8.435	
		Br-B	1.986	0.017	-0.110	-0.178	-0.069	-0.041	
		Br-B-B	113.062	-2.823	-1.090	-2.319	-2.125	-7.087	
		Br-B-B-Br	93.474	13.539	6.303	17.466	16.053	7.833	
		N-B	1.377	0.005	0.055	0.021	-0.011	-0.033	
		N-B-Br	117.673	6.191	6.303	0.683	-0.190	7.098	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B2C16N2H22	YAGMEY	B-B	1.714	-0.101	-0.028	-0.119	-0.068	-0.075	a
		B-N	1.403	0.001	0.014	0.018	-0.023	-0.059	
		B-B-N	121.316	0.305	0.088	1.821	2.840	10.697	
		N-B	1.392	0.012	0.015	0.030	-0.012	-0.048	
		N-B-B	122.420	-0.799	-0.026	1.038	1.696	9.563	
		N-B-B-N	93.450	-9.232	0.567	8.260	-3.050	2.586	
		C-N-B	122.584	-1.111	-0.097	0.132	-1.072	1.930	
		C-N-B-B	359.244	5.449	-0.350	-2.787	-0.314	-1.523	
BC22N2H15F2	YOHNAM	B-N	1.646	0.131	0.003	0.095	-0.001	0.002	a
		F-B	1.383	-0.052	0.025	-0.018	-0.018	-0.021	
		F-B-N	106.982	-0.004	0.198	-0.290	0.881	1.513	
		F-B	1.379	-0.046	0.028	-0.012	-0.011	-0.015	
		F-B-N	106.993	-0.880	0.230	-0.557	0.167	1.169	
B2C16P2N2H38	ZARTAN	B-B	1.682	-0.033	-0.017	-0.116	-0.019	0.033	a
		P-B	2.002	-0.149	-0.011	-0.087	0.105	0.198	
		P-B-B	95.690	-2.478	-1.072	0.433	-0.912	-1.792	
		P-B	1.982	-0.153	-0.011	-0.082	0.119	0.207	
		P-B-B	97.315	-1.401	-1.066	1.939	-1.087	-2.269	
		P-B-B-P	18.847	-6.528	-0.657	1.423	2.539	1.041	
		N-B	1.383	-0.007	0.010	0.020	-0.012	-0.057	
		N-B-B	136.728	-1.241	-0.576	-1.875	-0.919	-3.518	
		N-B-B-P	217.330	-6.092	0.580	3.163	5.372	-1.355	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de boro.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
B3C18N3H28S2	ZATCUS	B-B	1.720	-0.120	-0.020	-0.114	-0.062	-0.060	a
		B-B	1.714	-0.114	-0.020	-0.107	-0.056	-0.054	
		B-B-B	114.173	-7.501	-0.544	-0.039	-27.526	-15.948	
		S-B	1.863	-0.014	-0.020	-0.065	0.030	-0.006	
		S-B-B	119.640	-6.975	-0.547	5.172	-34.512	-7.124	
		S-B-B-B	56.865	19.634	-0.563	20.644	-12.352	3.947	
		S-B	1.849	0.000	-0.031	-0.051	0.045	0.008	
		S-B-B	122.153	-9.560	-1.128	2.682	-37.109	-9.503	
BC12N2H15	ZOCVAQ	S-B-B-B	68.003	8.898	-0.571	9.794	-23.353	-6.499	a
		B-N	1.603	0.081	0.012	0.100	0.005	0.022	
		C-B	1.604	-0.011	0.010	-0.016	-0.003	0.012	
		C-B-N	99.593	-0.901	0.563	-0.522	2.114	2.854	
		C-C-B	108.776	1.701	0.566	2.851	0.503	-0.294	
		C-C-B-N	14.671	2.507	0.562	-4.425	-2.600	-5.162	
		C-C-C-B	0.223	-0.618	0.563	0.055	1.581	1.147	

Código	Referências para a Geometria
a	Allen, F. H. research papers The Cambridge Structural Database : a quarter of a million crystal structures and rising research papers. 380–388 (2002).
b	``Structural Inorganic Chemistry'', A. F. Wells, Clarendon Press, Oxford, 1984.
c	L. A. Curtiss, J. A. Pople, J. Chem. Phys., 90, 4314 (1989).
d	J. H. Callomon, E. Hirota, T. Iijima, K. Kuchitsu, W. J. Lafferty, ``Structure Data on Free Polyatomic Molecules,'' Landolt-Bornstein, New Series, Group II, Vol. 15, Springer, Berlin (1977).
e	M. D. Harmony, V. W. Laurie, R. L. Kuczkowsky, R. H. Schwendeman, D. A. Ramsay, F. J. Lovas, W. J. Lafferty, A. G. Maki, J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 3 (1979).
f	E. Switkes, I. R. Epstein, J. A. Tossell, R. M. Stevens, W. N. Lipscomb, J. Am. Chem. Soc., 92, 3837 (1970).
g	D. Schwock, A. B. Burg, R. A. Beaudet, Inorg. Chem. 16, 3219 (1977).
h	I. R. Epstein, J. A. Tossell, E. Switkes, I. R. M. Stevens, W. N. Lipscomb, Inorg. Chem., 10, 171, (1971).
i	S. G. W. Ginn, J. K. Kennedy, J. Overend, J. Chem. Phys., 48, 1571 (1968).
j	G. Herzberg, J. W. C. Johns, Proc. R. Soc. London, Ser. A., 298, 142 (1967).

Apêndice B: Selênio

Tabela 1 – Entalpia de formação experimental (em ΔH_f em kcal.mol⁻¹) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H10Se2	(C6H5)-Se-Se-(C6H5)	56.72	6.50	10.97	-22.49	-4.76	2.24	a
C8N2H6Se	1 2 3 Selenadiazole4pheny	108.10	-19.83	-12.74	-42.76	-9.08	-14.40	a
C6H15SeBr	Et3SeBr	-30.10	19.58	2.14	-39.03	1.71	6.91	b
C14H14Se2	C6H5-CH2-Se-Se-CH2-C6H5	52.20	-7.11	-3.89	-50.16	-6.96	-14.99	b
CSe2	Carbondiselenide	61.40	12.74	6.87	3.36	-14.48	-4.22	c
C4H10Se	Diethylselenium	-21.90	7.64	9.15	-15.64	8.18	-3.21	b
H2Se	Hydrogenselenide	3.80	8.55	22.56	18.93	-6.61	-11.27	b
SeBr6	SeBr6(=)	-118.90	0.26	21.71	-96.02	-0.14	17.20	b
SeCl6	SeCl6(=)	-163.20	-29.99	-38.41	-65.06	7.59	20.36	b
NH3Se	SeH-NH2	20.40	-8.76	2.44	-16.58	4.03	-14.66	b
H6SeO6	Selenicacid (Se(OH)6)	-185.20	-40.39	-125.57	-121.74	-2.87	-82.34	b
SeBr2	Seleniumdibromide	-5.00	-9.14	-3.59	-2.60	0.04	-0.45	d
SeCl2	Seleniumdichloride	-8.00	-31.11	-32.93	-30.00	-6.24	-2.50	d
SeO2	Seleniumdioxide	-28.70	32.25	9.28	-1.17	13.73	-6.99	b
SeF6	Seleniumhexafluoride	-255.50	-63.72	-7.92	-11.27	-1.06	9.05	b
SeF4	Seleniumtetrafluoride	-191.20	-1.54	14.53	-22.75	3.94	-16.96	b
Se3	Selenium, trimer	42.10	-25.92	-18.41	-65.27	0.55	2.79	d
Se	Selenium, 1D(g) 4s(2)4p(4)	24.68	-17.26	2.93	23.67	5.47	-6.50	a
Se	Selenium, 1S(g) 4s(2)4p(4)	61.48	-61.48	-47.45	-61.48	-1.69	-61.48	a
Se	Selenium, atom	54.30	-5.56	0.00	0.00	0.00	-0.00	e
Se	Selenium, cation	276.49	-14.42	-53.54	-21.52	-31.01	-32.56	a
Se	Selenium, cation 4P(g) - 4s(1)4p(4)	242.66	-13.59	-94.53	-173.05	-4.58	-4.33	a

Código	Referências para a Entalpia de Formação
a	NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database, No. 69; W. G. Mallard, P. J. Linstrom, Eds., National Institute of Standards and Technology, Gaithersberg, http://webbook.nist.gov/chemistry .
b	
c	J. O. Cox, G. Pilcher, ``Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds," Academic Press, New York, N.Y., 1970.
d	I. Barin, O. Knacke, O. Kubaschewski, ``Thermochemical Properties of Inorganic Compounds", Springer-Verlag, Berlin, 1977.
e	CRC Handbook of Chemistry and Physics," 60th Edition, R. C. Weast, (Ed.), CRC Press, Boca Raton, FL, 1980.

Tabela 2 – Momento de dipolo experimental (em Debye) e erros para o RM1, AM1, PM3 e PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10H11SeCl	(E)-(3-chlorobut-2-en-2-yl)(phenyl)selane	1.44	0.61	0.34	-0.20	-0.05	0.29	a
C10H11SeBr	(E)-(3-bromobut-2-en-2-yl)(phenyl)selane	1.58	0.35	0.49	-0.01	0.05	-0.01	a
C14H11SeCl	(E)-(2-chloro-2-phenylvinyl)(phenyl)selane	1.63	0.29	-0.10	-1.43	0.06	0.45	a
C14H11SeBr	(E)-(2-bromo-2-phenylvinyl)(phenyl)selane	1.34	0.48	0.38	-0.81	0.46	0.60	a
C14H19SeCl	(E)-(5-chlorooct-4-en-4-yl)(phenyl)selane	1.21	0.43	0.38	0.16	0.17	0.69	a
C14H19SeBr	(E)-(5-bromooct-4-en-4-yl)(phenyl)selane	1.27	0.32	0.59	0.42	0.70	0.80	a
C12H15SeCl	(E)-(2-chlorohex-1-enyl)(phenyl)selane	1.47	0.38	0.03	-0.40	-0.12	1.08	a
C2H6Se	Dimethylselenium	1.41	-0.50	-0.31	0.47	-0.09	-0.54	b
H2Se	Hydrogenselenide	0.24	0.41	0.40	1.11	1.08	1.26	b
SeF4	Seleniumtetrafluoride	1.44	0.40	0.78	-0.60	-0.81	1.63	c
SeO2	Seleniumdioxide	2.70	1.82	3.73	0.94	1.76	2.78	d
SeF	Seleniumfluoride	1.52	0.35	0.17	-0.25	-0.17	1.15	b
C4H4Se	Selenophene	0.37	0.08	0.15	0.99	0.01	-0.24	b
HSe	Selenyl radical	0.48	0.02	0.01	0.41	0.53	0.60	b
SeO2F2	Selenoylfluoride (SeO2F2)	0.59	0.26	0.64	-0.56	0.83	-0.21	e
C4H8Se	Tetrahydroselenophene	1.93	-0.71	-0.22	0.41	-0.06	-0.50	b
CSeS	Thiocarbonylselenide	0.03	0.52	0.17	1.46	1.27	0.52	b

Código	Referências para o momento de dipolo
a	L. G. Wesson, "Tables of electric Dipole Moments", An Mit Press Classic, Massachusetts ()
b	A. L. McClellan, ``Tables of Experimental Dipole Moments," Vol 2, Rahara Enterprises, El Cerrito, (1974).
c	I. C. Bowater, R. D. Brown, and F. R. Burden, J. Molecular Spectroscopy, 28(4), 454 (1968)
d	K. P. Huber, G. Herzberg, ``Molecular Spectra and Molecular Structure," IV. ``Constants for Diatomic Molecules," Van Nostrand, Reinhold, New York, (1979).
e	Steven Firth, R. Wellington Davis, and Howard J. Clase, J. Molecular Spectroscopy, 174(2), 459 (1995)

Tabela 3 – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6N2H4Se	1 2 3 Benzoselenadiazole	8.83	0.33	-0.76	0.60	0.24	-0.25	a
C8N2H6Se	1 2 3 Selenadiazole4phenyl	8.80	0.20	-0.53	0.56	0.26	-0.18	a
C2N2H2Se	1 2 3 Selenadiazole	9.69	-0.06	-1.19	0.41	-0.07	-0.76	a
C4H4SeS	1 4 Thiaselenin	8.10	-0.07	-1.08	0.30	-0.27	-0.45	a
C8H8SeS	1Thia 6 selenacyclodeca 3 8 diyne	8.39	0.63	-0.66	0.80	0.16	-0.26	a
C6N2SeF4	2 1 3 Benzoselenadiazole	9.28	0.58	-0.47	0.86	0.60	-0.09	a
C6N2H4Se	2 1 3 Benzoselenadiazole2	8.76	0.47	-0.61	0.92	0.38	-0.22	a
C6NH7Se	2 1H Pyridineselone 1 methyl	7.22	0.29	0.17	0.88	0.60	0.22	a
C10H12Se	2 2Dimethyl 2 3 dihydrobenzoselenophene	7.60	0.79	-0.26	1.01	0.41	0.19	a
C7H10SeO	2 3H Selenophenone 3 3 5 trimethyl	7.98	0.96	-0.10	1.24	0.76	0.31	a
C5H6SeO	2 5H Selenophenone 5 methyl	8.84	0.41	-0.76	0.66	0.18	-0.39	a
C4H3SeBr	2 Bromoselenophene	8.56	0.57	-0.58	1.12	0.55	0.02	a
C5NH3Se	2 Cyanoselenophene	9.27	0.14	-1.08	0.72	0.12	-0.46	a
C9H12Se	2 ethyl selenetoluene	8.00	0.73	-0.53	0.98	0.29	-0.05	a
C3N2H6Se	2 Imidazolidinoneselono	7.45	0.25	0.01	0.90	0.48	0.07	a
C4H3SeI	2 Iodoselenophene	8.42	0.56	-0.41	0.61	0.15	0.15	a
C8H10Se	2 Methylmethylselenobenzene	7.80	0.64	-0.42	0.95	0.29	0.06	a
C7H8Se	2 Methylselenobenzene	8.40	0.14	-0.95	0.53	-0.16	-0.40	a
C4NH3SeO2	2 Nitroselenophene	9.64	-0.01	-1.22	0.59	-0.02	-0.69	a
C3H8Se	2 Propaneselenol	8.60	0.25	-0.95	0.68	-0.19	-0.55	a
C4NH7Se	2 Pyrrolidinone seleno	7.70	0.18	-0.24	0.71	0.21	-0.15	a
C5H4SeO	2 Selenophene carboxaldehyde	9.09	0.13	-0.93	0.73	0.14	-0.43	a
C7NH9SeO	2 Selenophene carboxamide N Ndimethyl	8.85	0.11	-1.04	0.51	0.09	-0.56	a
C6H6SeO2	2 selenophene carboxylic acid mehyl ester	9.05	0.38	-0.72	0.88	0.35	-0.25	a
C5H4SeO2	2Selenophene carboxylic acid	8.90	0.31	-0.83	0.89	0.38	-0.28	a

Tabela 3 (continuação) – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C5H6SeS	2 Selenophenethiol 5 methyl	8.17	0.29	-0.29	0.63	0.33	0.19	a
C6H8SeO	3 2H Selenophene 2 5 dimethyl	8.24	0.82	-0.37	1.05	0.58	0.12	a
C7H10SeO	3 2H Selenophenone 2 2 5 trimethyl	8.21	0.79	-0.37	1.00	0.54	0.09	a
C6H8SeS	3Selenophenethiol 2 5 dimethyl	7.90	0.60	-0.35	0.89	0.40	0.16	a
C9H12Se	4ethylselenotoluene	8.00	0.35	-0.66	0.59	0.06	-0.24	a
C4H10Se	Ethane1 1selenobis	8.30	0.35	-0.78	0.65	-0.16	-0.45	a
C6H6SeO	Ethanone1selenophene 2 yl	9.06	0.14	-0.93	0.71	0.11	-0.43	a
C6H3SeOF3	Ethanone2 2 2trifluoro 1 selenophene 2 yl	9.64	-0.11	-1.28	0.42	-0.11	-0.78	a
C8H10Se	Ethyl seleno benzene	8.30	0.15	-0.92	0.39	-0.16	-0.43	a
C7NH9Se	Benzenamine 2 methyl seleno	7.95	0.16	-0.48	0.56	0.43	0.09	a
C7NH9Se	Benzenamine 3 methyl seleno	7.83	0.21	-0.51	0.73	0.28	-0.02	a
C7NH9Se	Benzenamine 4 methyl seleno	7.88	0.26	-0.57	0.87	0.36	-0.05	a
C12H10Se	Benzene1 1selenobis	7.79	0.59	-0.50	0.81	0.47	0.16	a
C8H10SeO	Benzene1methoxy 2 methyl seleno	7.86	0.63	-0.67	0.93	0.22	-0.10	a
C8H10SeO	Benzene1methoxy 3 methyl seleno	7.93	0.55	-0.52	0.81	0.30	-0.03	a
C8H10SeS	Benzene1methylseleno 4 methylthio	7.90	0.49	-0.63	0.55	0.13	-0.10	a
C8H10SeO	Benzene1methoxy 4 methyl seleno	8.05	0.21	-0.76	0.47	-0.13	-0.35	a
C9H12Se	Benzene dimethyl methyl seleno	8.70	0.01	-1.26	0.23	-0.42	-0.77	a
C10H14Se	Benzene ethyl seleno dimethyl	8.30	0.40	-0.84	0.60	-0.06	-0.39	a
C6H6Se	Benzeneselenol	8.90	-0.30	-1.43	0.07	-0.54	-0.85	a
C8H6Se	Benzo b selenophene	8.03	0.52	-0.49	0.91	0.44	0.08	a
C5NH11SeO2	Butanoic acid 2 amino 4 methylseleno	8.26	0.68	-0.51	1.00	0.29	-0.12	a
CSe2	Carbondiselenide	9.25	-0.79	-1.71	0.50	-0.47	-1.38	b
CH2SeO	Carbonyl selenide	10.36	-0.91	-2.09	-0.50	-1.02	-1.69	a

Tabela 3 (continuação) – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
CSeF ₂	CSeF ₂	9.40	0.03	-1.14	0.57	-0.04	-1.69	a
C ₁₂ H ₈ Se	Dibenzoselenophene	7.86	0.61	-0.61	0.73	0.24	-0.64	a
C ₁₄ H ₁₄ Se	Dibenzylmonoselenide	8.00	0.75	-0.42	0.97	0.40	0.14	a
C ₃ PH ₉ Se	Dimethylmethylselenophosphine	8.30	0.65	-0.44	0.52	0.00	0.04	a
C ₂ H ₆ Se	Dimethylselenium	8.40	0.28	-0.95	0.60	-0.20	0.17	b
CH ₂ Se	Formaldehydeseleneo	8.95	-0.31	-1.44	0.19	-0.60	-0.52	a
H ₂ Se	Hydrogenselenide	9.88	-0.79	-2.11	-0.12	-1.12	-1.02	b
CNSeI	Iodineselenocyanate	9.74	0.20	-1.41	-1.44	-0.11	-1.59	a
C ₉ H ₁₂ Se	Isopropylselenobenzene	8.30	0.29	-0.86	0.46	0.08	-1.22	a
C ₆ H ₄ Se	Methaneselone	8.34	0.03	-0.86	0.51	-0.50	-0.43	a
C ₂ NH ₃ Se	Methyl isoselenocyanate	8.90	-0.71	-0.97	-0.04	-0.45	-1.05	a
C ₂ NH ₃ Se	Methyl selenocyanate	9.60	-0.12	-1.82	0.25	-0.32	-0.98	a
C ₂ PH ₆ SeCl	Phosphin selenoic chloridedimethyl	8.64	0.35	0.29	0.30	0.16	-0.17	a
CPH ₃ SeCl ₂	Phosphono selenoic dichloridemethyl	9.16	0.35	-0.08	0.37	0.28	-0.36	a
C ₃ PH ₉ SeO ₃	Phosphoro selenoic acid o o o trimethyl	8.67	0.46	0.12	0.17	0.37	-0.25	a
C ₁₆ H ₁₈ Se	Selenide bis 4methylbenzyl	7.86	0.69	-0.32	0.84	0.34	-0.36	a
CNSeBr	Selenium bromide cyanide	9.99	0.03	-1.78	0.30	-0.59	-1.00	a
CNSeCl	Selenium chloride cyanide	10.19	-0.09	-2.26	-0.19	-0.62	-1.11	a
C ₂ N ₂ Se	Selenium cyanide	10.96	-0.73	-2.90	-0.31	-0.96	-1.65	a
SeBr ₂	Selenium dibromide	9.17	0.71	-0.78	0.88	-0.25	-0.41	b
SeCl ₂	Selenium dichloride	9.50	0.54	-1.57	0.05	-0.30	-0.62	b
SeF ₂	Selenium difluoride	10.20	-0.95	-3.15	-0.17	-1.11	-1.86	a
C ₂ H ₂ Se	Selenoketene	8.72	-0.29	-1.42	0.20	-0.36	-0.68	a
C ₆ H ₄ SeS	Selenolo 2 3 c thiophene	7.76	0.74	-0.40	1.12	0.60	0.26	a

Tabela 3 (continuação) – Potencial de ionização experimental (em eV) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6H4SeS	Selenolo 3 4 b thiophene	7.91	0.43	-0.06	0.87	0.56	0.35	a
C4H3SeCl	Selenophene2chloro	8.83	0.34	-0.86	0.60	0.25	-0.22	a
C7H10SeS	Selenophene 2 5 dimethyl 3- methylthiol	7.73	0.54	-0.22	0.85	0.30	0.11	a
C6H8SeS	Selenophene2methyl 5 methylthiol	7.84	0.36	-0.24	0.72	0.34	0.23	a
C5H6Se	Selenophene2methyl	8.40	0.45	-0.62	1.05	0.36	-0.12	a
C5H6SeS	Selenophene2methylthio	8.75	-0.43	-1.15	-0.08	-0.46	-0.59	a
C7H10SeO	Selenophene3methoxy 2 5 dimethyl	7.69	0.70	-0.33	0.82	0.03	0.24	a
C4H4Se	Selenophene	8.78	0.09	-0.97	0.72	0.04	-0.44	a
C4H8Se	Tetrahydroselenophene	8.14	0.48	-0.69	0.76	-0.01	-0.30	b
C8PN3H18Se	Tetramethyl 2 6 7 triaza	8.15	0.47	0.50	0.43	0.02	-0.46	b
C3NH5SeS	Thiazolidin2selone	7.88	0.10	-0.33	0.74	0.24	-0.20	a
C6PN3H12Se	Triaza	8.32	0.28	-0.04	0.32	0.13	-0.15	a
C6PN3H18Se	Tris	8.45	-0.10	0.21	-0.03	-0.28	-0.64	a

Código	Referências para o Potencial de Ionização
a	NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database, No. 69; W. G. Mallard, P. J. Linstrom, Eds., National Institute of Standards and Technology, Gaithersberg, http://webbook.nist.gov/chemistry .
b	R. D. Levin, S. G. Lias, "Ionization Potentials and Appearance Potential Measurements," 1971-1981, Natl. Stand. Ref. Data Ser., Natl. Bur. Stand. 71, (1982), Cat. No. C13.48:71.

