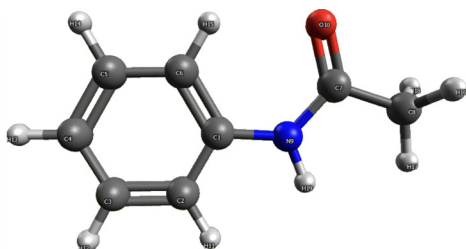


## Información de Soporte

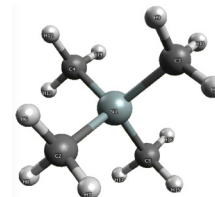
Un procedimiento para la obtención de los espectros IR, RAMAN y RMN de compuestos orgánicos mediante cálculos mecánico-cuánticos con el software ORCA-5.0.3

### Moléculas utilizadas en este estudio:

Acetaldehído, Acetato de etilo, Ácido acético, Ácido benzoico, Ácido fórmico, Anilina, Ciclohexanona, Etanol, Fenol, Formaldehído.



**FIGURA S1.** Estructura de la acetanilida optimizada usando el force field MMFF94 en el programa Avogadro-1.2.0.



**FIGURA S2.** Estructura de la molécula de tetrametilsilano optimizada con el programa Avogadro-1.2.0.

## Sección S1. Ejemplo de la entrada para la optimización de las geometrías moleculares usando el programa Orca-5.0.3

```
!B3LYP 6-31+G(d,p) OPT DEFGRID2 TIGHTSCF D3BJ PAL8
!geom
iter 200
end
* xyz 0 1
C      -0.30784      -0.03631      -0.18571
C      -0.99415      -0.08270      -1.40959
C      -2.36976      -0.28843      -1.44267
C      -3.08407      -0.45141      -0.25418
C      -2.40061      -0.40497       0.96054
C      -1.02103      -0.19940       1.01040
C       1.99835       0.26605       0.78811
C       3.43481       0.49751       0.34624
N       1.08695       0.17613      -0.23925
O       1.70514       0.16930       1.96990
H      -0.44454       0.04343      -2.34012
H      -2.88202      -0.32103      -2.39973
H      -4.15736      -0.61209      -0.27643
H      -2.94405      -0.53018       1.89268
H      -0.49557      -0.16382       1.95377
H       4.04718      -0.33523       0.70499
H       3.56209       0.59103      -0.73657
H       3.80389       1.40743       0.82821
H       1.46260       0.27469      -1.17059
*
```

*Nota:* Para realizar la optimización geométrica se utiliza la instrucción OPT. Luego, se debe especificar el funcional y el conjunto base a utilizar. En este cálculo fue usado el funcional B3LYP con el conjunto base 6-31+G(d,p). La instrucción PAL8 indica el número de núcleos del procesador a utilizar para ejecutar el cálculo. En este caso, PAL8 indica el uso de los 8 hilos de un procesador i7.

## Sección S2. Entrada en el programa ORCA para la obtención de los espectros Infrarrojos y Raman

```
# avogadro generated ORCA input file
# Basic Mode
#
! B3LYP 6-31+G(d,p) NumFreq DEFGRID2 TIGHTSCF D3BJ PAL8
%elprop Polar 1 end
* xyz 0 1
  C      -0.30663      -0.03507      -0.18989
  C      -0.99393      -0.08508      -1.41472
  C      -2.37155      -0.29068      -1.44429
  C      -3.08460      -0.45155      -0.25228
  C      -2.39790      -0.40285       0.96295
  C      -1.01668      -0.19623       1.01010
  C       1.99622       0.26412       0.78757
  C       3.43355       0.49757       0.34951
  N       1.08823       0.17849      -0.24425
  O       1.69766       0.16031       1.97212
  H      -0.44544       0.03925      -2.34620
  H      -2.88594      -0.32549      -2.40024
  H      -4.15815      -0.61184      -0.27216
  H      -2.93932      -0.52668       1.89654
  H      -0.48825      -0.15888       1.95187
  H       4.04434      -0.33834       0.70325
  H       3.56100       0.59819      -0.73249
  H       3.80201       1.40406       0.83796
  H       1.46537       0.28070      -1.17534
*
```

*Nota:* Si la convergencia no fue alcanzada, se sustituyen las coordenadas iniciales en el archivo de entrada \*.inp por las coordenadas xyz obtenidas del último paso de optimización contenidas en el archivo con extensión \*.out. Luego se reinicia el cálculo con estas nuevas coordenadas. Para más información sobre la sintaxis utilizada por Orca se puede consultar su [manual](#).

## Sección S3. Salida que muestra los valores obtenidos de los espectros Infrarrojos y Raman

### IR SPECTRUM

Mode	freq cm <sup>**</sup> -1	eps L/(mol*cm)	Int km/mol	T**2 a.u.	TX	TY	TZ
6:	46.97	0.000222	1.12	0.001474	( 0.008204	-0.037475	-0.001608)
7:	57.80	0.001355	6.85	0.007317	(-0.011598	0.084680	0.003378)
8:	97.90	0.000156	0.79	0.000497	( 0.003219	-0.021565	-0.004652)
9:	175.08	0.001355	6.85	0.002415	(-0.045458	-0.005932	-0.017714)
10:	259.35	0.000067	0.34	0.000080	( 0.001251	-0.008813	-0.000960)
11:	340.20	0.000332	1.68	0.000304	( 0.015771	0.002608	-0.006994)
12:	353.75	0.000132	0.66	0.000116	(-0.008277	-0.000427	-0.006880)...

*Nota:* Verificar que no existan valores de frecuencia imaginarias después de la optimización. Si está presente una frecuencia imaginaria, esto indica que la estructura obtenida corresponde a un máximo local. Si este es el caso, se recomienda construir nuevamente la molécula en Avogadro y realizar la optimización geométrica.

