

Acid-base thermochemistry of gaseous oxygen and sulfur substituted amino acids (Ser, Thr, Cys, Met)

Vanessa Riffet, Gilles Frison and Guy Bouchoux

Laboratoire des Mécanismes Réactionnels, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau cedex, France.

Electronic Supplementary Information

Figure S1. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twenty nine conformers of neutral L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S2. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first eleven conformers of deprotonated L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S3. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirteen conformers of protonated L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S4. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the ten most stable conformers of neutral L-threonine.

Figure S5. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the four most stable conformers of deprotonated L-threonine.

Figure S6. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the four most stable conformers of protonated L-threonine.

Figure S7. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twelve conformers of neutral L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated at the G4 level).

Figure S8. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first four conformers of deprotonated L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S9. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first four conformers of protonated L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S10. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the eight most stable conformers of neutral L-cysteine.

Figure S11. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the five most stable conformers of deprotonated L-cysteine.

Figure S12. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the six most stable conformers of protonated L-cysteine.

Figure S13. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirteen conformers of neutral L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S14. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first eight conformers of deprotonated L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S15. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first six conformers of protonated L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S16. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the most stable conformers of neutral L-methionine.

Figure S17. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the nine most stable conformers of deprotonated L-methionine.

Figure S18. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the six most stable conformers of protonated L-methionine.

Figure S19. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirty two conformers of neutral L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S20. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twenty four conformers of deprotonated L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Figure S21. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first six conformers of protonated L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).

Table T1. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-Serine.

Table T2. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-threonine.

Table T3. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-cysteine.

Table T4. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-methionine.

Table T5. Signed deviation (method-G4) on the computed GB and PA of the studied amino acids.

Table T6. Signed deviation (method-G4) on the computed deprotonation thermochemistry of the studied α -aminoacids.

Table T7. Signed deviation (method-experiment) on the computed protonation thermochemistry of the studied amino acids.

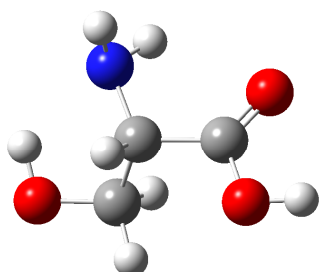
Table T8. Signed deviation (method-experiment) on the computed deprotonation thermochemistry of the studied α -aminoacids.

Table T9. Computed thermochemical data of reference compounds ammonia and benzoic acid.

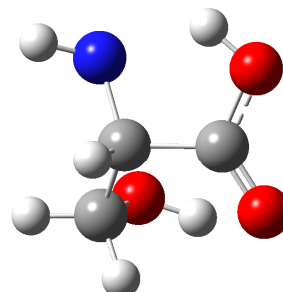
Table T10. Correspondence between conformers name in excels tales and charts.

L-Serine

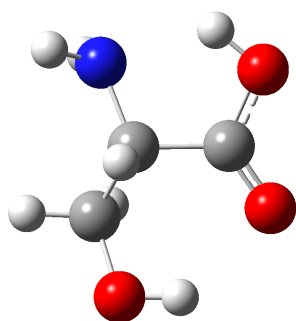
Figure S1. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twenty nine conformers of neutral L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



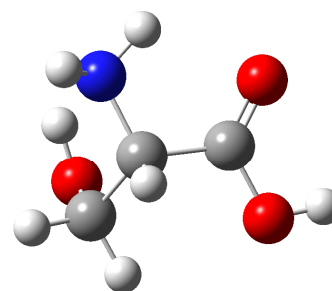
SER1 [0.0; 0.0]



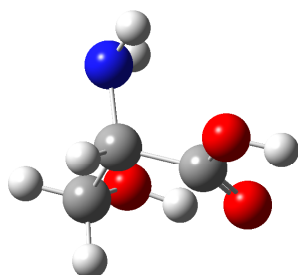
SER2 [0.2; 1.7]



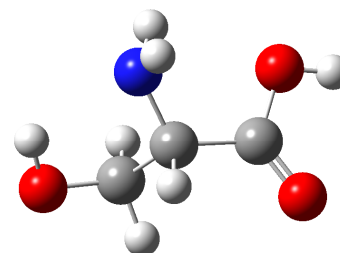
SER3 [1.3; 4.7]



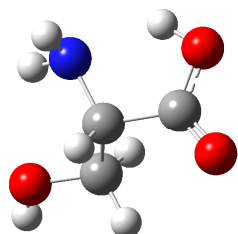
SER4 [3.6; 4.8]



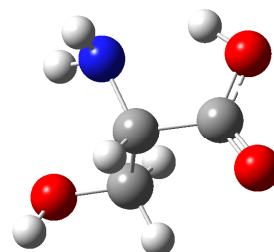
SER5 [6.4; 7.1]



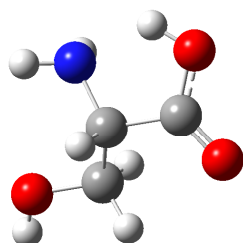
SER6 [6.6; 5.5]