Tabela 4 – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19H20SeO3	AXOZOC	Se-C	1.891	-0.045	-0.058	-0.050	-0.025	-0.023	a
		C-C-Se	131.770	-1.837	1.447	3.702	-0.291	-1.387	
		C-C-Se	133.560	1.931	-1.097	-3.854	0.351	1.320	
		C-C-Se-C	181.855	-2.936	-6.287	-3.522	2.917	-6.363	
		C-Se	1.920	-0.006	-0.030	-0.034	-0.002	0.005	
		C-Se-C	98.137	-0.691	2.210	5.951	-0.565	-0.541	
C12H8Se4	AYAVUR	Se-C	1.842	-0.072	-0.009	-0.076	-0.042	-0.051	a
		C-C-Se	173.610	1.066	0.020	0.779	0.583	5.129	
		C-C-C-Se	56.120	-0.332	0.014	-0.321	-0.163	-9.144	
C14H12Se4	AYAWAY	Se-C	1.823	0.000	-0.018	0.000	-0.031	-0.013	a
		C-C-Se	177.635	0.000	-0.274	0.000	-0.211	0.179	
		C-C-C-Se	311.532	0.000	0.023	0.000	0.018	-0.139	
		C-Se	1.950	0.000	-0.001	0.000	0.003	0.009	
C13NH11SeS	BACGOC	Se-C	1.921	-0.007	-0.030	-0.014	0.000	0.026	a
		C-C-Se	119.523	-1.247	-8.183	-14.966	3.855	9.493	
		S-C-C-Se	1.395	-0.971	1.294	0.306	-7.512	-1.191	
		C-C-Se	121.110	-0.148	5.760	13.559	-3.270	-9.169	
C16H13SeBrO5	BAFNIH	Se-C	1.879	0.023	-0.025	0.004	0.010	0.043	a
		Se-C	1.903	0.036	-0.014	0.005	0.005	0.029	
		C-Se-C	87.311	-0.807	0.593	-0.384	0.229	-2.187	
		C-C-Se	110.234	-0.202	1.339	0.509	0.723	2.346	
		C-C-Se-C	359.223	-0.910	-0.686	-0.654	-0.332	0.841	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8H8SeO2	BAGTOT	Se-O	1.617	-0.024	0.036	0.039	0.041	0.027	a
		O-Se	1.616	-0.023	0.039	0.044	0.044	0.028	
		O-Se-O	116.459	5.677	7.879	3.217	3.146	7.130	
		C-Se	1.904	0.008	-0.009	0.037	0.099	0.055	
		C-Se-O	108.700	0.010	-1.046	-0.454	-0.308	1.411	
		C-Se-O-O	237.388	-4.331	-4.800	-2.692	-1.077	-3.524	
		C-C-Se	118.699	2.248	2.761	-1.683	-0.462	0.296	
		C-C-Se-O	355.830	9.457	10.052	3.021	3.546	17.235	
		C-Se	1.909	0.000	-0.008	0.004	0.079	0.053	
C13N2H10SeO	BAHBOD	Se-N	1.890	-0.034	-0.064	-0.003	-0.032	-0.002	a
		C-Se	1.889	0.027	-0.010	0.007	0.020	0.041	
		C-Se-N	84.404	2.473	4.909	3.725	2.953	1.686	
		C-C-Se	112.408	-2.074	-2.963	-1.604	-2.318	-2.032	
		C-C-Se-N	4.662	-7.289	-7.868	-12.931	-8.220	-7.844	
C20H14SeS	BAJNUW	Se-S	2.179	0.055	0.055	0.026	0.097	0.599	a
		C-Se	1.975	-0.002	-0.026	-0.035	-0.020	-0.014	
		C-Se-S	103.873	2.116	2.068	7.789	-2.702	-7.173	
		C-C-Se	115.278	-0.524	-0.885	1.120	-0.874	-0.467	
		C-C-Se-S	297.303	-6.648	-9.649	-10.038	-4.136	0.810	
		C-C-C-Se	2.971	-0.449	1.916	5.686	-2.238	-2.750	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H24SeO4	BAPPAJ	Se-O	1.868	-0.010	0.017	-0.056	-0.056	-0.052	a
		O-Se	1.867	-0.005	0.020	-0.054	-0.054	-0.051	
		O-Se-O	165.785	-11.585	-4.947	-22.148	0.000	0.454	
		O-Se	1.779	0.054	0.075	0.030	0.025	0.032	
		O-Se-O	85.850	-4.707	-2.586	-10.221	-1.388	0.379	
		O-Se-O-O	55.218	-1.380	-3.741	10.458	-7.654	-5.077	
		O-Se	1.779	0.054	0.073	0.029	0.021	0.031	
		O-Se-O	86.014	-2.241	-0.844	1.498	0.024	-1.160	
		O-Se-O-O	304.772	4.071	6.240	-5.819	5.400	6.585	
SeO3	BAYCEK	O-Se	1.682	0.064	0.123	0.072	0.024	0.056	a
		O-Se	1.680	0.066	0.125	0.074	0.026	0.059	
		O-Se-O	106.510	-1.443	-2.211	2.486	0.033	0.899	
		O-Se	1.715	0.032	0.090	0.039	-0.010	0.024	
		O-Se-O	99.494	5.511	4.688	9.333	6.173	7.616	
		O-Se-O-O	105.387	5.075	3.482	13.143	7.242	9.321	
SeO3	BAYCIO	Se-O	1.695	-0.139	-0.114	-0.157	-0.102	-0.106	a
		O-Se	1.708	-0.152	-0.127	-0.169	-0.115	-0.119	
		O-Se-O	101.994	18.036	18.019	18.017	18.038	18.039	
		O-Se	1.696	-0.141	-0.115	-0.158	-0.103	-0.107	
		O-Se-O	103.877	16.103	16.115	16.112	16.101	16.100	
		O-O-O-Se	255.007	-75.007	-75.007	-75.013	-75.007	-75.009	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C2H6SeO2	BECZAL	Se-O	1.626	-0.034	0.029	0.026	0.028	0.016	a
		Se-O	1.625	-0.033	0.029	0.027	0.028	0.017	
		O-Se-O	114.779	6.561	7.892	7.123	4.298	6.486	
		C-Se	1.905	0.041	0.017	0.068	0.118	0.070	
		C-Se-O	108.166	0.366	-0.311	-0.101	-0.367	-1.042	
		C-Se-O-O	121.822	4.952	4.263	3.586	1.338	1.294	
C9NH12Se	BELRAM01	Se-C	1.929	-0.029	-0.064	-0.065	-0.044	-0.029	a
		C-C-Se	114.140	-0.266	2.045	-4.100	-0.525	0.757	
		C-C-C-Se	179.191	-1.937	-0.866	-2.804	-3.870	-2.021	
		C-C-Se	125.742	-0.545	-3.521	2.408	0.126	-1.386	
		C-C-Se-C	178.407	-0.119	0.310	-0.476	-1.409	-0.435	
		C-C-C-Se	359.351	-5.222	-3.473	-4.071	-6.835	-3.989	
C9NH12Se	BELREQ01	Se-C	1.925	-0.028	-0.057	-0.062	-0.040	-0.026	a
		C-C-Se	114.075	-0.247	1.561	-4.283	-0.686	0.780	
		C-C-C-Se	359.454	-5.958	-6.469	-4.156	-5.964	-4.179	
		C-C-C-Se	179.580	-2.606	-2.970	-1.912	-3.087	-2.406	
		C-C-Se	125.657	-0.445	-2.772	2.566	0.434	-1.238	
		C-C-Se-N	158.533	5.659	11.092	14.377	10.335	8.287	
C26H16Se	ACINEF	Se-C	1.906	0.004	-0.019	-0.017	0.005	0.019	a
		Se-C-C	119.957	-1.517	-0.520	-2.477	-1.210	-1.012	
		Se-C-C-C	3.168	-0.935	0.778	1.858	1.113	1.797	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12PH17Se2O2	ACIQAE	Se-P	2.072	-0.068	0.002	0.020	-0.100	-0.010	a
		O-P-Se	117.138	1.783	-2.759	-0.739	4.004	6.441	
		O-Se-P	109.141	4.125	-0.787	0.788	2.942	-10.753	
		O-Se-P-O	239.272	8.952	9.442	7.369	4.804	8.538	
		C-O-P-Se	321.223	8.726	13.470	8.208	-2.533	37.078	
HSeO3	ADAVAC	O-Se	1.791	0.081	0.088	0.026	0.041	0.044	a
		O-Se	1.658	-0.003	0.077	0.037	-0.002	0.011	
		O-Se-O	100.514	-3.651	-4.581	0.323	-1.371	-1.112	
		O-Se	1.650	0.006	0.086	0.046	0.007	0.020	
		O-Se-O	99.624	-3.029	-4.075	0.933	-0.818	-0.504	
C9NH7SeO2	AHEQIN	Se-C	1.873	-0.049	-0.064	-0.010	-0.014	0.011	a
		Se-C-N	177.911	-0.521	-1.840	-0.573	1.161	0.379	
		C-Se	1.937	-0.019	-0.061	-0.010	-0.031	-0.005	
		C-Se-C	94.728	2.594	4.555	0.573	3.984	1.875	
		C-Se-C-N	181.171	-8.051	-3.098	-0.573	-1.212	-2.564	
Se2O5	AHOYAX	O-Se	1.857	-0.025	0.000	-0.046	-0.047	-0.049	a
		O-Se	1.839	-0.007	0.019	-0.029	-0.028	-0.031	
		Se-O-Se	115.087	-1.497	-8.818	-18.116	10.054	15.190	
		O-Se	1.650	0.030	0.107	0.063	0.020	0.037	
		O-Se-O	101.663	-1.645	-2.047	2.520	2.775	3.907	
		O-Se-O-Se	287.020	-1.414	-1.462	-38.038	-0.841	8.199	
		O-Se	1.651	0.027	0.103	0.061	0.016	0.036	
		O-Se-O	97.592	2.403	2.315	6.959	1.876	4.851	
		O-Se-O-Se	177.794	1.345	3.043	-41.732	1.066	7.576	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C22PH21SeO2	AHUNIB	Se-C	1.916	0.023	-0.012	-0.001	0.008	0.037	a
		C-C-Se	111.768	-1.389	-3.307	-8.080	-1.775	-8.261	
		C-Se	1.924	-0.015	-0.032	-0.042	-0.011	0.014	
		C-Se-C	100.323	-0.104	3.181	5.860	-0.716	-3.876	
		C-Se-C-C	172.091	-6.354	6.495	32.944	-7.838	-9.352	
		C-C-Se	118.991	0.588	-0.944	-5.308	2.337	1.522	
		C-C-Se-C	267.452	8.021	-16.510	-55.752	35.712	36.457	
C9PH17Se	AJATUA	Se-P	2.117	-0.106	-0.040	-0.011	-0.083	-0.029	a
		C-P-Se	113.492	2.430	-6.210	3.138	1.957	2.340	
		C-P-Se	113.673	1.885	-4.827	1.381	1.282	2.103	
		C-P-Se-C	230.204	2.152	8.666	-3.369	2.492	-2.047	
C10N2H20Se2S2	AJOZII	Se-Se	2.345	0.061	0.126	0.151	0.026	0.068	a
		Se-C	1.952	0.041	-0.005	-0.022	0.036	0.104	
		Se-Se-C	93.704	-10.599	-12.481	-15.117	6.195	4.242	
		Se-Se-C-S	357.421	2.693	3.255	8.839	74.813	71.765	
C18N2H25SeBrO2	AJULEX	Se-C	1.839	0.008	-0.019	-0.040	-0.008	0.041	a
		N-C-Se	124.026	-2.009	-3.571	-3.261	2.314	0.264	
		C-C-Se	118.594	-0.348	-2.773	-1.617	-2.313	-2.431	
C18P2NH25SeS	ALIBIG	Se-P	2.097	-0.090	0.017	0.021	-0.072	-0.027	a
		N-P-Se	115.631	-6.033	-15.554	-7.993	2.728	-0.144	
		P-N-P-Se	33.505	-13.119	-29.439	-28.550	26.733	3.043	
		C-P-Se	112.656	0.516	-4.702	1.981	3.072	4.439	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9N2H14SeO2	ANOTON	Se-C	1.956	0.022	-0.002	-0.003	-0.007	0.008	a
		Se-C	1.944	0.030	0.009	0.009	0.011	0.008	
		C-Se-C	97.923	0.526	1.629	4.223	0.212	1.513	
		C-C-Se	112.840	-4.268	-4.859	-7.388	0.358	-0.144	
		C-C-Se-C	284.719	-9.430	-1.687	-6.354	-0.486	2.329	
C10N2H16SeO2	ANOTUT	Se-C	1.953	0.028	0.008	0.006	0.007	0.011	a
		Se-C	1.944	0.031	0.013	0.006	0.013	0.019	
		C-Se-C	97.885	-0.929	-1.007	4.537	-0.094	3.392	
		C-C-Se	113.601	-5.727	-7.322	-8.769	-1.698	1.609	
		C-C-Se-C	270.740	-2.339	-2.235	5.150	6.889	18.224	
C38H30SeS2	AQACIE	Se-S	2.189	0.035	0.015	0.097	0.061	0.543	a
		Se-S	2.180	0.044	0.033	-0.052	0.070	0.560	
		S-Se-S	108.277	-4.510	1.118	4.829	-2.365	-9.952	
		C-S-Se	106.863	-6.234	1.234	-14.889	1.644	-3.961	
		C-S-Se-S	100.361	7.732	-8.173	78.812	-7.947	-14.687	
C9PH11SeO3	ARULUU	Se-P	2.226	-0.074	0.091	0.083	0.041	-0.020	a
		O-P-Se	114.751	5.350	5.849	12.573	3.232	6.362	
		O-P-Se	108.394	-2.716	-7.434	-8.070	-3.340	0.896	
		O-P-Se	101.263	1.829	-5.185	-9.003	2.964	2.246	
		C-Se	1.921	-0.001	-0.006	-0.056	-0.004	0.030	
		C-C-Se	121.649	-0.904	-1.871	-0.439	-0.223	-2.652	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9PH11SeS2O	ARUMAB	Se-P	2.252	-0.149	0.298	-0.011	0.047	0.013	a
		S-P-Se	108.812	-10.350	10.785	-3.787	2.858	5.347	
		S-P-Se	103.532	-5.639	-49.416	-34.026	5.356	8.330	
		S-P-Se-S	114.282	-11.018	-38.119	-13.249	0.396	0.045	
		O-P-Se	114.931	7.553	15.587	13.620	-2.601	-4.304	
C9PH11SeS3	ARUMEF	Se-P	2.253	-0.136	0.213	0.001	0.065	0.056	a
		S-P-Se	100.781	-2.465	-43.999	-44.309	6.655	7.163	
		S-P-Se	109.360	0.584	2.184	0.424	0.361	0.739	
		S-P-Se-S	247.356	0.370	25.469	24.079	0.699	4.784	
		S-P-Se	116.201	0.387	14.140	18.943	0.226	3.138	
		Se-C	1.914	-0.008	-0.034	-0.045	0.000	0.030	
C18H16Se2S4O2	ASIHIT	Se-C	1.892	-0.007	-0.033	-0.012	0.025	0.087	a
		C-C-Se	127.031	-2.368	0.075	-21.187	-1.325	-4.449	
		Se-C-C-Se	0.824	-0.739	-0.892	-0.892	-0.577	-0.559	
		C-Se	1.948	0.036	0.015	0.026	0.019	0.018	
		C-Se-C	98.332	-0.570	1.234	3.605	-0.776	-0.870	
		C-Se-C-C	63.631	3.681	-1.878	24.741	1.712	4.815	
C10N2H6SeS2	ATABAZ	Se-C	1.881	0.065	0.027	0.037	0.047	0.074	a
		Se-C	1.875	0.070	0.032	0.042	0.052	0.079	
		C-Se-C	81.912	-1.042	0.320	-0.006	-0.908	-1.540	
		N-C-Se	113.624	-0.386	-1.490	-0.739	0.162	-0.366	
		N-C-Se-C	0.499	-0.506	-0.500	-0.501	-0.543	-0.506	
		N-C-Se	115.148	-1.912	-3.014	-2.260	-1.365	-1.888	
		N-C-Se-C	359.657	0.346	0.345	0.350	0.389	0.352	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C26PH37SeO	ATAQES	Se-P	2.117	-0.101	-0.020	-0.006	-0.087	-0.028	a
		C-P-Se	111.503	-2.717	-7.624	-0.686	1.117	2.294	
		C-P-Se	116.738	-0.186	-5.431	-1.694	1.911	1.006	
		C-C-P-Se	5.397	-3.561	-2.329	-2.937	-5.127	-5.693	
CH4SeO2	AWAVOJ	Se-O	1.752	0.058	0.095	0.046	0.041	0.030	a
		Se-O	1.669	-0.053	0.018	-0.002	-0.024	-0.030	
		O-Se-O	103.474	-7.640	-11.163	-3.646	-7.183	-5.931	
		C-Se	1.913	0.065	0.025	0.070	0.063	0.064	
		C-Se-O	93.575	2.830	2.642	4.757	2.837	2.275	
		C-Se-O-O	258.001	-0.690	1.447	-3.462	0.240	0.697	
C28P2N2H46Se2	AWESAW	Se-P	2.111	-0.097	-0.015	0.007	-0.064	-0.019	a
		Se-P-N	111.938	-0.581	-3.487	-3.843	2.266	0.058	
		C-N-P-Se	167.306	-4.163	-7.753	4.733	10.756	7.170	
C14H12SeO2	ESABIJ	Se-C	1.917	-0.008	-0.043	-0.027	-0.021	0.009	a
		C-C-Se	121.229	-1.344	-3.155	-5.728	-8.528	-7.259	
		C-C-C-Se	3.439	-1.735	-3.383	-3.582	-3.412	-3.373	
		C-C-Se	120.400	-0.385	1.769	3.293	7.392	6.123	
		C-Se	1.957	0.038	0.013	0.014	0.015	0.039	
C26H14Se2Cl2O2	EVEBOW	Se-C	1.936	-0.023	-0.043	-0.038	-0.019	0.008	a
		C-Se	1.907	0.009	-0.027	0.011	-0.008	0.016	
		C-Se-C	99.957	-2.429	1.164	0.278	-0.864	-2.926	
		C-C-Se	122.806	-3.038	-2.289	8.855	5.683	4.662	
		C-C-Se-C	8.566	24.289	4.317	-8.530	-8.462	-8.243	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C ₂₆ H ₁₆ Se ₂ Cl ₂	EVECEN	C-Se	1.913	-0.003	-0.029	-0.024	-0.001	0.008	a
		C-Se	1.956	-0.043	-0.058	-0.067	-0.039	-0.029	
		C-Se-C	100.293	-1.217	0.810	4.448	-1.991	-0.285	
		C-C-Se	118.285	-0.702	0.578	2.733	-1.361	-1.280	
		C-C-Se-C	101.947	6.172	-27.308	-37.782	12.687	18.003	
C ₈ N ₄ H ₁₀ Se ₂	EVEFOA	Se-Se	2.357	0.014	0.024	0.029	0.086	0.107	a
		Se-C	1.880	-0.017	-0.028	-0.048	0.007	0.019	
		Se-Se-C	99.447	-2.506	2.207	-1.937	-0.457	-0.961	
		N-C-Se	122.802	0.545	0.968	5.616	0.706	3.481	
		N-C-Se-Se	102.115	-8.765	21.309	37.457	6.222	-22.037	
C ₁₆ N ₂ H ₂₀ SeO ₃	EVEFUG	Se-N	1.913	-0.036	-0.082	-0.008	-0.051	-0.016	a
		C-N-Se	115.563	-0.286	-1.775	1.021	-1.579	-0.816	
		O-C-N-Se	175.136	7.451	8.298	-3.685	5.898	5.390	
		C-Se	1.861	0.040	0.005	0.035	0.034	0.056	
		C-Se-N	84.732	1.225	4.374	-1.357	3.926	2.056	
C ₂₄ PN ₂ H ₁₆ SeSF ₃	EWACIP	Se-S	2.350	-0.003	0.077	-0.065	0.080	1.260	a
		N-S-Se	96.726	-0.596	-6.402	-1.792	-1.189	-25.603	
		N-S-Se	110.824	2.405	-8.069	2.302	4.745	-51.381	
C ₁₉ PNH ₃₄ SeS ₂ O ₂	EYERIK	Se-S	2.249	0.113	0.018	-0.038	0.173	1.498	a
		P-S-Se	100.432	24.477	14.889	13.633	21.050	-51.546	
		C-Se	1.927	-0.014	-0.048	-0.015	-0.029	0.030	
		C-Se-S	100.223	9.461	2.218	6.636	3.938	-20.748	
		C-Se-S-P	259.731	23.087	-8.786	-12.768	25.226	-51.093	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6N3H8Se	EZUZII	C-Se	1.885	-0.079	-0.082	-0.086	-0.047	-0.052	a
		Se-C-N	175.962	4.034	4.034	4.034	4.037	4.291	
		C-Se	1.912	0.203	0.037	-0.065	0.067	0.182	
		C-Se-C	93.199	8.092	19.532	30.578	24.379	10.866	
		C-Se-C-N	164.648	12.360	-6.737	149.542	2.325	2.176	
		N-C-Se	125.159	0.384	-0.593	5.044	1.168	0.497	
C9NH7SeO	FADDOE	Se-C	1.886	0.024	-0.015	0.004	0.006	0.033	a
		C-C-Se	120.374	-0.346	-1.615	-5.070	-7.617	-5.747	
		C-C-C-Se	0.000	-0.624	0.073	-0.005	0.006	0.008	
		C-C-Se	121.922	-2.150	-0.767	1.685	5.438	3.710	
C19NH19SeO2	FADFAS	C-Se	1.907	0.001	-0.025	-0.029	0.001	0.011	a
		C-Se	1.938	0.049	0.024	0.023	0.037	0.035	
		C-Se-C	102.439	-6.089	-1.489	2.867	-3.940	-2.984	
		C-C-Se	108.828	-2.536	-4.289	-9.001	0.708	-0.851	
		C-C-Se-C	175.785	15.518	8.983	5.668	-17.915	29.626	
		C-Se	1.373	0.011	0.016	0.009	0.025	0.016	
Se2Cl6O2	BIRHAL10	Se-Cl	2.266	0.068	0.019	0.023	0.112	0.156	a
		Cl-Se	2.329	0.002	-0.049	-0.041	0.050	0.114	
		Cl-Se-Cl	92.893	1.646	0.783	0.729	2.353	-1.032	
		O-Se	1.597	-0.010	0.069	0.067	0.028	0.006	
		O-Se-Cl	100.989	-2.958	-1.355	-3.119	-2.766	-2.153	
		O-Se-Cl-Cl	96.644	2.628	4.181	1.986	2.937	2.770	
		Cl-Se	2.851	-0.419	-0.314	-0.441	-0.345	-0.190	
		Cl-Se-Cl	166.344	-4.015	-7.075	-2.866	-5.431	-7.388	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8NH9SeO	BOPFIW	Se-C	1.847	-0.022	-0.038	-0.050	-0.042	-0.005	a
		C-C-Se	122.495	-2.136	-3.815	-1.383	-2.060	-1.952	
		N-C-Se	118.675	1.581	-0.159	-0.122	6.068	3.435	
		C-C-C-Se	122.358	-0.494	-0.310	-0.101	-2.438	-1.243	
C9NH11SeO2	BOPGIX	Se-C	1.828	-0.006	-0.020	-0.030	-0.025	0.013	a
		N-C-Se	120.470	0.184	-1.866	-1.930	4.844	2.055	
		C-C-Se	122.400	-2.148	-3.625	-1.219	-2.368	-2.025	
C21H21Se	BORWEK	Se-C	1.933	-0.031	-0.053	-0.024	0.001	0.004	a
		C-Se	1.923	-0.013	-0.040	-0.015	0.015	0.016	
		C-Se-C	101.073	-0.553	-0.411	3.722	-1.385	-1.292	
		C-Se	1.929	-0.022	-0.045	-0.022	0.007	0.008	
		C-Se-C	100.656	0.395	-0.211	3.891	-0.873	-0.764	
		C-Se-C-C	258.272	-1.043	-0.047	-7.962	1.250	1.290	
		C-C-Se	115.467	-0.358	0.169	-2.223	-0.078	0.032	
		C-C-Se-C	164.480	-1.076	-1.024	-13.933	-0.903	-0.462	
		C-C-Se	121.390	-0.267	0.260	-0.023	0.103	-0.086	
C18PH15SeS2	BOSTUZ	Se-S	2.206	0.070	0.047	-0.015	0.105	0.591	a
		P-S-Se	102.605	11.381	11.705	3.143	17.750	-7.958	
		S-P-S-Se	310.803	46.629	76.587	104.520	1.543	-2.077	
C24PN2H27SeS2	BOSVEL	Se-S	2.298	0.089	0.089	-0.133	0.126	1.648	a
		P-S-Se	97.996	14.331	9.827	17.961	23.015	-39.760	
		C-Se	1.943	-0.035	-0.069	-0.024	-0.041	-0.021	
		C-Se-S	98.666	2.128	0.342	12.382	5.907	-37.815	
		C-Se-S-P	254.541	-64.686	-72.739	23.577	26.282	-50.768	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C2N4H8SeS2	BUXBOL	Se-S	2.192	0.054	0.029	-0.307	0.047	0.645	a
		S-Se	2.206	0.036	0.013	-0.314	0.032	0.618	
		S-Se-S	99.546	4.240	9.975	82.041	7.450	-5.434	
		C-S-Se	105.194	3.272	5.869	35.791	1.894	-0.471	
		C-S-Se-S	257.267	-3.087	6.260	18.081	7.760	-17.282	
		C-S-Se	104.597	4.832	6.486	35.542	2.607	3.646	
		C-S-Se-S	264.194	-2.690	5.235	-83.698	0.588	-2.479	
C4H4Se	Selenophene	Se-C2	1.855	0.056	0.020	0.032	0.042	0.044	c
		C5-Se-C2	87.800	-1.598	-0.101	0.172	-1.139	-1.174	
		C2-C3	1.369	-0.031	-0.017	-0.025	-0.018	-0.023	
		Se-C2-C3	111.600	-0.284	-0.726	-1.495	-0.084	-0.243	
		C2-H	1.070	0.008	0.014	0.014	0.008	-0.005	
		Se-C2-H2	121.700	-2.260	-1.878	-0.568	-0.353	-2.209	
C4H8Se	Tetrahydroselenophene	Se-C2	1.963	0.020	0.005	-0.005	0.004	0.007	c
		C5-Se-C2	90.700	0.048	0.693	1.433	1.184	0.651	
		C2-C3	1.549	-0.039	-0.053	-0.044	-0.028	-0.032	
		Se-C2-C3	104.000	0.447	0.390	-0.712	1.681	1.913	
C27PN3H36Se	CAFKOL	Se-P	2.117	-0.104	0.010	0.012	-0.061	-0.021	a
		C-P-Se	112.134	-0.476	-5.752	-1.083	1.573	3.156	
		C-P-Se	114.080	-3.698	-12.500	-4.271	-2.070	1.205	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
Se6	CAHJUQ	Se-Se	2.295	0.072	0.095	-0.217	-0.053	0.140	a
		Se-Se	2.337	0.019	0.009	-0.189	0.110	0.109	
		Se-Se-Se	108.550	-11.764	-11.001	103.800	-0.198	-9.590	
		Se-Se	2.361	1.048	-0.015	-0.363	0.031	0.068	
		Se-Se-Se	106.769	-32.864	-13.064	-41.638	-9.621	-8.862	
		Se-Se-Se-Se	265.285	66.035	186.966	-122.642	-61.428	35.139	
C3N2H8SeBr2	CALROW	Se-Br	2.440	-0.048	-0.192	-0.045	-0.204	0.033	a
		C-Se	1.943	0.052	0.088	-0.012	0.008	0.062	
		C-Se-Br	90.617	-1.510	30.155	15.876	13.392	-1.131	
		N-C-Se	121.985	0.498	-0.635	1.333	3.264	1.327	
		N-C-Se-Br	102.835	16.248	-7.381	52.808	72.844	9.421	
		C-N-C-Se	184.446	-5.545	-4.615	-3.035	-11.330	-8.850	
		N-C-Se	116.107	-2.555	-2.744	-2.993	-0.857	-0.530	
C17PN2H17SeS	CASSOG	Se-P	2.100	-0.097	-0.015	0.012	-0.081	-0.026	a
		C-P-Se	113.898	-0.487	-1.145	-1.444	0.976	1.900	
		N-C-P-Se	301.398	5.901	-0.521	20.379	-3.616	-0.108	
C21PN2H16SeBr	CASSUM	Se-P	2.103	-0.097	-0.012	0.047	-0.100	-0.023	a
		C-P-Se	113.543	-4.370	-0.844	-18.183	-0.548	0.469	
		N-C-P-Se	319.747	17.592	-0.536	29.167	-0.247	-29.571	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C18H38Se2	CEHRUC	Se-Se	2.315	0.050	0.033	0.048	0.052	0.125	a
		C-Se	2.012	0.005	-0.018	-0.038	0.007	-0.001	
		C-Se-Se	102.340	-2.070	-2.443	-11.076	0.643	-2.399	
		C-Se	2.010	0.007	-0.014	-0.035	0.008	0.001	
		C-Se-Se	101.594	-1.357	-2.779	-10.354	0.543	-1.721	
		C-Se-Se-C	247.923	21.868	1.788	15.533	1.656	40.180	
C26NH27SeO5	CEPSHC	Se-C	1.925	-0.018	-0.005	-0.047	-0.002	-0.006	a
		C-C-Se	118.558	1.996	-0.021	-2.173	-0.028	-1.411	
		C-C-C-Se	179.408	-1.261	-0.045	-3.618	-0.022	2.725	
		C-C-Se	120.740	-2.966	-0.020	0.812	-0.028	1.112	
C8H16SeS2Cl2	CEQKUE	Se-S	2.550	-0.128	-0.014	-0.166	-0.037	1.993	a
		C-S-Se	106.798	-0.924	-0.563	-1.500	-0.196	-29.592	
		C-S-Se	98.628	1.386	-0.552	1.093	-0.046	-6.497	
C8NH7Se	CIGGOO	Se-C	1.828	-0.018	-0.005	-0.006	0.010	0.015	a
		N-C-Se	177.553	0.796	0.148	0.111	0.686	1.235	
		C-Se	1.971	0.023	-0.002	0.001	0.010	0.003	
		C-Se-C	95.971	1.430	0.468	0.800	0.615	1.755	
		C-Se-C-N	190.396	-1.169	-0.022	-0.002	-0.576	0.521	
		C-C-Se	114.581	-5.656	-0.482	-0.474	-0.775	-3.121	
		C-C-Se-C	296.079	-3.872	-0.154	-0.143	-0.550	0.063	
		C-C-C-Se	276.533	0.586	-0.001	0.005	-0.512	0.375	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C24P2NH21Se2	CISFIT	Se-P	2.096	-0.087	-0.018	0.002	-0.009	-0.011	a
		N-P-Se	117.385	-6.416	-2.109	-0.941	0.277	0.203	
		P-N-P-Se	293.253	39.260	1.167	0.970	-0.204	4.414	
		Se-P	2.099	-0.089	-0.020	0.000	-0.020	-0.025	
		Se-P-N	111.940	-6.581	-2.137	-1.680	-0.322	-6.756	
		Se-P-N-P	226.693	-15.294	1.331	0.424	-0.103	-11.881	
C6N4H2SeS	CISMUM	Se-N	1.789	0.000	0.003	0.000	0.005	0.055	a
		N-Se	1.791	0.000	0.003	0.000	0.004	0.052	
		N-Se-N	93.134	0.000	0.094	0.000	0.127	-3.215	
		C-N-Se	107.908	0.000	0.058	0.000	0.110	2.335	
		C-N-Se-N	0.686	0.000	0.001	0.000	0.008	-0.688	
		C-N-Se	107.218	0.000	0.068	0.000	0.115	2.699	
C16P2N2H36Se2S	COFHAG10	Se-P	2.109	-0.095	-0.034	0.012	0.015	-0.022	a
		N-P-Se	115.282	-2.249	-6.303	-1.505	1.711	-1.028	
		S-N-P-Se	352.960	4.975	4.867	-0.834	0.918	1.886	
		Se-P	2.096	-0.090	-0.027	0.023	0.006	0.004	
		Se-P-N	115.958	-2.880	-4.403	-3.387	1.045	3.077	
C2N2H7Se	COFROE10	Se-C	1.906	0.039	0.017	0.023	0.033	0.078	a
		N-C-Se	122.885	0.602	-1.253	1.436	1.761	0.806	
		C-Se	1.896	0.041	0.023	0.044	0.041	0.020	
		C-Se-C	99.821	1.111	0.437	2.481	0.901	-0.055	
		C-Se-C-N	355.092	-0.584	1.106	-0.759	-0.843	0.312	
		N-C-Se	113.644	0.039	-0.612	-1.112	2.584	4.387	
		N-C-Se-N	176.662	1.609	1.884	1.445	1.649	2.950	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8N2H18Se6	COJCUZ	Se-N	1.830	-0.015	-0.014	-0.110	0.024	0.010	a
		Se-N	1.829	-0.177	-0.049	-0.012	0.004	0.010	
		Se-N-Se	114.809	0.215	0.530	-0.162	0.219	6.553	
		Se-Se	2.333	0.005	-0.013	-0.008	0.008	0.097	
		Se-Se-N	109.986	0.065	-2.485	-0.271	0.220	-1.934	
		Se-Se-N-Se	270.121	0.327	0.538	-0.087	0.111	-2.819	
C12N2H9Se	COQTUX	Se-N	2.052	0.010	-0.023	-0.046	0.010	-0.121	a
		N-N-Se	116.884	0.426	-0.220	-0.539	-0.422	-1.109	
		C-N-N-Se	1.293	0.539	0.420	0.562	0.727	2.392	
		C-N-Se	123.378	0.521	-0.468	-1.517	0.622	0.323	
CSeS	Carbonsulfideselenide	C-S	1.533	-0.067	-0.110	-0.103	-0.002	0.001	c
		C-Se	1.695	-0.110	-0.110	-0.110	0.001	-0.001	
C7H8SeO2	CUSKOQ	Se-O	1.612	-0.010	0.041	0.044	0.019	0.031	a
		Se-O	1.611	-0.010	0.048	0.053	0.020	0.032	
		O-Se-O	115.224	0.757	4.569	2.254	1.396	7.746	
		C-Se	1.927	-0.011	-0.015	-0.008	0.028	0.035	
		C-Se-O	107.737	0.694	2.949	2.056	0.928	-1.008	
		C-Se	1.899	0.011	0.016	0.055	0.031	0.075	
		C-C-Se	237.532	-0.838	-3.698	-2.608	-0.731	-3.122	
C16N4H22Se	DAKBIA	Se-C	1.882	0.017	-0.010	-0.013	0.011	0.065	a
		N-C-Se	123.541	-0.822	-1.293	-0.831	0.579	-1.390	
		N-C-Se	121.718	-0.813	-1.115	-0.691	0.504	0.610	
		N-N-C-Se	113.478	0.619	0.851	0.762	0.795	0.969	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14H8Se2O2	DAMNOV	Se-C	1.910	0.017	-0.001	-0.006	0.002	0.009	a
		C-C-Se	124.010	0.826	-0.007	-5.299	0.946	6.125	
		Se-C	1.908	0.082	-0.001	-0.006	0.004	0.010	
		Se-C	124.136	0.152	0.038	0.108	0.055	5.979	
		Se-C-C	358.393	-0.096	-0.029	-0.132	-0.027	1.612	
		Se-C-C-Se	1.383	-0.006	0.001	-0.003	0.014	0.002	
C14H8Se2O2	DAMNUB	Se-C	1.911	0.002	-0.001	0.000	0.000	0.002	a
		C-C-Se	126.026	0.152	0.043	0.040	0.910	3.440	
		Se-C	1.911	0.002	0.001	0.000	0.001	0.002	
		Se-C-C	126.026	0.005	-0.036	-0.010	-0.032	3.497	
		Se-C-C-Se	180.000	0.020	0.050	0.031	0.084	-0.011	
		O-C-C-Se	358.712	-0.021	-0.145	-0.040	-0.162	1.277	
C17NH13SeO	DAPQER	Se-C	1.864	0.010	0.001	0.010	0.002	0.032	a
		C-C-Se	114.344	0.584	0.073	-0.594	0.233	5.437	
		O-C-C-Se	9.676	0.573	0.063	0.572	0.094	50.494	
		C-Se	1.868	0.010	0.001	0.010	0.002	0.095	
		C-Se-C	84.293	0.571	0.041	0.572	0.072	-1.150	
		C-Se-C	176.301	0.569	0.055	0.572	0.059	2.044	
C9N2H10Se	DATBEG	Se-C	1.934	0.019	0.018	-0.026	0.024	0.052	a
		N-C-Se	127.716	0.390	-1.754	-5.730	2.010	4.376	
		N-C-Se	109.318	0.255	-0.950	0.115	0.309	0.106	
		C-N-C-Se	358.049	0.539	0.948	4.774	-1.776	3.436	
C10N2H12Se	DATBOQ	Se-C	1.931	0.039	0.013	-0.010	0.100	0.055	a
		N-C-Se	121.331	0.076	-2.270	-0.645	1.458	3.923	
		N-C-Se	119.162	0.067	-1.118	-0.686	0.153	-0.536	
		C-N-C-Se	4.429	-0.069	-0.224	-0.642	0.946	3.316	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16N3H15Se2	DATCAD	Se-C	1.917	0.019	0.001	-0.009	0.007	0.060	a
		N-C-Se	111.463	0.261	-1.913	0.033	0.040	-0.488	
		C-N-C-Se	177.945	2.718	0.092	2.351	1.463	8.219	
		Se-C	1.836	0.031	-0.004	-0.012	0.005	0.086	
		Se-C-N	121.406	-0.319	-0.187	-0.466	0.123	-1.397	
		Se-C-N-C	167.137	5.730	0.631	2.310	0.634	8.929	
C12H10Se2S2O4	DAYWUV	Se-Se	2.282	0.056	0.018	0.016	0.029	0.125	a
		S-Se	2.268	0.100	0.032	0.019	0.034	1.765	
		S-Se-Se	99.897	1.943	0.318	1.232	1.684	-26.348	
		S-Se	2.275	0.100	0.032	0.019	0.034	2.812	
		S-Se-Se	100.787	1.751	0.266	1.118	1.627	-51.603	
		S-Se-Se-S	89.184	4.575	1.853	1.373	1.459	-39.669	
		O-S-Se	111.083	-5.730	-1.673	-0.262	-0.585	-40.189	
		O-S-Se-Se	313.507	0.223	-0.641	-0.465	0.602	-72.219	
C10H6Se2	DAZZIO	Se-C	1.967	0.009	-0.011	-0.015	-0.011	-0.060	a
		C-C-Se	117.613	0.441	-0.583	-1.812	0.558	-4.957	
		C-C-C-Se	359.808	0.416	0.554	0.464	0.553	0.192	
C12H8Se	DBZSEL	Se-C	1.888	0.001	0.000	0.000	0.001	0.028	a
		C-Se	1.897	0.000	0.000	0.000	0.001	0.019	
		C-Se-C	86.698	0.009	0.016	0.015	0.036	0.207	
		C-C-Se	112.591	-0.013	-0.023	-0.010	-0.012	-0.790	
		C-C-Se-C	0.484	-0.032	-0.086	-0.024	-0.058	-0.524	
		C-C-Se	111.806	0.021	0.170	0.441	0.703	-0.009	
		C-C-Se-C	359.761	-0.002	0.008	0.000	0.015	0.259	
		C-C-Se	126.572	-0.012	-0.021	-0.010	-0.016	-0.011	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C23N2H20Se	DEBBAO	C-Se	1.920	-0.001	-0.005	-0.008	-0.007	-0.001	a
		C-Se	1.950	0.002	-0.003	-0.013	0.003	0.044	
		C-Se-C	102.714	0.092	0.649	0.949	0.033	-5.884	
		N-C-Se	121.203	-0.247	-0.360	-1.403	0.245	4.073	
		N-C-Se-C	187.564	0.188	0.297	0.473	-0.028	-62.585	
		C-N-C-Se	5.246	0.057	-0.051	-0.603	0.558	-9.286	
C19N2H10SeO3F2	DEDLON	Se-C	1.893	0.013	0.017	0.073	0.017	0.041	a
		Se-C-O	107.286	0.664	0.927	0.952	-1.244	-8.490	
		C-Se	1.886	-0.011	-0.083	-0.048	-0.060	-0.020	
		C-Se-C	99.527	0.579	6.303	-0.147	0.780	-6.018	
		C-Se-C-O	188.811	-0.550	0.578	-0.016	0.666	62.279	
		C-C-Se	129.599	0.543	-0.209	6.303	0.949	1.132	
C14NH20SeClO	DESMET	Se-Cl	2.302	-0.012	-0.015	-0.011	-0.011	0.017	a
		O-Se	2.078	0.010	-0.011	-0.017	-0.014	-0.113	
		O-Se-Cl	174.730	0.568	1.554	0.568	0.788	0.358	
		C-O-Se	108.078	0.570	-0.547	0.572	1.818	4.885	
		C-O-Se-Cl	13.554	0.569	0.598	0.569	0.578	0.235	
C12PH9SeO3	DESZUW01	Se-P	2.095	-0.100	-0.056	-0.021	-0.110	-0.037	a
		C-P-Se	114.916	3.571	-1.098	1.246	0.944	2.651	
		O-C-P-Se	47.170	0.230	0.328	0.128	0.263	-19.187	
		C-C-P-Se	232.104	-0.107	-0.207	-0.171	-0.185	-21.697	
		C-P-Se	114.920	1.800	-1.809	2.070	0.460	2.503	
C7PNH16SeO2	DICJAA	Se-P	2.081	-0.024	-0.006	0.015	-0.032	-0.043	a
		O-P-Se	113.758	-0.477	-0.087	-0.475	-0.212	4.161	
		O-P-Se	114.901	-0.478	-0.088	-0.475	-0.214	2.667	
		N-P-Se	114.659	-0.604	-1.676	-0.534	2.160	4.250	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19H30SeO	DIWNIG	C-Se	1.922	-0.010	-0.013	-0.010	-0.014	0.017	a
		C-Se	2.014	-0.010	-0.007	-0.010	0.001	0.023	
		C-Se-C	101.840	-0.587	-0.497	-0.566	-2.110	-5.552	
		C-C-Se	103.551	0.569	-0.193	-0.681	0.409	-6.613	
		C-C-Se-C	185.895	0.571	0.181	0.570	0.178	6.398	
		O-C-C-Se	315.328	-0.569	0.006	0.566	-0.025	21.829	
C18PH13Se	DOTTIP	Se-P	2.109	-0.031	-0.008	-0.005	-0.025	-0.044	a
		C-P-Se	114.289	0.096	-0.299	0.011	0.531	3.797	
		C-P-Se	115.295	0.191	-0.066	-0.016	-0.510	4.213	
C25P2H22Se2	DPPSEM01	Se-P	2.103	-0.014	-0.012	0.000	-0.014	-0.023	a
		C-P-Se	113.046	0.034	-0.921	-0.244	0.461	1.734	
		P-C-P-Se	85.056	-0.175	-0.633	-0.099	0.125	5.971	
		Se-P	2.103	-0.014	-0.013	0.000	-0.032	-0.024	
		Se-P-C	113.058	-0.795	-0.762	-0.058	-0.052	1.685	
		Se-P-C-P	85.022	0.031	-0.570	-0.065	0.366	6.677	
C8N2H16Se2O2	DSEMOR10	Se-Se	2.345	0.029	0.024	-0.008	0.015	0.097	a
		Se-N	1.852	-0.006	-0.042	-0.012	0.010	0.001	
		N-Se-Se	109.199	-0.014	-2.859	-2.917	0.698	-0.815	
		C-N-Se	114.260	-0.057	-0.191	-0.439	-0.455	1.605	
		C-N-Se-Se	67.201	0.058	2.440	0.803	0.648	8.301	
C11H14SeS2O	DUNSAG	Se-C	1.965	0.001	-0.003	-0.011	0.013	0.114	a
		S-C-Se	107.979	-0.024	-0.440	-0.567	2.068	12.112	
		S-C-Se	116.058	0.015	-0.125	-0.580	0.609	4.138	
		C-S-C-Se	288.741	0.023	0.000	0.557	0.536	-14.164	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16PH11SeO2	DUWDOP	Se-P	2.054	-0.022	-0.002	0.009	-0.041	-0.041	a
		Se-P-O	114.534	-0.028	-0.030	-0.035	-0.063	0.218	
		O-P-Se	117.373	-0.029	-0.029	-0.035	-0.062	-3.374	
		C-O-P-Se	131.231	0.016	0.011	0.021	0.035	0.523	
C19PH13SeCl2O2	DUWFEH	Se-P	2.067	-0.087	0.000	0.002	-0.011	-0.040	a
		O-P-Se	115.386	-0.010	-0.002	-0.001	0.157	4.781	
		O-P-Se	114.838	-0.039	-0.001	-0.001	0.012	5.262	
		C-O-P-Se	320.414	-0.050	0.000	-0.002	0.005	-6.686	
C12N2H8Se2O4	DUWKEL	Se-Se	2.302	0.013	0.029	0.017	0.019	0.150	a
		Se-C	1.922	-0.004	-0.016	-0.009	-0.002	-0.005	
		C-Se-Se	103.242	-0.285	-0.538	-0.320	0.616	-7.174	
		C-C-Se	123.692	-0.026	-0.058	-0.032	-0.037	-3.244	
		C-C-Se-Se	23.294	-0.032	-0.064	-0.038	-0.032	-91.203	
C6NH5SeSO	EBEYUF	Se-C	1.877	0.009	0.010	0.009	0.008	0.022	a
		C-C-Se	110.066	0.472	0.537	0.560	0.327	0.469	
		S-C-C-Se	178.548	0.493	0.527	0.479	0.447	1.441	
		N-Se	1.881	0.008	-0.048	0.007	0.007	0.005	
		N-Se-C	85.392	0.486	0.550	0.505	0.452	0.576	
		N-Se-C-C	359.761	0.495	0.532	0.487	0.466	0.142	
C6H12SeBr2	ECOKOW	Se-C	2.012	0.022	-0.011	-0.009	0.034	0.022	a
		C-C-Se	102.980	0.255	-0.444	-0.454	0.325	1.373	
		C-C-C-Se	41.237	-0.343	-0.507	-0.504	0.215	-2.346	
		C-C-Se	112.863	-0.858	-0.480	-0.661	-0.140	-1.173	
		C-C-Se-C	233.273	0.913	1.171	0.664	0.945	2.616	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C7N2H10SeO2	EDECUL	Se-C	1.786	0.005	-0.025	-0.028	0.025	0.045	a
		N-C-Se	125.989	-0.151	-0.373	-0.253	-0.315	0.861	
		N-C-Se	125.648	-0.153	-0.377	-0.257	-0.318	1.127	
		C-N-C-Se	181.287	0.459	0.399	0.379	0.496	0.256	
C6N2H11SeBr	EFIWAS	Br-Se	2.782	-0.110	-0.410	-0.110	-0.119	-0.393	a
		N-Se	1.805	0.009	0.006	0.010	0.009	0.040	
		N-Se-Br	86.954	-0.410	-0.436	-0.302	-0.525	5.745	
		N-Se	1.945	0.011	0.007	0.002	0.009	0.212	
		N-Se-Br	172.716	0.433	0.462	0.319	0.524	1.898	
		C-N-Se	111.844	0.398	0.364	0.365	0.507	3.893	
		C-N-Se-Br	179.785	0.450	0.484	1.422	0.552	0.228	
C18PNH16Se	EGARIO	Se-P	2.111	-0.037	-0.019	-0.001	-0.076	-0.028	a
		C-P-Se	113.008	0.365	-2.131	-0.065	-0.165	2.235	
		C-P-Se	113.983	0.331	-2.131	0.082	-0.649	1.436	
		C-C-P-Se	305.472	-0.062	1.049	1.004	-2.176	-22.243	
C18PH15SeOF6	EGIGAC	Se-C	1.997	0.019	-0.011	-0.005	0.002	0.113	a
		P-C-Se	81.138	1.113	-0.629	-0.161	0.245	-11.324	
		O-P-C-Se	184.359	1.680	-1.873	-0.008	-0.038	1.879	
		C-P-C-Se	283.133	0.526	2.249	0.019	0.034	-12.453	
C14NH17SeO	EHEDUQ	Se-C	1.940	0.010	0.003	0.010	0.014	0.029	a
		O-C-Se	122.729	0.591	-0.050	0.647	0.620	2.127	
		N-C-Se	110.432	0.559	-0.033	-0.566	0.479	0.213	
C24N2H14Se	EKALAD	Se-C	1.909	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013	a
		C-Se	1.909	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013	
		C-Se-C	92.495	-0.014	-0.013	-0.015	-0.018	1.473	
		C-C-Se	119.439	-0.016	-0.013	-0.020	-0.020	0.434	
		C-C-Se-C	319.013	0.012	0.013	0.013	0.021	7.105	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14H10Se2O2	ELONAU	Se-Se	2.287	0.056	0.064	0.052	0.012	0.130	a
		Se-Se	1.964	0.021	-0.005	-0.009	0.000	-0.009	
		C-Se-Se	99.263	1.237	1.796	2.180	0.184	-1.220	
		C-C-Se	114.158	-1.192	-2.071	-2.621	0.086	-0.703	
		C-C-Se-Se	184.241	0.073	-0.011	0.014	-0.023	1.153	
C11H12SeO2	ELONEY	Se-C	1.912	-0.001	-0.026	-0.020	-0.009	0.014	a
		Se-C-C	121.577	-0.033	-0.101	-0.230	-0.132	-7.473	
		C-C-C-Se	356.058	0.257	0.808	1.079	0.962	3.966	
		C-C-Se	120.659	-0.013	-0.071	-0.109	-0.053	5.726	
C21N2H16Se	EMUFUO	Se-N	1.926	0.001	0.006	0.001	0.004	0.051	a
		N-C-Se	118.448	0.021	0.139	0.083	0.102	0.176	
		Se-C	1.913	-0.010	-0.001	0.000	0.001	0.005	
		C-Se-C	96.252	0.021	0.616	0.062	0.068	-0.363	
		C-Se-C-N	342.229	0.006	0.084	0.069	0.024	6.891	
C20H24SeO9	ERIFUG	Se-C	1.971	0.010	-0.002	-0.012	-0.010	0.028	a
		Se-C	1.916	-0.010	-0.007	-0.016	0.000	0.005	
		C-C-Se	113.450	-0.655	-0.049	-0.086	0.008	-10.068	
		C-C-Se-C	87.011	-0.529	-0.037	-0.055	0.005	10.782	
		C-C-C-Se	64.626	-0.527	-0.039	-0.064	-0.010	24.930	
C12N2H9SeBr	ERUVUJ	Br-Se	1.971	0.000	-0.002	0.000	0.004	0.267	a
		N-Se	1.916	0.000	-0.007	-0.002	0.012	0.140	
		N-Se-Br	113.450	0.000	-0.049	0.000	-0.001	5.281	
		N-N-Se	87.011	-0.069	-0.037	-0.126	-0.001	-4.262	
		N-N-Se-Br	64.626	0.000	-0.039	0.000	-0.001	3.058	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12N2H9SeBr	ERUVUJ	Br-Se	2.665	1.971	-0.007	0.000	-0.010	0.267	a
		N-Se	2.026	1.916	0.000	-0.002	0.000	0.140	
		N-Se-Br	174.717	113.450	0.005	0.000	0.008	5.281	
		N-N-Se	118.370	87.011	0.001	-0.126	0.005	-4.262	
		N-N-Se-Br	323.477	64.626	-0.006	0.000	-0.010	3.058	
C16H14Se3	KECFON	Se-Se	2.325	0.001	0.004	0.000	0.004	0.094	a
		Se-Se	2.325	0.000	0.000	0.000	0.012	0.094	
		Se-Se-Se	106.065	-0.001	-0.002	0.000	-0.001	0.270	
		Se-C	1.924	0.000	-0.003	0.000	-0.001	-0.011	
		Se-Se-C	101.585	-0.001	-0.003	0.000	-0.001	-3.067	
C24P2N3H20Se Cl	KEHYUR	Se-Cl	2.336	-0.010	-0.028	-0.014	0.009	0.037	a
		N-Se	1.739	-0.002	-0.011	0.002	0.012	0.056	
		N-Se-Cl	101.458	0.317	0.591	0.352	-0.487	-1.890	
		N-Se	1.722	-0.002	0.009	0.009	-0.009	0.073	
		N-Se-Cl	103.100	-0.073	-0.609	0.041	0.525	-3.654	
		P-N-Se	117.814	-0.056	-0.573	0.059	0.600	-1.203	
C16H16Se2O4	FAFQAE	Se-Se	2.324	0.001	0.002	0.011	0.007	0.114	a
		C-Se	1.915	0.000	-0.001	-0.010	-0.001	-0.002	
		C-Se-Se	93.784	-0.013	-0.020	-0.559	-0.022	-1.582	
		C-C-Se	122.969	-0.039	-0.026	-0.563	-0.026	-0.341	
		C-C-Se-C	315.519	0.009	0.018	0.558	0.015	2.071	
C9NH7SeO	FAGGAV	Se-C	1.845	-0.008	-0.015	-0.017	0.010	0.016	a
		Se-C-N	176.535	0.604	0.812	0.705	0.672	2.139	
		C-Se	1.944	0.009	0.010	0.011	0.011	0.034	
		C-Se-C	95.069	0.055	-0.617	1.036	0.559	0.182	
		C-Se-C-N	136.693	0.008	0.601	0.178	0.580	20.027	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10H12Se2O	FAGHIF	Se-C	1.960	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.020	a
		Se-C	1.962	-0.001	-0.001	-0.002	0.001	0.017	
		Se-C-Se	112.185	-0.003	-0.009	-0.020	0.038	3.907	
		Se-C	1.952	0.008	0.000	0.000	0.000	0.008	
		C-Se-C	97.848	-0.053	-0.009	0.012	0.011	0.085	
		C-Se-C-Se	303.314	-0.015	0.003	-0.550	-0.022	4.902	
C19N3H23Se	FAJWEU	Se-C	1.873	0.004	-0.005	-0.014	0.001	0.039	a
		N-Se-C	118.069	-0.683	-0.364	-1.592	0.068	3.723	
		C-N-C-Se	297.993	0.217	0.268	-0.034	-0.043	7.828	
		N-C-Se	123.634	-1.269	-0.644	-1.591	0.043	-0.501	
C14H14SeO2	FANSOD	Se-C	1.890	-0.014	-0.014	-0.012	-0.014	-0.038	a
		C-Se-C	132.258	0.551	-0.002	-0.566	1.822	4.537	
		C-C-C-Se	175.973	-0.557	0.024	0.559	0.519	-0.931	
		C-C-Se	132.192	0.550	-0.002	0.767	-0.516	-3.505	
		C-Se	1.944		0.000	0.010	0.010	-0.004	
C10H8Se4O4	FARROG	Se-C	1.902	-0.006	-0.008	-0.011	0.005	0.050	a
		Se-C	1.916	-0.007	-0.015	-0.009	-0.009	0.036	
		Se-C-Se	113.635	0.102	0.277	0.186	-0.112	-6.916	
		Se-C	1.901	0.000	-0.005	-0.002	0.001	-0.013	
		C-Se-C	98.066	-0.206	-0.308	-0.161	0.038	-1.604	
		C-Se-C-Se	138.816	0.161	0.081	-0.040	0.042	9.360	
C29NH25SeO4	FASKOA	C-Se	1.932	-0.005	-0.009	-0.009	-0.003	-0.004	a
		C-Se	1.919	-0.004	-0.011	-0.011	-0.006	-0.005	
		C-Se-C	101.362	0.069	0.326	1.155	0.091	-3.249	
		C-C-Se	121.053	0.010	0.009	-0.098	0.009	-3.197	
		C-C-Se-C	62.195	0.042	0.033	0.425	0.039	-7.696	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15PN3H14SeO	FAWCEM	Se-P	2.062	-0.018	-0.001	0.001	-0.032	-0.044	a
		O-P-Se	115.316	-0.012	-0.008	-0.005	-0.047	-10.480	
		N-P-Se	117.438	0.008	0.001	0.002	0.048	3.570	
		N-P-Se	114.524	-0.016	-0.011	-0.006	-0.051	6.687	
C22N2H24SeO	FAWWEF	Se-C	1.995	0.001	-0.003	-0.007	-0.014	-0.012	a
		C-C-Se	104.363	0.013	0.004	-0.371	0.490	-0.041	
		O-C-C-Se	267.511	0.025	-0.538	-0.102	-0.465	8.741	
		C-C-Se	109.666	-0.130	-0.300	-1.264	0.526	2.443	
C14H9SeCl	FAXTIH	Se-C	1.836	-0.011	-0.012	-0.011	-0.005	-0.043	a
		C-C-Se	179.232	-0.141	-0.389	-0.605	-0.322	-0.743	
		C-C-C-Se	218.616	0.009	0.001	0.573	0.001	-0.098	
		C-Se	1.915	-0.002	-0.005	-0.010	0.000	0.012	
		C-Se-C	98.484	-0.065	-0.033	0.647	-0.024	0.689	
C13NH15SeO	FEBZAP	Se-C	1.926	0.011	0.046	0.014	0.010	0.055	a
		N-C-Se	129.499	0.450	-0.656	-0.525	1.322	5.174	
		C-Se	1.959	-0.002	-0.010	-0.005	0.008	0.010	
		C-Se-C	85.368	-0.132	-0.255	-0.158	0.398	-0.313	
		C-Se-C-N	164.496	0.512	0.535	0.392	0.614	4.172	
C15NH12SeIO	FEBZIX	Se-C	1.902	0.012	0.011	0.011	0.014	0.058	a
		O-C-Se	112.402	0.534	-0.617	-1.400	-1.051	-1.688	
		N-C-Se	130.976	0.641	-0.596	0.673	1.605	4.306	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H20SeO3	FECTIQ01	Se-C	1.967	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.013	a
		C-C-Se	113.502	-0.028	-0.013	-0.023	-0.018	-1.707	
		C-C-C-Se	80.084	-0.015	-0.007	-0.014	-0.005	7.390	
		C-Se	1.995	-0.001	0.000	-0.001	-0.001	-0.001	
		C-Se-C	101.307	-0.022	-0.013	-0.010	-0.027	0.509	
C14H14SeO2	FEDQOV	C-Se	1.912	-0.010	-0.025	-0.033	0.000	0.008	a
		C-Se	1.953	0.020	-0.008	-0.014	0.005	0.017	
		C-Se-C	101.402	-1.803	-1.122	3.550	-1.132	-1.861	
		C-C-Se	113.377	-0.050	0.060	-0.748	0.019	-1.105	
		C-C-Se-C	61.762	0.208	-0.056	0.146	-0.055	25.513	
		O-C-C-Se	222.743	0.195	0.264	0.268	0.084	1.923	
C20NH23Se	FEHYIA10	Se-C	1.837	0.000	-0.010	-0.012	0.009	0.034	a
		N-C-Se	122.883	-0.206	-0.580	-0.632	1.777	2.477	
		C-C-Se	118.830	-0.255	-0.583	-0.633	-0.722	-5.157	
		C-N-C-Se	178.144	-0.108	0.578	-0.574	-0.490	2.533	
C26H20Se2Cl2	FENFOU	Se-Se	2.304	0.011	0.017	0.018	0.011	0.115	a
		C-Se	1.994	0.000	-0.003	-0.009	-0.001	-0.004	
		C-Se-Se	103.887	0.033	-0.120	-0.063	-0.043	-3.410	
		C-C-Se	104.637	-0.449	-0.672	-1.043	0.090	-1.092	
		Se-Se-C-C	193.799	-1.035	-0.459	-0.507	-0.226	-12.571	
C29NH39SeO4	FETKOE	Se-C	1.906	0.000	-0.003	-0.003	0.000	0.018	a
		C-Se	1.965	0.002	-0.002	-0.004	0.003	0.025	
		C-Se-C	105.043	-0.298	-0.455	-0.043	-0.791	-9.040	
		C-C-Se	112.377	0.004	0.006	-0.025	-0.021	-2.116	
		C-C-Se-C	258.317	-0.004	-0.004	0.016	0.029	-8.094	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12PH16SeCl	FICQEO	Se-P	2.080	-0.099	-0.011	0.001	-0.050	-0.004	a
		Cl-P-Se	112.567	0.588	-0.555	0.191	0.435	3.473	
C16PH19Se2	FICQOY	Se-P	2.098	-0.016	-0.010	-0.002	-0.017	0.004	a
		C-P-Se	114.873	-0.726	-0.581	0.302	-0.610	-1.186	
		C-C-P-Se	182.510	0.662	0.567	0.082	-0.632	-1.677	
		Se-C	1.922	-0.013	-0.011	-0.014	-0.014	0.027	
C6NH7Se2O	FIKYIH	Se-Se	2.441	0.000	-0.010	-0.010	0.000	0.087	a
		O-Se	2.049	-0.003	-0.012	-0.010	-0.075	-0.135	
		O-Se-Se	170.805	0.000	1.211	-0.668	0.033	0.516	
		N-O-Se	112.497	0.001	-0.559	-0.811	0.027	3.205	
		N-O-Se-Se	353.360	0.000	-0.586	0.574	-0.058	-0.811	
C6NH7Se2S	FIKYON	Se-Se	2.473	-0.018	-0.019	-0.084	-0.031	-0.031	a
		C-Se	1.906	0.009	-0.010	-0.009	0.003	0.070	
		C-Se-Se	88.710	0.498	-0.438	-0.178	0.189	2.406	
		N-C-Se	121.001	-0.774	-1.096	-2.997	-1.759	4.154	
		N-C-Se-Se	179.064	0.518	0.510	0.301	0.262	5.264	
C6NH7SeS2	FIKYUT	Se-C	1.898	-0.008	-0.010	-0.007	0.003	0.066	a
		N-C-Se	121.141	-0.779	-0.880	-1.404	-1.473	3.660	
		C-N-C-Se	359.741	-0.459	-0.451	-0.328	-0.025	5.992	
		S-Se	2.370	-0.023	-0.029	-0.054	-0.014	0.355	
C5N2H8SeS	FILXON	Se-C	1.792	-0.058	-0.014	-0.023	-0.010	-0.016	a
		N-C-Se	125.556	-0.162	-0.544	-0.522	-0.529	2.317	
		C-N-C-Se	175.985	1.161	0.543	-0.458	-0.492	4.005	
		C-C-Se	127.512	-0.187	-0.545	-0.532	-0.535	-1.660	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C18N3H18SeCl	FITQOO	Se-C	1.920	-0.006	-0.014	-0.004	0.001	0.006	a
		C-Se	1.915	-0.002	-0.007	0.000	0.001	0.009	
		C-Se-C	92.734	-0.062	0.831	0.103	0.125	1.043	
		C-C-Se	118.997	0.006	-0.072	0.039	0.086	2.155	
		C-C-Se-C	297.956	-0.024	-0.414	-0.069	-0.082	3.637	
		C-C-C-Se	357.913	-0.029	-0.331	-0.070	-0.068	-1.572	
C15PNH16Se	FOCRIZ	Se-P	2.108	-0.110	-0.046	-0.009	-0.047	-0.021	a
		N-P-Se	117.491	-1.621	-6.303	-0.557	-0.874	2.106	
		C-N-P-Se	306.171	0.287	0.159	0.642	0.400	1.028	
		C-P-Se	112.229	0.128	-5.718	-0.674	0.487	3.937	
C28H22Se2	FODFOU	Se-C	1.897	-0.006	-0.010	-0.012	-0.012	-0.019	a
		C-C-Se	133.018	-0.005	0.020	-0.039	-0.487	3.865	
		Se-C	1.878	-0.005	-0.006	-0.008	-0.009	0.002	
		C-C-Se	130.769	0.209	0.221	-0.200	0.780	5.138	
		Se-C-C-Se	352.857	-0.050	0.275	-0.651	0.639	5.557	
C18H29SeI	FOHNEV	I-Se	2.528	0.012	-0.010	0.010	0.256	-0.256	a
		C-Se-I	97.524	0.814	0.587	0.611	2.504	2.504	
		C-C-Se	118.862	0.494	-0.604	-0.668	-0.604	0.414	
		C-C-Se-I	86.727	1.774	0.572	0.588	0.588	-0.765	
		C-C-C-Se	198.907	0.940	0.572	-0.596	0.572	6.075	
C16H16Se2O4	FOLPEB	Se-C	1.956	-0.011	-0.015	-0.018	-0.010	-0.038	a
		C-C-Se	119.950	-0.539	-0.558	-0.557	-0.556	5.689	
		Se-C	1.859	0.014	-0.010	-0.010	0.010	0.059	
		Se-C-C	125.713	0.928	-0.553	-0.552	0.559	-0.116	
		Se-C-C-Se	7.605	-0.538	-0.559	-0.553	-0.554	-7.634	
		C-Se	1.974	-0.023	-0.014	-0.013	-0.022	-0.056	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6N2H13Se	FOLROO	Se-C	1.893	0.043	0.029	-0.013	0.327	0.217	a
		N-C-Se	113.205	0.433	-0.531	-0.582	0.187	-3.374	
		N-C-Se	122.348	0.558	-0.654	-0.613	2.137	3.999	
		C-N-C-Se	7.732	1.404	0.623	0.693	-0.003	11.353	
C31P2NH27Se2O	FOQFAS	Se-P	2.106	-0.016	-0.013	0.000	-0.015	-0.030	a
		Se-P-N	116.084	-0.178	-1.727	-0.234	0.410	-8.937	
		P-N-P-Se	296.788	-0.069	-0.474	-0.053	-0.340	-17.712	
		Se-P	2.094	-0.018	-0.015	0.000	-0.014	-0.017	
		Se-P-N	114.798	-0.363	-1.497	-0.477	1.759	-5.209	
		Se-P-N-P	337.634	-0.394	-0.462	-0.929	-0.303	23.796	
C14N2H8SeBr2	FOYFOP	Se-C	1.874	0.069	-0.009	0.038	0.011	0.069	a
		Se-C	1.875	0.090	-0.009	0.055	0.011	0.067	
		C-Se-C	81.344	-0.117	-0.552	-0.080	-0.571	-1.550	
		N-C-Se	113.476	-0.149	-0.565	-0.306	-0.571	-0.661	
		N-C-Se-C	360.321	1.720	0.644	1.696	0.576	-0.051	
C12N2H8SeO	FOYGAC	Se-C	1.860	0.052	-0.008	0.018	0.064	0.085	a
		Se-C	1.887	0.040	-0.009	0.012	0.060	0.072	
		C-Se-C	81.956	-0.039	-0.536	-0.017	-0.515	-1.953	
		N-C-Se	115.186	-0.055	-0.561	-0.054	-0.517	-0.983	
		N-C-Se-C	0.572	-0.031	-0.479	-0.019	-0.500	-0.393	
		N-C-Se	113.626	-0.037	-0.553	-0.047	-0.509	-0.290	
		N-C-Se-C	359.417	0.043	0.479	0.023	0.500	0.406	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12N2H7SeBrO	FOYGEG	Se-C	1.894	0.026	-0.008	0.013	0.027	0.063	a
		Se-C	1.869	0.026	-0.008	0.014	0.027	0.076	
		C-Se-C	82.174	-0.182	-0.535	-0.062	-0.509	-2.163	
		N-C-Se	114.965	-0.218	-0.567	-0.144	-0.506	-0.771	
		N-C-Se-C	1.835	-0.232	-0.522	-0.147	-0.521	-1.659	
		N-C-Se	112.923	-0.049	-0.540	-0.084	-0.479	0.490	
		N-C-Se-C	358.681	-0.092	-0.419	-0.026	-0.485	1.134	
C19H16Se2O2	GABTAF	Se-C	1.912	-0.002	-0.015	-0.002	-0.009	-0.006	a
		C-Se-C	120.396	0.152	0.321	0.032	0.528	0.267	
		C-C-C-Se	176.096	0.239	0.086	0.053	0.191	6.323	
		C-Se	1.927	-0.002	-0.003	-0.001	-0.008	0.002	
		C-Se-C	101.325	-0.151	-0.097	0.059	-0.432	-5.403	
C18H14Se2O2	GABTIN	Se-C	1.906	-0.001	-0.003	-0.008	-0.003	-0.002	a
		C-C-Se	120.450	-0.002	-0.010	-0.009	-0.044	-1.172	
		C-C-C-Se	176.769	-0.008	-0.004	0.013	0.029	1.342	
		C-C-Se	120.095	-0.006	-0.012	-0.011	-0.050	1.156	
C22H22Se2O2	GABTOT	Se-C	1.925	-0.002	-0.003	-0.004	-0.038	0.004	a
		C-C-Se	123.148	-0.305	-0.070	-0.363	0.838	5.923	
		Se-C	1.922	-0.004	-0.005	-0.008	-0.001	0.007	
		C-C-Se	122.559	-0.406	-0.252	-0.537	0.411	6.453	
		Se-C-C-Se	357.115	1.326	0.846	0.326	0.459	11.690	
		C-Se	1.927	-0.001	-0.011	-0.002	-0.009	-0.009	
C20H18Se2O2	GABTUZ	Se-C	1.919	-0.001	-0.004	-0.006	-0.002	-0.006	a
		C-C-Se	114.657	-0.002	-0.009	-0.026	-0.015	0.294	
		O-C-C-Se	1.234	-0.005	-0.002	-0.006	-0.003	-0.752	
		C-C-Se	125.219	-0.013	-0.016	-0.023	-0.022	-0.326	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15H16SeO	GABVAH	Se-C	1.927	-0.001	-0.004	-0.007	-0.018	-0.004	a
		C-C-Se	119.372	-0.005	-0.017	-0.024	-0.063	-0.438	
		C-C-C-Se	184.176	0.004	0.005	0.007	0.076	-1.971	
		C-C-Se	119.704	-0.005	-0.016	-0.023	-0.059	0.318	
C12H10SeO2	GABVEL	Se-C	1.907	-0.002	-0.006	-0.017	-0.003	-0.002	a
		C-C-Se	120.817	-0.010	-0.020	-0.033	-0.027	-1.487	
		O-C-C-Se	355.698	-0.013	-0.001	0.040	-0.020	2.441	
		C-C-C-Se	177.108	-0.012	-0.015	0.001	-0.001	1.247	
C14H14SeO	GABVIP	Se-C	1.918	-0.006	-0.001	-0.006	-0.010	-0.004	a
		C-C-Se	115.062	0.028	0.000	-0.040	-0.107	2.958	
		O-C-C-Se	1.238	-0.198	-0.021	-0.060	-0.123	0.602	
		C-C-C-Se	180.933	-0.252	-0.002	-0.013	0.077	0.820	
C14H14SeO	GABVOV	Se-C	1.920	-0.001	-0.001	-0.012	-0.010	0.002	a
		C-C-Se	121.025	-0.003	-0.006	-0.038	-0.107	1.166	
		C-C-Se	118.340	-0.003	-0.006	-0.040	-0.123	-2.002	
		C-C-C-Se	176.478	0.000	-0.001	-0.013	0.077	1.573	
C14H17SeBrO4	GADZOC	Se-Br	2.372	-0.010	-0.028	0.010	-0.022	0.003	a
		C-Se	1.924	-0.010	-0.018	-0.012	-0.012	0.008	
		C-Se-Br	99.767	-0.588	0.871	0.548	-0.566	4.667	
		C-C-Se	116.148	-0.506	-0.480	-0.561	-0.522	-6.098	
		C-C-Se-Br	149.672	0.665	-0.529	0.637	0.866	17.186	
		C-C-Se	126.262	-0.505	-0.476	-0.551	-0.489	5.707	
		C-C-Se-Br	334.892	0.510	0.475	-0.559	0.486	13.303	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C13H14SeO4	GADZUI	Se-O	1.871	-0.009	0.010	-0.032	-0.020	-0.013	a
		C-Se	1.854	0.023	0.009	0.010	0.005	0.037	
		C-Se-O	86.298	-0.510	0.539	0.536	0.149	-2.631	
		C-C-Se	113.191	0.508	0.614	1.023	-0.004	1.513	
		C-C-Se-O	0.000	-0.505	-0.533	-0.509	-0.001	-0.014	
		C-O-Se	114.939	-0.527	-1.462	0.515	0.105	3.352	
		C-O-Se-C	0.000	-0.504	-0.532	-0.509	0.000	0.015	
C18H20SeO3	GAPCUW	Se-O	1.858	0.001	0.019	-0.001	0.009	-0.033	a
		Se-O	1.864	0.005	0.001	-0.016	0.005	5.363	
		O-Se-O	167.680	-0.005	-0.120	0.045	0.232	3.628	
		Se-O	1.612	-0.004	0.004	0.018	0.044	1.866	
		O-Se-O	95.881	-0.004	-0.005	-0.018	-0.017	3.431	
		C-Se	1.943	0.000	-0.001	0.014	0.015	1.078	
		C-Se-O	85.600	-0.021	-0.028	-0.007	0.250	0.045	
C21H18SeSO2	GAQPEV	Se-C	1.904	0.012	-0.001	-0.001	0.011	0.017	a
		C-C-Se	123.015	0.750	-0.059	-0.086	0.947	11.074	
		S-C-C-Se	0.915	-0.312	-0.621	-0.122	-0.707	0.151	
C14H14SeO3	GARHUD	O-Se	1.665	-0.002	0.007	0.009	0.001	0.003	a
		Se-C	1.938	0.000	-0.004	-0.005	0.002	0.027	
		C-Se-O	102.785	-0.050	-0.337	0.853	-1.506	-4.350	
		C-C-Se	119.850	-0.001	-0.010	-0.017	-0.020	-2.129	
		C-C-Se-O	352.673	0.000	-0.005	-0.040	0.054	11.431	
		C-C-C-Se	178.081	-0.002	-0.006	-0.008	-0.019	1.227	
C6NH7Se	GASWUS	Se-C	1.834	-0.002	-0.008	-0.013	-0.009	0.022	a
		N-C-Se	121.612	-0.050	-0.062	-0.548	-0.532	0.689	
		C-N-C-Se	0.000	-0.122	-0.008	0.523	-0.584	-0.032	
		C-C-Se	122.726	-0.047	-0.058	-0.545	-0.537	-2.268	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9N2H9Se	GAWJAQ	Se-C	1.874	0.004	0.011	0.001	0.011	0.276	a
		N-C-Se	124.740	0.292	-0.705	-0.369	0.595	6.240	
		N-C-Se	111.146	0.066	0.537	0.075	0.561	-2.564	
		C-Se	1.875	0.001	0.009	0.001	0.008	0.011	
		C-Se-C	85.332	0.052	0.533	0.085	0.549	-3.713	
		C-Se-C-N	180.131	-0.044	-0.517	-0.008	-0.551	4.534	
C12H24Se6	GAXLAS10	Se-C	1.950	0.000	0.000	0.000	0.008	0.005	a
		Se-C	1.950	0.000	0.000	0.000	0.005	0.004	
		Se-C-Se	115.940	-0.013	-0.003	-0.008	-0.050	5.212	
		C-Se	1.957	0.001	0.000	0.000	0.006	0.016	
		C-Se-C	96.003	-0.009	-0.003	-0.004	0.134	2.283	
		C-Se-C-Se	276.923	0.303	0.087	0.347	0.052	12.586	
C30H26SeO	GEFNUB	Se-C	1.934	-0.001	-0.003	-0.006	-0.012	0.002	a
		C-C-Se	118.872	-0.143	-0.225	-0.220	0.629	-0.147	
		C-C-C-Se	356.200	0.023	0.122	0.110	-0.499	4.271	
		C-C-C-Se	176.599	-0.024	-0.150	-0.119	0.513	5.103	
C12N8Se2	GEFVOC10	Se-N	1.791	0.010	0.000	0.000	0.001	0.045	a
		C-N-Se	107.890	0.571	0.008	0.009	0.020	2.752	
		C-C-N-Se	180.560	0.579	-0.002	-0.002	-0.005	0.101	
		N-Se	1.791	0.010	0.001	0.001	0.002	0.045	
		N-Se-N	92.704	0.571	0.011	0.009	0.023	-3.245	
C12P2NH28Se2	GEGHOQ	Se-Se	2.484	-0.009	-0.010	0.008	0.013	0.314	a
		Se-P	2.272	-0.036	0.011	-0.013	-0.010	-0.099	
		Se-P-Se	91.430	-0.521	-0.583	0.606	0.656	-2.373	
		P-Se	2.229	-0.010	-0.012	0.009	0.012	-0.055	
		P-Se-Se	93.936	-0.526	-0.616	0.594	0.649	-4.859	
		P-Se-Se-P	25.077	-0.527	-0.610	0.597	0.582	2.430	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15P2H16Se3O	GEGNIP	Se-P	2.259	-0.010	-0.010	0.003	0.011	0.043	a
		Se-P	2.080	-0.013	-0.010	-0.004	-0.034	-0.036	
		Se-P-Se	117.728	0.562	0.575	-0.045	-0.536	5.652	
		O-P-Se	101.704	-0.549	-0.579	0.104	0.558	-6.956	
		P-Se	2.258	-0.016	0.010	0.021	0.020	0.071	
		P-Se-P	90.761	1.843	-0.574	0.212	0.576	5.162	
C10H16SeO6	GEHNEM	Se-C	1.783	0.003	-0.002	0.000	-0.008	-0.018	a
		O-C-Se	123.935	0.007	-0.002	-0.007	-0.109	-0.572	
		O-C-Se	123.715	0.007	-0.002	-0.007	-0.110	0.720	
C11N2H20SeI2	GEPPUM	Se-C	1.892	0.031	-0.004	0.008	-0.004	0.224	a
		N-C-Se	126.477	-0.096	-0.238	-0.042	-0.238	0.112	
		N-C-Se	125.536	-0.082	-0.227	-0.025	-0.2	0.795	
		N-C-Se-N	179.455	2.103	0.519	2.204	0.795	0.072	
C11N2H9SeClO	GOCBIJ	Se-C	1.812	0.010	-0.011	-0.010	0.011	0.028	a
		N-C-Se	127.247	-0.572	-0.571	-0.571	-0.551	-1.703	
		N-C-Se	124.735	-0.572	-0.571	-0.571	-0.544	3.245	
		C-N-C-Se	179.728	0.572	0.563	0.570	0.518	-0.297	
C17H18SeS2O2	GONNEC	Se-C	1.900	-0.004	-0.005	-0.008	0.004	0.084	a
		C-C-Se	125.242	-1.046	-1.047	-0.605	0.432	-0.918	
		S-C-C-Se	2.230	-0.472	-0.273	-0.171	0.099	1.012	
		Se-C-S	115.802	-0.712	-0.776	-0.524	0.672	6.189	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C21H18Se2SO2	GONNIG	Se-C	1.881	-0.001	-0.002	-0.010	0.004	0.096	a
		C-C-Se	124.942	-0.847	-0.688	-0.744	-0.121	-6.284	
		Se-C	1.875	0.004	-0.003	0.010	0.002	0.043	
		C-C-Se	122.164	-0.847	-0.688	-0.906	0.420	5.155	
		Se-C-C-Se	358.733	-0.327	-0.096	-0.592	-0.096	-0.736	
		S-C-Se	118.073	-0.566	-0.602	-0.656	0.386	7.021	
C20P4H36Se	GUDBIQ	Se-P	2.238	-0.010	-0.025	0.010	0.010	0.043	a
		C-Se	1.988	-0.010	0.013	0.008	0.011	0.057	
		P-Se-C	91.342	-0.574	-1.683	0.590	0.570	5.192	
		C-C-Se	107.380	0.601	-1.807	-1.787	-0.550	-3.798	
		C-C-Se-P	182.607	0.660	-0.757	-0.913	-0.561	-2.776	
C12N2H16SeO2	GUDNID	Se-C	1.849	0.016	-0.016	-0.015	0.010	0.058	a
		N-C-Se	120.176	-0.796	-0.854	-0.531	0.605	-0.621	
		N-C-Se	120.737	-0.773	-0.839	-0.588	0.715	1.395	
C18H16Se2O	GUKZER	Se-C	1.931	-0.005	-0.013	-0.008	-0.011	0.004	a
		C-C-Se	122.634	-0.062	-0.099	-0.066	-0.142	2.662	
		C-C-C-Se	14.918	-0.279	-0.732	-0.637	-0.683	-5.604	
		Se-C	1.951	-0.009	-0.026	-0.011	-0.027	-0.014	
		Se-C-C	121.780	-1.124	-2.172	-3.815	-1.261	0.062	
C17H13Se2Cl	GUKZIV	Se-C	1.925	-0.003	-0.003	-0.009	-0.002	0.009	a
		Se-C-C	125.295	0.476	-0.004	0.244	-0.003	2.921	
		C-C-Se	113.521	-0.004	-0.007	-0.009	-0.025	-3.576	
		Se-C	1.925	-0.001	-0.003	-0.006	-0.005	0.010	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6H10Se2O3	GULVAK	Se-Se	2.339	0.010	0.013	0.015	0.028	0.098	a
		C-Se	1.953	0.015	-0.001	-0.002	0.010	0.001	
		C-Se-Se	86.505	0.910	-0.060	-0.129	0.466	1.784	
		C-C-Se	109.184	1.115	-0.072	-0.158	0.518	3.229	
		C-C-C-Se	115.465	-0.445	-0.142	-0.249	-0.398	1.547	
C20H13Se	GUNJAA	Se-C	1.933	0.000	-0.006	0.000	0.001	0.021	a
		C-Se	1.921	0.002	-0.004	0.001	0.001	0.034	
		C-Se-C	86.554	-0.003	0.020	0.024	0.029	-0.180	
		C-C-Se	111.269	-0.004	-0.005	-0.015	-0.005	-0.115	
		C-C-Se-C	0.885	-0.013	-0.004	-0.004	0.005	1.305	
C9N2H9SeOF3	GUQBAW	Se-C	1.919	0.003	-0.007	-0.010	0.010	0.020	a
		Se-C	1.963	0.008	0.009	0.009	0.011	0.013	
		C-Se-C	103.960	0.386	0.707	0.877	-1.673	-5.806	
		N-C-Se	109.115	-0.054	-0.458	-0.530	-0.461	4.046	
		N-C-Se-C	189.436	-0.008	0.422	-0.513	-0.419	25.666	
		O-C-Se	121.984	0.059	-0.438	1.113	0.604	-1.703	
		O-C-Se-C	358.514	0.298	0.666	0.571	0.665	-4.431	
C19PNH18SeO2	GUTTIY	Se-C	1.900	0.010	0.003	0.000	0.039	0.058	a
		P-C-Se	130.118	0.865	0.615	0.548	2.265	-6.658	
		N-P-C-Se	359.215	-1.378	-0.314	-0.543	-0.821	-4.700	
		C-Se	1.907	0.002	-0.025	-0.013	0.003	0.028	
		C-Se-C	105.559	0.901	0.224	0.561	-0.965	-4.130	
H2Se	Hydrogen selenide	SeH	1.460	-0.048	-0.046	0.010	0.003	0.004	e
		HSeH	91.000	0.450	0.554	2.797	-1.171	2.765	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10N4H16Se3	HABGOG	Se-C	1.835	0.001	-0.013	-0.027	0.005	0.056	a
		N-C-Se	127.554	-0.005	0.001	0.007	-0.046	3.210	
		Se-N	2.043	-0.001	-0.001	-0.001	-0.005	-0.013	
		Se-N-C	115.106	0.002	-0.008	-0.009	0.049	3.810	
		Se-N-C-Se	180.366	-0.005	-0.331	-0.647	-0.028	-1.798	
C9N4H14Se3	HABGUM	Se-C	1.891	0.020	0.011	-0.008	0.014	0.061	a
		N-C-Se	113.300	-1.089	-0.643	-0.751	-0.591	1.389	
		C-N-C-Se	355.751	0.406	0.552	0.567	0.512	3.807	
		Se-C	1.874	0.009	-0.013	-0.026	0.010	0.049	
		Se-C-N	122.965	-0.564	-0.613	-0.574	-0.555	1.697	
C14H10Se2Cl2	HAFTOX	Se-C	1.916	-0.002	-0.004	-0.025	-0.005	0.012	a
		Cl-C-Se	119.318	-0.070	-0.123	2.584	-0.297	-3.506	
		C-C-Se	122.097	-0.073	-0.342	-1.639	-0.230	2.981	
		Se-C	1.916	-0.002	-0.005	-0.026	-0.005	0.012	
		Se-C-C	122.097	-0.024	-0.318	-2.584	0.177	3.666	
C22PN2H23Se	HAJHIL	Se-P	2.105	-0.025	-0.014	0.000	-0.008	-0.020	a
		N-P-Se	116.974	-0.053	-0.241	-0.124	-0.050	2.801	
		C-P-Se	112.762	-0.071	-1.903	-0.396	0.318	4.072	
C19H20SeO2	HAJJOR	Se-C	2.000	-0.002	-0.004	-0.011	-0.002	0.020	a
		C-C-Se	105.866	-0.055	-0.079	-0.597	-0.350	-0.432	
		C-C-C-Se	306.690	-0.043	0.238	0.886	-0.018	-7.116	
C26N2H20Se2O2	HALNIR	Se-Se	2.342	0.004	0.007	0.004	0.028	0.108	a
		Se-C	1.898	-0.002	-0.010	-0.021	0.000	0.004	
		C-Se-Se	99.204	0.112	0.204	0.168	-0.025	-1.369	
		C-C-Se	121.371	-0.125	-0.103	-0.093	0.145	1.680	
		C-C-Se-Se	97.950	-0.146	-0.249	-0.145	0.012	-8.313	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12N4H20Se2O4	HAVDOX	Se-C	1.970	0.009	0.000	0.000	0.010	-0.000	a
		C-C-Se	109.818	-0.005	-0.007	-0.013	0.567	-0.410	
		C-C-C-Se	250.061	0.003	0.005	0.007	-0.566	19.476	
		N-C-C-Se	67.644	-0.016	-0.016	-0.027	0.717	22.842	
C23H16SeO2F6	HAWXAE	Se-O	1.976	0.007	0.009	-0.059	-0.031	-0.080	a
		Se-O	1.902	0.001	0.009	-0.026	0.008	-0.020	
		O-Se-O	163.381	0.010	0.489	0.567	0.509	-4.795	
		C-Se	1.922	0.011	0.011	0.017	0.018	0.088	
		C-Se-O	91.671	-0.028	-0.493	-0.547	-0.508	-2.450	
		C-O-Se	96.329	0.000	-1.644	-0.636	0.500	2.604	
C8PH18SeI	HECMEH	Se-P	2.104	-0.078	-0.021	-0.016	-0.078	-0.019	a
		I-P-Se	112.204	0.365	-2.615	-0.500	0.365	4.800	
		Se-P-C	111.236	0.463	-3.873	-0.357	0.581	3.024	
		C-C-P-Se	302.908	-0.786	0.197	0.577	0.588	-8.324	
C6PH11SeI2	HECMIL	Se-P	2.092	-0.012	-0.007	-0.010	-0.110	-0.030	a
		I-P-Se	112.869	0.581	-0.571	-0.572	2.377	4.868	
		I-P-Se	114.208	0.588	-0.551	0.572	1.401	3.397	
		C-P-Se	114.377	0.604	-1.430	0.581	0.588	3.870	
C8PH18SeI	HECMOR	Se-P	2.172	-0.110	-0.065	-0.110	0.095	-0.087	a
		I-P-Se	110.980	2.377	-0.854	0.952	-0.529	6.021	
		C-P-Se	105.651	1.401	-0.050	1.792	0.034	8.558	
C8NH7SeO	HICBOK	Se-N	1.881	-0.008	-0.018	-0.002	0.000	-0.002	a
		C-Se	1.886	0.003	0.000	0.001	0.002	0.030	
		N-Se-C	85.688	0.092	0.041	0.095	0.064	0.987	
		C-N-Se	116.340	-1.047	-0.182	-0.529	0.037	-0.707	
		C-N-Se-C	358.040	0.046	0.450	0.034	0.040	1.760	
		O-C-N-Se	180.323	0.112	0.046	0.144	0.136	-0.125	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C20H16SeCl2O	HIKYIJ	Se-C	1.972	0.003	-0.002	-0.003	0.001	-0.011	a
		C-C-Se	115.582	-1.229	-0.309	-1.107	0.014	-3.123	
		O-C-C-Se	54.039	-0.102	-0.018	-0.104	0.072	2.233	
		C-Se	1.923	-0.004	-0.005	-0.009	-0.001	-0.003	
		C-Se-C	98.056	-0.044	-0.145	1.316	-0.208	3.190	
C29NH21SeO	HINFUF	Se-C	1.896	-0.007	-0.018	-0.003	0.002	0.020	a
		C-Se-C	97.488	-0.066	-0.242	-1.107	-0.059	-1.535	
		C-Se	1.948	-0.008	-0.013	-0.104	0.002	0.023	
		C-Se-C	101.294	0.065	0.257	-0.009	-0.202	-0.808	
		C-C-Se	126.981	-0.072	-0.039	1.316	-0.068	-3.142	
C9N2H10Se	HIVRAF	Se-C	1.825	0.003	-0.010	-0.011	0.002	0.048	a
		N-C-Se	126.905	0.009	-0.806	0.009	0.002	-0.097	
		N-C-Se	126.693	0.009	-0.798	0.009	0.002	-0.014	
C19H26SeO3	HIZXUJ	Se-C	1.965	0.013	-0.002	-0.010	0.010	0.004	a
		C-C-Se	112.215	-5.730	-0.204	-0.736	0.769	0.016	
		C-C-C-Se	177.576	-0.031	-0.015	-0.555	-0.477	-11.630	
		C-Se	1.924	-0.022	-0.005	-0.011	-0.009	0.002	
		C-Se-C	96.819	0.642	0.975	0.779	0.526	-1.322	
C20H28Se3	HOBXIF	Se-C	1.894	-0.009	-0.001	-0.010	-0.001	-0.014	a
		Se-C-C	138.173	-0.522	-0.012	-0.557	-0.025	0.109	
		Se-C	1.892	-0.011	-0.003	-0.011	-0.003	-0.020	
		Se-C-C	127.883	-0.520	-0.015	-0.556	-0.018	3.727	
		Se-C-C-Se	358.846	0.514	0.011	0.555	0.001	-1.529	
		Se-Se	2.346	0.010	0.001	0.010	0.004	0.093	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H6Se8	HOFVED	Se-C	1.842	0.009	-0.012	-0.014	0.015	0.105	a
		Se-C	1.907	0.009	0.007	-0.025	0.010	0.042	
		Se-C-Se	117.251	0.624	0.581	0.652	0.616	-4.920	
		C-Se	1.905	0.012	0.009	0.011	0.012	-0.011	
		C-Se-C	90.520	0.652	0.606	0.668	0.648	3.408	
		C-Se-C-Se	355.276	-0.978	-1.096	-0.814	-0.859	4.188	
C20N2H18SeO6	HUBLIZ	Se-C	1.963	0.002	0.004	0.000	0.001	0.016	a
		N-C-Se	106.288	0.031	-0.020	-0.038	0.009	2.673	
		C-N-C-Se	17.658	-0.008	-0.012	-0.003	0.048	-1.386	
C12N3H27Se3	HUBXIL	Se-N	1.843	-0.011	-0.013	-0.011	0.008	0.029	a
		Se-N	1.825	-0.008	-0.010	-0.009	0.008	0.040	
		Se-N-Se	113.328	-0.430	-0.516	-0.464	0.471	6.265	
		N-Se	1.841	-0.010	-0.013	-0.011	0.009	0.030	
		N-Se-N	106.612	-0.445	-0.529	-0.476	0.445	-1.546	
		N-Se-N-Se	301.259	1.273	2.599	3.393	0.456	6.153	
		N-Se	1.826	-0.020	-0.065	-0.036	0.036	0.039	
C12N3H27SeSO2	HUBXOR	Se-N	1.961	-0.031	-0.031	-0.082	-0.038	0.077	a
		Se-N	1.933	0.008	-0.019	0.015	0.018	0.105	
		N-Se-N	73.153	0.343	-0.517	1.286	0.842	-3.698	
		S-N-Se	98.609	0.593	4.159	1.402	1.130	5.072	
		S-N-Se-N	351.656	1.820	1.846	5.116	2.448	5.749	
		N-Se	1.666	-0.015	-0.045	0.084	-0.011	-0.048	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C24NH20SeS	IBIKIO	Se-N	1.833	0.025	-0.082	0.011	0.029	4.287	a
		S-N-Se	107.616	2.544	0.557	3.112	2.624	-29.314	
		C-S-N-Se	118.799	-1.589	-5.730	-2.490	-0.687	-157.036	
		C-S-N-Se	221.093	1.535	5.730	2.962	0.649	-149.020	
C12PN2H11Se	IBIPEO	Se-P	2.115	-0.100	-0.012	-0.007	-0.016	-0.056	a
		N-P-Se	118.742	-0.061	-1.428	-0.072	-0.549	1.571	
		N-P-Se	115.553	-0.167	-1.404	-0.066	-0.551	4.678	
		C-N-P-Se	247.141	-2.994	-0.570	-0.199	-0.751	-12.856	
C24H26Se2O5	IBIVUL	Se-O	1.855	0.001	0.000	-0.004	-0.001	-0.008	a
		Se-C	1.858	0.002	0.000	0.000	0.003	0.029	
		O-Se-C	86.446	0.030	0.004	0.022	0.126	-2.285	
		C-C-Se	113.231	-0.020	-0.002	-0.001	-0.017	1.797	
		C-C-Se-O	9.023	0.354	0.000	0.045	0.343	-1.938	
		C-O-Se	112.975	0.010	0.002	0.011	0.146	3.815	
C16N2H12Se2S4O	IDERAL	Se-C	1.878	0.010	-0.011	-0.010	0.008	0.097	a
		C-C-Se	126.724	0.475	0.556	-0.571	0.057	-4.809	
		Se-C	1.884	0.009	-0.011	-0.010	0.007	0.087	
		C-C-Se	125.517	-0.857	0.567	-0.604	-0.646	-5.488	
		Se-C-C-Se	2.226	0.643	-0.776	0.569	-0.355	-0.291	
		S-C-Se	116.454	0.485	0.556	-0.570	0.087	5.856	
C16NH21SeO	IFEGEF	Se-C	1.914	-0.004	-0.003	-0.004	0.000	0.009	a
		C-C-Se	116.021	-0.113	-0.009	-0.010	-0.004	2.922	
		C-Se	1.959	0.005	-0.001	-0.002	0.001	0.022	
		C-Se-C	101.936	0.079	-0.090	0.177	-0.096	-4.471	
		C-Se-C-C	158.292	-0.184	0.142	-0.011	0.197	-48.074	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9NH11Se2	IFESIV	Se-C	1.816	-0.029	-0.003	-0.100	0.010	0.048	a
		Se-C	1.939	-0.007	-0.007	-0.079	0.010	0.043	
		Se-C-Se	122.889	-1.282	-0.097	-0.717	-0.723	-0.462	
		N-C-Se	124.145	-0.237	-0.016	3.621	-0.605	-1.470	
		Se-C	1.919	-0.007	-0.001	-0.022	-0.014	-0.001	
		C-Se-C	100.278	-3.019	-0.173	-5.730	-1.483	-2.958	
C18P2H16Se3O4	IFUKID	Se-P	2.091	-0.020	-0.012	-0.013	-0.038	-0.034	a
		P-Se	2.243	-0.029	0.011	0.011	0.027	0.092	
		Se-P-Se	114.763	0.533	-0.835	1.029	-0.427	4.697	
		P-Se	2.280	-0.010	-0.011	0.008	0.010	0.024	
		P-Se-P	93.747	-0.519	-0.581	0.580	0.572	4.105	
		P-Se-P-Se	229.393	-0.516	0.718	0.469	0.487	11.771	
C12PH11Se3O4	IFUKOJ	Se-P	2.113	-0.015	-0.013	-0.013	-0.043	-0.027	a
		Se-P	2.251	-0.021	0.010	0.010	0.048	-0.021	
		Se-P-Se	116.483	0.577	0.552	0.688	1.397	5.859	
		Se-Se	2.359	-0.010	-0.010	0.010	0.012	0.145	
		Se-Se-P	91.485	-0.549	-0.597	0.583	0.631	-4.490	
		Se-Se-P-Se	94.523	0.591	-0.731	0.599	1.078	-7.644	
C18PH17Se2O8	IFUKUP	Se-P	2.092	-0.017	-0.011	-0.010	-0.062	-0.037	a
		C-P-Se	112.914	0.568	-0.629	0.562	0.547	2.366	
		C-C-P-Se	77.710	0.551	-0.649	-0.562	-0.522	2.309	
		Se-C	1.895	-0.010	-0.010	0.010	0.010	0.029	
		Se-C-C	125.290	-0.556	-0.585	0.563	0.571	1.717	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19P2N2H24Se3	IFULEA	Se-P	2.085	-0.021	-0.015	-0.005	-0.015	-0.034	a
		P-Se	2.276	-0.001	-0.010	0.002	0.011	0.096	
		Se-P-Se	109.236	0.028	0.595	-0.101	-0.543	7.869	
		P-Se	2.228	-0.062	0.011	-0.001	-0.008	0.060	
		P-Se-P	90.276	-0.038	-0.543	0.164	0.579	5.257	
		P-Se-P-Se	217.317	0.086	0.738	0.484	-0.532	6.137	
C22NH27SeO3	IGACOI	Se-C	1.994	-0.009	-0.005	-0.007	0.001	-0.001	a
		C-C-Se	109.251	0.532	0.002	-0.504	-0.002	-0.325	
		O-C-C-Se	194.726	-0.552	-0.151	0.004	-0.148	-1.667	
		C-C-Se	109.797	0.530	-0.133	-0.344	-0.009	-0.297	
C14H16Se4S2O4	IJOCUF	Se-C	1.897	-0.010	-0.011	-0.017	0.011	0.053	a
		Se-C	1.896	0.009	-0.010	-0.033	0.010	0.053	
		Se-C-Se	114.413	0.506	-0.545	0.472	0.504	-2.168	
		C-C-Se	124.714	-0.723	-0.624	1.827	-1.424	-0.779	
		Se-C	1.900	-0.009	-0.012	-0.025	-0.009	0.030	
		Se-C-C	119.768	0.999	0.537	0.491	-0.507	4.379	
C14H14SeO4	IKABOL	Se-C	1.843	0.003	0.000	0.002	0.004	0.042	a
		C-Se	1.843	0.003	0.000	0.002	0.004	0.042	
		C-Se-C	87.975	0.092	0.016	0.104	0.151	-1.677	
		C-C-Se	112.166	0.090	0.015	0.085	0.148	0.554	
		C-C-Se-C	0.000	0.000	-0.006	-0.001	0.000	0.005	
		C-C-Se	112.164	0.090	0.015	0.085	0.148	0.559	
		C-C-Se-C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	
		C-C-Se	120.455	0.323	0.053	-6.040	1.224	0.040	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C11NH16Se	IKUZAP	Se-C	1.918	-0.010	-0.013	-0.013	0.009	0.027	a
		C-C-Se	125.722	-0.837	-0.823	-0.695	-1.343	-8.232	
		C-C-Se	112.974	-0.727	-0.748	-0.998	-0.500	4.380	
C7H4Se2S4	ILEWUR01	Se-C	1.911	0.000	-0.030	-0.025	0.011	0.045	a
		C-Se	1.910	0.000	-0.012	-0.002	0.009	0.046	
		Se-C-Se	114.337	0.022	-0.241	-0.043	0.497	-4.299	
		C-Se	1.874	0.001	-0.012	-0.001	0.011	0.087	
		C-Se-C	92.986	0.016	-0.308	-0.016	0.526	2.308	
		C-Se-C-Se	3.543	-0.007	-0.054	-0.013	0.750	10.607	
C32P2H28Se2	IQUTIX	Se-P	2.116	-0.045	-0.023	-0.002	-0.036	-0.002	a
		C-P-Se	114.027	0.183	-0.068	0.045	0.064	-3.160	
		C-C-P-Se	295.403	-0.009	-0.061	0.020	0.065	-24.121	
		Se-C	113.957	-0.006	-0.067	0.019	0.065	-3.194	
C7NH5SeO4	ISUJEM	Se-O	1.795	0.009	0.021	0.007	0.004	0.022	a
		O-Se	1.631	-0.039	0.030	0.025	0.001	-0.003	
		O-Se-O	104.789	-0.771	-4.161	0.010	-0.153	-3.925	
		C-Se	1.934	0.005	0.005	0.002	0.004	0.058	
		C-Se-O	86.492	0.098	0.153	0.171	0.133	-1.653	
		C-C-Se	110.140	-0.120	-0.130	-0.116	-0.061	-1.135	
		C-C-Se-O	270.011	-0.140	-0.164	-0.153	-0.078	3.928	
C7NH5SeO4	ISUJIQ	Se-O	1.850	0.001	0.010	-0.002	0.009	-0.010	a
		Se-O-C	115.320	0.012	0.466	0.034	0.534	2.681	
		O-C-O-Se	249.682	-0.012	-0.554	-0.058	-0.527	3.864	
		C-Se	1.852	0.001	-0.015	0.001	0.010	0.030	
		C-Se-O	86.589	0.021	0.499	0.057	0.541	-1.937	
		C-Se-O-C	350.327	0.017	-0.502	-0.047	-0.509	0.814	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6H12SeO2	ITAMUL	Se-O	1.961	0.000	-0.018	-0.055	-0.051	-0.108	a
		Se-O	1.945	0.001	-0.003	-0.050	-0.046	-0.092	
		O-Se-O	172.979	0.004	-0.004	0.506	0.164	-5.222	
		Se-C	1.961	0.006	0.001	0.010	0.009	0.061	
		C-Se-O	86.208	0.153	0.035	0.482	0.218	-0.371	
		C-C-Se	107.937	0.105	0.021	0.459	0.162	-1.417	
C19PN2H21Se	ITAVUV	Se-P	2.115	-0.100	-0.025	-0.002	-0.076	-0.032	a
		Se-P-C	114.676	0.096	-2.459	-0.433	-0.250	3.264	
		N-C-P-Se	301.885	-0.134	-0.045	0.356	-0.317	12.960	
		N-C-P-Se	118.511	0.211	0.149	0.389	0.082	19.322	
C13N2H10SeO3	IVEKOK	Se-C	1.645	-0.018	0.018	0.011	-0.002	-0.012	a
		N-Se	1.867	0.001	0.001	0.004	0.002	0.089	
		N-Se-O	106.254	-0.087	-0.304	-0.141	-0.104	-4.791	
		C-Se	1.937	0.002	0.006	0.001	0.003	0.043	
		C-Se-O	104.324	-0.153	-0.830	-0.112	-0.542	-5.925	
		C-C-Se	127.006	-0.004	-0.062	-0.063	-0.036	-0.346	
		C-C-Se-O	86.357	0.107	0.869	0.142	0.188	5.505	
C14N2H12SeO2	IVELAX	Se-N	1.890	-0.006	-0.015	-0.002	0.000	0.059	a
		C-Se	1.861	0.008	0.000	0.001	0.001	0.025	
		C-Se-N	85.724	0.737	0.053	0.083	0.033	-0.272	
		C-C-Se	126.124	0.037	0.009	0.001	0.001	-4.048	
		C-C-Se-N	187.228	0.096	0.017	0.026	0.030	-5.739	
		C-C-Se	113.984	0.026	0.008	0.004	0.010	2.173	
		C-C-Se-N	7.306	0.137	0.038	0.053	0.406	-6.299	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14N2H11SeBrO2	IVELEB	Se-N	1.905	-0.001	0.000	-0.002	0.001	0.060	a
		C-Se	1.880	0.012	0.000	-0.001	0.000	0.016	
		C-Se-N	88.109	-0.038	-0.002	-0.036	0.013	-2.026	
		C-C-Se	128.311	0.084	0.007	0.040	0.539	-5.267	
		C-C-Se-N	170.247	-0.407	-0.042	-0.354	-0.037	1.514	
		C-N-Se	111.616	-0.379	-0.214	-3.263	0.038	-1.869	
		C-N-Se-C	255.789	2.541	0.097	-0.996	-0.020	-4.352	
C17N2H18Se	IXATIK	Se-C	1.828	0.001	-0.005	-0.001	0.010	0.043	a
		N-C-Se	126.359	-0.010	-0.039	-0.006	-0.572	0.509	
		N-C-Se	127.056	-0.010	-0.039	-0.007	-0.572	-0.686	
C12Se2SF10	IYUCAG	Se-S	2.176	0.014	0.011	-0.014	0.013	0.568	a
		Se-S	2.176	0.014	0.012	-0.014	0.013	0.593	
		Se-S-Se	108.534	-1.269	0.670	0.629	0.719	-11.154	
		C-Se	1.915	-0.012	-0.016	-0.024	-0.015	-0.018	
		C-Se-S	99.751	0.517	0.650	1.384	-0.706	-7.706	
		C-Se-S-Se	101.883	-0.599	-0.650	-0.669	-0.864	-55.964	
C24N2H22SeSO4	IZUMIZ	Se-C	2.003	0.000	-0.002	-0.037	0.001	0.029	a