### RAMAN SPECTRUM

Mode	freq (cm <sup>**</sup> -1)	Activity	Depolarization
6:	46.97	0.080848	0.744835
7:	57.80	0.487068	0.749879
8:	97.90	1.292490	0.749715
9:	175.08	0.633829	0.283761
10:	259.35	0.977269	0.749857
11:	340.20	3.420362	0.207647
12:	353.75	1.421368	0.739303...

Orca no genera directamente la intensidad en el espectro Raman sino sus actividades, ya que parten de las frecuencias vibracionales en el IR, para ello se pueden convertir dichos valores usando la ecuación 1:

$$I_i = \frac{C(v_0 - v_i)^4 S_i}{v_i B_i}; B_i = 1 - \exp\left(\frac{-hcv_i}{k_B T}\right) \quad (1)$$

En la ecuación 1, i denota el modo de vibración, C es un factor de normalización adicional, h, c,  $k_B$ , son la constante de Planck ( $6.626 \cdot 10^{-34}$  J.s), la velocidad de la luz ( $2.998 \cdot 10^{10}$  cm/s) y la constante de Boltzman ( $1.3806 \cdot 10^{-23}$  J/K), S en la actividad en el Raman, v es la frecuencia vibracional,  $v_0$  frecuencia de la luz incidente. En este procedimiento, el valor óptimo obtenido fue de una longitud de onda de 1064 nm ( $9398.5 \text{ cm}^{-1}$ ) a una temperatura de 298.15 K. Sin embargo, en otros sistemas estudiados, el valor recomendado para la frecuencia de la luz incidente fue de 532 nm (Liu et al., 2020).

#### Sección S4. Ejemplo de la entrada en ORCA para la estimación de los desplazamientos químicos de $H^1$ y $C^{13}$ para la obtención de los espectros de RMN

```
! B3LYP 6-311+G(2d,p) AutoAux DEFGRID2 TIGHTSCF D3BJ
* xyz 0 1
C      -0.30663      -0.03507      -0.18989
C      -0.99393      -0.08508      -1.41472
C      -2.37155      -0.29068      -1.44429
C      -3.08460      -0.45155      -0.25228
C      -2.39790      -0.40285       0.96295
C      -1.01668      -0.19623       1.01010
C       1.99622       0.26412       0.78757
C       3.43355       0.49757       0.34951
N       1.08823       0.17849      -0.24425
O       1.69766       0.16031       1.97212
H      -0.44544       0.03925      -2.34620
H      -2.88594      -0.32549      -2.40024
H      -4.15815      -0.61184      -0.27216
H      -2.93932      -0.52668       1.89654
H      -0.48825      -0.15888       1.95187
H       4.04434      -0.33834       0.70325
H       3.56100       0.59819      -0.73249
H       3.80201       1.40406       0.83796
H       1.46537       0.28070      -1.17534
*
%EPRNMR
      NUCLEI = ALL H {ssall}
END
```

a) Tabla que contiene las constantes de acoplamiento isotrópico de la molécula usada como ejemplo

SUMMARY OF ISOTROPIC COUPLING CONSTANTS (Hz)						
H	10 H	11 H	12 H	13 H	14 H	15
10 H	0.000	6.882	0.599	0.375	1.860	0.000
11 H	6.882	0.000	6.357	1.056	0.445	0.000
12 H	0.599	6.357	0.000	6.330	0.720	0.000
13 H	0.375	1.056	6.330	0.000	7.414	0.000
14 H	1.860	0.445	0.720	7.414	0.000	-0.167
15 H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.167	0.000...

## b) Entrada para el cálculo y la construcción del espectro RMN

```
! B3LYP 6-311+G(2d,p) NMR AutoAux DEFGRID2 TIGHTSCF D3BJ
* xyz 0 1
C -0.30663 -0.03507 -0.18989
C -0.99393 -0.08508 -1.41472
C -2.37155 -0.29068 -1.44429
C -3.08460 -0.45155 -0.25228
C -2.39790 -0.40285 0.96295
C -1.01668 -0.19623 1.01010
C 1.99622 0.26412 0.78757
C 3.43355 0.49757 0.34951
N 1.08823 0.17849 -0.24425
O 1.69766 0.16031 1.97212
H -0.44544 0.03925 -2.34620
H -2.88594 -0.32549 -2.40024
H -4.15815 -0.61184 -0.27216
H -2.93932 -0.52668 1.89654
H -0.48825 -0.15888 1.95187
H 4.04434 -0.33834 0.70325
H 3.56100 0.59819 -0.73249
H 3.80201 1.40406 0.83796
H 1.46537 0.28070 -1.17534
*
%eprnmr
NMRspectrum true
NMRcouplingFile = "acetanilide-spin"
NMRspecFreq = 400.00 #spectrometer freq [MHz] (default 400)
NMRcoal = 1.0 #threshold for merged lines [Hz] (default 1)
NMRREF[1] 31.8353
NMRREF[6] 182.5778
NMREquiv
1 {10 14} end
2 {11 13} end
3 {15 16 17} end
end
end
```

*Nota :* Para realizar el cálculo de los desplazamientos químicos se utiliza la instrucción NMR seguido de AutoAux (Neese, 2022). En la sección %EPRNMR se especifica la creación el espectro RMN (NMRspectrum), el nombre del archivo que contiene las constantes de acoplamiento químico (NMRcouplingFile), la frecuencia del espectrómetro (NMRspecFreq), NMRREF[X] define los acoplamientos químicos de referencia para los núcleos de hidrógeno (TMS: 31.8353) y carbono (TMS: 182.5778). NMREquiv se define los núcleos de hidrógenos equivalentes en el compuesto.