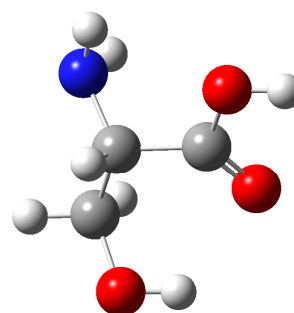
SER7 [6.7; 7.7]



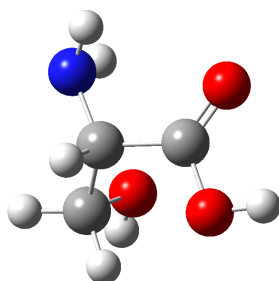
SER8 [6.9; 8.3]



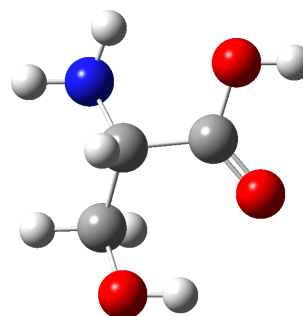
SER9 [7.2; 7.7]



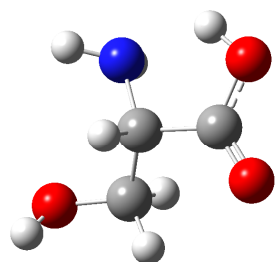
SER10 [8.8; 8.5]



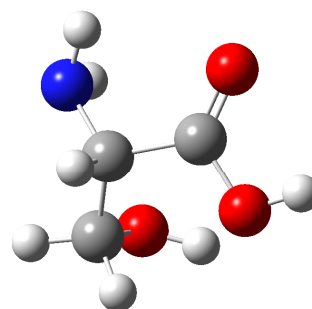
SER11 [9.9; 8.9]



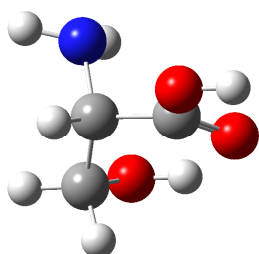
SER12A [10.1; 11.1]



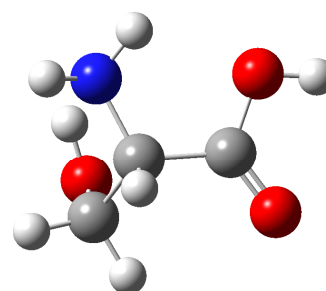
SER12B [10.1; 8.8]



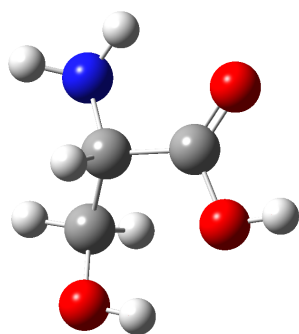
SER13 [10.5; 8.9]



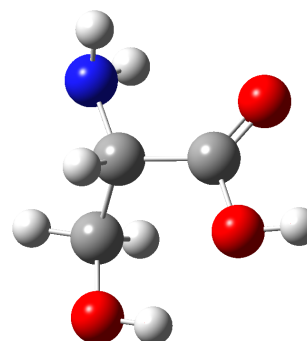
SER14 [11.2; 12.0]



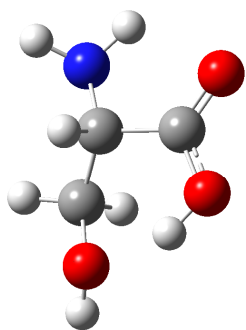
SER15 [11.3; 11.6]



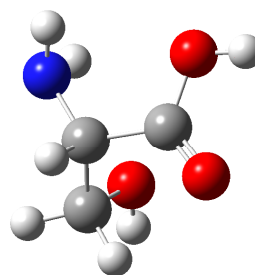
SER16A [11.5; 12.2]



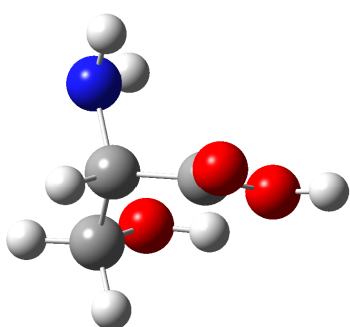
SER16B [11.5; 10.7]



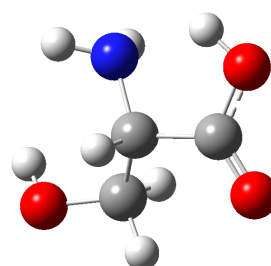
SER17 [12.6; 14.8]



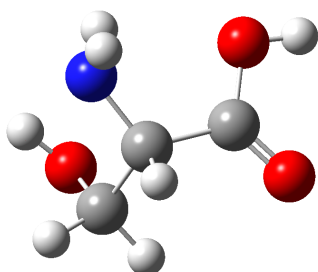
SER18 [13.5; 12.1]