		N-C-Se	113.257	-0.001	-0.003	0.027	0.011	1.346	
		C-C-Se	113.242	-0.001	-0.005	0.018	0.009	-4.834	
		C-Se	1.921	-0.001	-0.003	-0.020	-0.002	0.002	
		C-Se-C	100.129	0.234	-0.013	0.087	-0.239	-3.382	
C6N2H12SeO4	JABPEH	Se-C	1.952	0.019	0.001	-0.007	0.018	0.017	a
		C-C-Se	114.596	-3.135	-3.780	-2.511	-0.777	-0.080	
		C-C-C-Se	44.042	-3.199	1.122	-2.511	-3.625	0.122	
		N-C-C-Se	279.389	3.429	0.555	2.511	2.546	8.254	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C13N2H8SeO3	JABZAN	Se-N	1.896	0.010	-0.002	0.001	0.001	0.017	a
		C-Se	1.846	0.010	0.001	0.002	0.002	-0.080	
		N-Se-C	85.484	0.571	0.051	0.112	0.077	0.122	
		C-C-Se	127.185	0.591	-0.007	-0.063	-0.033	8.254	
		N-C-C-Se	178.157	0.574	0.061	0.058	0.037		
C12N2H14SeO4	JACFEZ	Se-C	1.944	0.011	0.012	0.010	0.011	0.104	a
		N-C-Se	120.058	-0.576	-0.860	-0.578	0.627	3.195	
		N-C-Se	116.575	0.561	-2.380	-0.641	0.556	-1.277	
C7N2H8SeO3	JAQKUI	Se-C	1.882	0.109	-0.001	0.067	-0.007	0.044	a
		Se-C	1.931	0.007	0.005	0.004	0.011	0.105	
		C-Se-C	83.618	0.174	0.241	0.288	0.508	-2.359	
		N-C-Se	120.031	-0.316	-5.238	1.077	1.155	3.861	
		N-C-Se-C	181.537	-0.191	-0.160	-0.146	-0.394	-1.537	
		C-C-Se	126.931	-0.360	-0.693	-3.657	-0.395	-9.361	
C9NH7SeSO	JATGOB	Se-C	1.790	-0.007	-0.015	-0.026	0.001	0.052	a
		S-C-Se	121.054	-0.118	0.022	-0.079	0.979	10.535	
		N-C-Se	127.717	-0.789	0.017	-0.092	0.317	-6.094	
C19PN3H15SeCl	JAXBOZ	Se-Cl	2.339	-0.006	-0.015	-0.024	-0.014	-0.004	a
		N-Se	1.755	0.000	-0.001	0.003	0.010	0.048	
		N-Se-Cl	98.302	-0.004	0.053	-0.126	-0.558	-0.992	
		N-Se	1.727	0.000	-0.001	0.004	0.011	0.065	
		N-Se-Cl	104.022	-0.019	0.045	-0.146	-0.563	-1.509	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C26P2N4H26Se2	JAYTOS10	Se-N	1.779	0.000	-0.010	0.002	0.012	0.048	a
		Se-N	1.777	0.001	-0.010	0.004	0.015	0.065	
		N-Se-N	105.012	0.019	-0.538	0.076	0.560	15.297	
		P-N-Se	115.896	0.033	-0.532	0.079	0.611	6.796	
		P-N-Se-N	260.164	-0.058	-2.270	-0.120	-0.714	50.474	
C16H23SeBrO2	JENKAO	Se-C	1.907	0.009	-0.001	-0.011	0.010	0.014	a
		Se-C	1.979	0.010	-0.001	-0.011	0.010	0.007	
		C-Se-C	97.437	-0.654	-0.087	0.714	-1.376	0.973	
		C-C-Se	110.244	-0.722	-0.477	-0.949	0.740	-0.509	
		C-C-Se-C	152.622	0.608	0.039	0.627	0.529	-20.939	
C26H20Se2	JEVSOS	Se-C	2.002	-0.001	-0.002	-0.005	-0.010	0.017	a
		Se-C	1.996	-0.001	-0.004	-0.016	0.009	0.023	
		Se-C-Se	93.170	-0.021	-0.068	-0.223	0.976	3.016	
		Se-C	1.996	-0.003	-0.004	-0.010	-0.010	0.023	
		C-Se-C	86.829	-0.068	-0.075	-0.149	-0.609	-3.019	
		C-Se-C-Se	0.000	-0.088	-0.119	-0.278	-0.546	0.081	
C18H22Se2O4	JITQIM	Se-Se	2.329	0.066	0.004	0.012	0.011	0.133	a
		C-Se	1.928	-0.007	-0.001	-0.005	-0.011	-0.015	
		C-Se-Se	100.984	-0.592	0.005	0.122	-0.583	-5.814	
		C-C-Se	121.480	-0.968	-0.086	0.017	0.592	1.851	
		C-C-Se-Se	107.508	-0.022	0.011	-0.061	-0.664	42.780	
HSeO3	JIVWEQ	Se-O	1.663	-0.091	-0.002	-0.041	-0.019	-0.037	a
		Se-O	1.651	-0.067	0.010	-0.026	-0.004	0.100	
		O-Se-O	104.889	6.303	6.303	16.011	7.584	-5.039	
		Se-O	1.784	0.014	0.045	0.011	0.005	-0.026	
		O-Se-O	97.412	2.992	3.996	6.303	5.181	1.374	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 E PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15NH15SeCl	JIXJOP	Se-Cl	2.295	0.016	-0.023	-0.028	0.031	0.129	a
		C-Se	1.953	-0.004	0.001	-0.003	0.001	-0.009	
		C-Se-Cl	94.143	-0.019	-0.016	-0.040	-0.040	7.754	
		C-Se	1.957	-0.001	-0.001	-0.002	0.000	-0.014	
		C-Se-Cl	96.263	0.050	0.039	0.053	0.042	6.025	
		C-C-Se	122.744	0.015	0.013	0.019	0.003	-7.317	
C16H10Se4	JOBNOB	Se-Se	2.336	0.005	0.008	0.006	0.026	0.111	a
		Se-C	1.913	-0.004	-0.004	-0.004	-0.003	-0.003	
		Se-Se-C	92.226	-0.451	-0.289	-0.195	-0.142	-1.583	
		C-C-Se	115.705	0.023	0.004	0.006	0.003	1.894	
		C-C-Se-Se	1.410	0.001	0.002	-0.005	0.005	-1.657	
C16H10Se4	JOBNUJ	Se-Se	2.343	0.001	0.000	0.007	0.049	0.107	a
		C-Se	1.912	-0.003	0.000	-0.014	-0.001	-0.008	
		Se-Se-C	92.122	-0.134	-0.001	-1.054	-0.023	-1.703	
		C-C-Se	115.381	0.003	-0.028	0.001	-0.006	2.639	
		C-C-Se-Se	7.137	-0.015	-0.001	-0.020	-0.287	-7.220	
C14H6Se4	JOLHAT	Se-Se	2.340	0.000	0.000	0.000	0.001	0.098	a
		Se-C	1.906	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	
		Se-Se-C	91.602	-0.007	-0.001	-0.002	0.009	0.091	
		C-C-Se	121.055	0.006	0.001	0.001	0.234	1.066	
		C-C-Se-Se	176.855	0.070	0.036	0.458	0.014	3.149	
C22N2H24Se2O2	JOWTAQ	Se-Se	2.353	0.011	0.005	0.012	0.015	0.144	a
		Se-C	1.945	-0.012	-0.009	-0.015	-0.012	-0.014	
		C-Se-Se	101.493	0.568	-0.017	-0.560	1.190	-1.170	
		C-C-Se	121.276	-0.528	-0.020	-0.515	-0.517	4.938	
		C-C-Se-Se	350.290	-1.097	-0.809	-1.086	-1.244	9.406	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C ₂₄ N ₂ H ₂₄ Se ₂	JOWXUO02	Se-Se	2.373	0.001	0.001	-0.001	0.014	0.117	a
		C-Se	1.944	-0.003	-0.007	-0.007	-0.014	-0.023	
		C-Se-Se	102.038	0.000	-0.052	-0.121	1.912	-0.658	
		C-C-Se	121.366	-0.013	-0.019	-0.026	-0.055	1.276	
		C-C-Se-Se	357.112	-0.049	-0.034	-0.134	-0.139	1.468	
C ₁₅ N ₂ H ₉ SeClO ₂	JUDNOL	Se-C	1.911	0.029	0.001	0.008	0.003	0.067	a
		C-Se	1.863	0.001	0.001	0.001	0.001	0.042	
		C-Se-C	84.518	0.033	0.047	0.089	0.060	-1.185	
		N-C-Se	114.278	-0.011	0.055	-0.035	0.108	0.626	
		N-C-Se-C	354.215	0.007	0.029	0.032	0.037	5.463	
C ₃ H ₃ Se ₆ O	JUKGIF	Se-C	1.922	-0.002	-0.031	-0.127	0.012	0.006	a
		Se-C	1.933	-0.003	-0.014	-0.039	0.012	0.048	
		Se-C-Se	99.484	0.082	-2.575	-6.419	5.999	12.046	
		Se-Se	2.389	-0.003	-0.009	-0.014	0.001	0.055	
		Se-Se-C	105.694	-0.081	-0.448	-0.581	0.034	-4.178	
		Se-Se-C-Se	182.051	0.003	0.470	0.643	-0.181	-17.334	
C ₉ H ₁₁ SeCl	KABSAI	Se-Cl	2.188	0.018	-0.014	-0.004	0.028	0.076	a
		C-Se	1.907	-0.006	-0.003	-0.016	-0.004	-0.005	
		C-Se-Cl	98.980	-0.385	0.079	0.714	-0.993	-3.510	
		C-C-Se	119.960	-0.034	-0.020	-0.050	-0.064	0.482	
		C-C-Se-Cl	275.537	0.092	0.036	0.102	0.072	16.497	
C ₉ H ₁₁ SeBr	KABSIQ	Br-Se	2.331	0.010	-0.015	0.016	-0.011	0.007	a
		C-Se	1.920	-0.010	-0.005	-0.015	-0.011	-0.008	
		C-Se-Br	98.805	0.559	0.389	0.434	-0.575	-0.888	
		C-C-Se	118.518	0.969	-0.005	-0.006	0.845	1.162	
		C-C-Se-Br	92.384	0.557	0.011	-0.010	0.561	-1.429	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9H2SeBrF9	KABSOW	Br-Se	2.311	0.016	-0.023	0.028	-0.018	0.011	a
		C-Se	1.940	-0.010	-0.016	-0.026	-0.013	0.007	
		C-Se-Br	98.079	0.435	2.552	0.761	-0.709	-1.945	
		C-C-Se	120.205	-0.463	-0.421	-0.490	-0.472	0.073	
		C-C-Se-Br	93.426	-0.479	-0.434	0.760	0.737	-3.339	
C18H29SeBr	KABSUC	Br-Se	2.335	0.011	-0.006	0.012	-0.015	0.013	a
		C-Se	1.927	-0.010	-0.002	-0.012	-0.011	-0.002	
		C-Se-Br	97.188	0.590	0.706	0.695	-0.533	-1.359	
		C-C-Se	118.730	-0.552	-0.009	-0.540	-0.495	0.604	
		C-C-Se-Br	90.996	-0.682	0.006	0.543	-1.110	-4.994	
C10NH11Se	KABTAJ	Se-C	1.834	-0.010	-0.011	-0.010	0.010	0.015	a
		N-C-Se	178.728	0.673	0.601	0.731	0.684	1.667	
		C-Se	1.936	-0.010	-0.013	-0.010	-0.021	-0.009	
		C-Se-C	95.882	0.619	0.582	0.698	0.536	0.344	
		C-Se-C-N	68.687	0.598	0.575	0.594	0.581	14.141	
C18PN3H18Se	KABVIT	Se-P	2.117	-0.100	-0.019	-0.020	-0.077	-0.061	a
		N-P-Se	106.964	-0.489	-1.065	-0.854	1.021	6.425	
		N-P-Se	117.922	-0.961	-1.438	-0.875	-0.853	0.213	
		N-P-Se	116.115	-0.817	-0.970	-0.546	-0.532	5.256	
C20P2H44Se2S2O	KAJQOB01	P-Se	2.228	-0.110	0.047	0.049	0.068	0.047	a
		Se-Se	2.383	0.011	0.012	0.007	0.110	0.958	
		Se-Se-P	97.043	6.303	3.269	6.303	6.303	-41.537	
		P-Se	2.229	-0.051	0.040	0.047	0.067	0.115	
		P-Se-Se	97.044	6.303	3.215	6.303	6.303	-41.564	
		P-Se-Se-P	179.982	0.618	0.678	0.909	0.619	28.779	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6PN3H12Se	KAYCOD	Se-P	2.099	-0.047	-0.042	-0.020	-0.070	-0.041	a
		C-P-Se	117.790	-0.012	0.029	0.447	-0.171	2.611	
		C-P-Se	117.783	-0.073	0.002	-0.196	-0.214	2.577	
		C-P-Se	117.801	0.687	0.071	0.362	-0.154	2.600	
SeO4	RANYEK	Se-O	1.615	0.052	0.110	0.110	0.070	0.100	a
		O-Se	1.617	0.049	0.110	0.110	0.069	0.097	
		O-Se-O	111.563	-0.805	-0.788	-0.625	-0.870	-2.080	
		O-Se	1.652	0.021	0.099	0.066	0.044	0.062	
		O-Se-O	109.093	-0.120	-0.113	-0.056	-0.145	0.369	
		O-Se-O-O	122.794	-1.883	-1.886	-1.748	-1.941	-2.808	
C4H3SeO	REDZOQ	Se-C	1.871	-0.010	-0.039	-0.038	-0.024	-0.029	a
		O-C-Se	117.732	-0.569	-0.310	-0.117	-0.456	-7.625	
		C-C-Se	134.373	-0.569	-0.307	-0.118	-0.437	5.801	
		C-C-Se-O	181.395	-0.571	-0.460	-0.371	-0.534	-1.405	
C8PNH18Se2O	REJZUB	Se-P	2.269	0.000	0.008	0.004	0.008	-0.014	a
		Se-P-Se	112.273	-1.001	0.479	3.236	-0.956	12.467	
		O-P-Se	95.512	0.209	0.467	0.127	0.297	-0.995	
		O-P-Se-Se	241.061	-0.206	1.804	-0.109	-0.330	9.551	
C2P4N2Se3	REQQIN	Se-P	2.263	-0.040	-0.006	-0.008	0.012	0.042	a
		Se-P	2.266	-0.032	-0.005	-0.008	0.022	0.129	
		P-Se-P	103.050	-1.285	-0.211	-0.440	0.511	-3.334	
		Se-P	2.242	-0.051	-0.025	-0.042	0.050	0.111	
		Se-P-Se	103.978	-1.039	-0.268	-0.490	0.967	0.265	
		Se-P-Se-P	26.086	-1.293	-0.327	-0.514	0.992	-4.349	
		P-P-Se	93.278	-0.379	19.332	4.720	1.165	-3.552	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
HSeO3	RESNEI	Se-O	1.649	0.013	0.091	0.048	0.010	0.021	a
		O-Se	1.665	-0.003	0.074	0.034	-0.006	0.005	
		O-Se-O	104.590	-0.089	-1.203	3.102	-0.689	1.130	
		O-Se	1.767	0.076	0.090	0.050	0.051	0.067	
		O-Se-O	98.971	-1.915	-2.192	1.728	-0.282	0.339	
		O-Se-O-O	258.133	2.693	3.503	-2.861	0.862	-0.655	
C13NH11Se	RIFHET	Se-C	1.816	-0.008	-0.010	-0.017	-0.003	-0.009	a
		Se-C-N	128.234	-0.370	-0.237	-1.419	-0.090	0.522	
		C-N-C-Se	175.154	-0.066	0.030	0.046	-0.003	3.310	
		C-N-C-Se	357.218	0.083	0.028	0.069	0.042	1.589	
C20PH19SeO	KEVBUI	Se-C	1.982	-0.006	-0.004	-0.004	0.019	0.055	a
		Se-C-P	106.342	-1.399	0.477	-0.226	2.552	-15.930	
		Se-C-P-O	56.875	-0.338	-0.129	-0.134	-0.141	-75.914	
		C-Se	1.936	0.007	0.001	0.002	0.011	0.026	
		C-Se-C	98.035	0.561	-0.048	0.393	-0.764	-1.396	
C12P2H28Se4O4	KONQIN	Se-P	2.074	-0.070	-0.020	-0.010	-0.034	-0.001	a
		Se-P	2.222	-0.164	0.024	0.020	0.065	0.116	
		Se-P-Se	103.998	-0.243	-4.468	-7.912	-0.289	12.424	
		Se-Se	2.396	-0.006	0.000	-0.023	0.103	0.925	
		Se-Se-P	98.318	6.303	3.029	6.303	6.303	-43.034	
		Se-Se-P-Se	179.270	-0.233	-0.686	-0.744	1.125	2.238	
C16H14SeBr2	KUGYIU	Se-C	1.943	-0.005	-0.011	-0.011	-0.010	0.004	a
		C-C-Se	119.967	-2.424	-0.575	-1.677	0.618	4.196	
		C-Se	1.911	-0.003	-0.011	-0.005	0.010	0.012	
		C-Se-C	97.626	1.359	1.013	1.163	0.573	-0.546	
		C-Se-C-C	97.545	0.055	0.598	-0.525	0.571	2.121	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6PH13SeO3	KUTHOX	Se-P	2.209	-0.017	0.013	0.041	0.034	-0.003	a
		O-P-Se	106.853	-0.473	-0.025	-0.419	-0.336	3.223	
		O-P-Se	105.173	-0.462	-0.047	-0.540	-0.307	-0.254	
		O-P-Se	114.122	0.511	0.004	0.488	0.417	6.348	
		C-Se	1.962	0.012	0.004	0.010	0.019	0.012	
		C-Se-P	93.097	0.838	0.568	2.653	1.363	8.167	
		C-Se-P	174.220	0.624	0.733	2.653	3.415	33.227	
C24NH27SeO3	KUTLUG	Se-C	1.971	0.013	-0.001	-0.003	0.003	0.022	a
		Se-C-C	105.299	0.039	0.014	-0.041	-0.016	-3.163	
		O-C-C-Se	352.610	0.152	0.053	0.214	0.211	8.794	
		C-Se	1.911	-0.004	-0.004	-0.006	0.000	0.014	
		C-Se-C	97.741	-0.643	-0.269	0.278	-0.240	-1.965	
C40H26Se2	LACRAI	Se-Se	2.381	0.000	0.002	0.002	0.011	0.095	a
		C-Se	1.973	-0.008	-0.008	-0.019	-0.002	-0.003	
		Se-Se-C	100.608	-0.898	-0.334	-0.477	-0.110	-2.179	
		C-C-Se	107.180	0.019	0.005	-0.100	0.000	0.946	
		C-C-Se-Se	180.765	0.222	0.037	0.030	0.020	-1.187	
C23N4H20SeClO2	LAFWAQ	Se-C	1.974	-0.001	-0.005	-0.007	-0.010	0.009	a
		C-C-Se	116.492	-0.064	-0.078	-0.084	-0.560	3.869	
		O-C-C-Se	142.137	0.008	0.047	0.018	0.551	-6.533	
		C-C-Se	115.260	-0.042	-0.066	-0.057	-0.559	-5.602	
C15PNH18Se	LAGJAF	P-Se	2.116	-0.048	-0.058	-0.011	-0.024	-0.029	a
		N-P-Se	117.639	-0.355	-4.769	-0.323	-0.656	1.960	
		C-P-Se	111.940	-0.053	-5.730	-0.760	0.732	4.261	
		C-P-Se	113.771	-0.220	-5.730	-0.802	0.488	3.205	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6		Ref.
C14H10SeCl4	LAQRAY	C-Se	1.966	0.007	-0.001	-0.002	0.004	0.008	a
		C-Se	1.970	0.004	-0.002	-0.004	0.001	0.004	
		C-Se-C	99.159	-0.471	0.997	1.908	0.115	1.431	
		C-C-Se	110.354	-2.351	-1.014	-1.908	-0.559	-2.675	
		C-C-Se-C	212.941	0.122	0.090	-0.016	0.084	23.936	
		C-C-Se	113.652	-0.920	-0.337	-0.738	-0.272	-2.430	
		C-C-Se-C	295.830	-0.174	-1.939	-0.162	-0.566	0.395	
C16N3H13SeS	LATWUY	Se-S	2.200	0.004	0.004	0.014	0.014	0.535	a
		C-S-Se	97.387	0.035	0.005	-0.725	0.566	-11.110	
		N-C-S-Se	358.910	0.004	0.004	0.006	0.553	-34.989	
C2H6SeO	LAWBIV	Se-O	1.676	-0.043	0.031	0.014	-0.013	-0.014	a
		C-Se	1.933	0.038	0.012	0.035	0.043	0.049	
		C-Se-O	102.759	-1.242	-3.356	0.379	-1.990	-2.812	
		C-Se	1.930	0.040	0.013	0.036	0.045	0.052	
		C-Se-O	103.111	-1.397	-5.196	0.173	-2.186	-3.191	
C19PNH16SeS	LAYDIY	Se-P	2.110	-0.021	-0.018	0.001	-0.018	-0.029	a
		C-P-Se	110.543	0.099	-1.329	-0.247	0.738	3.870	
		S-C-P-Se	192.261	-0.019	-1.189	-0.411	0.649	23.369	
		C-P-Se	114.336	0.049	-2.559	-1.238	0.740	3.658	
C7H6SeO2	LAYFAT	Se-O	1.793	0.005	0.011	0.001	0.001	0.019	a
		Se-O	1.631	-0.008	0.011	0.007	0.002	0.002	
		O-Se-O	105.090	-0.768	-0.777	0.003	-0.149	-2.102	
		C-Se	1.938	0.002	0.010	0.001	0.001	0.033	
		C-Se-O	86.557	0.050	0.558	0.038	0.038	0.215	
		C-C-Se	126.966	0.035	1.612	0.011	-0.002	2.469	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14H12SeO2	LAYFEX	Se-O	1.921	0.001	0.001	-0.023	-0.004	-0.057	a
		C-Se	1.923	0.001	0.000	0.002	0.004	0.046	
		C-Se-O	83.711	0.014	0.015	0.025	0.117	0.763	
		Se-O	1.921	0.001	0.000	-0.023	-0.004	-0.057	
		O-Se-O	174.391	0.004	0.014	0.029	0.100	-3.153	
		C-O-Se	114.426	0.020	0.009	0.015	0.078	4.326	
C8Se2O4	LEDGAD	Se-C	1.878	-0.001	-0.010	-0.004	-0.004	-0.011	a
		C-C-Se	133.392	-0.023	-0.518	-0.239	-0.192	0.218	
		Se-C	1.878	-0.008	-0.025	-0.100	-0.050	-0.011	
		C-C-Se	133.394	-0.024	-0.525	-0.239	-0.127	0.199	
		Se-C-C-Se	359.683	0.020	0.489	1.456	0.033	0.324	
C11NH11SeO	LEMDAI	Se-C	1.833	-0.001	-0.012	-0.012	-0.010	0.047	a
		C-C-Se	117.769	-0.017	-0.662	-0.665	-0.977	-13.628	
		O-C-C-Se	317.569	-0.015	-0.567	-0.562	-0.588	42.416	
		N-C-Se	124.706	-0.021	-0.652	-0.652	0.839	5.414	
C16H22SeO2	LICRIY	Se-O	1.676	-0.008	0.006	0.008	-0.001	0.005	a
		C-Se	1.956	0.013	0.001	0.008	0.049	0.052	
		C-Se-O	102.787	-2.240	0.065	-0.120	-1.883	-5.325	
		C-C-Se	113.151	-1.980	0.041	-0.522	-0.190	-0.993	
		C-C-Se-O	78.282	-0.954	0.049	-0.142	-1.633	6.623	
C12H12SeS	LIMQON	Se-C	1.884	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.016	a
		C-C-Se	119.037	-0.033	-0.108	-0.017	0.021	0.356	
		C-Se	1.973	0.001	0.001	0.000	0.000	0.008	
		C-Se-C	95.817	-0.031	-0.109	-0.012	-0.157	-0.139	
		C-Se-C-C	320.081	0.023	0.061	0.004	-0.031	3.257	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8H8Se2S3	LITPUZ	Se-C	1.865	0.005	-0.011	-0.087	0.010	0.082	a
		Se-C	1.865	0.034	-0.031	-0.048	0.036	0.081	
		Se-C-Se	114.781	0.252	3.909	0.045	0.361	-3.010	
		C-Se	1.897	0.007	-0.009	-0.009	0.008	0.026	
		C-Se-C	93.713	0.225	-0.432	0.033	0.438	0.884	
		C-Se-C-Se	359.056	0.230	0.469	0.448	-0.370	0.934	
C18N2H24Se	LIWZAS	Se-C	1.942	-0.007	-0.003	-0.009	-0.035	-0.009	a
		C-C-Se	119.309	0.062	0.003	0.054	0.089	0.177	
		C-Se	1.937	-0.006	-0.002	-0.009	-0.032	-0.005	
		C-Se-C	96.625	-0.241	0.081	0.564	0.168	1.224	
		C-Se-C-C	50.057	-0.075	-0.006	-0.073	-0.077	-6.640	
C14H12Se2	LIXGEE	Se-C	1.895	-0.001	-0.005	-0.012	0.003	0.015	a
		Se-C	1.876	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.033	
		Se-C-Se	117.012	0.019	-0.002	-0.016	0.011	1.277	
		Se-C	1.901	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.021	
		C-Se-C	102.596	0.003	-0.007	-0.017	0.005	-2.084	
		C-Se-C-Se	313.321	-0.012	0.005	0.019	-0.007	0.805	
C26H16Se2	LIZXUN	Se-C	1.894	-0.001	-0.003	-0.001	0.001	0.027	a
		Se-C	1.936	-0.001	-0.002	-0.001	-0.001	-0.015	
		C-Se-C	94.041	-0.044	-0.074	-0.018	-0.023	0.870	
		C-C-Se	121.093	-0.052	-0.130	-0.032	-0.045	-1.334	
		C-C-Se-C	325.386	0.061	0.031	0.025	0.009	2.156	
C14H10Se	LIZYIC	Se-C	1.896	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.020	a
		C-C-Se	122.120	-0.027	-0.021	-0.011	-0.032	-1.234	
		C-Se	1.896	0.000	0.000	0.000	0.007	0.020	
		C-Se-C	96.339	-0.021	-0.014	-0.006	-0.002	-0.442	
		C-Se-C-C	332.530	-0.071	-0.070	-0.073	-0.058	-1.219	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C5PNH12SeO2	LUDQIL	Se-P	2.095	-0.024	-0.003	0.010	-0.025	-0.065	a
		O-P-Se	114.064	-0.488	-0.011	-0.523	-0.417	3.931	
		O-P-Se	113.785	-0.491	-0.013	-0.524	-0.418	3.844	
		N-P-Se	114.203	0.756	-0.296	0.790	2.292	7.250	
C20H22Se	LUPBII	Se-C	1.909	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.008	a
		Se-C	1.912	0.000	0.000	-0.002	0.003	0.010	
		C-Se-C	96.105	-0.021	-0.019	-0.051	-0.014	-0.570	
		C-C-Se	118.454	0.018	0.019	0.052	0.020	-1.399	
		C-C-Se-C	211.788	0.053	0.057	0.332	0.042	-1.567	
		C-C-Se	118.483	-0.020	-0.018	-0.064	-0.003	1.905	
		C-C-Se-C	326.275	0.019	0.019	0.053	0.021	4.474	
C10PN5H22Se	LUPHOU	Se-P	2.102	-0.047	-0.014	0.013	0.009	-0.014	a
		N-P-Se	112.719	-0.512	-1.615	-0.856	1.287	-0.443	
		N-P-Se	115.404	-0.614	-1.657	-0.844	-0.434	-1.094	
		C-P-Se	111.443	-0.777	-3.074	-0.790	-0.695	2.467	
C32N2H28Se2O4	LUSRAS	Se-Se	2.333	0.007	0.010	0.013	0.013	0.126	a
		Se-C	1.946	-0.004	-0.007	-0.010	-0.011	-0.036	
		Se-Se-C	103.915	-0.515	-0.569	-0.768	0.604	-2.667	
		C-C-Se	121.481	0.026	0.015	0.013	0.537	-5.860	
		C-C-Se-Se	11.161	0.076	0.063	0.105	0.546	123.226	
C16NH15SeSO	MADPOX	Se-S	2.249	0.000	0.001	-0.003	0.004	0.870	a
		C-S-Se	105.045	-0.339	-0.077	-0.136	0.451	-9.107	
		C-C-S-Se	40.338	-0.007	-0.006	-0.011	0.032	-87.229	
		C-Se	1.937	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.020	
		C-Se-S	100.396	-0.020	-0.016	-0.017	-0.018	-3.297	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9NH11Se	MAKDEH	Se-C	1.830	-0.003	-0.006	-0.019	-0.008	0.024	a
		N-C-Se	124.153	-0.215	-0.368	-0.863	0.823	0.490	
		C-C-Se	117.890	-0.220	-0.409	-0.881	-1.129	-2.467	
C16H14Se2O4	MAWTOT	Se-Se	2.313	0.019	0.021	0.006	0.060	0.140	a
		C-Se	1.969	0.006	-0.008	-0.002	-0.033	-0.013	
		C-Se-Se	98.524	0.596	1.449	0.223	2.377	0.600	
		O-C-Se	119.622	-0.062	-0.280	-0.095	0.876	2.925	
		O-C-Se-Se	1.110	-0.076	-0.035	-0.052	-0.509	-2.279	
C8NH13Se	MAXBET	Se-C	1.804	0.007	-0.013	-0.012	0.011	0.029	a
		N-C-Se	127.691	-2.451	-0.714	-0.971	0.642	-1.682	
		C-N-C-Se	359.358	1.143	0.643	0.970	1.534	0.180	
		C-N-C-Se	180.176	-1.066	-0.637	-0.973	-1.480	0.132	
C18PNH30Se	MAXREJ	Se-P	2.112	-0.018	-0.010	0.000	-0.022	-0.030	a
		N-P-Se	112.737	0.679	-0.575	0.106	1.007	2.077	
		C-P-Se	112.702	-0.557	-0.585	-0.178	1.682	3.589	
		C-P-Se	111.646	1.043	-0.585	-0.069	1.033	3.958	
C8N2H18Se3Cl2	MEKKAO	Se-N	1.803	-0.026	-0.026	-0.011	0.007	0.051	a
		Se-N	1.948	-0.059	-0.038	-0.012	-0.099	-0.043	
		N-Se-N	96.525	-1.956	-2.168	-1.528	0.293	3.278	
		Se-N	1.758	-0.016	-0.017	0.011	0.024	0.028	
		Se-N-Se	118.074	-1.396	-2.168	-1.340	1.129	5.215	
		Se-N-Se-N	40.786	0.884	0.456	-0.667	0.242	22.507	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9H18Se3	MELRUQ	Se-C	1.958	0.004	0.000	0.000	0.004	0.010	a
		C-C-Se	113.916	0.100	0.011	0.016	0.145	-1.739	
		C-Se	1.956	0.004	-0.007	-0.009	0.009	0.011	
		C-Se-C	97.459	0.104	0.012	0.015	0.155	1.992	
		C-Se-C-C	298.660	-0.114	-0.027	-0.027	-0.142	1.620	
		C-C-Se	114.492	0.089	0.018	0.015	0.137	-2.620	
		C-C-Se-C	98.610	-0.101	-0.033	-0.031	-0.138	-1.322	
		C-C-C-Se	175.258	-0.099	-0.039	-0.035	-0.101	-0.215	
C3PH9Se	MEPNSE	P-Se	2.111	-0.110	-0.019	-0.004	-0.072	-0.019	a
		C-P-Se	112.851	2.379	-0.569	2.500	3.708	2.343	
		C-P-Se	113.299	2.097	-0.646	1.852	-0.067	1.892	
		C-P-Se	112.841	1.979	-0.588	1.880	1.953	2.352	
C10H12Se4	MESEFV	Se-C	1.879	0.005	-0.003	-0.012	0.009	0.067	a
		Se-C	1.884	0.015	-0.100	-0.023	0.041	0.062	
		Se-C-Se	113.572	0.257	-0.003	-0.462	0.289	-1.467	
		Se-C-C	123.517	-0.728	-0.259	-0.650	-0.053	0.438	
		Se-C	1.876	0.005	-0.002	-0.010	0.009	0.069	
		Se-C-C	121.805	-0.166	0.032	0.471	-0.218	2.112	
C17H13SeCl	MIBWID	Se-C	1.926	-0.002	-0.028	-0.004	-0.016	0.001	a
		C-Se-C	1.938	-0.002	-0.017	-0.004	-0.018	-0.001	
		Se-C-C	1.429	0.000	-0.001	0.000	-0.002	-0.008	
		C-Se-C-C	123.466	-0.014	-0.053	-0.014	-0.133	-0.113	
		C-C-C-Se	127.271	-0.022	-0.066	-0.021	-0.154	-0.309	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16H10SeCl2	MIBWOJ	Se-C	1.929	-0.015	-0.012	-0.042	-0.011	-0.007	a
		Se-C	1.936	-0.016	-0.013	-0.036	-0.017	-0.003	
		C-Se-C	98.837	5.140	0.255	1.576	5.730	0.202	
		Se-C-C	122.992	-0.091	-0.040	-0.127	-0.126	4.690	
		Se-C-C-C	159.847	0.075	0.035	0.093	0.114	-109.651	
C16NH10SeBrO2	MIBXAW	Se-C	1.933	-0.001	-0.011	-0.007	-0.003	-0.000	a
		Se-C-C	122.750	-0.009	-0.036	-0.028	-0.027	4.870	
		Se-C-C-Br	354.116	0.110	0.258	0.241	0.042	-10.236	
		C-Se	1.931	-0.001	-0.009	-0.006	-0.002	-0.009	
C22H28SeO6	MIHKOD	Se-C	1.911	0.002	-0.013	-0.009	0.003	0.015	a
		C-C-Se	119.670	-0.139	-0.395	-0.151	-0.113	0.907	
		C-C-Se	120.669	-0.135	-0.393	-0.145	-0.115	-2.295	
		C-Se	1.976	0.004	-0.015	-0.010	0.001	0.011	
		C-Se-C	99.347	0.189	-0.312	1.935	-1.720	-1.716	
C11N2H20SeO	MIJFUG	Se-C	1.965	0.032	-0.008	-0.005	0.053	0.027	a
		Se-C	1.908	0.009	0.009	0.006	0.013	0.080	
		C-Se-C	88.877	0.500	0.483	0.415	0.390	-0.884	
		N-C-Se	109.971	0.491	0.438	0.270	0.385	-0.117	
		N-C-Se-C	355.957	-0.484	-0.447	-0.190	-0.215	2.930	
C10H12Se4	MIJGIV	Se-C	1.970	0.000	-0.002	-0.009	0.003	0.006	a
		Se-C	1.836	-0.003	-0.052	-0.021	-0.010	-0.042	
		C-Se-C	97.915	-0.268	-0.060	-0.527	0.049	0.075	
		Se-C-C	175.767	0.030	1.084	0.539	0.080	2.847	
		C-Se-C-C	150.133	0.010	-0.029	-0.532	0.062	23.746	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14H20Se4	MIJGOB01	Se-C	1.976	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	a
		Se-C	1.831	0.000	0.000	0.000	-0.007	-0.037	
		C-Se-C	98.483	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.792	
		Se-C-C	175.518	-0.006	0.000	0.000	-0.003	3.633	
		C-Se-C-C	213.581	0.001	0.000	0.000	-0.002	-1.409	
		Se-C	1.833	0.000	0.000	0.000	-0.007	-0.040	
C12PN3H24SeO3	MORPSE	Se-P	2.103	-0.095	-0.015	0.018	0.010	-0.025	a
		Se-P-N	112.050	-0.120	-0.598	-0.203	3.787	1.755	
		Se-P-N	115.070	-0.168	-0.602	-0.197	-0.408	5.791	
		Se-P-N	111.317	-0.106	-0.519	-0.152	-0.379	2.491	
C8N2H16Se3O2	MORTSR10	Se-Se	2.352	0.004	0.002	-0.011	0.039	0.088	a
		Se-Se	2.352	0.004	0.003	-0.011	0.039	0.089	
		Se-Se-Se	101.700	-0.719	0.213	-0.592	2.833	4.210	
		N-Se	1.842	-0.004	-0.016	-0.010	0.021	0.002	
		N-Se-Se	105.214	0.104	-0.887	-0.710	2.829	3.096	
		N-Se-Se-Se	97.123	-0.730	-1.084	-0.610	-0.166	-21.784	
C14H8Se2O4	MOSEAN	Se-C	1.913	-0.001	-0.006	-0.001	0.000	0.005	a
		C-C-Se	121.443	-0.018	-0.127	-0.043	0.709	3.950	
		Se-C	1.923	-0.001	-0.050	-0.013	0.001	-0.005	
		C-C-Se	119.955	-0.003	-0.094	-0.051	1.120	5.382	
		Se-C-C-Se	3.035	-0.010	-0.148	-0.043	-0.013	-3.176	
		Se-C	1.930	-0.001	-0.010	-0.002	-0.002	-0.012	
C20PN2H24Se	MOSROB	Se-P	2.103	-0.100	-0.023	0.012	-0.023	-0.013	a
		Se-P-C	111.770	-1.875	-7.276	-3.285	1.392	4.382	
		Se-P-C	114.839	-1.710	-2.415	-1.526	0.585	0.392	
		Se-P-C	112.920	0.621	1.830	0.917	-0.673	0.225	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8N2H18Se2O2	MOTGEH	Se-O	1.621	-0.013	0.057	0.021	0.011	0.011	a
		Se-N	1.881	0.008	-0.010	-0.008	0.009	0.048	
		N-Se-O	104.382	1.262	0.134	0.483	-0.533	3.496	
		N-Se	1.888	-0.008	-0.029	-0.053	0.015	0.041	
		N-Se-O	104.940	2.387	0.595	0.464	-0.321	2.733	
		Se-N	1.881	0.009	-0.023	-0.010	0.014	0.049	
		Se-N-Se	98.264	0.444	-0.447	-0.414	0.274	0.323	
		Se-N-Se-O	239.049	1.741	0.913	0.451	4.846	5.820	
C20NH23SeO	MOYLAN	Se-C	1.834	-0.004	-0.014	-0.006	-0.003	0.020	a
		Se-C-N	124.872	-0.213	-0.738	-0.284	0.853	1.116	
		Se-C-N-C	356.055	0.013	0.018	0.012	0.053	4.112	
		C-C-Se	119.244	-0.195	-0.701	-0.228	-0.021	-1.533	
C3H9Se	MOYQUM	Se-C	1.932	0.066	0.032	0.027	0.044	0.059	a
		Se-C	1.929	0.062	0.035	0.031	0.045	0.062	
		C-Se-C	97.484	6.303	6.303	6.303	6.303	14.832	
		Se-C	1.931	0.059	0.030	0.029	0.043	0.060	
		C-Se-C	96.702	6.303	6.303	6.303	6.303	15.573	
C3H9Se	MOYREX	Se-C	1.933	0.019	-0.019	0.035	0.030	0.007	a
		C-Se	1.939	0.016	-0.024	0.032	0.025	-0.000	
		C-Se-C	96.124	1.053	-0.118	3.340	0.981	2.703	
		C-Se	1.933	0.019	-0.026	0.034	0.030	0.006	
		C-Se-C	98.561	0.182	-1.459	2.189	-0.461	0.340	
		C-Se-C-C	259.691	0.283	1.751	-0.990	1.153	-0.083	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C21N2H24SeO3	MOZKOB	Se-C	1.922	-0.001	-0.004	-0.006	-0.004	-0.003	a
		C-C-Se	120.911	0.002	0.020	0.033	-0.008	-1.166	
		C-Se	2.042	-0.002	-0.005	-0.022	-0.002	-0.015	
		C-Se-C	104.559	0.279	0.196	2.037	0.013	0.003	
		C-Se-C-C	283.693	-0.069	-0.053	-0.169	-0.058	-4.577	
C21N2H26SeO3	MOZLES	Se-C	1.927	-0.002	-0.020	-0.011	-0.009	0.004	a
		C-C-Se	121.231	0.051	0.063	0.529	0.120	-3.563	
		C-Se	1.976	0.004	-0.004	-0.011	0.004	0.027	
		C-Se-C	96.941	0.287	-0.177	0.701	0.088	1.486	
		C-Se-C-C	57.488	0.420	-0.026	0.575	0.366	66.517	
C12H12Se4	MSEFCQ10	Se-C	1.876	-0.001	-0.010	-0.008	0.002	0.045	a
		Se-C-Se	115.618	0.140	-0.550	-0.063	0.050	-0.345	
		C-C-Se	122.193	0.000	-0.539	-0.002	0.000	0.117	
		C-C-Se-Se	179.711	0.137	0.560	0.481	0.098	0.268	
C9H12SeO2	MSEHPD	Se-C	2.022	-0.005	-0.008	-0.010	-0.009	-0.000	a
		C-Se	1.977	-0.002	-0.007	-0.004	-0.009	0.018	
		C-Se-C	78.627	-0.219	-0.427	-0.155	-0.533	-1.046	
		C-C-Se	93.733	-0.193	-0.438	-0.233	-0.531	3.234	
		C-C-Se-C	60.481	-0.329	-0.443	-0.205	-0.531	-2.239	
C19H18SeO	MUFZOC	Se-C	1.871	-0.010	-0.001	-0.001	0.000	0.008	a
		C-C-Se	127.017	0.746	0.390	0.213	-0.015	1.628	
		O-C-C-Se	356.869	0.564	0.031	0.035	0.034	3.839	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10N2H13SeBrO4	MUJZIB	Se-C	1.898	0.010	1.904	0.007	0.011	0.084	a
		Se-C	1.881	0.006	1.884	0.007	0.006	0.019	
		C-Se-C	84.298	0.303	84.544	0.386	0.295	-2.078	
		C-C-Se	122.151	-1.399	121.429	-4.787	2.016	-1.215	
		C-C-Se-C	181.824	0.079	181.944	0.320	0.216	-2.535	
		C-C-Se	109.573	0.213	109.839	0.375	0.413	2.932	
		C-C-Se-C	0.710	0.136	0.868	0.341	0.215	0.271	
C23N4H18Se	MULHIK	Se-C	1.863	0.014	0.002	0.005	0.003	0.039	a
		Se-C-C	111.463	0.061	0.019	0.031	0.068	0.000	
		N-C-C-Se	0.000	-0.114	-0.093	-0.164	-0.197	-2.391	
C45P2H34Se2O2	MUMFUV	Se-P	2.072	-0.020	-0.018	0.006	-0.042	-0.015	a
		O-P-Se	117.261	-0.096	-1.550	-0.135	0.563	-2.007	
		C-P-Se	115.564	-1.243	-1.899	-0.201	0.091	4.932	
		C-P-Se-O	120.674	0.293	1.283	0.362	0.356	-17.745	
C22H19SeClO4	MUVRIF	Se-C	1.892	0.000	-0.008	-0.010	-0.001	0.025	a
		Se-C	1.928	-0.003	-0.017	-0.010	-0.013	0.017	
		C-Se-C	98.574	-0.267	0.911	0.696	0.169	-2.002	
		C-C-Se	124.265	-0.204	-0.950	-1.047	-0.399	-7.269	
		C-C-Se-C	185.381	0.253	0.241	0.571	0.124	-9.655	
		C-C-Se	116.862	-0.147	-0.137	0.557	-0.087	2.788	
		C-C-Se-C	4.647	-0.270	-0.217	-0.556	-0.171	-10.509	
C21N3H23Se	NADCAX	Se-C	1.943	0.001	0.000	0.000	0.002	0.061	a
		N-C-Se	110.307	-0.022	-0.570	0.014	0.121	1.121	
		N-C-Se	127.878	0.008	-0.339	0.024	0.046	1.088	
		N-C-Se-N	171.358	-0.003	0.011	-0.016	-0.026	2.573	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9NH7Se2O6	NAFNIR	Se-C	1.858	0.006	0.009	0.006	0.009	0.023	a
		C-Se	1.852	0.010	0.009	0.023	0.010	0.034	
		Se-C-Se	117.044	-0.325	-0.533	-0.388	-0.514	7.728	
		C-Se	1.887	0.018	-0.010	0.000	0.010	0.081	
		C-Se-C	92.300	0.427	-0.526	-0.022	0.584	-6.103	
		C-Se-C-Se	0.664	0.533	0.517	0.305	0.524	-0.856	
C9PN3H21SeF	NAGJUA	Se-P	2.098	-0.078	-0.018	0.025	-0.028	-0.041	a
		F-P-Se	109.721	-0.026	-3.031	-1.139	0.180	0.534	
		N-P-Se	118.475	-0.460	-6.303	-1.683	1.441	1.198	
		N-P-Se-F	236.417	-0.239	-0.266	6.303	3.660	1.309	
C10H8Se4O4	NAGYOK	Se-C	1.904	0.004	-0.005	-0.014	0.007	0.059	a
		C-C-Se	121.348	0.475	3.373	0.610	0.474	1.496	
		Se-C	1.899	0.003	-0.003	-0.028	0.005	0.064	
		Se-C-C	123.006	-0.178	0.039	-0.370	-0.080	-0.189	
		Se-C-C-Se	3.720	1.157	0.191	0.884	1.349	-4.566	
C15NH16Se	NAHJUC	Se-C	1.857	0.019	0.020	0.012	0.018	0.085	a
		N-C-Se	119.249	-0.680	-0.941	-1.034	0.805	-0.452	
		C-Se	1.923	0.014	0.011	0.013	0.014	0.045	
		C-Se-C	101.993	0.623	0.560	1.088	0.622	-1.253	
		C-Se-C-N	179.010	-0.605	-1.199	-0.847	-0.939	82.236	
C34P2N2H28Se2	NAKKEP	Se-P	2.112	-0.015	-0.007	0.000	-0.016	-0.031	a
		N-P-Se	114.272	0.035	-1.012	-0.543	0.251	-2.258	
		C-P-Se	110.664	0.235	0.217	0.171	0.208	6.091	
		C-P-Se-N	236.046	-0.196	-0.396	-0.127	-0.015	1.716	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19NH16SeO3F3	NAKZII	Se-C	1.789	-0.001	-0.011	-0.019	-0.001	-0.001	a
		N-C-Se	130.964	0.116	-0.065	-0.375	-0.045	6.025	
		C-N-C-Se	172.834	-0.496	-1.862	-0.471	-1.498	0.575	
C12H14Se4	NALSUO	Se-C	1.896	0.007	-0.044	-0.047	0.024	0.025	a
		C-Se	1.895	-0.040	-0.009	-0.010	0.004	0.026	
		Se-C-Se	113.141	0.427	-0.397	-0.477	0.201	1.978	
		C-Se	1.908	0.007	-0.009	-0.009	0.002	0.025	
		C-Se-C	94.611	0.391	-0.416	-0.424	0.082	-1.782	
		C-Se-C-Se	7.418	-1.057	-0.490	-0.491	-2.209	-6.331	
C28N4H26Se2	NAMNEU	Se-Se	2.380	0.000	0.000	-0.003	0.013	0.096	a
		C-Se	1.943	-0.013	-0.015	-0.018	-0.009	-0.028	
		C-Se-Se	100.801	1.255	0.295	-0.035	2.337	0.477	
		C-C-Se	118.618	-0.107	-0.040	-0.190	-0.086	-5.399	
		C-C-Se-Se	169.485	0.049	0.030	0.094	0.059	11.210	
C10N4H4Se2	NAPSEZ10	Se-N	1.809	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	a
		N-Se	1.820	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.012	
		N-Se-N	103.216	-0.001	-0.005	0.003	0.005	-3.282	
		C-N-Se	121.622	-0.001	-0.006	0.003	0.004	3.147	
		C-N-Se-N	357.786	0.001	0.000	0.000	-0.002	1.225	
		C-C-N-Se	180.316	-0.046	-0.026	0.002	-0.009	0.193	
		C-N-Se	120.873	-0.001	-0.005	0.003	0.007	3.880	
HSeO4	NASQIH	Se-O	1.688	0.095	0.110	0.110	0.090	0.139	a
		O-Se	1.613	0.002	0.075	0.049	0.038	0.044	
		O-Se-O	109.522	-6.303	-6.303	-5.575	-6.303	-12.238	
		O-Se	1.609	0.004	0.075	0.046	0.039	0.042	
		O-Se-O	107.086	-4.487	-4.730	-3.435	-3.711	-2.605	
		O-Se-O-O	119.426	-0.747	-0.749	-0.450	-0.692	-0.525	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H6Se2F4	NAXBOE	Se-Se	2.333	0.034	0.038	0.046	0.100	0.112	a
		C-Se	1.905	-0.008	-0.023	-0.042	-0.010	-0.003	
		C-Se-Se	100.466	-5.730	1.174	-1.748	-0.018	-3.721	
		C-C-Se	122.180	-0.217	-0.335	-0.299	-0.208	0.515	
		C-C-Se-Se	91.817	-0.048	-0.086	-0.049	-0.058	-13.622	
C24H21SeCl5	NAXBUK	Se-Cl	2.164	0.027	-0.010	0.002	0.037	0.091	a
		C-Se	1.921	-0.006	-0.003	-0.007	-0.010	-0.008	
		C-Se-Cl	98.789	-0.781	0.024	0.122	-0.882	-3.534	
		C-C-Se	119.940	-0.003	-0.008	-0.017	-0.038	1.380	
		C-C-Se-Cl	286.778	-0.027	-0.010	-0.026	-0.019	10.461	
C12N6H8Se4S4	NEBGUX	Se-Se	2.461	-0.042	-0.022	-0.015	0.054	0.073	a
		N-Se	1.816	-0.021	-0.100	-0.009	-0.035	-0.043	
		N-Se-Se	87.114	0.486	0.509	0.626	5.730	6.009	
		C-N-Se	124.985	-3.726	-13.955	-3.191	3.517	22.666	
		C-N-Se-Se	174.331	-0.068	-0.300	-0.607	-0.385	38.821	
C13H12SeO2	NEKZOS	Se-O	1.680	-0.002	0.009	0.001	-0.003	-0.013	a
		C-Se	1.945	0.000	-0.005	-0.001	0.003	0.026	
		C-Se-O	100.921	0.041	-0.366	0.234	-0.582	-2.522	
		C-C-Se	120.819	0.000	-0.004	-0.002	-0.015	-0.866	
		C-C-Se-O	159.414	0.001	0.097	0.028	0.112	21.056	
C13NH21SeO2	NIFHEP	Se-C	1.944	0.010	0.001	0.008	0.009	0.026	a
		N-Se	1.865	-0.009	-0.001	-0.008	-0.009	0.011	
		N-Se-C	87.052	2.417	0.686	3.425	1.319	2.970	
		C-N-Se	109.529	-0.530	-0.020	-0.470	-0.507	1.510	
		C-N-Se-C	323.208	1.181	0.678	-0.447	-0.501	10.255	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C11N2H8Se	NIFSIE	Se-C	1.827	0.005	-0.007	-0.009	0.010	0.035	a
		N-C-Se	128.665	-0.116	-0.218	-0.093	-0.552	-1.021	
		N-C-Se	127.463	-0.113	-0.205	-0.085	-0.555	0.101	
		N-C-Se-N	180.168	-0.010	0.001	-0.009	-0.694	-0.167	
C16H14Se3	NIMPOO	Se-C	1.960	0.000	-0.005	0.001	0.000	-0.010	a
		C-Se	1.933	0.000	0.000	0.001	0.000	0.016	
		C-Se-C	100.856	0.009	-0.003	0.085	0.001	-0.601	
		C-C-Se	113.090	0.012	-0.402	0.030	0.003	4.589	
		C-C-Se-C	53.027	-0.289	-0.007	-0.671	0.001	26.553	
H2SeO3	NIRSIQ	Se-O	1.622	-0.025	0.042	0.022	0.003	-0.000	a
		O-Se	1.750	0.032	0.074	0.037	0.022	0.011	
		O-Se-O	102.958	-6.303	-6.303	-2.762	-6.081	-5.643	
C16H16Se2S2	NIVLOT	Se-C	1.992	-0.010	-0.004	-0.004	0.003	0.062	a
		Se-C-Se	94.573	-0.571	-0.170	-0.230	0.098	0.175	
		C-Se	1.983	-0.010	-0.005	-0.006	0.006	0.071	
		C-Se-C	85.454	-0.571	-0.111	-0.093	0.089	-0.207	
		C-Se-C-Se	0.000	0.575	0.219	0.610	-0.345	-0.238	
C17PH19SeO2	NORLUC	P-Se	2.077	-0.091	-0.006	0.005	-0.048	-0.027	a
		O-P-Se	117.231	-0.274	-0.573	-0.193	-0.206	-3.653	
		C-P-Se	113.349	0.613	-1.247	-0.086	0.455	5.214	
		C-O-P-Se	122.777	-1.544	-0.682	1.667	-0.399	4.331	
C19PH14SeClO2	NORMAJ	Se-P	1.651	0.022	-0.046	0.024	0.019	0.002	a
		Se-P-O	114.938	0.413	-3.051	-0.349	-0.276	-0.662	
		C-P-Se	115.493	0.403	-4.940	-0.351	1.221	5.725	
		C-P-Se	114.324	0.332	-5.730	-1.080	0.671	4.671	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C20P2H28Se2S2	NOSVIA	Se-P	2.298	-0.010	-0.010	-0.010	0.053	-0.050	a
		Se-P-S	114.047	-0.573	0.580	1.079	6.303	9.584	
		Se-Se	2.275	0.010	0.011	0.014	0.110	0.162	
		Se-Se-P	99.313	0.573	0.607	0.767	5.788	-2.464	
		Se-Se-P-S	336.799	0.573	0.588	0.656	-5.203	-18.249	
C11H14Se2	NOWKIT	Se-C	1.951	0.016	0.000	0.000	0.001	0.016	a
		C-C-Se	114.591	-0.166	-0.797	-0.858	-0.005	-1.792	
		C-C-C-Se	69.285	-0.043	-0.010	-0.019	-0.115	-0.906	
C12H10Se	NOWLOA	Se-C	1.932	-0.011	-0.012	-0.012	-0.010	-0.010	a
		C-C-Se	119.109	-0.509	-0.535	-0.537	-0.510	-1.935	
		C-C-C-Se	183.134	-0.635	-0.694	-0.630	-0.660	-0.953	
C3H9Se	NOWMAN	Se-C	1.919	0.028	-0.004	0.042	0.037	0.021	a
		C-Se	1.933	0.019	-0.020	0.034	0.028	0.007	
		C-Se-C	102.307	-5.209	-3.861	0.185	-6.199	-3.501	
		C-Se	1.943	0.015	-0.047	0.031	0.023	-0.003	
		C-Se-C	96.133	1.209	-0.322	3.231	0.931	2.672	
		C-Se-C-C	261.883	-0.976	0.926	-4.281	-0.607	-2.294	
C20PN6H38Se	NOYREY	Se-P	2.295	-0.015	0.011	0.024	0.013	-0.076	a
		N-P-Se	112.253	-0.565	-1.166	-0.748	0.748	9.871	
		C-Se	1.933	-0.010	-0.009	-0.019	-0.011	0.020	
		C-Se-P	100.182	0.944	3.103	3.296	-1.215	-3.136	
		C-Se-P-N	215.214	0.558	0.865	0.636	0.580	47.376	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C18H16SeO	NUFMEH	Se-C	1.919	-0.003	-0.002	-0.006	-0.001	0.003	a
		C-C-Se	119.807	-0.016	-0.011	-0.020	-0.013	-0.424	
		C-C-C-Se	172.285	0.028	0.092	0.126	0.044	4.539	
		C-Se	1.928	-0.001	-0.002	-0.003	-0.001	0.006	
		C-Se-C	101.943	-0.132	-0.028	0.357	-0.090	-1.432	
		C-Se-C-C	85.896	0.048	-0.007	-0.009	-0.008	7.586	
C19H16Se3	NUNKAI	Se-C	1.958	-0.005	-0.004	-0.030	0.003	0.020	a
		Se-C-Se	107.364	-0.308	-0.148	-1.702	0.284	4.633	
		C-Se	1.928	-0.002	-0.001	-0.007	-0.012	-0.001	
		C-Se-C	101.367	-0.536	-0.097	-1.626	-0.295	-6.780	
		C-Se-C-Se	189.960	-0.378	-0.179	-2.537	0.375	16.727	
C15PNH28SeS	NURVAX	Se-P	2.112	-0.031	-0.014	-0.008	-0.052	-0.022	a
		C-P-Se	111.661	0.468	-1.179	-1.186	1.047	3.272	
		S-C-P-Se	177.941	0.709	0.541	0.701	2.953	2.096	
		N-C-P-Se	358.334	0.678	-0.515	0.669	1.071	1.700	
C14PN2H17Se	NUXSOP	Se-P	2.108	-0.013	-0.012	-0.001	-0.008	-0.049	a
		N-P-Se	112.372	-0.381	-1.353	-0.022	-0.033	4.473	
		C-P-Se	112.792	0.047	-0.654	-0.073	0.517	4.683	
		N-P-Se	113.546	-0.315	-1.315	-0.022	-0.036	1.668	
C26H38Se3	NUZWOU	Se-C	1.978	-0.010	-0.004	-0.014	0.011	0.026	a
		C-Se	1.990	-0.009	-0.001	-0.010	-0.006	0.022	
		Se-C-Se	105.644	-0.543	-0.068	-0.585	-0.340	1.871	
		C-C-Se	104.980	-0.538	-0.029	-0.563	0.411	-0.684	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C26H21SeSO2	OBEYID	Se-C	1.942	0.001	-0.012	0.002	0.010	0.032	a
		C-C-Se	128.934	-0.510	-0.642	-0.906	0.573	-3.313	
		C-Se	1.935	-0.007	-0.021	-0.006	0.009	0.014	
		C-Se-C	94.963	0.177	0.561	0.527	0.581	3.362	
		C-Se-C-C	196.427	-0.056	-0.534	0.282	-0.532	-17.090	
C23H18Se	OCUFEY	Se-C	1.916	-0.002	-0.002	-0.004	-0.014	0.010	a
		C-C-Se	119.275	0.012	0.010	0.026	-0.105	-2.451	
C17NH17SeSO	OGANOZ	Se-S	2.218	0.016	0.035	-0.001	0.059	0.914	a
		C-S-Se	104.572	-0.429	0.003	-0.351	4.521	-9.348	
		C-C-S-Se	219.044	0.016	0.071	0.003	0.079	-87.149	
C16H13SeIO	OGOYEP	Se-C	1.917	-0.001	-0.004	-0.007	-0.004	0.022	a
		C-C-Se	122.541	-0.010	-0.019	-0.027	-0.031	3.628	
		I-C-C-Se	359.705	0.550	0.386	1.019	-0.032	3.135	
		C-Se	1.911	0.000	-0.004	-0.004	-0.429	0.014	
		C-Se-C	97.287	1.203	1.269	2.273	0.016	0.036	
		C-Se-C-C	100.737	0.006	0.015	0.025	9.056	27.428	
C22NH16SeSBr	OHINUP	Se-C	1.902	-0.004	-0.009	-0.005	0.001	0.040	a
		S-C-Se	120.525	-0.031	-0.026	-0.042	-0.039	9.056	
		C-C-Se	129.166	-0.032	-0.040	-0.046	-0.072	-7.232	
C15NH15Se	OJEQUQ	Se-C	Se-C	-0.002	1.804	-0.036	0.005	0.031	a
		Se-C-N	Se-C-N	-2.680	128.161	-5.730	0.464	-0.780	
		C-N-C-Se	C-N-C-Se	-0.784	178.674	-0.544	-0.205	-0.498	
		C-N-C-Se	C-N-C-Se	0.556	357.158	-0.205	0.523	2.667	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C18H22SeO	OPAWAE	Se-O	1.650	-0.010	0.008	0.011	0.004	0.017	a
		C-Se	1.957	-0.010	-0.002	-0.010	-0.001	0.023	
		C-Se-O	105.158	-0.620	-0.843	-0.595	-0.466	-4.709	
		C-Se	1.975	-0.010	-0.002	-0.010	-0.010	0.008	
		C-Se-O	109.554	-0.643	-0.925	-0.586	-0.826	-6.714	
		C-C-Se	117.311	-0.567	-0.011	-0.567	-0.021	-0.857	
		C-C-Se-O	239.522	-0.566	-0.025	-0.567	-0.053	-10.228	
C18NH13SeO	OPUYII	Se-N	1.881	-0.006	-0.019	0.000	0.002	0.007	a
		C-Se	1.893	0.005	0.003	0.004	0.006	0.023	
		C-Se-N	85.398	0.206	0.176	0.238	0.264	1.842	
		C-N-Se	116.912	0.001	0.435	0.051	0.092	-2.360	
		C-N-Se-C	356.687	0.198	-0.001	0.528	0.055	10.621	
C16N2H14SeO	OQEWUD	Se-C	1.818	-0.008	-0.007	-0.009	-0.002	0.021	a
		N-C-Se	126.436	-0.027	-0.031	-0.038	-0.031	-0.716	
		C-C-Se	120.356	-0.025	-0.030	-0.037	-0.030	-2.992	
C10N2H7SeCl	ORAXOV	Se-C	1.903	0.010	-0.012	0.009	0.012	0.042	a
		Se-C	1.914	-0.014	-0.020	-0.016	0.007	0.008	
		C-Se-C	99.868	-0.653	-0.515	1.000	-0.888	0.630	
		N-C-Se	113.342	-0.571	-0.576	-0.568	-0.565	1.962	
		N-C-Se-C	194.266	-0.540	-0.519	-0.535	-0.465	-1.349	
		N-C-Se	124.221	-0.572	-0.580	-0.570	-0.572	-2.727	
		N-C-Se-C	13.373	0.538	0.510	0.530	0.443	-0.006	
C11PN2H19Se	OSEHUQ	Se-P	2.113	-0.014	-0.024	-0.010	-0.019	-0.033	a
		N-P-Se	105.517	0.561	-1.148	-0.588	0.607	4.279	
		C-P-Se	113.544	0.559	-3.206	-0.715	0.515	4.963	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C20N4H15SeCl	OZEKIO	Se-C	1.917	0.002	0.002	0.001	0.002	0.131	a
		N-Se	2.001	0.000	-0.008	-0.009	0.000	-0.000	
		N-Se-C	80.718	0.045	0.088	0.034	0.050	-1.579	
		N-C-Se	115.478	0.040	0.024	0.001	0.031	-1.970	
		N-C-Se-N	356.450	-0.046	-0.051	-0.018	-0.037	3.481	
		N-C-Se	120.209	0.054	0.039	0.024	0.038	-4.916	
		N-C-Se-N	176.769	0.112	0.088	0.344	0.065	3.215	
P4Se3	P4Se3	P1-Se	2.312	-0.022	-0.047	-0.031	0.010	0.068	f
		Se-P1-Se	99.700	-1.137	-2.126	-1.246	0.536	-1.526	
		P2-Se	2.309	0.011	-0.057	-0.037	0.020	-0.016	
		P2-Se-P1	99.500	-1.212	-2.293	-1.315	-0.752	-0.794	
C10PH15SeO	PADTOE	Se-P	2.104	-0.014	-0.018	0.010	-0.020	-0.039	a
		O-P-Se	115.924	0.033	-1.076	-0.594	-0.529	0.307	
		C-P-Se	112.250	0.113	-1.463	-0.531	0.696	6.393	
		C-P-Se-O	237.931	0.137	1.033	0.590	1.172	1.211	
C5H8Se2	PAGRIZ	Se-C	1.968	0.015	0.014	0.011	0.014	0.004	a
		C-Se	1.979	-0.007	-0.003	-0.008	0.002	-0.008	
		C-Se-C	72.464	-0.460	-0.141	-0.401	0.151	1.527	
		C-C-Se	91.809	1.285	-0.134	-0.428	0.200	0.597	
		C-C-Se-C	15.105	-0.451	-0.216	-0.425	0.056	-15.149	
C8N3H4Se2	PAHREV	Se-Se	2.317	0.017	0.003	-0.071	0.008	0.208	a
		N-Se	1.793	0.004	0.001	0.004	0.005	-0.017	
		N-Se-Se	90.722	0.302	0.103	0.266	0.196	-3.473	
		N-Se	1.809	-0.004	-0.002	-0.004	-0.005	-0.033	
		N-Se-Se	91.388	-0.074	-0.042	-0.158	0.021	-4.143	
		N-Se-Se-N	0.596	-1.006	-0.544	-1.082	-0.289	-0.543	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8N3H4Se2	PAHRUL	Se-Se	2.323	0.001	0.001	-0.003	0.001	0.204	a
		N-Se	1.768	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.012	
		N-Se-Se	93.285	0.013	0.019	-0.031	0.021	-5.903	
		N-Se	1.776	0.000	-0.001	0.002	0.001	0.004	
		N-Se-Se	88.126	0.023	0.039	0.414	0.042	-0.745	
		N-Se-Se-N	0.232	-0.058	-0.150	-0.067	-0.076	-0.294	
C10H12Se4	PAJPIZ	Se-C	1.892	-0.003	-0.110	-0.110	0.021	0.053	a
		Se-C	1.896	0.001	-0.007	-0.010	0.005	0.049	
		Se-C-Se	114.454	0.107	-0.158	-0.156	0.129	-2.343	
		C-Se	1.907	0.003	-0.006	-0.004	0.005	0.018	
		C-Se-C	93.540	0.119	-0.129	-0.077	0.170	0.785	
		Se-C-Se-C	358.438	0.759	0.260	-0.846	0.476	1.305	
C8N4Se2S2	PAMKIX	Se-Se	2.325	0.050	0.063	0.014	0.105	0.111	a
		Se-C	1.926	0.010	-0.027	-0.019	0.039	0.090	
		C-Se-Se	94.143	0.212	-13.214	-4.397	6.303	14.286	
		S-C-Se	122.400	-11.961	-6.303	-4.889	6.303	10.005	
		S-C-Se-Se	353.659	-0.185	0.638	0.663	-2.208	26.187	
C16H24Se2	PAPKUM01	Se-C	1.918	-0.007	-0.008	-0.010	-0.009	0.009	a
		C-Se	1.920	-0.006	-0.005	-0.008	0.002	0.008	
		C-Se-C	101.872	-0.598	-0.179	-0.253	-1.265	-3.411	
		C-C-Se	121.365	-0.153	-0.160	-0.205	-0.070	3.193	
		C-C-Se-C	320.603	0.029	0.065	0.012	0.017	2.159	
C18PH15Se	PAQKAT01	Se-P	2.168	-0.100	-0.100	-0.017	-0.029	-0.085	a
		C-P-Se	112.890	1.592	-0.353	0.148	1.542	3.215	
		C-C-P-Se	6.046	0.307	0.015	-0.021	0.205	32.075	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19N3H19SeO3	PAWLUW	Se-C	1.843	0.010	0.003	0.010	0.010	0.073	a
		C-C-Se	109.124	0.572	0.136	0.561	0.541	0.275	
		N-Se	1.879	0.010	0.001	0.010	0.009	0.033	
		N-Se-C	86.861	0.572	0.163	0.562	0.531	-2.388	
		N-Se-C-C	359.759	-0.571	-0.128	-0.555	-0.533	-0.164	
		N-N-Se	111.006	0.573	0.199	0.565	0.574	2.940	
		N-N-Se-C	0.408	-0.569	-0.098	-0.557	-0.492	-0.255	
C32N4H36Se2	PAZNUA	Se-C	1.926	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	a
		C-C-Se	120.616	0.011	0.010	0.009	0.023	0.507	
		C-Se	1.938	-0.001	-0.002	0.004	-0.001	-0.006	
		C-Se-C	98.034	0.003	0.005	0.004	-0.001	0.829	
		C-Se-C-C	325.661	0.000	0.000	0.000	0.000	15.656	
C18H8Se4	PEFGEM	Se-Se	2.343	0.006	0.004	0.002	0.014	0.102	a
		C-Se	1.911	-0.001	-0.002	0.000	-0.001	-0.006	
		C-Se-Se	91.607	-0.037	-0.053	-0.015	-0.023	-1.209	
		C-C-Se	117.005	-0.017	-0.015	-0.005	-0.023	1.408	
		C-C-Se-Se	359.097	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.887	
C8H6Se4O	PEHYIK	Se-C	1.926	-0.009	-0.025	-0.015	-0.010	-0.023	a
		C-C-Se	117.176	-0.505	-0.522	-0.572	0.519	3.047	
		Se-C	1.898	0.023	-0.009	-0.008	0.009	0.006	
		Se-C-C	121.697	-0.539	-0.530	-0.574	0.503	-1.600	
		Se-C-C-Se	0.305	0.551	0.550	0.681	1.384	-0.324	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10PNH16SeO2	PEWJAC	Se-P	2.208	-0.043	0.100	0.038	0.025	0.058	a
		O-P-Se	105.825	1.122	-2.718	-0.517	1.018	15.673	
		O-P-Se	106.549	-0.672	-3.842	-0.768	0.786	-40.902	
		O-P-Se-O	124.101	-0.808	-3.060	-0.560	0.828	-5.438	
C22H28SeO2	PHSEPN	Se-C	1.969	0.005	-0.014	-0.009	0.001	0.016	a
		C-C-Se	111.540	0.150	0.057	0.078	0.003	0.401	
		C-C-Se	108.050	0.277	-0.486	-0.642	0.137	4.588	
		C-C-Se-C	238.137	-0.139	-0.178	-0.089	-0.077	-5.594	
C9H2SeF9	PIKRUW	Se-C	1.907	-0.011	-0.046	-0.026	-0.015	-0.013	a
		C-C-Se	120.868	-0.473	-0.450	-0.461	-0.495	-0.179	
		C-C-C-Se	4.567	-0.635	-1.163	-0.744	-0.567	-4.965	
C10H8Se2S6O	PILFEV	Se-C	1.885	0.010	-0.004	-0.002	0.001	0.064	a
		C-Se	1.898	0.009	-0.005	-0.001	0.001	0.087	
		C-Se-C	92.101	-0.030	-0.163	-0.045	0.019	3.535	
		Se-C	1.892	0.002	-0.008	-0.013	0.002	0.058	
		Se-C-Se	114.401	-0.124	-0.163	-0.085	0.004	-5.575	
		Se-C-Se-C	342.019	0.500	0.322	0.108	0.015	-2.513	
C13N2H16SeO4	PILKOK	Se-C	1.843	0.006	-0.020	-0.011	0.000	0.030	a
		O-C-Se	152.172	-0.070	-0.099	-0.020	-0.039	-1.099	
		N-C-Se	124.341	-0.117	-0.176	-0.066	-0.067	-1.549	
		N-C-Se-O	135.238	0.072	0.097	0.029	0.039	-3.939	
C20H14Se2	PINTEL	Se-Se	2.342	0.002	0.004	0.003	0.018	0.107	a
		C-Se	1.919	-0.001	-0.002	-0.002	-0.032	-0.004	
		C-Se-Se	100.319	-0.135	0.007	0.133	-0.657	-2.657	
		C-C-Se	117.961	0.010	0.014	0.014	-0.066	0.444	
		C-C-Se-Se	96.921	0.041	0.076	0.235	-0.162	-12.308	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C24P2H20Se2O	PINTIP01	Se-P	2.068	-0.021	-0.004	0.006	-0.017	0.040	a
		O-P-Se	116.847	-0.963	-0.676	-0.204	0.950	-54.356	
		C-P-Se	115.356	-0.369	-0.670	-0.181	0.601	8.621	
		C-P-Se-O	238.763	-0.458	-0.137	-0.377	0.526	22.380	
C15PN3H30Se	PIPPSE	Se-P	2.109	-0.100	-0.013	0.009	0.009	-0.021	a
		N-P-Se	111.377	-0.109	-0.199	-0.253	0.789	2.162	
		N-P-Se	115.467	-0.188	-0.193	-0.286	-0.108	4.825	
		N-P-Se-N	239.847	0.151	0.083	0.177	0.101	5.367	
C15PNH16SeS	PIQQUB	Se-P	2.084	-0.025	-0.011	0.013	-0.010	-0.001	a
		S-P-Se	139.251	-0.522	-0.937	-0.837	0.821	1.411	
		C-S-P-Se	358.301	0.532	0.649	0.585	-0.542	13.994	
C12H23SeO	PIVFOP	Se-C	1.978	0.039	-0.040	0.018	0.011	0.042	a
		C-Se	1.965	0.058	-0.007	0.046	0.011	0.051	
		C-Se-C	103.539	-1.097	-2.006	-0.373	-0.733	-3.414	
		C-C-Se	113.230	0.164	-1.284	0.043	-0.533	-1.618	
		C-C-Se-C	63.122	-0.139	-1.018	-0.367	-0.575	-7.021	
C17N3H19SeO	PIYFEI	Se-C	2.008	0.005	0.000	-0.012	0.005	0.031	a
		C-C-Se	108.685	0.019	-0.049	-4.320	0.018	-2.015	
		C-Se	1.897	0.002	-0.002	-0.011	0.005	0.020	
		C-Se-C	94.087	0.564	0.900	1.189	0.376	3.900	
		C-Se-C-C	184.640	0.227	0.316	0.580	0.018	-21.036	
C20P2H30Se	PODGEU	Se-P	2.268	-0.055	-0.024	0.022	0.020	0.085	a
		P-P-Se	60.918	-4.161	-1.028	0.717	0.667	1.543	
		C-P-Se	105.695	0.958	1.560	6.303	1.797	5.685	
		C-P-Se-P	262.073	-0.926	-2.272	-3.985	-1.725	-3.532	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C24N2H26SeO	POKNOS	Se-C	1.983	0.003	0.000	-0.001	0.002	0.010	a
		C-C-Se	111.526	0.006	0.002	0.000	-0.002	0.611	
		O-C-Se	116.011	0.007	0.003	0.001	-0.003	-5.980	
		O-C-Se-C	236.882	0.010	0.007	0.003	0.000	5.275	
C29NH35SeO3	POKWER	Se-C	1.868	0.024	0.027	0.017	0.022	0.053	a
		C-Se	1.970	0.016	0.015	0.014	0.014	0.037	
		C-Se-C	90.799	1.160	1.514	1.512	0.934	5.439	
		C-C-Se	100.331	0.622	0.720	0.590	0.765	7.200	
		C-C-Se-C	210.600	0.585	0.663	0.624	0.555	-10.296	
C12H16Se2	POVHAJ	Se-C	1.949	0.023	-0.002	-0.013	0.028	0.029	a
		Se-C	1.966	-0.005	-0.003	-0.011	0.004	0.012	
		Se-C-Se	112.678	0.021	-0.062	-0.615	0.248	5.395	
C9NH11SeO	POWNAQ	Se-C	1.776	0.003	0.000	-0.001	0.004	0.065	a
		C-C-Se	121.358	-0.201	-0.332	-0.506	-0.037	-3.164	
		N-C-Se	125.089	-0.211	-0.457	-0.554	0.305	2.027	
		N-C-Se-C	180.423	-0.203	-0.219	-0.897	-0.032	-0.097	
SeSO3	POWQAT	Se-S	2.175	0.102	0.110	0.083	0.081	0.905	a
		O-S-Se	108.553	0.281	-1.179	0.692	0.272	-4.921	
		O-S-Se	108.378	0.188	-0.963	0.704	0.178	-4.792	
		O-S-Se-O	238.302	1.424	1.206	1.224	1.150	1.711	
C17H24SeO3	POXGEO	Se-O	1.682	-0.012	0.002	0.010	-0.002	-0.013	a
		C-Se	1.952	0.012	0.001	0.010	0.005	0.062	
		C-Se-O	104.388	-0.663	-0.243	-0.586	-0.413	-5.717	
		C-Se	1.908	0.011	0.000	0.010	0.003	0.053	
		C-Se-O	103.353	-0.607	-0.205	0.575	-0.406	-4.541	
		C-Se-O-C	98.546	0.587	-0.024	0.595	0.095	-1.214	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9NH6SeO2	PSELAZ	Se-C	1.909	0.039	0.100	0.004	0.029	0.646	a
		O-C-Se	125.011	-1.965	-2.758	0.807	-1.567	-17.408	
		C-C-Se	80.924	-2.235	-0.412	-0.114	-0.601	-8.505	
		C-C-Se-O	178.165	0.579	0.515	0.703	-0.806	1.833	
C26P2H24Se2	PSETXY	Se-P	2.094	-0.021	-0.015	0.002	-0.016	-0.006	a
		C-P-Se	113.284	0.020	-0.746	-0.263	0.504	1.691	
		C-C-P-Se	197.844	0.010	0.961	0.007	0.464	28.335	
C15H18SeO2	PSEXDO	Se-C	1.950	0.051	0.014	0.013	0.012	0.045	a
		C-C-Se	106.515	0.271	0.055	0.522	1.687	3.118	
		C-C-C-Se	287.152	0.292	0.587	0.579	-0.867	1.217	
C9H6SeS2	PTSTCQ	Se-C	1.879	0.038	-0.012	-0.010	0.076	0.181	a
		S-C-Se	122.642	0.234	-1.830	-1.582	6.303	7.350	
		S-C-Se	112.895	0.442	-0.375	-2.443	0.490	0.120	
		S-C-Se-S	180.551	-0.243	-0.471	-0.521	-0.148	-0.370	
C13N2H7SeBrO4	PUKXID	Se-O	1.638	-0.023	0.003	0.009	-0.002	-0.014	a
		Se-C	1.955	0.001	0.001	0.000	0.001	0.026	
		C-Se-O	107.710	-0.087	-0.085	-0.063	-0.102	-8.676	
		N-Se	1.888	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.097	
		N-Se-O	102.859	-0.074	-0.068	-0.096	-0.088	-3.230	
		C-C-Se	112.555	0.017	0.031	0.024	0.053	0.795	
		C-C-Se-O	102.418	-0.079	-0.396	-2.727	-0.052	-9.383	
C48H34Se2	PUPGOW	Se-C	1.938	-0.001	-0.003	-0.004	-0.005	-0.017	a
		C-C-Se	119.723	0.005	0.013	0.069	0.017	-0.107	
		C-C-C-Se	168.046	0.104	0.954	0.499	-0.329	4.055	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C11N2H14Se	PUPVUR	Se-C	1.858	-0.008	-0.012	-0.016	-0.009	-0.001	a
		N-C-Se	123.903	-0.509	-0.748	-0.761	1.153	3.106	
		C-C-Se	118.544	-0.485	-0.724	-0.673	1.835	-0.360	
		C-C-Se-N	180.579	1.195	0.801	1.098	-0.499	1.438	
C26PN2H23Se	PUVFES	Se-P	2.081	-0.025	-0.029	0.000	0.000	-0.026	a
		N-P-Se	118.182	0.166	-5.730	-0.003	0.001	4.169	
		C-N-P-Se	238.448	-0.068	2.111	0.004	-0.001	-19.709	
C12PNH10SeS	PUVFIW	Se-P	2.102	-0.036	-0.004	-0.017	-0.072	-0.044	a
		S-P-Se	116.094	-0.004	-0.006	-0.048	-0.054	8.584	
		N-P-Se	117.195	-0.011	-0.007	-0.061	-0.085	-2.270	
		C-S-P-Se	106.484	0.350	-0.002	2.145	-0.038	25.724	
		C-N-P-Se	258.381	0.001	0.003	0.036	0.054	-42.519	
C16PH11SeS2	PUVFOC	Se-P	2.096	-0.004	-0.015	-0.002	-0.009	-0.028	a
		S-P-Se	112.961	0.001	-0.001	-0.001	-0.003	7.388	
		S-P-Se	110.028	0.001	-0.002	-0.001	-0.005	10.318	
		C-P-Se	114.775	0.000	-0.006	-0.002	-0.010	1.449	
C16N2H12Se2S2	PUZWIQ	Se-C	1.906	0.018	0.001	-0.001	0.010	0.118	a
		S-C-Se	117.289	-0.305	-0.629	-1.006	0.680	11.206	
		C-S-C-Se	174.833	0.157	0.022	-0.155	0.621	9.242	
C16N2H12Se2S2	PUZWOW	Se-C	1.882	0.019	0.016	0.017	0.100	0.146	a
		S-C-Se	123.298	-0.138	-0.616	-2.299	4.588	6.140	
		N-C-Se	110.216	0.200	-0.080	-0.242	0.218	-2.488	
		N-C-Se-S	179.861	-0.059	-0.071	-0.220	-0.171	0.290	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C21PNH22SeS2	QADQOC	Se-S	2.341	-0.009	-0.013	-0.040	0.015	1.625	a
		S-S-Se	103.522	0.788	0.599	0.524	1.304	-41.305	
		P-S-S-Se	106.765	0.588	0.518	0.076	1.091	-33.458	
C15PNH26SeS2O2	QADQUI	Se-S	2.337	-0.011	-0.001	-0.015	0.016	1.728	a
		P-S-Se	101.637	1.321	1.049	0.889	1.039	-62.017	
		S-P-S-Se	186.959	-0.581	-0.081	-0.562	-0.584	13.431	
		O-P-S-Se	314.489	0.520	-0.003	0.948	-0.597	7.169	
C15PN3H12Se	QAFKOZ	Se-P	2.105	-0.034	-0.027	-0.004	-0.028	-0.036	a
		C-P-Se	113.855	0.963	-0.661	-0.013	0.728	1.966	
		C-P-Se	113.856	0.663	-2.303	-0.040	0.597	1.966	
		C-P-Se	113.857	0.685	-0.847	0.275	0.640	1.972	
C48P2H32Se2O2	QAJXEE	Se-P	2.095	-0.026	-0.006	0.002	-0.004	-0.021	a
		C-P-Se	115.262	0.069	0.054	0.204	0.020	0.729	
		C-C-P-Se	251.483	0.005	0.009	0.023	0.008	5.509	
C20PH19SeO2	QAJYEH	P-Se	2.117	-0.040	-0.016	-0.001	-0.034	-0.003	a
		C-P-Se	110.360	0.057	-2.168	-0.153	0.266	5.424	
		C-C-P-Se	173.696	0.046	-0.049	-0.033	-0.041	-9.991	
		C-P-Se	113.966	0.089	-0.912	-0.145	-0.193	-4.637	
C22PH23SeO4	QAJZEI	Se-P	2.122	-0.027	-0.011	-0.003	-0.035	-0.003	a
		C-P-Se	110.592	0.079	-0.652	-0.320	0.446	5.098	
		C-C-P-Se	169.511	-0.028	0.572	0.031	-0.157	-5.818	
		C-P-Se	114.456	0.061	-0.827	-0.713	-0.309	-5.393	
		C-P-Se	112.260	0.078	-0.664	-0.220	0.160	1.746	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C28P2H28Se2	QAMQAW	Se-P	2.106	-0.038	-0.045	0.000	-0.027	-0.021	a
		C-P-Se	113.321	0.226	-3.244	0.216	0.125	3.352	
		C-C-P-Se	55.790	-0.244	-0.421	-0.547	-0.001	9.832	
C21H21SeO3	QAPTOQ	Se-C	1.918	-0.004	-0.018	-0.010	0.009	0.013	a
		C-C-Se	115.048	0.135	0.108	-0.626	1.010	0.438	
		C-C-C-Se	184.459	-0.461	-0.191	-0.590	-0.585	-3.142	
C18H26Se	QAXPIP	Se-C	1.974	0.011	-0.010	-0.010	0.003	0.009	a
		C-C-Se	110.425	0.516	0.593	0.531	1.107	-0.640	
C18H24Se2	QAXPOV	Se-C	2.009	-0.010	-0.013	-0.010	-0.009	0.010	a
		C-C-Se	106.213	-1.379	-0.624	-1.954	0.453	-1.964	
		C-C-C-Se	242.897	0.876	2.337	1.005	1.029	5.251	
C20H16SeO2	QERJIG	Se-C	1.915	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	a
		C-Se	1.918	0.000	-0.007	0.000	0.001	-0.002	
		C-Se-C	97.039	0.015	0.069	0.023	0.031	0.576	
		C-C-Se	121.416	0.016	0.074	0.017	0.032	0.922	
		C-C-Se-C	6.719	-0.361	-0.204	-1.128	-1.327	-11.905	
C18H18Se2O4	QIGNAV	Se-Se	2.318	0.012	0.023	0.027	0.019	0.179	a
		C-Se	1.940	-0.007	-0.018	-0.022	-0.011	-0.017	
		C-Se-Se	102.013	-0.410	-0.578	-1.128	0.802	-3.373	
		C-C-Se	120.636	-0.042	-0.058	-0.082	-0.514	4.385	
		C-C-Se-Se	328.387	0.027	0.062	-0.051	-0.711	1.731	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16H18Se2O2	QIHNUQ	Se-Se	2.326	0.014	0.009	0.051	0.040	0.100	a
		C-Se	1.960	0.007	-0.003	-0.013	0.009	0.025	
		C-Se-Se	100.804	0.026	0.015	-0.833	0.377	0.178	
		C-Se	1.964	0.004	-0.005	-0.018	0.008	-0.013	
		C-Se-Se	99.592	0.189	0.136	3.709	0.498	2.552	
		C-Se-Se-C	244.904	-0.337	-0.165	-0.686	0.350	15.021	
C6H10SeO4	QIKBAN	Se-C	1.961	0.015	-0.012	-0.004	0.012	-0.002	a
		C-C-Se	110.829	-5.320	-2.356	-3.785	1.573	1.923	
		C-C-C-Se	183.943	0.472	0.318	0.324	1.063	-4.641	
C12P2H10Se4	QITVOE	Se-P	2.276	-0.017	-0.046	-0.024	0.005	0.099	a
		Se-P-Se	115.601	-0.542	-0.206	-0.061	-0.065	4.195	
		Se-P	2.283	-0.021	-0.015	-0.013	0.004	0.062	
		Se-P-Se	94.573	-1.315	-2.359	-1.210	0.083	-4.301	
		Se-P-Se-Se	240.501	-0.614	-0.872	-0.265	-0.058	-5.591	
C13PH15Se3	QITVUK	P-Se	2.233	-0.006	-0.010	-0.003	0.037	0.003	a
		Se-Se	2.352	0.002	0.011	0.003	0.021	0.109	
		Se-Se-P	89.591	-0.010	0.793	-0.146	4.034	-3.992	
		Se-P	2.117	-0.043	-0.013	-0.024	-0.037	-0.018	
		Se-P-Se	110.211	-0.417	-0.568	-0.616	0.180	8.411	
		Se-P-Se-Se	194.871	0.448	0.580	0.506	-0.016	-2.489	
C18P2NH15Se3	QITWAR	Se-P	2.068	-0.015	-0.013	0.000	-0.015	-0.014	a
		N-P-Se	116.078	0.975	0.531	0.082	-0.498	2.745	
		Se-P	2.271	-0.017	-0.010	-0.004	0.011	0.059	
		Se-P-Se	120.641	0.749	0.552	0.133	-0.521	2.397	
		Se-P-Se-N	103.427	-1.868	-0.548	-0.125	0.522	-3.256	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C20P2N4H30Se2	QODMIF	Se-P	2.080	-0.040	-0.018	0.011	-0.007	-0.032	a
		N-P-Se	121.034	1.411	0.677	-0.604	-0.611	-3.312	
		P-N-P-Se	245.470	-0.856	-1.840	0.666	0.480	-7.933	
C14H20Se2O2	QOPCIH	Se-C	1.945	0.000	0.000	0.000	0.005	0.019	a
		C-C-Se	116.521	-0.005	0.000	-0.007	-0.084	-4.284	
		C-C-C-Se	280.806	0.055	0.000	0.000	-0.051	6.947	
C14H10SeO2	QORGIN	Se-C	1.921	-0.001	-0.001	-0.004	-0.001	0.007	a
		C-C-Se	121.190	0.033	0.020	0.404	0.118	4.873	
		C-C-C-Se	180.110	-0.029	-0.030	-0.525	-0.019	0.197	
C12NH9SeO2	QOZPAX	Se-C	1.916	-0.001	-0.002	-0.014	-0.011	0.008	a
		C-C-Se	122.805	-0.430	-0.671	-4.452	-0.139	-6.846	
		C-Se	1.926	-0.006	-0.003	-0.034	-0.002	0.017	
		C-Se-C	99.566	-0.014	0.026	0.937	0.015	-2.272	
		C-Se-C-C	179.309	-0.087	-0.217	-0.053	-0.140	0.100	
		C-C-Se	120.311	0.009	-0.002	0.003	-0.003	-0.899	
		C-C-Se-C	277.559	-0.017	0.001	-0.029	0.006	-8.317	
C12P2NH28SeI	RADRAR	Se-P	2.133	-0.110	-0.079	-0.017	0.001	-0.037	a
		N-P-Se	118.132	-4.011	-6.303	-1.473	0.827	2.681	
		P-N-P-Se	359.454	-2.011	-1.589	-2.579	-1.976	-3.223	
		C-P-Se	110.008	0.319	-6.091	-0.718	1.080	5.624	
C16P2NH36SeI	RADREV	Se-P	2.137	-0.110	-0.054	-0.008	0.001	-0.030	a
		N-P-Se	118.613	-6.303	-15.074	-2.066	0.827	2.653	
		P-N-P-Se	327.508	-2.045	2.106	3.331	-1.976	4.710	
		C-P-Se	109.486	-0.857	-6.303	-0.592	1.080	4.253	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
SeCl4O	RAFYOM	Se-Cl	2.278	0.083	0.088	0.020	0.106	0.250	a
		Se-O	1.608	-0.028	0.057	0.031	0.019	0.008	
		O-Cl-Se	99.843	-1.814	-2.044	-1.207	-3.073	-1.323	
		Se-Cl	2.483	-0.110	-0.088	-0.075	-0.052	0.034	
		Se-Cl-Cl	91.270	-3.389	-3.034	-2.643	-3.282	-2.449	
		Cl-Se	2.775	-0.110	-0.322	-0.410	-0.259	-0.255	
		Se-Cl-Cl	169.727	-1.768	-4.255	-1.389	-3.461	-6.781	
		Cl-Se	2.483	-0.110	-0.083	-0.075	-0.051	0.034	
C14N2H10Se	RAJVJ	Se-C	1.865	0.003	0.001	0.001	0.010	0.051	a
		Se-C	1.866	0.002	0.001	0.001	0.010	0.027	
		C-Se-C	86.266	0.105	0.056	0.057	0.540	0.154	
		C-C-Se	118.384	0.172	0.068	-0.602	0.887	3.948	
		C-C-Se-C	182.004	-0.251	-0.162	-0.438	-0.554	-0.468	
		C-C-Se	111.769	0.114	0.053	0.052	0.541	-0.942	
		C-C-Se-C	0.119	0.066	0.042	0.045	0.509	0.566	
C13H10Se2O	RAKMAR	Se-C	1.936	0.004	-0.001	-0.003	0.001	0.033	a
		O-C-Se	124.910	0.002	0.002	0.004	0.001	-3.433	
		C-Se	1.936	0.004	-0.001	-0.002	0.001	0.034	
		Se-C-Se	110.176	-0.748	-0.881	-1.874	0.056	6.882	
		Se-C	1.914	-0.002	-0.003	-0.009	0.000	-0.000	
		C-Se-C	97.090	0.258	0.745	1.691	0.118	2.661	
C33PN6H39SeS3	RALYIM	Se-P	2.124	-0.030	-0.008	-0.010	-0.014	-0.078	a
		N-P-Se	112.645	-0.086	-1.033	0.557	-0.554	-0.204	
		N-P-Se	112.111	-0.039	-1.033	-0.583	0.595	2.041	
		N-P-Se-N	238.701	0.114	0.064	0.534	0.588	6.394	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
SeO4	RANYAG	Se-O	1.623	0.045	0.110	0.110	0.064	0.091	a
		O-Se	1.651	0.022	0.099	0.066	0.045	0.063	
		O-Se-O	109.128	-0.225	-0.224	-0.211	-0.232	0.357	
		O-Se	1.641	0.031	0.110	0.084	0.052	0.074	
		O-Se-O	109.971	-0.522	-0.517	-0.487	-0.543	-0.515	
		O-Se-O-O	116.256	1.867	1.866	1.704	1.936	3.730	
C12N2H12Se2	WUFRIY	Se-Se	2.297	0.069	0.098	0.100	0.018	0.164	a
		C-Se	1.932	-0.005	-0.019	-0.033	0.010	0.004	
		C-Se-Se	103.804	-2.338	-3.048	-3.354	0.622	-6.348	
		N-C-Se	110.096	-0.180	-0.215	-0.182	-0.510	5.097	
		N-C-Se-Se	174.950	-0.337	-0.338	-0.267	-0.536	-39.774	
		C-C-Se	125.064	-0.191	-0.243	-0.203	-0.511	-3.257	
C16N3H13Se3	WUFROE	Se-C	1.940	-0.001	-0.012	-0.016	0.013	0.036	a
		Se-C	1.938	-0.002	-0.017	-0.018	0.012	0.033	
		Se-C-Se	108.683	-0.330	-0.786	-1.037	0.553	3.014	
		Se-C	1.938	-0.001	-0.012	-0.018	0.012	0.038	
		Se-C-Se	108.704	-1.360	-1.099	-1.331	-0.566	5.587	
		C-Se	1.918	0.000	-0.019	-0.015	0.009	0.020	
		C-Se-C	100.234	0.115	0.786	0.846	0.634	-1.352	
C34N4H26Se2O2	WUHZUU	Se-Se	2.358	0.003	0.008	0.012	0.011	0.129	a
		Se-C	1.894	-0.003	-0.008	0.010	0.002	0.008	
		C-Se-Se	96.754	0.183	0.571	1.134	0.856	7.511	
		N-C-Se	125.162	-0.003	-0.070	-0.009	-0.017	15.326	
		N-C-Se-Se	300.111	0.146	-0.090	-0.075	-0.058	52.667	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C18N2H10SeS	WUJPAS	Se-C	1.906	0.011	0.001	-0.008	0.005	0.042	a
		C-C-Se	122.407	0.054	-0.067	0.018	0.760	4.945	
		Se-C-N	113.432	0.029	-0.077	0.030	-0.009	-3.331	
		S-C-C-Se	10.591	-1.526	-0.927	-1.139	-0.045	-5.981	
C6PN3H18SeI	RIJQAC	I-Se	2.596	-0.048	-0.110	-0.064	0.022	-0.286	a
		P-Se	2.221	-0.110	0.040	0.057	-0.001	0.009	
		P-Se-I	101.238	6.303	6.303	6.303	0.004	6.151	
		N-P-Se	110.772	-1.426	-4.439	-1.575	0.091	-0.282	
		N-P-Se-I	87.626	0.325	-0.920	-1.162	1.911	-2.852	
C22N2H22SeO7	RIKHUO	Se-C	1.914	-0.010	-0.005	-0.010	0.034	0.002	A
		C-C-Se	125.133	-0.660	0.201	-0.602	0.022	-0.934	
		C-C-C-Se	175.974	0.588	0.118	0.580	1.905	1.414	
C16H16Se2O4	RIKZAM	Se-C	1.911	0.000	-0.004	-0.012	0.001	0.007	a
		C-C-Se	121.655	0.021	0.022	0.563	0.027	3.765	
		Se-C	1.905	-0.010	-0.001	-0.010	0.000	0.012	
		Se-C-C	122.344	0.003	-0.527	-0.582	0.009	3.250	
		Se-C-C-Se	1.039	-0.012	-0.006	-0.566	-0.002	-0.532	
		Se-C	1.911	-0.001	0.000	-0.010	0.000	0.007	
C15PH19SeO	RIQZUM	Se-P	2.118	-0.020	-0.027	-0.025	-0.011	-0.035	a
		C-P-Se	114.657	-0.002	-0.023	0.295	0.026	1.314	
		C-C-P-Se	19.794	-0.551	-0.158	-0.186	-0.003	5.541	
C10H20Se2	RIYSIB	Se-C	1.960	0.000	0.000	-0.001	0.004	0.015	a
		C-C-Se	117.742	-0.034	-0.016	-0.051	0.091	-1.556	
		C-Se	1.974	0.022	0.000	-0.001	0.002	0.000	
		C-Se-C	97.916	-0.072	-0.026	-0.092	0.090	-0.673	
		C-Se-C-C	110.269	-0.018	-0.013	-0.037	0.091	1.023	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15H30Se3	RIYSOH	Se-C	1.969	0.013	-0.001	-0.009	0.003	0.000	a
		C-Se	1.972	0.010	-0.003	-0.027	0.002	0.002	
		C-Se-C	98.966	0.563	-0.203	-1.617	0.083	0.976	
		C-C-Se	113.248	-0.569	-0.088	-0.626	1.132	-2.148	
		C-C-Se-C	205.051	0.564	0.032	0.537	-0.104	-2.383	
C2H6Se	RIZMES	Se-C	1.914	0.044	0.026	0.034	0.043	0.033	a
		Se-C	1.960	0.010	-0.012	0.001	0.010	-0.014	
		C-Se-C	98.412	-1.977	-1.484	1.740	-0.843	0.228	
C24H32Se4O4	RIZMUI	Se-C	1.918	0.000	-0.002	-0.008	0.000	0.014	a
		C-C-Se	122.313	-0.034	-0.005	-0.025	-0.014	-1.888	
		C-C-C-Se	180.734	-0.022	0.006	-0.092	-0.006	-0.497	
C3NH4SeF3	ROHYOC	Se-C	1.804	-0.035	-0.056	-0.065	0.003	0.006	a
		C-C-Se	118.850	-1.643	-1.707	-3.169	-1.491	-0.345	
		N-C-Se	126.217	-1.882	-1.839	-3.274	-0.641	0.534	
		N-C-Se-C	179.772	0.114	0.182	-0.010	0.086	0.401	
C13NH19SeO3	RULRIA	Se-O	1.655	-0.023	0.007	0.010	-0.010	-0.016	a
		Se-O	1.743	0.021	0.022	0.019	0.017	0.038	
		O-Se-O	104.631	-2.521	-1.488	-1.681	-1.369	-7.834	
		C-Se	1.957	0.001	-0.004	-0.010	0.010	0.029	
		C-Se-O	100.110	0.066	-0.390	0.960	-0.792	-2.527	
		C-C-Se	1.367	0.029	0.037	0.042	0.046	0.020	
		C-C-Se-O	118.159	-0.028	-0.026	-0.482	-0.478	-1.235	
		C-C-Se	1.384	0.001	0.001	0.009	0.009	0.000	
		C-C-Se-O	119.837	-0.030	-0.022	-0.488	-0.474	2.507	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6, PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12H16SeO6	RUTCEO	Se-C	1.872	0.016	0.003	0.001	0.025	0.045	a
		C-C-Se	111.957	0.466	0.095	0.162	0.277	-0.177	
		C-C-C-Se	359.330	-0.439	-0.141	-0.192	-0.156	1.460	
C10H10Se3Br2	SACMIT	Se-Se	2.339	0.009	-0.010	-0.001	0.034	0.113	a
		Se-Se	2.315	0.005	0.010	0.006	0.011	0.136	
		Se-Se-Se	90.597	-0.020	-0.571	-0.069	0.949	3.719	
		C-Se	1.935	-0.001	-0.010	-0.003	-0.002	-0.015	
		C-Se-Se	93.695	-0.033	-0.572	-0.098	-0.006	3.963	
		C-Se-Se-Se	38.671	-0.043	-0.572	-0.082	-0.028	-38.593	
C14N2H9SeCl	SADVIE	Se-C	1.876	0.019	-0.002	0.015	0.044	0.077	a
		Se-C	1.873	0.022	-0.002	0.020	0.051	0.081	
		C-Se-C	82.825	-0.099	-0.172	-0.206	-0.293	-2.513	
		N-C-Se	113.700	-0.117	-0.213	-0.415	-0.276	-0.286	
		N-C-Se-C	359.423	0.108	0.128	0.274	0.268	0.589	
		N-C-Se	113.545	-0.085	-0.194	-0.342	-0.226	-0.191	
		N-C-Se-C	0.116	0.041	0.059	0.104	0.117	-0.119	
		C-C-Se	124.307	-0.688	-0.850	-3.571	1.172	-1.470	
C10H14Se3O2	SADYIF	C-Se	1.917	0.003	-0.047	0.007	0.005	0.016	a
		Se-Se	2.358	0.005	0.009	-0.012	0.026	0.117	
		Se-Se-C	103.727	-2.236	-0.946	-2.417	1.440	-2.472	
		Se-Se	2.358	0.006	0.009	-0.012	0.027	0.117	
		Se-Se-Se	106.624	-6.303	-0.811	-2.417	0.899	-1.985	
		Se-Se-Se-C	74.291	3.336	0.964	-0.738	1.883	-7.642	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C17H16Se2O2	SAHXII	Se-C	1.961	0.000	-0.008	-0.015	0.001	0.036	a
		C-C-Se	110.874	-0.429	0.014	0.480	-1.699	-0.919	
		Se-C	1.989	-0.002	-0.007	-0.017	-0.004	0.008	
		Se-C-Se	114.705	-1.047	-0.646	-0.978	0.433	4.664	
		Se-C-Se-C	120.072	0.311	-0.214	-1.104	0.271	-4.582	
C30PNH25Se	SAJNIB	Se-N	1.794	-0.002	-0.026	0.006	0.033	0.037	a
		P-N-Se	113.251	1.063	1.412	0.275	2.414	9.835	
		C-P-N-Se	57.419	-0.190	-0.336	-0.145	-0.286	2.523	
C16N2H18Se	SAKJUI	Se-C	1.905	-0.001	-0.002	-0.004	0.009	0.007	a
		C-C-Se	111.188	-0.072	-0.007	-0.004	-0.521	0.614	
		C-Se	1.883	0.005	-0.001	0.000	0.010	0.029	
		C-Se-C	87.079	-0.073	0.154	0.068	0.538	-0.618	
		C-Se-C-C	353.652	0.042	-0.046	-0.232	-0.558	0.901	
C11N3H8SeSCl	SALPOM	Se-C	1.818	-0.005	-0.025	-0.033	0.005	0.021	a
		N-C-Se	120.547	-0.063	-0.310	-0.368	-0.246	0.707	
		N-C-Se	122.625	-0.061	-0.295	-0.333	-0.258	0.925	
HSeO4	SAQHOH	Se-O	1.590	0.023	0.093	0.063	0.058	0.067	a
		O-Se	1.583	0.026	0.098	0.076	0.059	0.068	
		O-Se-O	112.834	1.931	1.950	1.304	1.726	2.831	
		O-Se	1.587	0.022	0.093	0.072	0.055	0.063	
		O-Se-O	113.143	1.573	1.752	1.055	1.490	2.497	
		O-Se-O-O	229.905	-6.303	-6.303	-6.303	-6.303	-10.045	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C26N2H28Se	SAYKIN	Se-N	1.787	0.010	0.000	0.001	0.001	0.051	a
		N-Se	1.785	0.010	0.011	0.028	0.015	0.053	
		N-Se-N	94.290	0.568	0.033	0.007	0.040	-4.155	
		C-N-Se	107.094	0.568	0.019	0.011	0.029	3.069	
		C-N-Se-N	359.132	0.566	0.010	0.012	0.009	0.967	
C18H22Se2	SAYYEW	Se-Se	2.334	0.007	0.004	0.004	0.025	0.118	a
		C-Se	1.929	-0.002	-0.002	-0.002	-0.027	-0.017	
		C-Se-Se	100.278	-0.627	0.042	0.141	-0.136	-2.881	
		C-C-Se	119.148	0.014	0.006	0.003	0.782	0.961	
		C-C-Se-Se	82.187	-0.199	-0.002	-0.021	0.274	-5.514	
C30H46Se2	SAZBEA	Se-Se	2.340	0.011	0.005	0.014	0.012	0.103	a
		C-Se	1.933	-0.011	-0.003	-0.013	-0.012	-0.015	
		C-Se-Se	99.787	0.550	0.222	-0.550	0.546	-1.308	
		C-Se	1.937	-0.010	-0.002	-0.011	-0.014	-0.019	
		C-Se-Se	101.153	0.565	0.150	-0.606	0.544	-2.680	
		C-Se-Se-C	286.620	-0.687	-0.306	-0.549	0.574	6.936	
C14N4H8SeS2	SAZFAA	Se-S	2.192	0.015	0.014	0.010	0.022	1.538	a
		S-Se	2.207	0.013	0.014	-0.011	0.019	3.478	
		S-Se-S	100.991	1.065	0.785	1.157	1.772	-67.290	
		C-S-Se	101.739	0.526	0.632	0.735	1.148	-52.566	
		C-S-Se-S	97.003	-0.583	-0.576	0.606	-0.638	-96.182	
H6SeO6	Selenic acid (Se(OH)6)	Se-O	1.861	-0.056	-0.018	-0.080	-0.030	-0.065	g