## c) Valores necesarios para graficar el espectro RMN en la sección “NMR Spectrum”

```
----- NMR SPECTRUM -----
-----
NMR Peaks for atom type 1, ref value 31.8353 ppm :
-----
Atom  shift[ppm]  rel.intensity
10    8.04         4.00
10    8.04         2.00
10    8.03         2.00
10    8.02         4.00
11    7.53         2.00...
-----
NMR Peaks for atom type 6, ref value 182.5778 ppm :
-----
Atom  shift[ppm]  rel.intensity
0     146.77     1.00
1     120.32     1.00
2     133.48     1.00
3     128.46     1.00...
```

*Nota :* la numeración de los átomos comienza con el número 0. Para graficar los espectros RMN de H<sup>1</sup> y C<sup>13</sup> se puede utilizar los programas GnuPlot y QtGrace.

**TABLA S1.** Valores de distancia de enlaces (Å) entre átomos estimados para la acetanilida a un nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d,p).

Enlaces	Distancia (Å)	Experimental (Brown y Corbridge, 1954)	Enlaces	Distancia (Å)	Experimental (Brown y Corbridge, 1954)
C1-C2	1.405	1.366	C2-H11	1.088	-
C2-C3	1.393	1.413	C3-H12	1.086	-
C3-C4	1.398	1.369	C4-H13	1.086	-
C4-C5	1.397	1.402	C5-H14	1.086	-
C5-C6	1.397	1.388	C6-H15	1.081	-
C1-C6	1.404	1.384	C8-H16	1.094	-
C7-C8	1.521	1.476	C8-H17	1.094	-
C7-N9	1.377	1.330	C8-H18	1.094	-
C1-N9	1.412	1.426	N9-H19	1.010	-
C7-O10	1.226	1.226			
					RMSE=0.0278

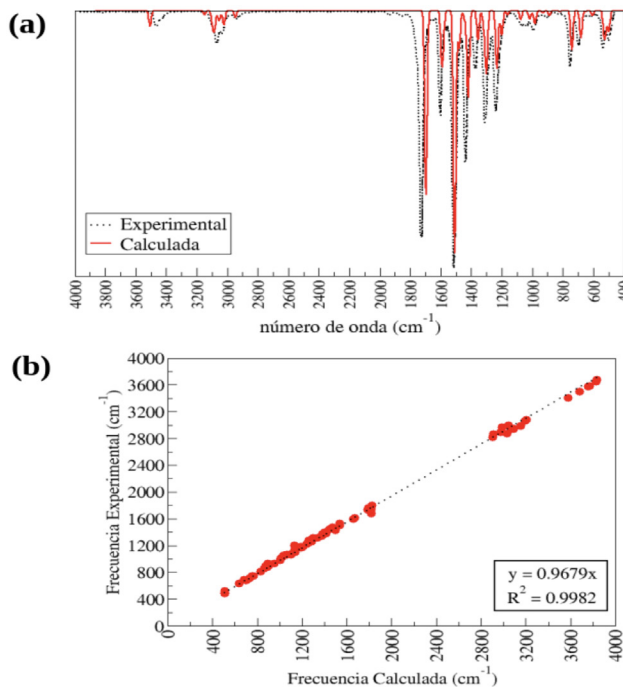
**TABLA S2.** Valores de ángulos entre enlaces en grados estimados para la acetanilida a un nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d,p).

Ángulo de enlace	(°)	Experimental (Brown y Corbridge, 1954)	Ángulo de enlace	(°)	Experimental (Brown y Corbridge, 1954)
C2-C1-N9	117.06	115.39	C1-C6-C5	119.22	119.17
C2-C1-C6	119.58	121.11	C5-C6-H15	121.19	-
C6-C1-N9	123.36	122.44	C1-C6-H15	119.59	-
C3-C2-H11	119.81	-	N9-C7-O10	123.92	121.42
C1-C2-H11	119.70	-	C8-C7-O10	121.43	120.25
C1-C2-C3	120.49	119.33	C8-C7-N9	114.64	117.44
C2-C3-H12	119.45	-	H17-C8-H18	109.04	-
C2-C3-C4	120.21	119.55	C7-C8-H18	108.48	-
C4-C3-H12	120.34	-	H16-C8-H17	108.96	-
C3-C4-C5	119.14	119.49	C7-C8-H17	114.15	-
C5-C4-H13	120.48	-	H16-C8-H18	107.51	-
C3-C4-H13	120.37	-	C7-C8-H16	108.50	-
C4-C5-C6	121.36	120.10	C7-N9-H19	116.00	-
C6-C5-H14	118.72	-	C1-N9-H19	114.82	-
C4-C5-H14	119.92	-	C1-N9-C7	129.19	129.18
					RMSE=1.44

En la tabla S1 y S2 es reportado el Error Cuadrático Medio de los parámetros geométricos (RMSE por sus siglas en inglés), los cuales fueron calculados con la ecuación 2:

$$RMSE = \sqrt{\left(\sum_1^n [d_i - d_{exp}]^2\right)} \quad (2)$$

Donde  $d_i$  representa las distancias de los enlaces ó los ángulos formados entre los átomos, los cuales fueron calculados por el método mecánico-cuántico utilizado. El término  $d_{exp}$  corresponde a los valores experimentales de las distancias de los enlaces ó los ángulos formados entre los átomos reportados para la molécula.

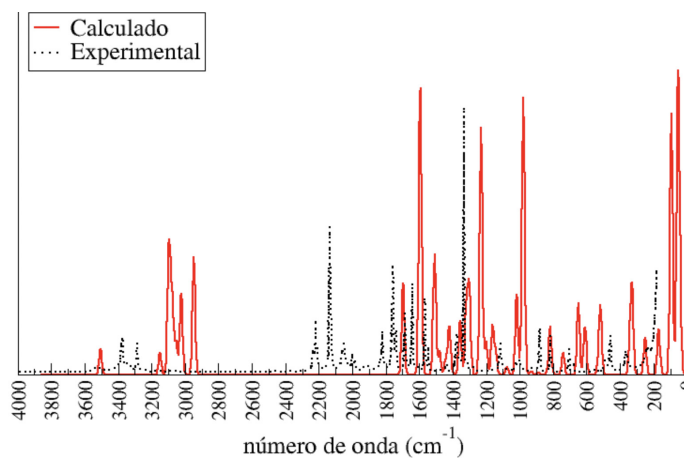


**FIGURA S3.** (a) Espectros Infrarrojos (experimental y calculado) para la acetanilida en fase gaseosa, y (b) Curva utilizada para obtener el factor de escalamiento.