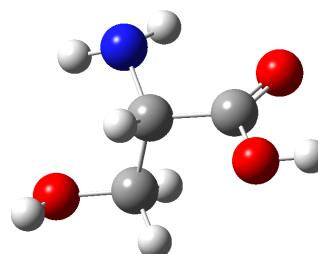
SER19 [13.7; 13.1]



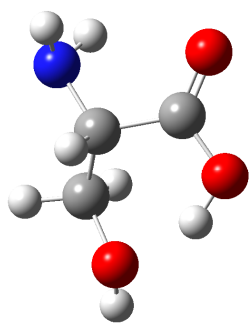
SER20 [13.8; 14.3]



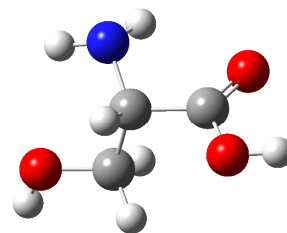
SER21 [13.9; 12.0]



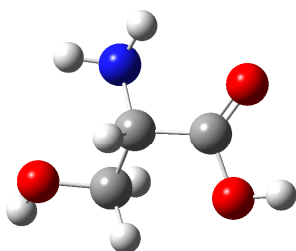
SER22 [14.0; 13.3]



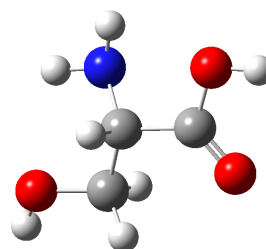
SER23 [14.1; 13.4]



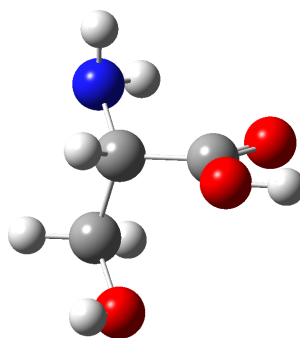
SER24A [14.4; 12.6]



SER24B [14.4; 13.4]

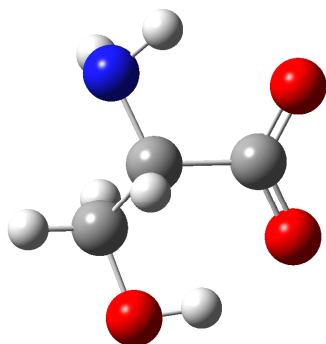


SER25 [14.5; 13.5]

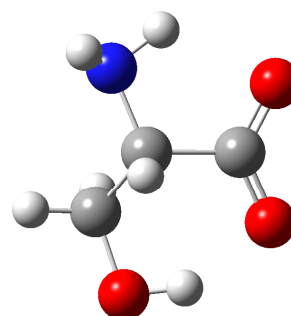


SER26 [14.9; 13.5]

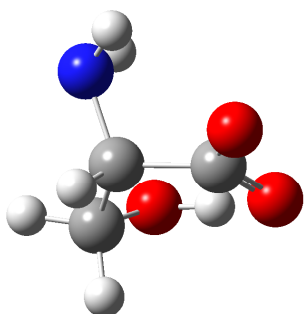
Figure S2. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first eleven conformers of deprotonated L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



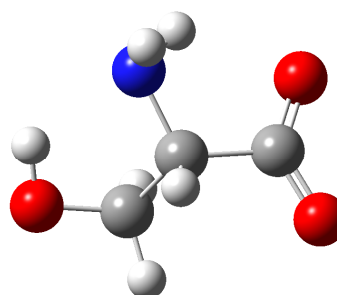
SER-H1 [0.0; 0.0]



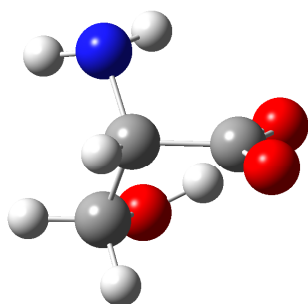
SER-H2 [0.1; 0.4]



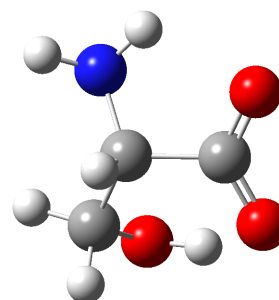
SER-H4 [8.5; 6.4]



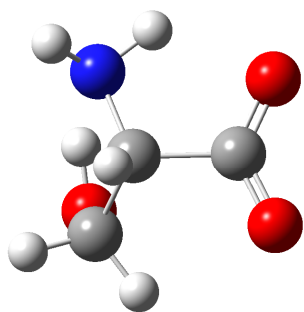
SER-H5 [14.2; 12.7]



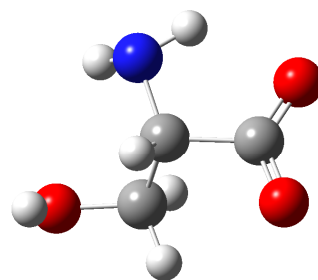
SER-H6 [16.9; 16.8]