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C2H6Se2	Me-Se-Se-Me	Se-C	1.950	-0.003	-0.026	-0.012	0.000	-0.014	e
		Se-Se	2.330	0.032	0.038	0.041	0.063	0.098	
		Se-Se-C	99.000	-0.281	-0.076	1.249	2.059	1.356	
C12H8Se2	SEANTH01	Se-C	1.896	0.000	-0.005	-0.008	0.013	0.023	a
		C-C-Se	121.181	0.002	-0.005	-0.573	0.000	4.165	
		Se-C	1.906	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.012	
		Se-C-C	120.497	0.002	-0.008	-0.019	0.022	4.832	
		Se-C-C-Se	359.722	-0.007	0.011	0.020	-0.006	0.181	
C18NH19SeO3	SEBQIA	Se-C	1.917	0.011	-0.010	-0.009	0.010	0.017	a
		C-C-Se	121.000	-0.521	-0.504	-0.535	-0.486	-5.984	
		C-C-C-Se	178.277	0.932	0.922	0.627	0.703	2.173	
SeBr6	SeBr6(=)	Se-Br	2.678	-0.210	-0.210	-0.210	-0.110	-0.122	g
C14NH13SeO	SEBZQI	Se-N	1.805	0.003	-0.006	0.010	0.000	0.043	a
		C-N-Se	121.238	0.281	-0.024	-0.274	-0.131	-3.991	
		C-C-N-Se	0.349	-0.014	-0.017	-0.021	-0.018	-0.380	
		C-Se	1.923	0.001	-0.003	-0.003	0.001	0.023	
		C-Se-N	94.209	0.436	1.178	1.148	0.509	1.222	
		C-Se-N-C	186.816	-0.275	-0.314	-0.284	-0.238	-6.821	
C2SeF6	Diperfluoromethyl selenide	Se-C	1.960	0.077	0.054	0.026	0.000	0.028	e
		C-Se-C	104.000	-6.303	-4.104	-1.301	-4.269	-7.270	
SeCl2	Selenium dichloride	Se-Cl	2.157	0.055	-0.110	0.007	0.062	-0.015	h
		Cl-Se-Cl	99.600	2.230	0.795	0.195	0.104	-0.004	
SeCl6	SeCl6(=)	Se-Cl	2.509	-0.110	-0.110	-0.110	-0.110	-0.553	g