**TABLA S3.** Comparación entre los valores de las frecuencias vibracionales reportadas, experimentales y calculadas para la acetanilida.

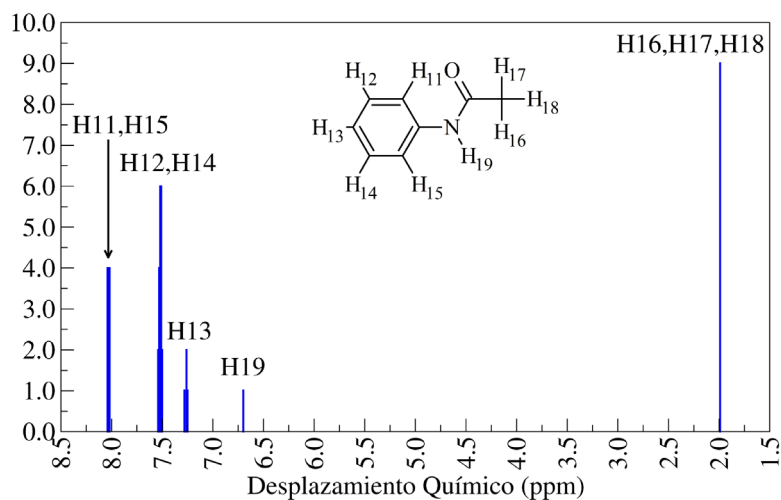
\* Espectro Infrarrojo experimental en fase gaseosa (Linstrom, et al., 2022). <sup>§</sup>La frecuencia calculada esta escalada usando el factor de escalamiento de 0.9679 para B3LYP/6-31+G(d,p).

Tipo de vibración	Frecuencia teórica (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia experimental (cm <sup>-1</sup> )*	Frecuencia calculada (cm <sup>-1</sup> ) <sup>§</sup>
N-H	3500-3100	3466	3505.49
C-H	3150-3100	3070	3148.61
C=O	1670-1640	1730	1696.68
C=C	1600-1745	1514	1593.83

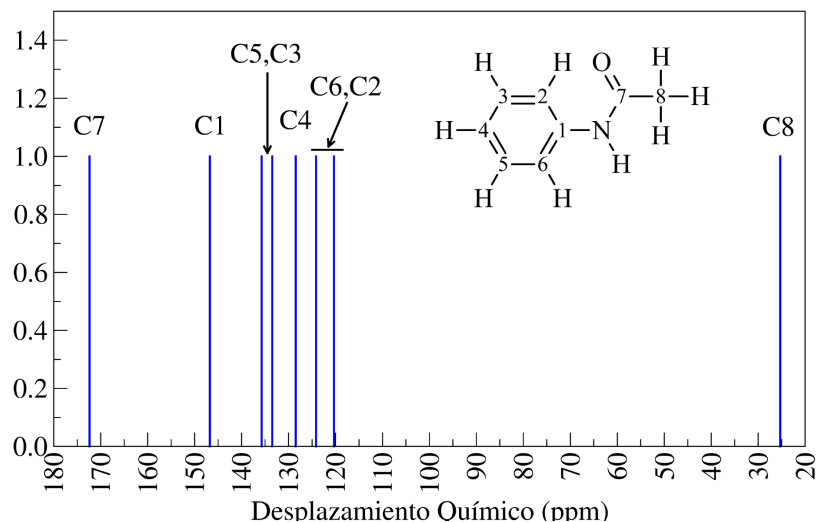


**FIGURA S4.** Espectros Raman experimental (en puntos negros) y calculado (línea roja) con el nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d,p) para la acetanilida.

**FIGURA S5.** Espectro RMN de  $H^1$  de la acetanilida calculado en el nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d,p).



**FIGURA S6.** Espectro de Resonancia magnética nuclear de  $C^{13}$  de la acetanilida calculado en el nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d,p).



**TABLA S4.** Comparación entre las señales experimentales y calculadas de RMN de  $H^1$  (en ppm) de la acetanilida.

# H	calculada	experimental	$\Delta\delta$
19	6.70	7.79	1.09
11,15	8.03	7.49	0.54
12,14	7.52	7.30	0.22
13	7.26	7.10	0.16
16,17,18	1.99	2.14	0.15
RMSE	0.56		

**TABLA S5.** Comparación entre las señales experimentales y calculadas de RMN de  $C^{13}$  (en ppm) de la acetanilida.

# C	B3LYP/6-311+G(2d,p)	Experimental	$\Delta\delta$
7	172.37	169.48	2.89
1	146.77	138.17	8.60
3,5	134.61	128.77	5.84
4	128.46	124.23	4.23
2,6	122.25	120.39	1.86
8	25.30	24.18	1.12
RMSE	4.81		

**TABLAS S6.** Longitudes de enlace teóricas y experimentales para las moléculas usadas en este procedimiento.

Acetaldehído		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.506	1.501
C1-O3	1.214	1.216
C1-H4	1.113	1.114
C2-H5	1.092	1.086
C2-H6	1.098	1.086
C2-H7	1.098	1.086
RMSE	0.007	

Acetato de etilo		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.509	1.508
C2-O3	1.352	1.345
O3-C4	1.449	-
C4-C5	1.517	1.515
C2-O6	1.215	1.203
C1-H7	1.095	1.105
C1-H8	1.095	1.105
C1-H9	1.090	1.105
C4-H10	1.095	-
C4-H11	1.095	-
C5-H12	1.095	-
C5-H13	1.095	-
C5-H14	1.095	-
RMSE	0.010	

Ácido Acético		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.506	1.517
C1-O3	1.213	1.212
C1-O4	1.359	1.361
C2-H5	1.090	1.100