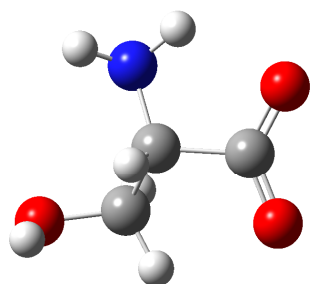
SER-H7 [21.8; 21.3]



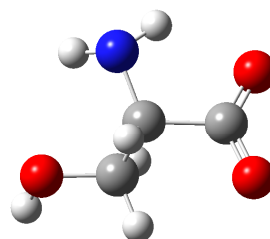
SER-H8 [23.5; 23.2]



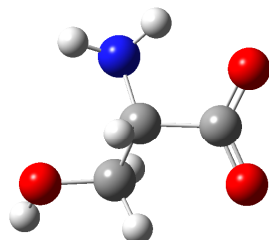
SER-H9 [32.8; 30.0]



SER-H10 [38.6; 34.9]

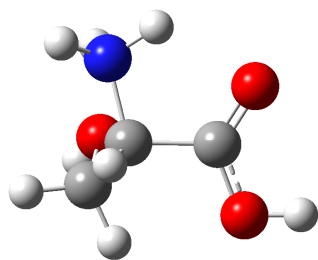


SER-H11 [42.8; 39.5]

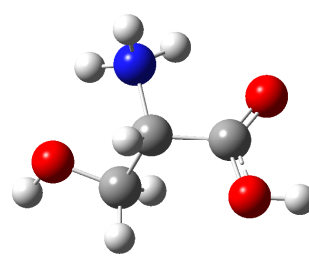


SER-H12 [42.9; 38.8]

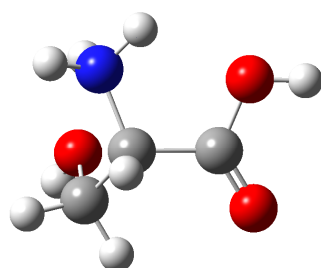
Figure S3. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirteen conformers of protonated L-serine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



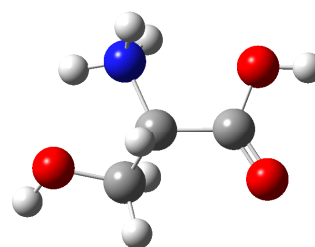
SERH+1 [0.0; 0.0]



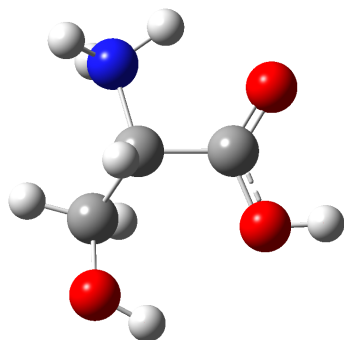
SERH+2 [2.0; 0.6]



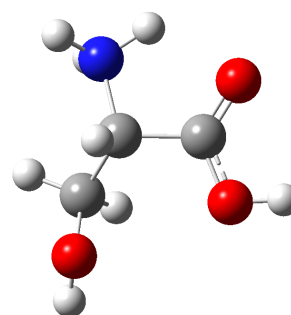
SERH+3 [14.3; 12.7]



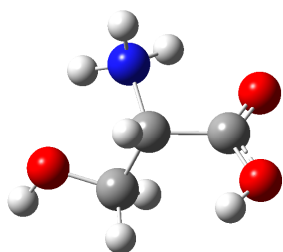
SERH+4 [16.4; 12.5]



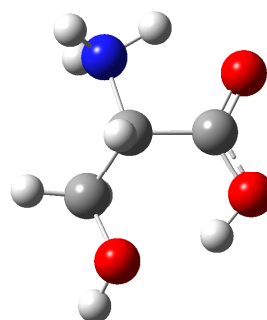
SERH+5 [37.5; 35.2]



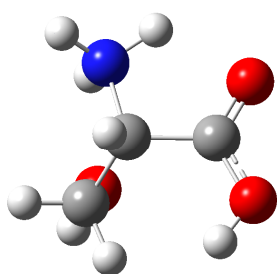
SERH+6 [39.5; 34.5]



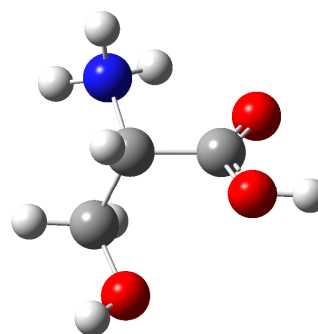
SERH+7 [40.0; 38.7]



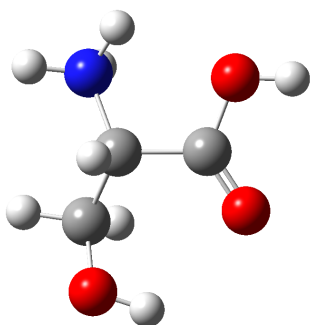
SERH+8 [40.4; 41.3]