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
CNHSe	Isoselenocyanic acid	Se=C	1.719	-0.012	-0.053	-0.046	0.013	0.013	h
		C=N	1.191	-0.026	-0.013	-0.008	-0.012	-0.014	
		Se=C=N	0.990	-0.005	-0.025	-0.016	-0.014	-0.015	
CSe	Selenium carbide	Se-C	1.676	-0.112	-0.094	-0.085	-0.027	-0.104	i
C2H6Se	Ethyl selanol	Se-H	1.440	-0.023	-0.022	0.032	0.027	0.029	j
		Se-C	1.962	0.006	-0.022	-0.014	0.010	0.006	
		H-Se-C	93.500	2.003	0.191	4.635	0.156	2.018	
		Se-C-C	108.700	-2.837	-2.675	-3.913	0.722	-0.814	
SeOF2	Selenyl fluoride	Se-O	1.576	0.009	0.087	0.053	0.027	0.017	k
		Se-F	1.730	-0.056	-0.023	-0.005	-0.003	-0.010	
		F-Se-O	104.800	-5.045	-6.303	-3.473	-6.303	-5.506	
		F-Se-F	92.200	-1.732	1.318	1.602	0.851	2.050	
SeF4	Selenium tetrafluoride	SeF	1.770	-0.027	-0.019	-0.017	-0.056	-0.036	e
		FSeF	169.200	10.801	-0.835	-0.675	15.744	28.500	
		SeF'	1.680	-0.053	0.009	0.030	0.061	0.025	
		F'SF'	100.550	-6.303	-4.945	-5.643	-12.032	-16.752	
NH3Se	SeH-NH2	Se-N	1.913	-0.044	-0.089	-0.026	-0.051	-0.029	h
SeO2F2	Selenoyl fluoride	Se-F	1.685	-0.050	-0.031	0.019	0.008	0.001	h
		F-Se-F	94.100	-0.475	2.174	0.858	5.019	2.162	
		Se-O	1.575	-0.021	0.023	0.016	0.012	0.013	
		O-Se-O	126.200	1.023	1.029	1.280	0.206	3.854	
SeO2	Selenium dioxide	Se-O	1.608	-0.034	0.035	-0.010	-0.011	-0.006	i
		O-Se-O	113.800	-6.303	-6.303	-4.548	-6.303	-7.063	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
SeO3	Selenium trioxide	Se-O	1.688	-0.132	-0.107	-0.150	-0.095	-0.099	h
SeCl2O	Selenyl chloride	Se=O	1.614	-0.059	0.021	0.021	-0.005	-0.025	b
		Se-Cl	2.205	0.038	-0.110	-0.002	0.053	0.081	
		O=Se-Cl	106.000	-2.300	-2.344	-2.019	-4.155	-4.088	
		Cl-Se-Cl	96.900	4.846	6.303	-0.020	4.560	0.728	
C10H12Se4	SEOTCR01	Se-C	1.897	0.055	-0.008	-0.009	0.004	0.028	a
		C-C-Se	118.728	-0.382	-0.458	-0.553	0.154	0.787	
		C-Se	1.914	-0.023	-0.072	-0.074	0.000	0.031	
		C-Se-C	94.258	-0.390	-0.449	-0.514	0.122	0.119	
		C-Se-C-C	1.185	-0.482	-0.481	-0.539	-0.362	-0.821	
PHSeF2	Difluorophosphine selenide	P=Se	2.026	-0.003	0.045	0.067	-0.044	-0.004	h
		P-F	1.557	0.020	-0.028	-0.008	0.024	0.016	
		Se=P-F	116.800	0.175	-0.160	-1.109	-0.034	-0.080	
		P-H	1.422	-0.022	-0.110	-0.110	0.041	0.060	
		Se=P-H	118.600	-2.587	-3.472	0.275	3.410	9.355	
		F-P-F	98.100	-5.963	-0.034	-4.007	-6.303	-5.452	
C17H13SeOF	SERJAA	Se-C	1.929	-0.003	-0.008	-0.010	-0.004	0.002	a
		C-C-Se	120.486	-0.035	-0.039	-0.061	-0.058	-0.150	
		C-C-C-Se	359.835	0.044	0.039	0.056	0.060	0.449	
C16N4H18Se2	SIDMAT	Se-N	1.817	0.020	0.009	0.016	0.020	0.049	a
		C-N-Se	125.206	-1.748	0.512	-2.768	1.208	0.167	
		N-C-N-Se	2.034	0.513	0.492	1.421	0.421	32.209	
C4Se2F8	SIYYAA	Se-C	1.959	0.014	0.007	-0.013	0.009	0.043	a
		Se-C-Se	97.697	0.526	0.074	-1.665	0.415	1.213	
		C-C-Se	114.079	-3.347	-1.431	-2.246	-0.523	0.072	
		C-C-Se-Se	120.900	-0.794	-1.554	-1.953	-0.437	0.722	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8N4H4Se4	SOBSUX01	Se-Se	2.342	0.001	0.001	-0.018	0.004	0.156	a
		N-Se	1.812	-0.001	-0.002	-0.002	-0.001	-0.042	
		N-Se-Se	91.961	0.019	0.011	-0.770	0.046	-4.125	
		N-Se	1.753	0.002	0.001	0.002	0.005	0.028	
		N-Se-Se	89.951	0.035	0.030	0.047	0.087	-2.249	
		N-Se-Se-N	2.450	0.027	0.003	-0.031	0.004	-2.401	
C12PH23Se	SOMBIG	P-Se	2.137	-0.039	-0.017	-0.012	-0.014	-0.043	a
		C-P-Se	112.838	0.361	0.137	0.545	0.021	3.638	
		C-P-Se	111.282	-0.013	-0.017	-0.507	0.004	2.736	
		C-C-P-Se	74.682	0.042	0.022	0.516	1.049	4.445	
C16N2H18Se2O2	SOPCUV	C-Se	1.945	0.000	0.000	0.000	0.000	0.020	a
		C-Se	1.959	0.001	0.000	0.000	0.001	0.005	
		C-Se-C	100.090	0.000	0.039	0.043	0.026	2.449	
		C-C-Se	115.982	-0.001	0.000	0.000	0.000	-2.648	
		C-C-Se-C	292.896	0.001	0.000	0.000	0.000	-1.342	
C6H8SeO4	SPSEBU	Se-O	1.973	-0.006	-0.029	-0.036	-0.044	-0.120	a
		C-O-Se	114.980	0.152	0.003	-0.926	0.516	5.425	
		C-Se	1.956	0.039	-0.001	0.021	0.026	0.056	
		C-Se-O	86.401	0.133	-0.129	0.569	0.520	-0.673	
		C-Se-O-C	355.232	0.144	-0.043	0.571	-0.519	3.510	
C14H8SeO4	SPSNAP10	Se-O	1.969	-0.001	-0.004	-0.045	-0.017	-0.093	a
		O-O-Se	142.518	0.001	0.043	0.090	0.094	3.212	
		C-Se	1.929	0.001	0.000	0.003	0.002	0.040	
		C-Se-O	83.736	0.010	0.061	0.093	0.096	0.331	
		C-Se-O-O	4.487	-0.026	0.036	-0.083	0.087	-1.107	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9PH14SeO7	SUBJUJ	Se-P	2.111	-0.100	0.010	0.021	-0.012	-0.011	a
		Se-P-O	104.091	-0.029	-0.562	-0.451	-0.519	-25.780	
		Se-P-O	112.689	-0.076	-0.567	-0.460	-0.519	4.474	
		Se-P-O	118.808	1.138	-0.557	1.333	-0.511	13.134	
C10N2H6SeBr2	SULWAY	Se-C	1.928	-0.010	-0.004	-0.002	0.001	0.014	a
		C-Se	1.927	-0.010	-0.004	-0.002	0.001	0.010	
		C-Se-C	97.327	0.571	0.121	0.528	0.018	0.554	
		N-C-Se	117.377	-0.647	-0.019	0.009	-0.010	-0.084	
		N-C-Se-C	304.445	0.570	0.037	-0.005	0.013	-2.358	
		N-C-Se	117.427	-0.640	-0.019	0.009	-0.010	0.573	
		N-C-Se-C	304.423	0.571	0.047	-0.004	0.014	14.989	
C10N2H6SeBr2	SULWEC	Se-C	1.906	-0.005	-0.016	-0.011	-0.010	0.009	a
		Se-C	1.910	-0.003	-0.012	-0.011	-0.009	0.004	
		C-Se-C	100.826	-0.315	-0.561	0.754	-0.634	-3.248	
		C-C-Se	125.350	-0.118	-0.539	0.587	-0.541	-3.191	
		C-C-Se-C	340.915	-0.021	0.634	-0.583	-0.614	-29.100	
		C-C-Se	123.295	-0.028	-0.531	-0.558	-0.515	-1.048	
		C-C-Se-C	299.908	0.032	0.535	0.558	0.518	13.532	
C8H8SeO5	SUMCIN	Se-O	1.667	-0.029	0.010	0.001	-0.020	-0.026	a
		Se-O	1.773	0.010	0.010	0.006	0.031	0.019	
		O-Se-O	104.833	-1.930	-0.604	-0.559	-3.005	-3.532	
		C-Se	1.927	0.002	-0.010	0.000	0.006	0.041	
		C-Se-O	100.573	0.094	-0.574	0.572	-1.633	-2.889	
		C-C-Se	118.092	0.012	0.583	-0.021	1.105	1.863	
		C-C-Se-O	162.750	0.055	0.575	0.462	5.730	11.361	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C7NH13SeO	SUNNUK	Se-C	1.814	0.010	-0.050	-0.028	-0.009	0.008	a
		N-C-Se	127.953	0.543	-1.101	0.533	1.992	7.336	
		C-N-C-Se	173.907	-0.555	-0.789	-0.688	-0.582	3.739	
C15NH13SeO	SUNPAS	Se-C	1.838	0.003	-0.041	-0.063	-0.005	-0.017	a
		N-C-Se	129.699	0.064	-0.174	-0.003	-0.031	5.957	
		C-N-C-Se	182.116	0.050	-0.398	-0.690	-0.430	-5.183	
C15NH13Se	SUPDAI	Se-C	1.981	0.000	-0.003	-0.004	0.000	0.014	a
		C-C-Se	110.215	-0.202	-0.283	-0.994	0.183	0.134	
		C-C-C-Se	170.987	0.034	-0.091	-0.036	-0.009	3.852	
C19H26Se	TAJLEW	Se-C	1.913	-0.011	-0.013	-0.013	-0.024	-0.012	a
		C-C-Se	127.695	0.592	-0.028	-0.872	1.579	2.367	
		C-C-C-Se	168.726	0.616	0.718	0.648	2.197	11.230	
C12H8Se2	TAPFIZ	Se-O	1.649	-0.057	0.019	-0.002	-0.022	-0.028	a
		O-Se	1.732	0.041	0.096	0.054	0.034	0.029	
		O-Se-O	102.964	-6.303	-6.303	-1.920	-4.803	-5.651	
		O-Se	1.722	0.054	0.094	0.067	0.044	0.039	
		O-Se-O	96.523	-0.641	-4.084	4.814	-1.125	0.797	
		O-Se-O-O	101.274	-6.303	-6.031	-0.798	-2.616	-1.281	
C15NH14Se	TARREK	Se-N	0.010	0.002	0.010	0.000	0.010	0.131	a
		C-Se	0.010	0.001	0.010	0.000	0.010	0.004	
		C-Se-N	0.561	0.056	0.561	0.047	0.561	0.352	
		C-C-Se	-0.537	-0.004	-0.537	-0.010	-0.536	-1.175	
		C-C-Se-N	0.533	0.014	0.533	0.022	0.530	1.098	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15NH14Se	TARRIO	Se-N	1.944	0.002	0.001	0.009	0.010	0.138	a
		C-Se	1.890	0.001	0.001	0.009	0.009	0.003	
		C-Se-N	83.208	0.070	0.064	0.551	0.543	0.280	
		C-C-Se	127.544	-0.057	-0.046	-0.544	-0.529	-1.072	
		C-C-Se-N	179.067	-0.001	-0.001	1.244	-0.503	0.950	
C10N4H16Se2	TAVWUI	Se-Se	2.409	-0.010	-0.009	0.011	0.008	0.004	a
		C-Se	1.873	0.011	-0.009	-0.015	0.014	0.056	
		C-Se-Se	95.687	1.315	1.064	1.516	1.546	6.743	
		C-Se	1.874	0.014	0.010	-0.009	0.017	0.055	
		C-Se-Se	98.035	1.113	1.038	1.359	1.094	4.366	
		C-Se-Se-C	66.491	1.315	1.064	1.555	1.789	17.783	
C10N4H16Se2	TAVXAP	C-Se	1.881	0.021	0.000	-0.023	0.028	0.048	a
		Se-Se	2.435	-0.045	-0.028	-0.008	-0.044	-0.021	
		Se-Se-C	98.263	5.309	6.303	6.303	5.604	4.076	
		N-C-Se	124.837	-0.218	-0.321	-0.207	-0.213	1.352	
		N-C-Se-Se	262.030	-6.791	0.071	-6.577	0.114	-14.322	
C10N4H14Se2	TAVXOD	C-Se	1.900	0.016	-0.011	-0.010	0.011	0.036	a
		Se-Se	2.416	-0.058	-0.014	-0.010	-0.012	-0.006	
		C-Se-Se	96.054	0.488	0.567	1.521	1.503	4.198	
		C-Se	1.886	0.010	-0.010	-0.010	0.012	0.049	
		C-Se-Se	98.929	0.484	0.567	1.512	1.122	1.317	
		C-Se-Se-C	93.066	-0.481	0.574	0.697	0.520	-6.955	
C18PH15SeO3	TAXTUI	P-Se	2.053	-0.022	0.011	0.015	-0.027	-0.051	a
		O-P-Se	117.789	1.900	-0.637	0.860	1.099	-5.932	
		O-P-Se	117.164	1.800	-0.548	0.975	0.925	11.584	
		O-P-Se-O	238.732	0.737	0.697	-0.495	0.756	4.122	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8NH11SeO2	TAYTAO	Se-O	1.614	-0.029	0.005	0.046	0.010	0.026	a
		O-Se	1.620	-0.035	0.004	0.039	0.010	0.021	
		O-Se-O	116.924	2.883	0.644	1.672	0.588	5.358	
		N-Se	1.815	0.024	0.000	0.082	0.010	0.121	
		N-Se-O	105.777	1.858	0.270	2.244	0.581	1.211	
		N-Se-O-O	125.654	0.112	-0.138	-3.382	-0.575	-1.198	
C7NH8SeO2	TAYTES	Se-O	1.617	-0.034	0.010	0.005	0.011	0.029	a
		O-Se	1.609	-0.017	0.011	0.019	0.011	0.037	
		O-Se-O	117.977	1.646	0.629	0.194	0.587	0.506	
		N-Se	1.791	0.062	0.010	0.081	0.012	0.235	
		N-Se-O	104.079	3.314	0.639	0.393	0.610	10.196	
		N-Se-O-O	242.346	-4.747	-0.681	-0.779	0.566	-7.121	
C18H38Se3	TBUTSE	Se-Se	2.316	0.020	0.025	-0.010	0.047	0.115	a
		Se-Se	2.312	0.021	0.025	-0.010	0.047	0.119	
		Se-Se-Se	107.660	-2.283	-6.303	-2.310	0.797	-3.700	
		Se-C	2.006	-0.008	-0.023	-0.025	0.011	0.004	
		Se-Se-C	102.331	-1.285	-5.110	-3.162	0.918	-1.801	
		Se-Se-Se-C	259.435	0.737	3.446	1.638	1.569	14.165	
C13N3H11SeO	TEFBIQ	Se-C	1.897	0.001	0.006	0.003	0.001	0.052	a
		C-Se	1.948	0.008	0.001	0.001	0.008	0.016	
		C-Se-C	87.417	0.021	0.578	0.554	0.036	0.438	
		N-C-Se	112.254	0.008	-0.003	-0.009	0.026	-0.699	
		N-C-Se-C	5.831	-0.005	-0.007	-0.008	-0.017	-1.368	
C12N3H7SeO	TEFBOW	Se-C	1.889	0.038	0.001	-0.010	0.038	0.062	a
		C-C-Se	80.942	-0.193	-0.137	-0.581	-0.485	-1.318	
		C-C-C-Se	353.991	0.073	0.056	0.551	0.085	6.037	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10N2H8Se	TEHCIS	Se-C	1.913	-0.003	-0.008	-0.007	-0.001	0.007	a
		C-C-Se	123.022	-0.058	-0.055	-0.055	-0.075	-0.064	
		C-C-C-Se	176.931	0.718	0.043	0.009	0.014	0.741	
C14H8Se2	TEHTOQ	Se-C	1.883	0.003	0.000	0.000	0.001	0.014	a
		C-C-Se	131.317	-0.023	0.073	-0.012	-0.042	-0.064	
		C-C-C-Se	358.916	0.061	0.022	0.044	0.094	0.213	
C26H16Se2	TEHTUW	Se-C	1.893	0.004	0.000	0.000	0.002	0.014	a
		C-C-Se	131.055	-0.015	0.525	-0.004	-0.032	-0.064	
		C-C-C-Se	359.731	-0.008	-0.013	-0.008	-0.018	0.213	
C18N2H16Se2	TELSIM	Se-C	1.910	0.001	-0.005	-0.003	0.003	0.019	a
		C-Se	1.959	0.005	0.001	0.002	0.005	0.018	
		C-Se-C	99.248	0.034	0.445	1.517	-0.018	0.195	
		C-C-Se	117.713	-0.047	-0.065	-0.052	-0.048	0.236	
		C-C-Se-C	173.812	0.102	0.122	0.116	0.102	6.937	
C21PN3H19SeClO	TENGIC	P-Se	2.243	-0.005	0.002	0.004	0.004	-0.033	a
		O-P-Se	97.273	-0.040	-0.019	-0.031	-0.008	2.315	
		N-P-Se	85.364	-0.123	-0.063	-0.104	-0.106	12.608	
		N-P-Se	127.762	0.047	0.020	0.034	0.037	-9.058	
		C-P-Se	115.119	-1.278	-1.089	-0.532	-0.225	4.522	
C14NH19SeO4	TEXROD	Se-O	1.611	-0.011	0.019	0.022	0.022	0.036	a
		Se-O	1.604	-0.009	0.020	0.031	0.023	0.041	
		O-Se-O	115.679	0.960	0.927	0.704	0.625	5.238	
		Se-C	1.889	0.010	0.010	0.012	0.019	0.069	
		Se-C-O	106.196	0.749	0.687	0.817	0.573	0.593	
		C-C-Se	119.066	0.795	-0.504	0.764	-0.457	-1.265	
		C-C-Se-O	230.501	0.807	0.629	0.746	0.652	-12.373	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C23NH21SeSO2	TEYQAP	Se-C	1.934	-0.010	-0.012	-0.012	-0.011	-0.009	a
		Se-C	1.909	-0.010	-0.011	-0.012	-0.007	0.013	
		C-Se-C	98.934	-0.603	0.190	0.829	-0.974	-2.078	
		C-C-Se	119.601	-0.586	-0.464	-0.693	1.144	2.355	
		C-C-Se-C	291.951	-0.639	-0.257	-0.629	-1.352	-4.749	
C20H10Se4S4	THPHSE	Se-Se	2.390	-0.001	0.000	-0.002	0.001	0.047	a
		C-Se	1.854	-0.001	-0.002	-0.006	0.004	0.040	
		C-Se-Se	99.951	-0.120	0.015	0.072	0.113	-1.085	
		Se-C	1.880	0.000	0.000	0.000	0.000	0.051	
		Se-C-Se	122.533	-0.002	0.001	-0.012	-0.007	-2.408	
		Se-C-Se-Se	254.877	0.001	0.006	0.004	0.001	5.632	
		C-Se	1.854	-0.001	-0.001	-0.006	0.003	0.040	
C17H14SeO	TIFYOW	Se-C	1.913	0.000	-0.002	-0.004	0.000	0.014	a
		C-C-Se	123.582	-0.001	-0.008	-0.012	-0.010	-2.162	
		C-C-Se	116.849	-0.001	-0.008	-0.016	-0.009	0.670	
		C-Se	1.912	0.000	-0.002	-0.005	0.000	0.008	
		C-Se-C	102.080	-0.027	-0.064	0.111	-0.086	-3.464	
		C-Se-C-C	3.478	-0.003	0.105	0.104	-0.015	-27.292	
C16H11SeCl	TIFYUC	Se-C	1.917	-0.001	-0.003	-0.008	0.000	0.010	a
		C-C-Se	118.272	0.004	0.002	0.009	0.016	-1.744	
		C-C-Se	121.590	0.003	0.002	0.008	0.028	0.504	
		C-Se	1.911	0.000	-0.011	-0.013	-0.001	0.010	
		C-Se-C	99.362	0.011	0.047	0.656	0.001	-0.069	
		C-Se-C-C	100.348	-0.087	-0.051	-0.322	0.035	20.574	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16H11SeBr	TIFZAJ	Se-C	1.922	-0.001	-0.004	-0.007	-0.001	0.006	a
		C-C-Se	118.402	0.006	0.007	0.012	0.023	-1.840	
		C-C-Se	121.194	0.006	0.006	0.011	0.026	0.865	
		C-Se	1.908	0.000	-0.003	-0.003	0.001	0.013	
		C-Se-C	99.385	0.008	0.150	1.124	-0.010	0.012	
		C-Se-C-C	259.249	0.165	0.081	0.421	-0.014	-19.500	
C19H16SeO2	TIFZEN	Se-C	1.929	-0.002	-0.006	-0.004	-0.009	-0.002	a
		C-C-Se	118.342	0.008	0.007	0.009	-0.087	-1.779	
		C-Se	1.912	-0.001	-0.006	-0.002	-0.001	0.009	
		C-Se-C	101.276	-0.091	-0.103	0.123	-0.424	-1.397	
C13N2H18SeO	TIQSIV	Se-C	1.840	-0.010	-0.003	-0.013	-0.010	0.020	a
		N-C-Se	122.942	-0.574	-0.175	-0.661	0.731	1.776	
		C-C-Se	118.156	-0.571	-0.159	-0.663	-0.572	-2.038	
		C-N-C-Se	354.427	0.560	0.009	0.535	0.542	0.946	
C11NH12SeBrO	TIQSOB	Se-C	1.824	-0.003	-0.009	-0.013	-0.001	0.029	a
		N-C-Se	125.291	-0.168	-0.545	-0.495	1.881	0.446	
		C-C-Se	116.973	-0.141	-0.478	-0.390	-0.519	-2.148	
		C-N-C-Se	4.220	-0.040	-0.015	-0.029	-0.046	-0.802	
C3H6Se3	TRSELE	Se-C	1.969	-0.011	-0.011	-0.011	-0.019	-0.016	a
		Se-C-Se	114.516	-1.013	-0.134	-0.506	0.444	6.661	
		C-Se	1.944	-0.009	-0.009	-0.012	0.010	0.008	
		C-Se-C	96.738	0.542	-0.107	-0.486	0.444	2.251	
		C-Se-C-Se	69.298	-0.575	-1.054	-0.697	-0.476	-9.393	
		Se-C-Se	114.516	-0.861	-0.308	-0.662	0.513	6.819	
		Se-C-Se-C	290.702	-0.554	0.054	0.483	-0.451	10.274	
		C-Se	1.948	0.011	-0.014	-0.018	0.019	0.005	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C14PN2H17Se2O	UBUCEZ	P-Se	2.247	-0.030	0.007	0.011	0.014	0.008	a
		C-Se	1.933	-0.001	0.000	-0.014	0.011	0.034	
		C-Se-P	95.259	1.735	1.164	0.978	-0.520	0.421	
		C-C-Se	120.388	-0.017	-0.014	2.223	-0.442	0.206	
		C-C-Se-P	282.416	-0.111	-0.002	-0.550	0.452	-2.148	
C18P2NH25SeO3	UCOFOH	Se-P	2.081	-0.025	-0.011	0.012	0.010	-0.012	a
		N-P-Se	114.553	0.501	-1.029	-0.675	0.849	-0.250	
		Se-P-N-P	8.003	0.716	0.705	0.710	1.122	23.445	
		C-P-Se	112.874	0.605	-0.720	0.941	0.628	4.588	
C15P2H16Se3	UCUTAN	Se-P	2.089	-0.015	-0.012	-0.010	-0.025	-0.022	a
		Se-P-Se	118.060	-0.737	-0.692	0.735	-0.491	3.067	
		P-Se	2.274	-0.010	-0.015	0.009	0.012	0.052	
		P-Se-P	75.999	-0.538	-0.833	0.585	0.736	8.878	
		P-Se-P-Se	259.340	0.515	0.607	0.564	-1.875	-20.468	
C8H8Se4	UFOVAM	Se-C	1.976	0.000	-0.005	0.002	0.001	0.010	a
C10H12Se4	UFOVEQ	Se-C	1.821	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.027	a
		C-C-Se	175.644	0.000	-0.085	-0.055	0.000	3.364	
		C-Se	1.831	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.038	
		C-C-Se	175.443	0.000	0.647	0.299	0.000	3.107	
		C-C-Se-Se	58.756	0.000	0.006	0.010	0.000	-67.724	
		C-Se	1.959	0.000	0.000	0.000	0.000	0.017	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C11H14Se4	UFOVIU	Se-C	1.827	-0.003	-0.010	-0.006	-0.001	-0.035	a
		Se-C-C	176.733	-0.058	-0.038	-0.201	-0.009	1.831	
		Se-C	1.830	-0.004	-0.002	-0.005	-0.001	-0.039	
		Se-C-C	177.929	0.160	0.006	0.029	-0.011	2.065	
		Se-C-C-Se	225.204	0.022	-0.004	-0.013	0.008	-3.165	
		Se-C	1.984	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.004	
C22H16Se2Br2	UGOHED	Se-Se	2.336	0.008	0.016	0.013	0.021	0.133	a
		Se-C	1.922	-0.006	-0.015	-0.018	-0.002	-0.008	
		C-Se-Se	101.352	-0.910	-0.525	-0.752	-0.047	-3.422	
		C-C-Se	120.294	0.000	-0.034	-0.040	-0.013	1.861	
		C-C-Se-Se	264.779	0.045	-0.095	0.020	-0.039	7.960	
		Se-C	1.926	-0.004	-0.013	-0.016	-0.003	-0.012	
C22H16SeO	UHUYAX	Se-O	1.635	0.000	0.017	0.019	0.007	0.017	a
		C-Se	1.951	0.011	0.001	0.016	0.025	0.068	
		C-Se-O	102.060	-0.040	-0.017	-0.020	-0.027	-2.085	
		C-Se	1.969	0.006	0.000	0.012	0.021	0.052	
		C-Se-O	103.738	0.034	0.012	0.022	0.008	-2.085	
		C-C-Se	113.479	-0.034	-0.003	-0.020	0.293	-1.216	
C29P2NH23Se2	UKEFOF	Se-P	2.097	-0.030	-0.009	0.000	-0.011	-0.019	a
		C-P-Se	114.213	0.057	-1.064	-0.247	-0.105	1.538	
		C-P-Se	113.148	-1.710	-1.064	-0.257	-0.053	1.760	
		C-P-Se	114.430	0.079	-0.668	-0.181	0.146	3.130	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C17N2H26SeO4	UKUYUU	Se-C	1.911	0.017	0.021	-0.009	0.022	0.062	a
		Se-C	1.876	-0.011	-0.046	-0.084	-0.048	-0.043	
		C-Se-C	102.177	-0.647	-0.316	1.872	-1.306	-6.019	
		N-C-Se	125.931	-0.484	-0.139	-0.445	-0.449	0.229	
		N-C-Se-C	93.937	-0.549	-0.197	-0.450	-0.491	-5.802	
C22N4H17SeBrO2	ULEMON	Se-C	1.901	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.030	a
		Se-C-N	118.844	0.010	0.000	0.004	0.244	2.177	
		Se-C	1.953	0.000	0.000	0.000	0.000	0.057	
		C-Se-C	96.946	-0.006	0.001	-0.002	0.002	-0.590	
		C-Se-C-N	175.872	-0.003	-0.012	-0.002	-0.014	4.578	
		N-C-Se	109.367	-0.077	-0.040	-0.048	0.194	1.634	
C14P2H18SeO4	ULIJOO	Se-P	2.087	-0.015	-0.007	0.033	0.007	-0.020	a
		C-P-Se	115.293	0.547	0.037	-3.702	0.690	1.932	
		C-C-P-Se	225.836	-0.959	-0.599	-8.354	0.663	-94.123	
C14P2H18Se2O4	ULIKEF	Se-P	2.079	-0.056	-0.002	0.027	-0.015	-0.005	a
		C-P-Se	118.019	0.120	-0.441	-1.373	0.567	1.578	
		C-C-P-Se	67.313	-0.227	-0.002	0.073	-0.554	-48.771	
C14P2H18SeO5	ULIKOP	Se-P	2.074	-0.022	-0.010	0.011	-0.014	0.304	a
		C-P-Se	120.231	0.026	-0.574	-0.620	0.981	20.497	
		C-C-P-Se	290.738	0.245	0.574	1.245	1.083	-53.634	
C10NH7SeO2	UNUGAM	Se-C	1.891	0.010	0.010	0.010	0.010	0.081	a
		Se-C	1.832	0.010	0.010	0.010	0.010	0.050	
		C-Se-C	84.775	0.569	0.552	0.569	0.546	-1.323	
		C-C-Se	121.858	-0.687	-1.069	-0.782	0.550	0.145	
		C-C-Se-C	177.779	0.599	1.069	0.605	0.587	1.846	
		N-C-Se	114.076	0.569	0.543	0.560	0.549	-0.731	
		N-C-Se-C	359.704	0.560	0.619	-0.558	1.445	0.738	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	Ref.
C16H14SeO2	UPAGAU	Se-C	1.921	-0.010	-0.004	-0.011	-0.002	a
		C-C-Se	120.366	0.564	0.436	0.565	0.130	
		Se-C	1.918	-0.010	-0.013	-0.010	-0.004	
		C-Se-C	99.610	-0.567	-0.010	0.621	-0.233	
		C-Se-C-C	91.264	0.606	-0.091	-0.576	0.024	
		C-C-Se	124.154	-0.631	-0.008	0.568	-0.031	
		C-C-Se-C	344.287	0.605	0.280	0.575	0.389	
C25N2H26Se	UREFUT	Se-C	1.827	-0.003	-0.027	-0.008	0.017	a
		N-C-Se	126.663	-0.168	-0.138	-0.025	-0.138	
		N-C-Se	126.666	-0.141	-0.138	-0.025	-0.138	
		C-N-C-Se	180.093	-0.040	0.039	0.011	0.045	
C2SeS2O7F6	VADVOL	Se-O	1.903	-0.059	-0.012	-0.110	-0.110	a
		Se-O	1.571	-0.020	-0.006	0.022	0.017	
		O-Se-O	106.108	-3.358	-1.618	-1.207	0.101	
		Se-O	1.925	-0.015	-0.014	-0.110	-0.110	
		O-Se-O	84.401	3.358	3.200	3.246	2.017	
		S-O-Se	128.095	3.358	3.200	6.303	6.303	
		S-O-Se-O	338.562	-3.358	-3.200	-2.229	-2.400	
C10H4Se4	VAMZEO	Se-Se	2.335	0.003	0.016	0.028	0.020	a
		C-Se	1.891	-0.001	-0.010	-0.007	-0.003	
		C-Se-Se	91.515	-0.016	-0.282	-0.170	-0.012	
		C-C-Se	117.094	-0.005	-0.070	-0.078	-0.097	
		C-C-Se-Se	3.181	-0.031	-0.203	-0.315	-0.276	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C8N3H14Se	VAVSOB	Se-C	1.944	0.032	0.002	0.001	0.021	0.058	a
		N-C-Se	116.097	-0.678	-1.348	0.089	0.857	-0.476	
		N-C-Se	120.526	-0.878	-1.473	-5.730	0.939	2.182	
		C-Se	1.970	0.010	-0.014	0.010	-0.001	-0.012	
		C-Se-C	94.562	1.570	3.911	4.017	1.975	2.598	
		C-Se-C-N	55.720	3.876	-1.172	3.004	5.730	14.597	
C14H10Se3Cl4	VAWJOS	Se-Se	2.335	0.005	0.001	-0.003	0.010	0.077	a
		Se-Se	2.334	0.005	0.001	-0.003	0.009	0.075	
		Se-Se-Se	105.196	-1.280	-0.582	-0.205	0.515	6.612	
		C-Se	1.987	-0.001	-0.007	-0.007	-0.003	-0.022	
		C-Se-Se	100.600	-0.239	0.003	-0.160	0.482	3.988	
		C-Se-Se-Se	287.910	-0.097	-0.738	-0.426	-1.656	7.734	
C8H16Se4	VAXZID10	Se-C	1.945	0.000	0.000	0.000	0.002	0.006	a
		Se-C	1.942	0.002	0.000	-0.001	0.012	0.018	
		Se-C-Se	112.327	-0.472	-0.021	-0.057	0.087	6.577	
		C-Se	1.972	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.003	
		C-Se-C	97.131	0.007	-0.004	-0.004	0.040	1.501	
		C-Se-C-Se	198.814	-0.007	0.003	0.004	-0.036	28.057	
		Se-C	1.971	0.007	-0.002	0.000	0.011	-0.007	
C11N2H14SeBr	VAYBON	Se-C	1.903	0.009	0.000	0.000	0.007	0.084	a
		N-C-Se	121.832	-0.013	-0.026	-0.018	0.050	0.537	
		N-C-Se	119.229	-0.341	-0.563	-1.093	0.314	0.667	
		C-Se	1.965	0.003	-0.002	0.001	0.008	-0.012	
		C-Se-C	98.918	-0.005	-0.018	-0.005	0.039	-1.306	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10H20Se4	VAZRET	Se-C	1.963	0.001	-0.001	-0.001	0.002	0.010	a
		C-C-Se	114.572	-0.040	-0.009	-0.013	-0.094	-2.029	
		C-Se	1.958	0.001	0.000	0.000	0.002	0.016	
		Se-C-C	111.983	0.017	0.001	0.001	0.054	0.602	
		Se-C-C-Se	172.333	-0.019	-0.001	-0.001	-0.061	1.635	
		C-Se	1.961	0.001	0.000	0.000	0.002	0.002	
C22N2H14Se2	VEBMAQ	Se-C	1.905	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.019	a
		Se-C	1.905	0.000	-0.002	-0.003	0.000	0.019	
		Se-C-Se	111.640	0.000	0.000	0.000	0.000	2.946	
		C-Se	1.903	0.000	0.000	0.000	0.000	0.028	
		C-Se-C	95.318	0.000	-0.022	-0.012	0.005	-2.261	
		C-Se-C-Se	351.639	0.000	0.000	0.000	0.000	6.515	
C8P2H18Se4	VEMFOI	Se-P	2.097	-0.011	-0.041	-0.021	-0.052	-0.027	a
		Se-P	2.269	-0.011	-0.022	-0.019	0.013	0.092	
		Se-P-Se	115.802	0.613	0.769	0.782	-0.241	4.095	
		Se-P	2.269	-0.013	-0.011	-0.009	0.016	0.092	
		Se-P-Se	115.802	0.662	0.748	0.796	-0.353	4.088	
		P-Se	2.269	-0.011	0.013	0.019	0.060	0.092	
		P-Se-P	83.485	-0.763	5.140	6.123	0.832	5.671	
C19NH17SeO	VEPWES	Se-C	1.931	0.000	-0.004	0.000	0.000	-0.003	a
		C-C-Se	119.707	0.001	-1.053	-0.302	-0.009	-0.070	
		C-Se	1.928	-0.007	-0.012	-0.007	-0.005	-0.006	
		C-Se-C	98.155	-0.001	-0.008	0.168	0.007	-0.270	
		C-Se-C-C	335.117	0.001	0.007	0.001	-0.008	-16.996	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C19H24SeO5	VERQIS	Se-C	1.962	0.000	-0.001	-0.002	0.012	0.013	a
		Se-C-C	113.546	0.000	0.009	-0.002	0.076	-0.898	
		Se-C	1.905	0.000	-0.003	-0.004	0.000	0.018	
		C-Se-C	102.406	0.000	-0.084	0.204	-2.522	-6.450	
		C-Se-C-C	300.113	0.000	-0.010	-0.137	-0.072	-6.174	
		C-C-Se	123.792	0.000	-0.009	-0.145	-0.042	-2.907	
C17H26Se2	VEWFAE	C-Se	1.974	0.010	-0.005	-0.010	0.001	-0.030	a
		Se-C	1.967	-0.010	-0.006	-0.010	0.007	0.038	
		C-Se-C	99.748	0.584	-0.103	0.595	0.291	0.426	
		Se-C	1.961	-0.010	-0.011	-0.011	0.005	0.058	
		Se-C-Se	102.718	-0.555	-0.049	-0.571	-0.043	5.197	
		Se-C-Se-C	74.287	0.557	0.048	0.571	0.066	-5.130	
C24PH27SeO6	VIFJEZ	P-Se	2.135	-0.012	-0.012	-0.011	-0.010	0.016	a
		C-P-Se	106.239	0.573	-0.640	-0.595	0.580	10.317	
		C-C-P-Se	248.263	-0.593	-0.597	-0.588	-0.579	8.370	
C8H8Se2S3	VITLIT	Se-C	1.856	0.010	-0.009	-0.036	0.013	0.090	a
		Se-C	1.861	-0.010	-0.011	-0.009	-0.002	0.086	
		Se-C-Se	114.971	0.558	0.180	0.483	0.142	-3.206	
		Se-C	1.868	0.010	-0.002	0.010	0.012	0.052	
		C-Se-C	94.932	0.557	-0.278	0.462	0.201	-0.376	
		C-Se-C-Se	359.286	0.565	-0.042	0.483	0.249	1.458	
C9H14SeS2	VOBKOM	Se-C	1.774	-0.014	-0.030	-0.018	-0.010	-0.035	a
		C-C-Se	122.199	-1.085	0.047	-0.531	-0.552	-1.047	
		C-C-Se	122.199	-1.084	0.047	-0.531	-0.552	-1.061	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C7NH7SeO2	VONYED	Se-C	1.939	0.011	0.003	0.003	0.013	0.030	a
		Se-C	1.906	0.003	-0.032	0.000	0.009	0.034	
		C-Se-C	99.681	-0.191	-2.026	0.268	-0.895	-0.967	
		N-C-Se	112.950	-0.246	0.574	-0.138	1.320	-0.622	
		N-C-Se-C	180.000	-0.001	-0.001	0.000	0.449	0.053	
		C-C-Se	107.307	0.236	-0.180	-1.102	0.709	-0.149	
		C-C-Se-C	180.000	-0.001	-0.001	-0.001	-0.417	-0.299	
C15H14SeO2	VONYIH	Se-C	1.982	0.010	-0.003	-0.008	0.008	0.016	a
		Se-C	1.951	0.016	0.000	0.003	0.009	0.011	
		C-Se-C	98.586	0.280	-0.046	0.906	-0.761	0.049	
		C-C-Se	111.934	-5.730	-1.499	-2.405	0.617	-2.192	
		C-C-Se-C	53.702	3.434	0.421	1.429	0.572	8.830	
		C-C-Se	106.022	-5.730	-0.978	-1.858	0.657	1.527	
		C-C-Se-C	181.934	-5.730	-0.183	-2.405	-0.584	5.367	
C6NH4Se2	VOYYUD	Se-N	1.740	-0.005	-0.005	0.004	0.002	-0.031	a
		N-Se	1.723	-0.002	-0.021	0.003	0.006	-0.014	
		Se-N-Se	118.085	0.152	0.750	0.748	0.130	9.734	
		C-Se	1.858	0.001	-0.001	0.000	0.002	0.080	
		C-Se-N	96.013	0.051	-0.037	-0.005	0.059	-5.553	
		C-Se-N-Se	1.392	0.023	0.010	0.029	0.018	-1.394	
C25P2H20Se2	VUNSOM	Se-P	2.080	-0.020	-0.014	-0.005	-0.018	-0.030	a
		Se-P	2.079	-0.020	-0.012	-0.002	-0.020	0.009	
		Se-P-Se	124.499	0.921	0.749	0.816	-0.742	8.632	
		C-P-Se	117.098	0.706	0.777	0.816	-0.808	1.003	
		P-C-P-Se	6.726	-0.712	-0.640	-0.250	0.596	0.520	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C9PNH16SeS2O	VUPYOU	Se-C	1.938	-0.009	-0.012	0.009	0.013	0.111	a
		Se-C	1.890	0.014	0.012	0.018	0.024	0.072	
		C-Se-C	91.363	-0.574	-0.716	0.537	0.570	-0.333	
		N-C-Se	118.585	-0.573	-0.706	0.531	0.709	-1.317	
		N-C-Se-C	357.005	0.577	0.599	-0.562	-0.464	2.862	
		P-N-C-Se	358.704	0.693	0.595	-0.584	-0.459	2.536	
C13N3H11Se	VUTNOO	Se-C	1.953	0.006	0.005	0.003	0.014	0.058	a
		Se-C	1.916	-0.006	-0.003	-0.006	0.008	0.001	
		C-Se-C	97.409	0.214	0.536	0.627	-0.534	1.599	
		N-C-Se	114.495	-1.005	-0.008	0.025	0.873	2.094	
		N-C-Se-C	294.263	-0.266	-0.158	-0.279	-0.962	37.760	
		C-N-C-se	97.950	-0.049	-0.048	-0.036	-0.548	-15.671	
C6H12SeO3	VUZHON	Se-O	1.611	-0.013	0.011	0.026	0.004	0.004	a
		O-Se	1.789	0.009	0.011	0.006	0.004	0.011	
		O-Se-O	102.528	-1.027	-0.578	0.112	0.019	-2.544	
		O-Se	1.777	0.009	0.010	0.008	0.007	0.018	
		O-Se-O	106.960	-0.445	-0.554	-0.186	-0.259	-4.138	
		O-Se-O-O	92.997	0.424	0.551	0.264	0.247	-2.981	
C17NH20Se2	WACZEG	Se-C	1.915	-0.001	-0.005	-0.012	0.009	0.022	a
		Se-C-C	120.047	-0.331	-0.412	-1.443	0.995	3.289	
		Se-C	1.878	0.003	-0.009	-0.010	0.010	0.021	
		Se-C-C	122.836	-0.435	-0.921	-1.515	0.648	4.955	
		Se-C-C-Se	359.302	0.022	-0.079	-0.645	-0.611	-2.668	
		Se-C	1.922	-0.001	-0.012	-0.011	0.009	0.000	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6NH4Se2	WALNAY	Se-N	1.740	-0.005	-0.005	0.004	0.002	-0.031	a
		Se-N	1.723	-0.002	-0.021	0.003	0.006	-0.014	
		Se-N-Se	118.085	0.152	0.750	0.748	0.130	9.734	
		C-Se	1.858	0.001	-0.001	0.000	0.002	0.080	
		C-Se-N	96.013	0.051	-0.037	-0.005	0.059	-5.553	
		C-Se-N-Se	1.392	0.023	0.010	0.029	0.018	-1.394	
C18H18SeO2	WAMBAO	Se-C	1.929	-0.002	1.929	-0.010	-0.006	0.006	a
		C-C-Se	121.090	-0.065	121.090	-0.062	-0.015	-0.003	
		C-Se	1.918	-0.002	1.918	-0.005	0.000	0.003	
		C-Se-C	99.099	-0.037	99.099	1.216	-0.047	-1.210	
		C-Se-C-C	283.212	0.018	283.212	0.014	0.025	15.313	
C5H6SeS3O2	WANCOD	Se-C	1.795	-0.030	-0.046	-0.022	0.009	0.045	a
		P-C-Se	122.102	0.465	0.504	-0.520	1.103	3.268	
		P-C-Se	122.205	0.463	0.505	-0.521	1.183	3.486	
		C-P-C-Se	15.139	1.741	2.071	-0.487	0.563	-7.543	
C18H13SeBr	WARJIK	Se-C	1.943	0.000	-0.011	-0.002	-0.013	-0.012	a
		Se-C	1.925	0.000	-0.005	-0.001	-0.001	-0.002	
		C-Se-C	98.517	0.006	0.139	0.098	0.156	1.007	
		C-C-Se	121.321	-0.129	-0.050	-0.044	-0.045	6.220	
		C-C-Se-C	159.908	0.000	0.073	0.006	0.124	-95.912	
		C-C-Se	120.227	-0.001	-0.013	-0.004	-0.017	-3.989	
		C-C-Se-C	95.860	0.015	-0.004	-0.004	0.382	101.439	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C24H18SeS	WARLAE	Se-C	1.953	-0.007	-0.018	-0.016	-0.012	-0.011	a
		C-C-Se	119.205	0.048	0.055	0.575	0.000	-11.306	
		C-Se	1.921	-0.001	-0.002	-0.010	-0.001	-0.001	
		C-Se-C	97.742	0.045	0.162	0.855	0.398	1.692	
		C-Se-C-C	336.285	0.069	0.089	0.576	0.018	-77.523	
		C-C-Se	120.973	0.009	0.013	0.515	0.010	1.930	
		C-C-Se-C	277.920	0.009	-0.050	-0.566	0.035	99.515	
C20NH25SeO	WARLEG	Se-N	1.819	0.001	1.794	0.005	-0.010	0.027	a
		Se-N-C	120.753	0.610	120.861	-1.208	-0.720	-2.510	
		C-C-N-Se	357.750	0.265	357.942	0.271	0.597	2.241	
		Se-C	1.927	-0.001	1.910	-0.003	-0.011	0.025	
C11N2H20Se	WASXUJ	Se-N	1.853	0.013	-0.021	-0.027	0.009	0.033	a
		N-C-Se	126.789	-0.412	-0.495	-0.466	-0.417	-0.047	
		N-C-Se	126.824	-0.412	-0.494	-0.466	-0.417	-0.127	
		C-N-C-Se	180.179	0.381	-0.389	0.445	0.368	-0.304	
C14N2H22SeS2	WATTER	Se-S	2.246	0.032	0.010	-0.022	0.013	2.022	a
		C-S-Se	106.756	-1.824	-0.636	-0.802	0.878	14.729	
		S-C-S-Se	12.456	-2.019	-0.582	-0.431	-0.515	-50.418	
		N-C-S-Se	190.243	1.473	0.573	0.334	0.614	-49.218	
C12N2H18SeS2	WATTOB	Se-S	2.266	0.009	-0.001	-0.017	0.014	3.346	a
		C-S-Se	106.457	-1.054	-0.148	-1.060	1.113	-0.299	
		S-C-S-Se	334.248	-0.515	0.049	0.601	-0.852	26.328	
		C-Se	1.930	-0.009	-0.010	-0.009	-0.021	-0.031	
		C-Se-S	100.154	0.504	-0.010	0.517	-0.514	-17.769	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16H8Se2S2	WECVEG	Se-C	1.912	-0.004	-0.014	-0.001	-0.001	-0.001	a
		C-C-Se	122.646	0.042	0.276	-0.016	-0.017	4.903	
		Se-C	1.897	-0.007	-0.042	-0.009	0.007	0.053	
		Se-C-C	125.741	-0.064	-0.327	-0.024	-0.024	-3.045	
		Se-C-C-Se	1.235	0.105	0.435	0.026	0.025	0.138	
		Se-C	1.897	-0.006	-0.019	-0.001	0.003	0.053	
C16H8Se2S2	WECVIK	Se-C	1.907	-0.003	-0.015	-0.016	0.000	0.005	a
		Se-C-C	122.488	0.033	0.096	-0.052	-0.009	4.568	
		Se-C	1.904	-0.003	-0.007	-0.002	0.005	0.046	
		Se-C-C	125.417	-0.054	-0.170	-0.065	-0.026	-2.410	
		Se-C-C-Se	2.251	0.053	0.144	0.079	0.030	-1.005	
		Se-C	1.892	-0.002	-0.006	-0.002	0.009	0.058	
C16PH19Se	WEGSAD	P-Se	2.108	-0.029	-0.015	0.000	-0.024	-0.021	a
		C-P-Se	113.797	0.626	-0.552	0.059	0.609	2.618	
		C-C-P-Se	303.966	-0.470	0.538	0.251	-0.741	0.789	
C25H32SeO3	WELDUM	Se-C	2.012	-0.004	-0.004	-0.011	-0.004	-0.001	a
		Se-C	1.921	-0.006	-0.021	-0.017	-0.001	-0.002	
		C-Se-C	102.860	-0.042	-0.027	0.348	-0.493	-1.013	
		C-C-Se	120.676	-0.075	-0.013	-0.098	-0.028	0.879	
		C-C-Se-C	98.912	-0.388	0.029	-0.024	-0.566	-36.881	
		C-C-Se	103.691	-0.116	-0.716	-0.319	-0.017	0.433	
C6N2H4Se	WERYAT	Se-C	1.863	-0.055	-0.080	-0.059	-0.023	-0.016	a
		N-C-Se	175.224	2.598	2.494	2.172	3.018	3.692	
		C-Se	1.929	-0.026	-0.052	-0.041	-0.014	-0.014	
		C-Se-C	94.747	2.673	2.658	5.730	2.889	2.252	
		C-Se-C-N	174.604	0.000	0.000	0.001	-0.005	-26.174	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C3N2H8Se	WIFKIF	Se-C	1.866	0.038	-0.020	-0.059	0.017	0.055	a
		N-C-Se	116.849	-1.308	-1.639	2.172	-0.314	0.552	
		N-C-Se	124.570	-1.390	-1.862	-0.041	-0.460	-0.673	
		N-C-Se-N	179.249	0.465	0.364	5.730	0.364	0.740	
C11N2H13SeS	WIRSIZ	Se-S	2.189	0.042	0.011	0.044	0.040	0.640	a
		N-S-Se	68.065	0.984	-0.027	0.166	0.585	-5.415	
		N-N-S-Se	180.861	0.020	0.009	0.035	0.420	-0.821	
C19N3H21SeO	WIWBIN	Se-C	1.857	0.010	-0.007	-0.012	0.003	0.054	a
		N-C-Se	121.288	-0.578	-0.496	-0.296	-0.045	1.009	
		N-C-Se	122.298	-0.578	-0.525	-0.365	0.314	0.380	
		C-N-C-Se	51.695	-0.609	-0.583	-1.517	-0.435	-0.050	
C23N3H17SeO3	WIWBOT	Se-C	1.889	0.002	0.001	0.001	0.006	0.090	a
		N-C-Se	115.700	0.011	-0.703	-0.466	0.037	-2.418	
		C-N-C-Se	0.072	0.045	0.036	-0.395	0.267	-0.052	
C22N2H22SeO2	WIWBUZ	Se-C	1.908	0.004	0.002	0.004	0.008	0.076	a
		Se-C-N	114.617	0.015	-0.107	-0.106	0.038	-1.249	
		C-N-C-Se	359.863	0.069	0.109	0.091	0.197	-1.257	
C17NH21SeO3	WONQOF	Se-C	1.833	-0.009	-0.005	-0.013	-0.012	-0.005	a
		N-C-Se	132.762	-0.510	-0.027	-0.524	-0.544	5.709	
		O-C-Se	118.080	-0.504	-0.023	-0.495	-0.550	-7.417	
C24NH29SeO5	WONQUL	Se-C	1.795	-0.009	-0.001	0.010	0.015	0.031	a
		Se-C-N	132.828	-0.553	-0.053	-1.032	-0.495	5.754	
		Se-C-O	118.184	-0.555	-0.097	-0.563	-0.502	-7.525	
		C-N-C-Se	170.753	0.611	0.778	0.710	-0.464	8.128	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C15P3H27Se3	WOQSAW	Se-P	2.087	-0.025	-0.023	-0.011	-0.024	-0.051	a
		Se-P	2.270	-0.010	-0.016	0.010	0.012	0.082	
		Se-P-Se	119.530	0.551	0.531	-0.559	-0.635	6.590	
		P-Se	2.303	0.030	-0.020	0.014	-0.012	0.052	
		P-Se-P	70.807	-0.454	-0.945	0.583	0.680	3.984	
		P-Se-P-Se	202.565	-0.469	-0.506	0.558	0.521	-2.837	
C7H5Se2	WOYJUP	Se-C	1.828	-0.012	-0.009	-0.038	-0.002	-0.012	a
		Se-C	1.831	-0.014	-0.011	-0.042	-0.003	-0.015	
		Se-C-Se	124.287	0.524	0.115	1.410	1.452	8.088	
		C-C-Se	117.987	-0.105	-0.070	-0.145	-0.273	-4.248	
		C-C-C-Se	132.582	-0.160	-0.101	0.010	-0.479	-42.646	
C21H20SeO	WUBFOO	Se-C	1.928	-0.005	-0.016	-0.012	-0.006	-0.005	a
		Se-C	1.978	0.002	-0.008	-0.008	0.004	0.007	
		C-Se-C	103.844	-0.055	0.275	0.449	-1.357	-3.124	
		C-C-Se	105.757	-0.034	-0.050	-0.054	-0.041	0.727	
		C-C-Se-C	159.004	-0.038	-0.030	-0.033	-0.049	-3.660	
C18H20SeO2	WUBFUU	Se-C	1.924	-0.001	-0.004	-0.008	-0.008	0.001	a
		Se-C	1.984	0.000	-0.004	-0.014	0.001	0.010	
		C-Se-C	99.128	-0.240	-0.185	0.251	-1.038	-0.982	
		C-C-Se	112.722	-0.014	0.001	0.223	0.425	-5.485	
		C-C-S-C	56.743	-0.008	0.003	-0.031	-0.036	90.529	
		C-C-Se	119.011	0.015	0.016	-0.039	0.062	2.307	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C28H24SeSO3	WUDSAP01	Se-C	1.911	-0.010	-0.011	-0.012	0.010	0.015	a
		Se-C	1.917	-0.010	-0.011	-0.010	0.009	0.044	
		C-Se-C	100.562	-0.573	0.829	1.237	-0.530	-1.718	
		C-C-Se	124.800	-0.584	-0.759	-1.308	0.767	2.377	
		C-C-Se-C	188.350	0.639	0.902	1.099	0.601	10.205	
		C-C-Se	121.104	-0.565	-0.516	-0.488	-0.496	-1.649	
C22H18Se	YAHSIK	Se-C	1.928	-0.001	-0.001	-0.001	-0.010	0.006	a
		C-C-Se	120.830	0.106	0.302	0.299	1.739	0.380	
		C-C-C-Se	359.940	0.008	-0.018	0.004	1.359	0.006	
SeF5	YALROS	Se-F	1.707	-0.018	0.014	0.029	0.018	0.023	a
		Se-F	1.829	-0.056	-0.039	-0.036	-0.063	-0.040	
		F-Se-F	83.423	-4.301	2.043	-2.051	-6.303	1.030	
		Se-F	1.845	-0.058	-0.050	-0.052	-0.078	-0.054	
		F-Se-F	83.761	-6.303	1.565	-5.328	-6.303	0.982	
		F-Se-F-F	89.878	0.000	0.000	0.000	0.000	0.140	
C18N2H26SeOF2	YAPHED	Se-C	1.842	0.006	-0.029	-0.042	0.011	0.073	a
		Se-C-N	118.689	-0.403	-1.832	-1.120	-0.554	2.231	
		Se-C-N	125.147	-0.470	-2.218	-1.583	-0.518	-1.666	
		C-N-C-Se	294.144	0.455	1.224	1.979	0.939	25.409	
C16H16SeO4	YARNAG	Se-C	1.889	0.000	0.000	0.010	0.010	0.022	a
		Se-C	1.893	0.000	0.000	0.010	0.010	0.018	
		C-Se-C	85.231	0.010	0.608	0.553	0.566	0.455	
		C-C-Se	113.621	0.008	0.000	0.549	0.582	-0.424	
		C-C-Se-C	1.319	-0.029	-0.050	-0.559	-0.590	-1.289	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
SeO3	YASHAC	Se-O	1.674	0.060	0.110	0.082	0.030	0.065	a
		O-Se	1.705	0.040	0.098	0.057	0.004	0.034	
		O-Se-O	103.289	1.299	0.806	3.757	1.899	3.834	
		O-Se	1.683	0.055	0.110	0.077	0.023	0.056	
		O-Se-O	104.514	0.607	0.075	3.351	1.260	2.594	
		O-Se-O-O	105.594	4.824	3.847	6.303	5.621	9.045	
C12H6Se2	YATYOH	Se-C	1.910	0.005	0.000	0.000	0.001	0.030	a
		Se-C	1.929	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.011	
		C-Se-C	88.700	-0.011	0.004	-0.005	0.027	0.560	
		C-C-Se	107.884	-0.017	-0.030	-0.013	-0.050	-0.173	
		C-C-Se-C	0.970	0.001	0.001	0.001	0.003	-0.969	
C20H28Se2O2	YAZPOE10	Se-C	1.962	-0.004	-0.011	-0.013	0.010	0.028	a
		Se-C	2.001	-0.011	-0.011	-0.012	-0.010	-0.010	
		C-Se-C	86.945	-0.468	-0.590	-0.623	-0.542	-3.289	
		Se-C	1.954	0.010	-0.010	-0.014	0.013	0.036	
		Se-C-Se	93.232	-0.320	-0.578	-0.633	-0.525	3.092	
		Se-C-Se-C	354.541	-0.091	-0.677	-0.712	0.556	6.955	
C9PH21Se	YEBWEI	Se-P	2.124	-0.110	-0.049	-0.014	-0.110	-0.025	a
		C-P-Se	110.987	0.337	-1.086	0.182	1.324	2.606	
		C-P-Se	111.347	0.311	-0.615	0.372	1.944	4.511	
		C-P-Se	110.987	0.197	-0.764	0.178	1.418	2.468	
C18P2H4SeF18	YEDCEP	Se-P	2.257	-0.044	-0.046	0.010	0.011	0.066	a
		P-P-Se	60.258	-3.103	-1.403	0.589	0.564	1.551	
		C-P-P-Se	92.582	0.976	1.401	0.620	0.571	16.061	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C16H24Se4	YERHEI	Se-Se	2.348	0.009	0.009	0.009	0.010	0.091	a
		C-Se	1.913	0.023	-0.009	-0.010	0.028	0.009	
		Se-Se-C	105.883	-0.522	-0.542	-0.539	-0.524	-5.697	
		C-C-Se	122.755	-0.531	-0.554	-0.556	-0.519	-11.713	
		C-C-Se-Se	107.777	-0.494	-0.529	-0.512	-0.505	4.729	
		Se-C	1.962	-0.009	-0.010	-0.010	-0.009	-0.025	
C7NH10Se	YERJAG	Se-C	1.964	0.011	-0.010	-0.009	0.010	-0.010	a
		C-C-Se	109.210	0.557	-0.588	-0.640	0.663	3.020	
		N-C-C-Se	171.543	0.569	0.576	0.580	0.590	6.667	
C5N2H8Se	YEWPOF	Se-C	1.844	0.016	-0.021	-0.023	0.011	0.034	a
		N-C-Se	126.639	-0.490	-0.514	-0.501	-0.477	0.775	
		N-C-Se	126.614	-0.490	-0.513	-0.501	-0.477	0.739	
		C-N-C-Se	180.000	0.340	0.328	-0.355	0.338	0.022	
C8NH7SeSI	YEYFUD	I-Se	2.565	-0.008	-0.010	-0.008	-0.002	-0.374	a
		C-Se	1.879	0.003	-0.006	-0.001	0.002	0.149	
		C-Se-I	97.747	-0.312	-0.548	1.112	-1.119	4.944	
		S-C-Se	124.552	0.075	0.038	-0.025	0.001	5.850	
		S-C-Se-I	7.670	-0.008	-0.036	-0.001	0.432	1.849	
		N-C-Se	122.637	0.080	0.041	-0.076	0.010	-3.536	
C18N2H10SeCl2O	YIBYIR	Se-C	1.957	-0.003	-0.004	-0.004	0.016	0.020	a
		Se-O	1.648	-0.003	0.007	0.005	0.586	0.005	
		C-Se-O	100.774	0.098	-0.241	0.711	0.009	-4.711	
		Se-C	1.942	-0.002	-0.002	-0.003	0.556	0.027	
		C-Se-C	95.745	0.058	0.580	0.711	-0.506	-1.907	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3 E PM6 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C6N3H2Se2O	YIFHUQ	Se-Se	2.316	0.010	0.010	0.000	0.010	0.199	a
		N-Se	1.771	-0.009	-0.008	0.000	0.016	0.014	
		N-Se-Se	91.566	0.598	0.532	0.151	0.586	-3.128	
		N-Se	1.777	0.010	-0.020	0.001	0.009	-0.006	
		N-Se-Se	90.158	0.559	0.511	0.071	0.556	-3.081	
		N-Se-Se-N	0.000	0.535	0.983	0.013	-0.506	0.691	
C24H16Se2S	YIHFAW	Se-C	1.937	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.005	a
		Se-C	1.938	-0.004	-0.005	-0.006	-0.002	-0.006	
		C-Se-C	96.883	-0.136	0.967	0.673	0.041	0.232	
		C-C-Se	124.325	-0.007	-0.010	-0.020	-0.006	-0.806	
		C-C-Se-C	244.871	0.043	0.072	0.194	0.486	-16.649	
		C-C-Se	117.186	-0.010	-0.018	-0.018	-0.010	0.430	
C24H16SeS2	YIHGEB	Se-C	1.875	0.000	0.000	0.000	0.003	0.038	a
		Se-C	1.897	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.015	
		C-Se-C	86.666	-0.055	-0.006	-0.012	-0.005	-0.111	
		C-C-Se	113.439	0.032	0.000	-0.475	-0.083	-1.572	
		C-C-Se-C	356.839	-0.046	0.150	0.353	0.284	-2.275	
		C-C-Se	112.507	-0.180	-0.003	-0.009	-0.003	-0.711	
C12N2H12Se2	WUMFIT	Se-Se	0.018	0.009	0.018	0.012	0.015	0.164	a
		C-Se	-0.015	0.000	-0.015	-0.012	0.010	0.007	
		C-Se-Se	-1.066	-0.900	-1.066	-0.463	0.526	-8.481	
		C-Se	-0.010	0.000	-0.010	-0.004	0.011	0.007	
		C-Se-Se	-0.958	-0.685	-0.958	-0.591	0.547	-8.357	
		C-Se-Se-C	-0.542	0.194	-0.542	-0.601	0.714	49.533	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C26H16Se2O2	WUMFUF	Se-C	1.920	-0.001	-0.005	-0.003	-0.003	0.003	a
		Se-C	1.924	-0.001	-0.003	-0.004	0.000	0.018	
		C-Se-C	98.469	0.621	0.833	0.751	1.207	-1.433	
		C-Se-C	121.504	-0.009	-0.020	-0.031	-0.038	-8.158	
		C-C-Se-C	187.174	-0.038	0.011	0.001	-0.016	-7.138	
C27H20Se2O	WUMGAM	Se-C	1.931	-0.001	-0.003	-0.005	-0.002	-0.006	a
		Se-C	1.921	0.000	-0.001	-0.003	0.000	0.014	
		C-Se-C	99.246	-0.011	0.028	0.238	0.004	-0.839	
		C-C-Se	120.290	0.001	0.001	0.002	0.267	5.418	
		C-C-Se-C	13.715	0.000	-0.001	0.211	-0.070	-7.617	
C26H18Se2	WUMGEQ	Se-C	1.922	-0.002	-0.005	-0.006	0.000	0.008	a
		C-C-Se	121.148	0.002	0.001	0.002	0.001	-0.597	
		C-C-Se	117.439	0.002	0.001	0.002	0.001	0.444	
		C-C-Se	100.263	-0.019	0.269	0.690	-0.017	-0.949	
C21H18SeSO2	WUNGER	Se-C	1.913	0.000	-0.006	-0.011	0.009	0.044	a
		Se-C	1.923	-0.005	-0.006	-0.033	-0.009	-0.001	
		C-Se-C	100.632	-0.369	0.891	5.730	-0.618	-5.390	
		C-C-Se	122.696	-0.318	-0.602	-5.730	0.885	6.432	
		C-C-Se	171.393	0.094	0.077	0.539	0.532	-45.289	
		S-C-C-Se	359.109	0.190	0.094	1.059	-0.583	-6.230	
C22PN2H26SeO5	WUTREI	Se-P	2.093	-0.100	-0.010	0.015	0.010	-0.016	a
		O-P-Se	118.470	0.373	-1.241	0.509	0.549	5.873	
		N-P-Se	112.279	-0.396	-0.582	-0.553	-0.538	-0.694	
		N-P-Se	112.115	-0.634	-0.609	-0.584	-0.561	-0.705	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
SeO4	WUYXIX	Se-O	1.616	0.050	0.110	0.110	0.070	0.098	a
		O-Se	1.607	0.057	0.110	0.110	0.077	0.108	
		O-Se-O	110.939	-0.565	-0.536	-0.258	-0.676	-1.458	
		O-Se	1.654	0.020	0.099	0.067	0.043	0.061	
		O-Se-O	109.630	-0.039	-0.034	-0.006	-0.061	-0.167	
		O-Se-O-O	121.462	-1.144	-1.128	-0.936	-1.222	-1.477	
C14N6H12Se4S4	XAKGUM	Se-Se	2.462	-0.013	-0.011	-0.016	0.012	0.144	a
		Se-N	1.811	-0.010	-0.012	0.009	-0.010	-0.114	
		N-Se-Se	87.930	0.654	0.645	0.561	0.883	14.327	
		N-Se	1.811	-0.010	-0.012	0.009	-0.010	-0.116	
		N-Se-Se	87.930	0.646	0.636	0.546	0.880	14.534	
		N-Se-Se-N	180.000	0.546	0.564	0.573	0.573	3.027	
C34P2H26Se	XANPOR	Se-P	2.121	-0.022	-0.054	-0.003	-0.088	-0.018	a
		C-P-Se	113.618	-0.016	-0.193	0.063	0.247	-1.830	
		C-P-Se	108.349	-0.016	-0.153	0.033	0.034	9.611	
		C-P-Se	119.080	0.011	0.057	-0.023	3.003	-6.386	
C35H28Se2	XARMOT	Se-C	1.912	0.002	-0.004	-0.003	0.004	0.014	a
		Se-C	1.897	-0.002	-0.007	-0.008	0.001	0.020	
		C-Se-C	99.013	0.239	0.669	0.631	0.123	-1.058	
		C-C-Se	122.840	0.058	0.020	-0.223	0.049	4.808	
		C-C-Se-C	259.640	0.029	0.085	-0.017	-0.083	13.787	
		Se-C	1.901	-0.004	-0.013	-0.011	0.000	0.009	
		Se-C-C	124.107	-0.037	-0.422	-1.374	0.511	2.910	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12N2H10Se2S	XASBID	Se-N	1.834	-0.001	-0.015	0.000	0.003	0.006	a
		Se-N-S	128.308	0.274	0.425	-0.663	0.702	31.565	
		N-S-N-Se	2.170	-0.093	-0.971	-0.124	-0.049	-2.030	
		Se-N	1.834	-0.001	-0.015	0.000	0.003	0.006	
		Se-N-S	128.331	0.279	0.436	-0.658	0.731	31.505	
		Se-N-S-Se	2.131	-0.132	-0.664	-0.122	-0.043	-2.107	
C18PH12SeCl3	XATXAS	Se-P	2.111	-0.029	-0.011	-0.012	-0.056	-0.036	a
		C-P-Se	113.852	0.060	-0.599	-0.839	-0.409	2.422	
		C-P-Se	113.853	0.056	-0.633	-1.149	-0.304	2.496	
C18N2H36Se2	XAWXID	Se-Se	2.357	0.011	0.003	-0.004	0.037	0.112	a
		N-Se	1.858	-0.011	-0.007	-0.021	0.000	0.013	
		N-Se-Se	105.127	0.561	-0.192	-1.603	-0.586	-2.993	
		C-N-Se	115.387	-0.548	-0.010	-0.200	-0.072	-0.418	
		C-N-Se-Se	261.553	-0.548	0.014	0.159	-0.104	-0.739	
C6H5Se	XAXSUK	Se-C	1.916	-0.011	-0.012	-0.007	-0.034	-0.023	a
		C-C-Se	121.791	-0.016	-0.563	-0.006	-0.525	-1.402	
		C-C-C-Se	183.315	-0.155	-0.632	-0.220	-0.566	-3.315	
C15N2H16SeO	XECLAT	Se-C	1.889	0.003	0.001	0.002	0.010	0.095	a
		Se-C	1.884	0.002	0.001	0.003	0.010	0.023	
		C-Se-C	83.833	0.091	0.049	0.107	0.507	-1.056	
		N-C-Se	115.405	0.064	-0.722	0.021	0.478	-2.129	
		N-C-Se-C	357.458	0.095	0.194	0.102	0.696	2.619	
		N-C-Se	122.897	-0.193	-0.517	-0.496	0.884	1.353	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C21PH21Se	XEFZOX	Se-P	2.085	-0.016	-0.012	0.003	-0.032	-0.005	a
		C-P-Se	113.298	0.277	-1.291	0.061	0.702	2.846	
C6H7SeO2	XEHHIB	Se-O	1.734	0.005	0.026	0.049	0.012	-0.011	a
		Se-O	1.733	0.005	0.032	0.048	0.012	-0.027	
		O-Se-O	98.441	-0.622	-1.658	1.492	-0.449	-0.486	
		C-Se	1.917	-0.001	-0.014	0.022	0.009	0.014	
		C-Se-C	94.800	0.624	1.903	4.487	1.207	-1.834	
		C-C-Se	118.863	0.664	-0.005	-0.022	-0.022	1.804	
		C-C-Se-O	129.829	-0.062	-0.053	-0.156	-0.073	-17.006	
C18NH19SeO	XEHNEE	Se-C	1.920	0.025	0.000	-0.009	0.029	0.048	a
		N-C-Se	127.757	0.086	-0.099	-0.070	0.203	0.422	
		C-N-C-Se	356.871	-0.153	-0.153	-0.756	-0.595	0.544	
C25NH15SeOF12	XEVDEH	Se-O	2.008	-0.001	-0.010	-0.019	-0.040	-0.136	a
		Se-N	1.974	-0.002	-0.014	-0.008	-0.005	0.029	
		O-Se-N	158.762	-0.028	0.552	0.489	0.072	-0.278	
		Se-C	1.990	0.020	0.015	0.013	0.015	0.078	
		Se-C-O	91.377	0.042	0.561	0.049	-0.030	-0.766	
		Se-C	1.923	0.000	-0.009	0.011	0.002	0.036	
		Se-C-O	82.841	-0.043	-0.540	-0.032	0.019	1.686	
C6H10SeO4	XEXPEV	Se-C	1.939	0.015	0.002	0.002	0.004	0.051	a
		C-C-Se	115.902	-0.546	-0.079	-1.222	-0.273	-2.917	
		O-C-C-Se	186.471	0.522	0.009	0.060	0.029	-7.003	
C7PH13Se	XIBVEJ	Se-P	2.110	-0.034	-0.043	-0.012	-0.037	-0.043	a
		Se-P-C	115.407	0.488	0.371	0.468	-1.745	2.600	
		Se-P-C	117.671	0.546	0.395	0.485	0.435	2.839	
		Se-P-C	119.743	0.651	0.427	0.512	0.704	2.664	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C12SeOF10	XIDWIQ	Se-O	1.643	-0.001	-0.001	0.000	-0.002	-0.006	a
		F-O-Se	92.349	-0.012	-0.031	-0.016	-0.033	2.256	
		F-F-O-Se	311.542	-0.037	-0.235	-0.044	-0.146	92.973	
C4H8SeO2	XIJTEP	Se-C	1.953	0.040	0.003	0.018	0.037	0.006	a
		C-Se	1.950	0.009	0.001	0.009	0.008	0.013	
		C-Se-C	89.342	0.461	0.034	0.507	0.410	0.448	
		C-C-Se	106.518	0.447	-0.385	0.462	0.411	2.467	
		C-C-Se-C	343.143	0.454	0.012	0.483	0.346	31.253	
		C-C-C-Se	40.091	0.450	0.016	0.487	0.383	-37.383	
		O-C-C-Se	281.051	0.802	-0.166	-0.617	-0.568	-35.790	
C4H8SeO3	XIJTIT	Se-O	1.679	-0.062	0.011	0.010	-0.011	-0.025	a
		C-Se	1.946	0.013	0.009	0.014	0.010	0.056	
		C-Se-O	103.792	-0.166	-0.505	-0.627	-0.540	-3.097	
		C-Se	1.946	0.110	0.016	0.010	0.021	0.060	
		C-Se-O	104.502	0.156	0.539	0.565	-0.527	-4.347	
		C-Se-O-C	92.538	0.315	0.505	0.934	0.542	-1.088	
		C-C-Se	107.400	0.180	0.490	-0.564	0.539	-0.180	
		C-C-Se-O	98.588	-0.306	-0.545	-0.566	-1.108	12.708	
C4H8Se2O2	XIJTOZ	Se-Se	2.311	0.017	0.050	0.033	0.004	0.127	a
		Se-C	1.945	0.020	-0.001	0.000	0.001	0.002	
		C-Se-Se	94.689	-0.554	-0.063	-0.011	0.016	1.134	
		Se-C	1.947	0.010	0.001	0.000	0.009	0.004	
		Se-Se-C	95.875	-0.557	-0.085	-0.015	0.007	-0.044	
		C-Se-Se-C	53.947	1.167	-0.033	0.828	0.019	-5.722	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C10N4H14Se	XOQBUA	Se-N	1.777	0.010	0.003	0.009	0.010	0.060	a
		N-Se	1.766	0.010	0.001	0.010	0.009	0.071	
		N-Se-N	94.052	0.533	0.060	0.522	0.526	-4.559	
		N-N-Se	164.514	0.524	0.034	0.523	0.516	1.936	
		N-N-Se-N	354.563	-0.525	-0.037	-0.518	-0.520	-16.636	
HSeO3	XORBUB	Se-O	1.769	0.024	0.061	0.022	0.012	-0.011	a
		O-Se	1.654	-0.066	0.009	-0.029	-0.006	0.097	
		O-Se-O	101.541	-0.171	1.920	3.594	0.247	-3.438	
		O-Se	1.663	-0.083	-0.003	-0.038	-0.022	-0.037	
		O-Se-O	96.487	2.468	1.207	5.905	0.783	2.266	
		O-Se-O-O	107.307	6.303	6.303	17.582	7.742	-5.960	
C16P2N4H38Se	XOTFUH	Se-P	2.117	-0.110	-0.049	-0.003	0.012	-0.051	a
		P-P-Se	122.647	-0.303	1.786	-1.510	0.432	4.037	
		N-P-Se	119.742	-0.382	-2.504	-0.690	-1.068	3.534	
		N-P-Se-P	309.597	3.233	1.821	-1.048	-1.372	-2.668	
C13PH13SeO	XOZZER	Se-P	2.119	-0.017	-0.011	-0.002	-0.100	-0.034	a
		C-P-Se	109.828	-0.022	-0.621	-0.134	-0.210	3.899	
		C-P-Se	112.892	0.168	-0.602	-0.146	0.692	4.244	
		C-P-Se	113.201	0.187	-0.617	-0.158	0.876	3.134	
C16H8Se4S4	XUGMAN	Se-C	1.906	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.034	a
		Se-C-S	120.821	0.000	0.185	0.002	0.010	12.394	
		C-C-Se	127.456	0.001	0.288	0.002	0.005	-9.992	
		C-Se	1.911	0.000	0.000	0.000	0.000	0.032	
		C-Se-C	98.770	-0.011	-0.049	-0.001	-0.010	-0.764	