C2-H6	1.095	1.100
C2-H7	1.095	1.100
O4-H8	0.972	-
RMSE	0.007	

Ácido Benzoico		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.485	1.480
C2-C3	1.403	1.390
C3-C4	1.395	1.410
C4-C5	1.399	1.370
C5-C6	1.399	1.360
C6-C7	1.394	1.420
C2-C7	1.403	1.390
C1-O8	1.217	1.240
C1-O9	1.360	1.290
C3-H10	1.084	0.730
C4-H11	1.086	0.960
C5-H12	1.086	0.910
C6-H13	1.086	-
C7-H14	1.085	0.790
O9-H15	0.971	-
RMSE	0.144	

Ácido Fórmico		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-O2	1.208	1.202
C1-O3	1.348	1.343
C1-H4	1.099	1.097
O3-H5	0.974	0.972
RMSE	0.004	

Anilina		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.406	1.392
C2-C3	1.395	1.392
C3-C4	1.398	1.392
C4-C5	1.398	1.392
C5-C6	1.395	1.392
C1-C6	1.406	1.392
C1-N7	1.399	1.431
C2-H8	1.088	1.084

C3-H9	1.087	1.084
C4-H10	1.085	1.084
C5-H11	1.087	1.084
C6-H12	1.088	1.084
N7-H13	1.011	-
N7-H14	1.011	-
RMSE	0.011	

Ciclohexanona		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.521	1.503
C2-C3	1.543	1.542
C3-C4	1.535	1.545
C4-C5	1.535	1.542
C5-C6	1.543	1.542
C1-C6	1.521	1.503
C1-O7	1.220	1.229
C2-H8	1.101	-
C2-H9	1.093	1.088
C3-H10	1.096	-
C3-H11	1.099	-
C4-H12	1.100	-
C4-H13	1.096	-
C5-H14	1.096	-
C5-H15	1.099	-
C6-H16	1.101	-
C6-H17	1.093	1.088
RMSE	0.010	

Etanol		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.519	1.512
C2-O3	1.432	1.431
C1-H4	1.096	1.088
C1-H5	1.095	1.088
C1-H6	1.095	1.098
C2-H7	1.101	1.086
C2-H8	1.101	1.086
O3-H9	0.965	0.971
RMSE	0.009	

Fenol		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-C2	1.399	1.398
C2-C3	1.398	1.398
C3-C4	1.397	1.398
C4-C5	1.400	1.398
C5-C6	1.395	1.398
C1-C6	1.399	1.398
C1-O7	1.372	1.364
C2-H8	1.088	1.084
C3-H9	1.086	1.076
C4-H10	1.085	1.082
C5-H11	1.086	1.076
C6-H12	1.085	1.084
O7-H13	0.966	0.956
RMSE	0.006	

Formaldehído		
Distancia	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C1-O2	1.210	1.205
C1-H3	1.109	1.111
C1-H4	1.109	1.111
RMSE	0.003	

Acetaldehído		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
O3-C1-H4	119.96	-
C2-C1-H4	115.43	117.50
C2-C1-O3	124.61	123.90
H5-C2-H6	110.10	108.30
C1-C2-H6	109.52	-
C1-C2-H7	109.52	-
H6-C2-H7	106.69	-
H5-C2-H7	110.10	108.30
C1-C2-H5	110.83	-
RMSE	1.68	

Acetato de etilo		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
H7-C1-H8	107.41	-
C2-C1-H7	109.97	-
H7-C1-H9	110.01	-

**TABLAS S7.** Ángulos entre enlaces obtenidos para las 10 moléculas orgánicas .

C2-C1-H9	109.45	107.70
C2-C1-H8	109.97	-
H8-C1-H9	110.00	-
C1-C2-O3	111.18	111.90
C1-C2-O6	125.45	124.10
O3-C2-O6	123.38	124.00
C2-O3-C4	116.30	115.70
O3-C4-H11	108.55	-
C5-C4-H10	112.20	-
O3-C4-H10	108.54	108.30
C5-C4-H11	112.19	-
O3-C4-C5	107.47	108.20
H10-C4-H11	107.79	108.10
H13-C5-H14	108.36	-
H12-C5-H14	108.43	-
C4-C5-H14	110.96	-
H12-C5-H13	108.36	-
C4-C5-H13	109.65	108.10
C4-C5-H12	111.00	-
RMSE	0.72	

Ácido Acético		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
O3-C1-O4	122.23	123.00
C2-C1-O3	126.07	126.60
C2-C1-O4	111.70	110.60
H5-C2-H6	110.13	-
C1-C2-H6	109.83	-
C1-C2-H7	109.85	-
H6-C2-H7	107.39	-
H5-C2-H7	110.15	-
C1-C2-H5	109.48	-
C1-O4-H8	107.05	-
RMSE	0.83	

Ácido Benzoico		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C2-C1-O9	113.25	118.00
O8-C1-O9	121.73	122.00
C2-C1-O8	125.02	122.00
C1-C2-C7	118.01	122.00

C1-C2-C3	121.93	119.00
C3-C2-C7	120.06	119.00
C2-C3-H10	119.67	-
C2-C3-C4	119.75	120.00
C4-C3-H10	120.58	-
C3-C4-H11	119.81	-
C3-C4-C5	120.11	122.00
C5-C4-H11	120.08	-
C6-C5-H12	119.94	-
C4-C5-H12	119.91	-
C4-C5-C6	120.16	118.00
C5-C6-C7	119.98	123.00
C7-C6-H13	119.89	-
C5-C6-H13	120.13	-
C6-C7-H14	121.31	-
C2-C7-H14	118.74	-
C2-C7-C6	119.95	118.00
C1-O9-H15	106.50	-
RMSE	2.67	

Ácido Fórmico		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
O2-C1-O3	124.97	124.90
O3-C1-H4	109.87	-
O2-C1-H4	125.16	124.10
C1-O3-H5	107.80	106.30
RMSE	1.06	