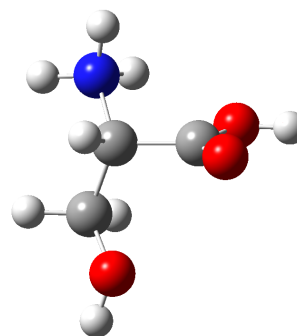
SERH+9 [41.4; 40.7]



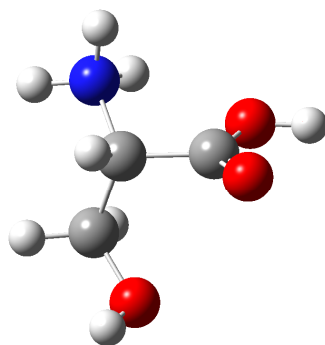
SERH+10 [42.2; 38.4]



SERH+11 [50.4; 47.7]



SERH+12 [59.1; 54.5]



SERH+13 [60.6; 56.2]

Table T1. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-Serine.
B97D/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,634941	-398,626245	-398,667265	1,6	0,0	361,4	1,00	0,34	3,05	-136,600841	123,84512	-136,614898
SER2	-398,63529	-398,626845	-398,667206	0,0	0,2	355,6	0,94	0,32	3,03	-128,393891	114,534281	-128,406891
SER3	-398,634458	-398,626102	-398,666087	2,0	3,1	352,3	0,29	0,10	1,91	-39,6435058	35,0347627	-39,6474823
SER4	-398,632886	-398,624161	-398,665121	7,0	5,6	360,9	0,11	0,04	1,00	-14,3741158	13,0128741	-14,3755928
SER5	-398,632776	-398,624227	-398,664883	6,9	6,3	358,2	0,08	0,03	0,83	-11,1951611	10,0597472	-11,1963029
SER6	-398,632599	-398,623836	-398,665632	7,9	4,3	368,2	0,18	0,06	1,43	-24,5836223	22,7097885	-24,5861999
SER7	-398,632414	-398,623697	-398,664523	8,3	7,2	359,7	0,06	0,02	0,63	-7,67070336	6,92157079	-7,67148897
SER8	-398,632871	-398,624264	-398,664829	6,8	6,4	357,4	0,08	0,03	0,80	-10,5779425	9,48385074	-10,5790189
SER9	-398,632201	-398,623438	-398,664405	8,9	7,5	360,9	0,05	0,02	0,58	-6,77665803	6,13596198	-6,77735447
SER10	-398,631659	-398,62295	-398,663985	10,2	8,6	361,5	0,03	0,01	0,41	-4,35968078	3,95405393	-4,36012958
SER11	-398,63086	-398,62191	-398,663291	13,0	10,4	364,6	0,02	0,01	0,23	-2,10340494	1,92379355	-2,10362329
SER12A	-398,630216	-398,62155	-398,662472	13,9	12,6	360,5	0,01	0,00	0,11	-0,88997912	0,8049551	-0,89007049
SER12B	-398,631586	-398,622705	-398,664191	10,9	8,1	365,5	0,04	0,01	0,49	-5,41265335	4,96301404	-5,41321666
SER13	-398,631345	-398,622542	-398,664296	11,3	7,8	367,9	0,04	0,02	0,53	-6,04366138	5,57740413	-6,04429442
								1,00	15,03	-398,625821	358,961178	-398,666564
SERH+1	-398,983478	-398,974517	-399,015806	0,0	0,0	363,8	1,00	0,53	2,81	-209,605865	191,112193	-209,627557
SERH+2	-398,98313	-398,974095	-399,015686	1,1	0,3	366,4	0,88	0,46	2,96	-184,787012	169,71564	-184,806275
SERH+3	-398,978738	-398,96963	-399,011499	12,8	11,3	368,9	0,01	0,01	0,24	-2,2750574	2,10349202	-2,27529616
SERH+4	-398,978511	-398,96936	-399,011512	13,5	11,3	371,4	0,01	0,01	0,25	-2,30632929	2,1468204	-2,30657296
								1,00	6,27	-398,974264	365,078145	-399,015701
SER-H1	-398,107456	-398,099285	-398,139105	0,0	0,0	350,8	1,00	0,63	2,41	-252,061894	222,132862	-252,087107
SER-H2	-398,106618	-398,098381	-398,138418	2,4	1,8	352,7	0,49	0,31	3,02	-122,509061	108,551315	-122,521382
SER-H4	-398,104743	-398,096656	-398,136776	6,9	6,1	353,5	0,09	0,05	1,32	-21,8401991	19,3920957	-21,8424001
SER-H5	-398,102245	-398,093792	-398,134338	14,4	12,5	357,2	0,01	0,00	0,19	-1,6876845	1,51443149	-1,68785639
								1,00	6,94	-398,098839	351,590704	-398,138746