Tabela 4 (continuação) – Geometria experimental (distância em Å, ângulos e diedros em graus) e erros para o RM1, AM1, PM3, PM6 e PM7 para as moléculas contendo o átomo de selênio.

Empírico	Nome Químico (em inglês)	Variável	Exp.	RM1	AM1	PM3	PM6	PM7	Ref.
C27H30Se6	XUGQOF	Se-C	1.949	0.000	0.000	0.000	0.000	0.037	a
		Se-C	1.808	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.021	
		C-Se-C	96.983	0.000	0.000	0.000	0.000	2.869	
		C-C-Se	178.195	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.156	
		C-C-Se-C	279.642	0.000	0.000	0.000	0.000	111.244	
		C-C-Se	116.720	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.831	
C12N2H12SeO	XUYPAI	Se-C	1.808	0.011	-0.014	-0.038	0.011	0.037	a
		N-C-Se	126.418	-0.248	-0.551	-0.275	-0.529	-0.815	
		N-C-Se	125.588	-0.239	-0.550	-0.277	-0.524	2.256	
C28N6H20Se2	YADMIA	Se-Se	2.289	0.004	0.010	0.003	0.011	0.124	a
		C-Se	1.938	0.000	-0.003	-0.002	0.004	0.004	
		C-Se-Se	102.963	-0.233	0.029	-0.178	0.378	2.360	
		Se-C	1.935	0.000	-0.001	0.000	0.006	0.008	
		C-Se-Se	103.285	0.018	0.272	0.051	0.389	1.906	
		C-Se-Se-C	268.624	-0.117	-0.410	-0.052	0.006	22.215	
C28N6H20Se3	YADMOG	Se-Se	2.324	0.004	0.003	0.001	0.004	0.091	a
		Se-Se	2.325	0.004	0.003	0.001	0.004	0.083	
		Se-C	103.520	-0.487	0.191	1.225	0.352	3.708	
		C-Se-Se	1.940	-0.002	-0.004	-0.017	0.002	0.010	
		C-Se-Se-C	102.888	-0.348	-0.190	-0.624	0.207	1.067	
		N-C-Se	1.303	0.013	0.029	0.014	0.024	0.024	
CN2HSe2	YAGLIB	Se-Se	2.328	0.008	0.010	-0.020	0.008	0.193	a
		N-Se	1.810	0.009	-0.014	0.010	0.007	-0.025	
		N-Se-Se	91.595	0.444	0.538	0.550	0.259	-4.128	
		N-Se	1.789	-0.009	-0.010	-0.010	-0.006	-0.003	
		N-Se-Se	91.579	0.392	-0.969	-1.014	0.113	-4.114	
		N-Se-Se-N	0.811	-0.659	-0.581	-0.583	-0.852	-0.813	