Anilina		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C2-C1-C6	118.71	-
C2-C1-N7	120.61	-
C6-C1-N7	120.63	-
C1-C2-C3	120.44	-
C1-C2-H8	119.47	-
C3-C2-H8	120.09	-
C4-C3-H9	120.05	-
C2-C3-H9	119.20	-
C2-C3-C4	120.76	-
C5-C4-H10	120.54	-
C3-C4-H10	120.55	-

C3-C4-C5	118.90	-
C4-C5-H11	120.02	-
C4-C5-C6	120.78	-
C6-C5-H11	119.21	-
C1-C6-C5	120.42	-
C5-C6-H12	120.10	-
C1-C6-H12	119.48	-
H13-N7-H14	112.26	113.90
C1-N7-H14	115.67	114.92
C1-N7-H13	115.68	114.92
RMSE	1.13	

Ciclohexanona		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C6-C1-O7	122.31	-
C2-C1-O7	122.30	-
C2-C1-C6	115.39	115.30
C1-C2-C3	111.70	111.50
C3-C2-H8	108.90	-
C3-C2-H9	112.19	-
C1-C2-H8	107.30	-
H8-C2-H9	107.85	106.00
C1-C2-H9	108.71	-
C4-C3-H10	110.76	-
C2-C3-H10	109.53	-
H10-C3-H11	106.63	-
C4-C3-H11	109.25	-
C2-C3-H11	109.04	-
C2-C3-C4	111.51	110.80
C3-C4-C5	111.00	-
H12-C4-H13	106.71	-
C5-C4-H13	110.09	-
C3-C4-H13	110.09	-
C5-C4-H12	109.42	-
C3-C4-H12	109.43	-
H14-C5-H15	106.63	-
C4-C5-H15	109.22	-
C6-C5-H14	109.55	-
C4-C5-H14	110.74	-
C6-C5-H15	109.05	-
C4-C5-C6	111.51	-

C1-C6-H17	108.72	-
C5-C6-H16	108.89	-
C1-C6-H16	107.33	-
C1-C6-C5	111.66	-
H16-C6-H17	107.86	-
C5-C6-H17	112.20	-
RMSE	1.00	

Etanol		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C2-C1-H6	110.48	-
H4-C1-H5	108.57	-
H4-C1-H6	108.57	-
C2-C1-H5	110.47	-
C2-C1-H4	110.40	-
H5-C1-H6	108.29	-
H7-C2-H8	107.87	-
C1-C2-O3	107.87	107.80
O3-C2-H8	110.40	-
C1-C2-H8	110.16	-
O3-C2-H7	110.38	-
C1-C2-H7	110.16	-
C2-O3-H9	109.23	105.40
RMSE	2.71	

Fenol		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
C2-C1-C6	120.22	-
C2-C1-O7	122.56	-
C6-C1-O7	117.21	-
C3-C2-H8	120.25	-
C1-C2-H8	120.06	-
C1-C2-C3	119.69	-
C4-C3-H9	120.19	-
C2-C3-H9	119.28	-
C2-C3-C4	120.53	-
C5-C4-H10	120.39	-
C3-C4-H10	120.34	-
C3-C4-C5	119.26	-
C4-C5-H11	119.99	-
C4-C5-C6	120.76	-

C6-C5-H11	119.26	-
C1-C6-C5	119.54	-
C5-C6-H12	121.44	-
C1-C6-H12	119.02	-
C1-O7-H13	109.93	109.00
RMSE	0.93	

Formaldehído		
Angulo de Enlace	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
O2-C1-H4	121.89	121.90
H3-C1-H4	116.22	116.13
O2-C1-H3	121.89	121.90
RMSE	0.05	

### Factor de Escalamiento

**TABLAS S8.** Señales de Infrarrojo y Raman para los 10 compuestos orgánicos estudiados.

B3LYP/6-31+G(d,p)	Error
0.9679	0.0022

Acetaldehído			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
150.63	145.79	-	1.36
508.22	491.91	519.15	1.34
774.58	749.72	-	5.43
890.83	862.23	935.59	6.07
1129.96	1093.69	1130.43	2.72
1130.84	1094.54	-	1.21
1381.22	1336.88	1371.13	4.41
1422.09	1376.44	1409.33	4.88
1462.51	1415.56	-	13.81
1471.70	1424.46	-	7.32
1811.88	1753.72	1725.17	12.03
2900.90	2807.78	2820.39	162.77
3032.54	2935.20	-	163.07
3090.11	2990.92	2937.55	70.03
3153.38	3052.16	2984.67	50.41



Acetato de etilo			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
49.22	47.64	-	0.16
76.43	73.98	-	0.36
153.45	148.52	-	0.01
193.32	187.11	-	0.32
261.55	253.15	-	0.02
367.89	356.08	-	3.20
430.65	416.83	-	0.42
605.49	586.05	-	0.99
635.46	615.06	634.15	8.35
814.42	788.28	-	0.31
860.73	833.10	856.35	8.15
950.80	920.28	934.77	2.27
1014.38	981.82	-	1.46
1065.55	1031.35	1060.52	0.06
1073.24	1038.79	-	2.81
1136.67	1100.18	1099.22	7.12
1178.40	1140.57	-	0.70
1277.35	1236.35	-	0.84
1296.80	1255.17	1313.51	8.23
1392.25	1347.56	1378.74	2.32
1408.04	1362.84	-	0.53
1434.38	1388.34	-	3.52
1474.42	1427.09	1473.81	8.54
1480.41	1432.89	-	7.61
1489.65	1441.83	-	9.72
1502.28	1454.06	-	12.29
1520.57	1471.76	-	1.54
1796.98	1739.30	1761.61	7.97
3047.11	2949.30	2997.41	138.86
3061.46	2963.19	-	174.38
3065.99	2967.57	-	80.37
3104.60	3004.94	-	97.25
3119.33	3019.20	-	77.24
3126.41	3026.05	-	58.42
3130.46	3029.97	-	12.39
3174.24	3072.35	-	64.40