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

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,882493	-398,87387	-398,914777	0,0	0,0	360,4	1,00	0,44	3,00	-177,108884	160,0288	-177,127048
SER2	-398,882171	-398,873792	-398,914149	0,2	1,6	355,6	0,52	0,23	2,81	-91,5823815	81,6377571	-91,5916476
SER3	-398,881552	-398,873385	-398,912996	1,3	4,7	349,0	0,15	0,07	1,53	-27,2855509	23,8731229	-27,2882606
SER4	-398,881001	-398,87249	-398,912963	3,6	4,8	356,6	0,15	0,07	1,49	-26,3560657	23,561756	-26,3587401
SER5	-398,879915	-398,871417	-398,912083	6,4	7,1	358,3	0,06	0,03	0,79	-10,4595952	9,39526806	-10,4606616
SER6	-398,879983	-398,871352	-398,912684	6,6	5,5	364,2	0,11	0,05	1,23	-19,6620385	17,9505548	-19,6640759
SER7	-398,879878	-398,871326	-398,911863	6,7	7,7	357,1	0,05	0,02	0,67	-8,30182632	7,43341175	-8,30267003
SER8	-398,879725	-398,871238	-398,911625	6,9	8,3	355,8	0,04	0,02	0,56	-6,46580621	5,76802742	-6,4664609
SER9	-398,879755	-398,871138	-398,911186	7,2	7,7	358,8	0,05	0,02	0,67	-8,27570785	7,44384629	-8,27655274
SER10	-398,879135	-398,870509	-398,911528	8,8	8,5	361,4	0,03	0,01	0,51	-5,83956601	5,29089901	-5,84016654
SER11	-398,878959	-398,870081	-398,911381	9,9	8,9	363,9	0,03	0,01	0,46	-5,00419223	4,56507938	-5,00471038
SER12A	-398,878542	-398,870008	-398,910552	10,1	11,1	357,2	0,01	0,01	0,23	-2,09522307	1,87638191	-2,09543604
SER12B	-398,878814	-398,870019	-398,911447	10,1	8,7	365,0	0,03	0,01	0,48	-5,36335146	4,90788739	-5,36390852
SER13	-398,878635	-398,869857	-398,911394	10,5	8,9	366,0	0,03	0,01	0,46	-5,07297812	4,65438878	-5,07350641
								1,00	14,89	-398,873167	358,387181	-398,913845
SERH+1	-399,227847	-399,219259	-399,259671	0,0	0,0	356,0	1,00	0,55	2,72	-220,876301	196,989800	-220,89866
SERH+2	-399,227282	-399,218504	-399,259452	2,0	0,6	360,8	0,79	0,44	3,00	-175,494399	158,591918	-175,5124
SERH+3	-399,222607	-399,21382	-399,254835	14,3	12,7	361,4	0,01	0,00	0,16	-1,375506	1,245075	-1,37564778
SERH+4	-399,221975	-399,213006	-399,2549	16,4	12,5	369,1	0,01	0,00	0,17	-1,472679	1,361604	-1,4728332
								1,00	6,06	-399,218885	358,188397	-399,25954
SER-H1	-398,358257	-398,350253	-398,389681	0,0	0,0	347,4	1,00	0,51	2,84	-204,696005	178,502694	-204,716265
SER-H2	-398,358165	-398,350209	-398,38954	0,1	0,4	346,5	0,86	0,44	3,00	-176,522379	153,555533	-176,539808
SER-H4	-398,35504	-398,347009	-398,387246	8,5	6,4	354,5	0,08	0,04	1,07	-15,8676244	14,1212032	-15,8692272
SER-H5	-398,353021	-398,344826	-398,384837	14,2	12,7	352,5	0,01	0,00	0,15	-1,26407869	1,11863936	-1,26420566
								1,00	7,06	-398,350087	347,29807	-398,389506