Código	Referências para a Geometria
a	Allen, F. H. research papers The Cambridge Structural Database : a quarter of a million crystal structures and rising research papers. 380–388 (2002).
c	M. D. Harmony, V. W. Laurie, R. L. Kuczkowsky, R. H. Schwendeman, D. A. Ramsay, F. J. Lovas, W. J. Lafferty, A. G. Maki, J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 3 (1979).
e	Structural Inorganic Chemistry", A. F. Wells, Clarendon Press, Oxford, 1984.
f	C. Aubauer, T. M. Klapoetke, and A. Schulz, J. Mol. Struct., 6, 76-85 (2000).
h	J. H. Callomon, E. Hirota, T. Iijima, K. Kuchitsu, W. J. Lafferty, ``Structure Data on Free Polyatomic Molecules," Landolt-Bornstein, New Series, Group II, Vol. 15, Springer, Berlin (1977).
i	K. P. Huber, G. Herzberg, ``Molecular Spectra and Molecular Structure," IV. ``Constants for Diatomic Molecules," Van Nostrand, Reinhold, New York, (1979).
j	J. Nakagawa, H. Okutani, M. Hayashi, J. Mol. Spectrosc., 94, 410 (1982).
k	J. H. Callomon, E. Hirota, K. Kuchitsu, W. J. Lafferty, A. G. Maki, C. S. Pote, ``Structure Data on Free Polyatomic Molecules," Landolt-Bornstein, New Series, Group II, Vol. 7, Springer, Berlin (1976).
l	E. H. Fink, K. D. Setzer, J. Mol. Spect., 125, 66 (1987).