Ácido Acético			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
82.81	80.15	-	0.17
422.68	409.11	-	0.33
544.86	527.37	-	1.86
580.17	561.55	-	2.37
669.67	648.17	-	0.38
864.27	836.53	-	11.31
1002.53	970.35	983.77	1.73
1066.81	1032.57	-	0.41
1206.22	1167.50	1184.04	2.72
1336.41	1293.51	-	4.33
1413.47	1368.10	1385.13	0.74
1474.83	1427.49	-	9.87
1481.49	1433.93	-	7.57
1822.66	1764.15	1803.10	10.82
3063.82	2965.47	-	135.82
3128.40	3027.98	-	61.20
3180.15	3078.07	-	52.55
3754.19	3633.68	3577.98	96.89

Ácido Benzoico			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
70.60	68.33	-	0.49
156.95	151.91	-	1.87
215.41	208.50	-	0.09
384.26	371.93	-	4.01
414.19	400.89	-	0.02
432.01	418.14	-	0.16
497.02	481.07	-	1.12
592.62	573.60	-	2.51
629.75	609.54	-	6.55
634.79	614.41	-	0.40
701.39	678.88	-	0.02
725.25	701.97	710.79	0.62
777.08	752.14	-	16.66
819.35	793.05	-	0.83
863.99	836.26	-	0.51
961.52	930.66	-	0.03

998.67	966.61	-	0.00
1015.09	982.51	-	0.09
1018.83	986.13	1021.58	38.39
1048.02	1014.38	-	15.46
1096.39	1061.20	1077.70	0.24
1120.96	1084.98	-	1.67
1186.21	1148.13	-	6.32
1191.50	1153.25	1181.30	19.74
1211.68	1172.79	-	14.15
1344.99	1301.82	-	0.14
1365.36	1321.53	-	2.62
1372.80	1328.73	1341.01	13.20
1485.64	1437.95	-	1.69
1529.52	1480.42	-	0.76
1630.59	1578.25	-	5.70
1651.64	1598.62	-	80.52
1790.52	1733.04	1764.03	95.90
3185.11	3082.87	-	58.65
3197.19	3094.56	-	108.27
3206.05	3103.14	3076.26	149.05
3220.90	3117.51	-	99.98
3228.66	3125.02	-	118.59
3766.64	3645.73	3581.30	141.59

Ácido Fórmico			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
624.40	604.36	-	3.57
693.19	670.94	676.85	0.45
1045.03	1011.48	1058.68	1.95
1133.85	1097.45	1199.36	2.52
1294.32	1252.77	-	1.60
1400.83	1355.86	1400.32	7.00
1819.19	1760.79	1677.65	11.02
3086.93	2987.84	2951.77	123.09
3731.44	3611.66	-	73.73

Anilina			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
220.56	213.48	-	0.98
291.33	281.98	-	0.24
383.19	370.89	-	0.66
420.71	407.21	-	0.01
507.21	490.93	489.48	0.67
535.41	518.22	-	4.40
573.38	554.97	-	6.84
633.92	613.57	-	4.58
698.69	676.26	684.26	0.21
762.58	738.10	743.06	3.55
831.26	804.58	-	1.26
832.72	805.99	-	21.53
885.41	856.99	873.49	0.43
967.31	936.26	-	0.04
986.81	955.13	-	0.33
1008.11	975.75	-	34.85
1049.52	1015.83	-	21.00
1065.08	1030.89	-	0.03
1135.30	1098.86	-	2.31
1180.58	1142.68	-	4.03
1200.91	1162.36	1174.70	3.33
1305.29	1263.39	-	15.79
1363.17	1319.41	-	1.30
1364.06	1320.27	-	0.40
1502.98	1454.73	-	1.16
1535.25	1485.97	1500.79	1.79
1634.03	1581.58	-	4.48
1650.28	1597.31	-	13.92
1668.17	1614.62	1617.75	32.53
3168.44	3066.73	-	27.15
3169.46	3067.72	-	110.22
3185.39	3083.14	-	170.60
3191.13	3088.69	-	30.95
3207.09	3104.14	-	245.06
3575.64	3460.86	3410.69	184.19
3680.99	3562.83	3497.43	55.70

Ciclohexanona			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
90.16	87.27	-	0.59
186.13	180.16	-	0.08
308.03	298.14	-	0.55
407.27	394.20	-	1.10
416.73	403.35	-	1.22
481.83	466.36	-	0.35
492.19	476.39	-	1.54
657.28	636.18	-	6.78
755.05	730.81	-	10.96
766.32	741.72	-	0.35
843.65	816.57	-	6.03
876.64	848.50	896.91	0.09
899.43	870.56	-	1.12
919.58	890.06	-	0.82
1002.52	970.34	-	3.23
1027.94	994.94	-	8.79
1062.44	1028.34	1060.70	0.79
1081.22	1046.51	-	4.58
1136.57	1100.09	-	2.20
1137.03	1100.53	1121.30	2.17
1241.71	1201.85	1224.88	1.92
1247.18	1207.15	-	5.84
1272.66	1231.81	-	7.67
1287.79	1246.45	-	3.55
1338.94	1295.96	1319.58	3.94
1347.03	1303.79	-	7.37
1366.20	1322.34	-	0.28
1380.21	1335.91	-	0.61
1381.04	1336.71	-	1.22
1468.05	1420.93	-	12.33
1475.73	1428.36	-	6.18
1494.98	1446.99	-	9.18
1495.79	1447.78	1431.78	6.95
1510.59	1462.10	-	1.68
1787.80	1730.41	1737.29	17.27
3013.40	2916.67	-	8.30
3015.72	2918.92	-	173.80