M062X/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,711284	-398,702784	-398,743417	0,9	0,0	358,0	1,00	0,42	3,03	-167,733795	150,607276	-167,75089
SER2	-398,711315	-398,703133	-398,742845	0,0	1,5	349,9	0,55	0,23	2,81	-91,9885991	80,7238515	-91,9977614
SER3	-398,710023	-398,701899	-398,741392	3,2	5,3	347,9	0,12	0,05	1,25	-19,9997736	17,453907	-20,0017546
SER4	-398,710613	-398,702282	-398,74231	2,2	2,9	352,7	0,31	0,13	2,22	-52,4471246	46,3908801	-52,4523901
SER5	-398,709391	-398,701118	-398,741022	5,3	6,3	351,6	0,08	0,03	0,96	-13,5602808	11,9573081	-13,561638
SER6	-398,708652	-398,700148	-398,74127	7,8	5,6	362,3	0,10	0,04	1,15	-17,5946022	15,9883277	-17,5964169
SER7	-398,708122	-398,699704	-398,739954	9,0	9,1	354,6	0,03	0,01	0,41	-4,41729645	3,92891177	-4,41774239
SER8	-398,707737	-398,69939	-398,739487	9,8	10,3	353,3	0,02	0,01	0,28	-2,70495062	2,39674268	-2,70522266
SER9	-398,707892	-398,69944	-398,739696	9,7	9,8	354,7	0,02	0,01	0,34	-3,36886396	2,99684462	-3,36920411
SER10	-398,708304	-398,699848	-398,740471	8,6	7,7	357,9	0,05	0,02	0,63	-7,60253395	6,82464475	-7,60330857
SER11	-398,708254	-398,699672	-398,740258	9,1	8,3	357,6	0,04	0,02	0,53	-6,07868607	5,45174892	-6,07930485
SER12A	-398,707797	-398,699461	-398,739462	9,6	10,4	352,4	0,02	0,01	0,28	-2,6348568	2,32904552	-2,63512115
SER12B	-398,706822	-398,69815	-398,739156	13,1	11,2	361,3	0,01	0,00	0,21	-1,91068984	1,73136701	-1,91088635
SER13	-398,708245	-398,69974	-398,740345	8,9	8,1	357,7	0,04	0,02	0,57	-6,6602441	5,97612218	-6,66092241
								1,00	14,66	-398,702297	354,756977	-398,742563
SERH+1	-399,054475	-399,045999	-399,086185	0,0	0,0	354,1	1,00	0,61	2,51	-243,187268	215,768684	-243,211758
SERH+2	-399,053569	-399,044866	-399,085743	3,0	1,2	360,1	0,63	0,38	3,06	-152,878052	137,974296	-152,893712
SERH+3	-399,049644	-399,041062	-399,081689	13,0	11,8	357,9	0,01	0,01	0,24	-2,1643503	1,94142438	-2,16457066
SERH+4	-399,048313	-399,039566	-399,08076	16,9	14,2	362,9	0,00	0,00	0,11	-0,81585444	0,74203851	-0,81593866
								1,00	5,91	-399,045525	356,426442	-399,08598
SER-H1	-398,185663	-398,177689	-398,217076	0,0	0,0	347,0	1,00	0,62	2,46	-247,015915	215,276525	-247,040349
SER-H2	-398,185203	-398,177317	-398,216528	1,0	1,4	345,5	0,56	0,35	3,05	-138,926113	120,53441	-138,939794
SER-H4	-398,182595	-398,174697	-398,214125	7,9	7,7	347,4	0,05	0,03	0,83	-11,1373581	9,7164816	-11,138461
SER-H5	-398,1801	-398,171946	-398,211919	15,1	13,5	352,2	0,00	0,00	0,14	-1,09807313	0,97123228	-1,09818337
								1,00	6,48	-398,17746	346,498649	-398,216788

CBS-QB3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,403867	-398,395276	-398,436035	1,6	0,0	359,1	1,00	0,31	3,02	-123,228981	111,075418	-123,241588
SER2	-398,404206	-398,395899	-398,436017	0,0	0,0	353,5	0,98	0,30	3,01	-120,921578	107,281288	-120,933755
SER3	-398,402747	-398,394608	-398,434094	3,4	5,1	347,9	0,13	0,04	1,08	-16,0483234	14,0137742	-16,049914
SER4	-398,403356	-398,394895	-398,435215	2,6	2,2	355,2	0,42	0,13	2,21	-52,0851199	46,4425637	-52,0903912
SER5	-398,402213	-398,393787	-398,434138	5,5	5,0	355,5	0,14	0,04	1,11	-16,8072631	14,9980398	-16,8089654
SER6	-398,401161	-398,392539	-398,433948	8,8	5,5	364,8	0,11	0,03	0,97	-13,7669389	12,6071433	-13,7683699
SER7	-398,401462	-398,392976	-398,433303	7,7	7,2	355,3	0,06	0,02	0,59	-6,9928717	6,23642783	-6,99358502
SER8	-398,401143	-398,392747	-398,432891	8,3	8,3	353,7	0,04	0,01	0,42	-4,53674189	4,02762521	-4,53719904
SER9	-398,401037	-398,392415	-398,433056	9,1	7,8	358,1	0,04	0,01	0,48	-5,39510077	4,84896047	-5,39565113
SER10	-398,400943	-398,392331	-398,433426	9,4	6,8	362,1	0,06	0,02	0,65	-7,95710361	7,23150659	-7,9579244
SER11	-398,401664	-398,392789	-398,434036	8,2	5,2	363,4	0,12	0,04	1,03	-15,0999014	13,7737047	-15,1014648
SER12A	-398,400899	-398,392359	-398,432877	9,3	8,3	357,0	0,04	0,01	0,42	-4,47052269	4,0058166	-4,47097736
SER12B	-398,399789	-398,391113	-398,431984	12,6	10,6	360,1	0,01	0,00	0,20	-1,75010119	1,58184724	-1,75028073
SER13	-398,401177	-398,392522	-398,433578	8,9	6,5	361,7	0,08	0,02	0,73	-9,33430147	8,47506501	-9,3352634
								1,00	15,92	-398,394854	356,599181	-398,435329
SERH+1	-398,748799	-398,740259	-398,780525	0,0	0,0	354,8	1,00	0,70	2,06	-280,426277	249,495586	-280,454595
SERH+2	-398,747631	-398,738905	-398,779689	3,6	2,2	359,3	0,42	0,29	2,99	-116,55232	105,031093	-116,564241
SERH+3	-398,743165	-398,73445	-398,775228	15,3	13,9	359,3	0,00	0,00	0,13	-1,07614681	0,96963759	-1,07625687
SERH+4	-398,741941	-398,733012	-398,774798	19,0	15,0	368,2	0,00	0,00	0,09	-0,68509161	0,63254731	-0,68516341
								1,00	5,27	-398,739835	356,128865	-398,780256
SER-H1	-397,87789	-397,869959	-397,909124	0,3	0,6	345,1	0,78	0,42	3,03	-168,408712	146,055291	-168,425289
SER-H2	-397,878005	-397,870055	-397,909365	0,0	0,0	346,3	1,00	0,55	2,75	-216,912115	188,817115	-216,933546
SER-H4	-397,875082	-397,867172	-397,906607	7,6	7,2	347,4	0,06	0,03	0,88	-11,9775424	10,4594106	-11,9787295
SER-H5	-397,87207	-397,863962	-397,90371	16,0	14,8	350,2	0,00	0,00	0,08	-0,57154958	0,50307223	-0,57160668
								1,00	6,73	-397,869919	345,834889	-397,909172