Código	Referências para a Geometria
a	Allen, F. H. research papers The Cambridge Structural Database : a quarter of a million crystal structures and rising research papers. 380–388 (2002).
c	M. D. Harmony, V. W. Laurie, R. L. Kuczkowsky, R. H. Schwendeman, D. A. Ramsay, F. J. Lovas, W. J. Lafferty, A. G. Maki, J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 3 (1979).
e	Structural Inorganic Chemistry", A. F. Wells, Clarendon Press, Oxford, 1984.
f	C. Aubauer, T. M. Klapoetke, and A. Schulz, J. Mol. Struct., 6, 76-85 (2000).
h	J. H. Callomon, E. Hirota, T. Iijima, K. Kuchitsu, W. J. Lafferty, ``Structure Data on Free Polyatomic Molecules," Landolt-Bornstein, New Series, Group II, Vol. 15, Springer, Berlin (1977).
i	K. P. Huber, G. Herzberg, ``Molecular Spectra and Molecular Structure," IV. ``Constants for Diatomic Molecules," Van Nostrand, Reinhold, New York, (1979).
j	J. Nakagawa, H. Okutani, M. Hayashi, J. Mol. Spectrosc., 94, 410 (1982).
k	J. H. Callomon, E. Hirota, K. Kuchitsu, W. J. Lafferty, A. G. Maki, C. S. Pote, ``Structure Data on Free Polyatomic Molecules," Landolt-Bornstein, New Series, Group II, Vol. 7, Springer, Berlin (1976).
l	E. H. Fink, K. D. Setzer, J. Mol. Spect., 125, 66 (1987).