3018.76	2921.86	-	222.45
3029.01	2931.78	-	29.29
3030.62	2933.34	2872.07	70.38
3073.24	2974.59	2944.00	194.06
3075.23	2976.52	-	76.54
3079.63	2980.77	-	103.99
3113.02	3013.09	-	78.65
3113.81	3013.86	-	122.53

Etanol			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
238.30	230.65	-	0.26
278.03	269.11	-	1.34
417.11	403.72	-	0.35
821.54	795.17	-	0.15
899.95	871.06	895.30	6.36
1032.69	999.54	1050.76	4.14
1100.57	1065.24	1064.09	6.88
1178.80	1140.96	-	0.76
1258.27	1217.88	1250.63	3.31
1297.35	1255.71	-	8.73
1404.26	1359.18	-	0.27
1448.61	1402.11	1450.51	3.11
1486.46	1438.74	-	9.39
1504.22	1455.93	-	13.46
1529.19	1480.10	-	3.74
2989.55	2893.59	2969.54	125.50
3018.78	2921.88	-	112.05
3045.01	2947.27	-	144.73
3115.62	3015.61	-	64.92
3124.05	3023.77	-	47.57
3834.02	3710.95	3680.20	105.93

Fenol			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
226.67	219.39	-	1.24
328.10	317.57	-	1.97
406.97	393.91	-	0.28
418.91	405.46	-	0.02

510.12	493.75	495.44	0.28
534.41	517.26	-	5.65
630.89	610.64	-	4.80
684.29	662.32	687.09	0.06
754.66	730.44	746.41	2.06
823.58	797.14	-	1.23
830.19	803.54	814.86	18.22
890.46	861.88	878.75	0.27
965.43	934.44	-	0.03
987.20	955.51	-	0.07
1011.49	979.02	1011.08	32.85
1045.66	1012.09	1056.71	17.92
1095.70	1060.53	-	0.99
1178.51	1140.68	-	1.76
1188.94	1150.78	1184.49	4.98
1192.83	1154.54	-	4.67
1286.35	1245.06	1257.50	15.20
1360.19	1316.53	-	0.50
1369.85	1325.88	-	0.84
1503.60	1455.33	-	0.67
1533.33	1484.11	1499.35	1.92
1644.21	1591.43	-	12.46
1654.75	1601.63	1599.74	14.01
3164.82	3063.23	-	79.15
3185.03	3082.79	-	87.82
3192.81	3090.32	3059.97	87.70
3206.84	3103.90	-	73.35
3213.09	3109.95	-	249.30
3825.82	3703.01	3648.63	111.98

Formaldehido			
Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Escalada (cm <sup>-1</sup> )	Frecuencia Experimental (cm <sup>-1</sup> )	Actividad Raman
1190.87	1152.64	1166.23	1.21
1260.08	1219.63	1275.75	3.29
1534.84	1485.57	1531.30	13.19
1818.68	1760.30	1745.76	9.07
2912.24	2818.76	2863.75	159.96
2975.67	2880.15	2891.13	109.56

**TABLAS S6.** Valores de desplazamientos químicos obtenidos para la Resonancia Magnética Nuclear de H<sup>1</sup>

Acetaldehído		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
4	10.38	9.79
5, 6, 7	2.13	2.21
RMSE	0.42	

Acetato de etilo		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
10, 11	4.055	4.12
7, 8, 9	1.97	2.04
12, 13, 14	1.23	1.26
RMSE	0.06	

Ácido Acético (ppm)		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
8	5.61	11.42
5, 6, 7	2.01	2.10
RMSE	4.11	

Ácido Benzoico (ppm)		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
15	5.80	12.09
10, 14	8.55	8.12
12	7.83	7.62
11, 13	7.68	7.45
RMSE	3.16	

Ácido Fórmico (ppm)		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
5	5.88	10.99
4	8.11	8.06
RMSE	3.62	

Anilina		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
9, 11	7.34	7.12
10	6.89	6.73
8, 12	6.77	6.64
13, 14	3.10	3.55
RMSE	0.27	



Ciclohexanona		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
8, 9, 16, 17	2.29	2.35
10, 11, 14, 15	1.82	2.07
12, 13	1.71	1.55
RMSE	0.17	

Etanol		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
7, 8	3.91	3.69
9	0.08	2.61
4, 5, 6	1.19	1.23
RMSE	1.46	

Fenol		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
9, 11	7.45	7.24
10	7.09	6.93
8, 12	6.93	6.84
13	3.67	5.35
RMSE	0.85	

Formaldehído		
#H	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
3, 4	10.32	9.60
RMSE	0.72	

Acetaldehído		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	206.01	199.93
2	33.73	30.89
RMSE	4.75	

Acetato de etilo		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
2	178.90	171.08
4	65.47	60.44
1	21.64	21.00
5	15.19	14.28
RMSE	4.68	

**TABLA S9.** Valores de desplazamientos químicos obtenidos para las Resonancia Magnética Nuclear de C<sup>13</sup>.

Ácido Acético (ppm)		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	178.61	178.12
2	19.84	20.80
RMSE	0.76	

Ácido Benzoico (ppm)		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	173.44	172.77
5	139.31	133.83
3, 7	137.39	130.28
2	134.54	129.44
4, 6	133.52	128.49
RMSE	5.14	

Ácido Fórmico (ppm)		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	166.22	166.22
RMSE	0.00	

Anilina		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	154.36	146.51
3, 5	135.01	129.26
4	122.47	118.39
2, 6	117.89	115.07
RMSE	5.46	

Ciclohexanona		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	218.96	211.56
2, 6	46.02	42.00
3, 5	32.38	27.11
4	30.10	25.07
RMSE	5.57	

Etanol		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	63.71	57.79
2	18.13	18.13
RMSE	4.19	

Fenol		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	165.12	155.02
3, 5	135.25	129.79
4	124.94	121.09
2, 6	118.61	115.48
RMSE	6.25	

Formaldehido		
#C	B3LYP/6-31+G(d,p)	Experimental
1	201.86	84.29
RMSE	117.57	