G3B3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,718563	-398,709852	-398,750865	1,5	0,0	361,3	1,00	0,33	3,04	-131,279303	118,975241	-131,292807
SER2	-398,71881	-398,710429	-398,75059	0,0	0,7	353,8	0,75	0,25	2,87	-98,3491188	87,2796817	-98,3590252
SER3	-398,717392	-398,709141	-398,748821	3,4	5,4	349,6	0,12	0,04	1,04	-15,3438778	13,4538432	-15,3454048
SER4	-398,718089	-398,709495	-398,750083	2,5	2,1	357,6	0,44	0,14	2,33	-57,74691	51,7923459	-57,7527886
SER5	-398,716763	-398,708239	-398,748756	5,7	5,5	357,0	0,11	0,04	0,99	-14,3313765	12,8311545	-14,3328328
SER6	-398,715922	-398,707172	-398,748816	8,6	5,4	366,9	0,12	0,04	1,04	-15,2634429	14,0458056	-15,2650371
SER7	-398,716424	-398,707789	-398,748428	6,9	6,4	358,0	0,08	0,03	0,78	-10,1551865	9,1195195	-10,1562216
SER8	-398,716087	-398,707551	-398,747981	7,6	7,6	356,2	0,05	0,02	0,55	-6,35056996	5,67358733	-6,35121392
SER9	-398,715932	-398,707181	-398,748083	8,5	7,3	360,4	0,05	0,02	0,59	-7,06861129	6,38881549	-7,06933644
SER10	-398,715362	-398,706638	-398,748148	10,0	7,1	365,7	0,06	0,02	0,63	-7,56797612	6,94184286	-7,56876403
SER11	-398,716491	-398,707467	-398,749022	7,8	4,8	366,1	0,14	0,05	1,20	-18,9499739	17,4009634	-18,951949
SER12A	-398,715474	-398,706836	-398,74755	9,4	8,7	358,7	0,03	0,01	0,39	-4,03863423	3,63345989	-4,03904664
SER12B	-398,714628	-398,70584	-398,746897	12,0	10,4	361,7	0,02	0,01	0,22	-2,03424242	1,84558087	-2,0344519
SER13	-398,715891	-398,707105	-398,748435	8,7	6,4	364,1	0,08	0,03	0,78	-10,2300989	9,34301446	-10,2311594
								1,00	16,46	-398,709322	358,724855	-398,750038
SERH+1	-399,064254	-399,055587	-399,096085	0,0	0,0	356,8	1,00	0,68	2,17	-271,906434	243,117053	-271,934028
SERH+2	-399,063169	-399,05432	-399,095343	3,3	1,9	361,4	0,46	0,31	3,02	-124,736865	112,975945	-124,749688
SERH+3	-399,058865	-399,049983	-399,091114	14,7	13,1	362,4	0,01	0,00	0,17	-1,46946703	1,33443547	-1,46961849
SERH+4	-399,057707	-399,048629	-399,090691	18,3	14,2	370,6	0,00	0,00	0,12	-0,94238798	0,8751643	-0,94248731
								1,00	5,49	-399,055154	358,302598	-399,095822
SER-H1	-398,191174	-398,183134	-398,222517	0,1	0,5	347,0	0,81	0,43	3,01	-172,891375	150,65898	-172,908475
SER-H2	-398,191235	-398,183183	-398,222712	0,0	0,0	348,3	1,00	0,53	2,79	-212,183747	185,584109	-212,204811
SER-H4	-398,188393	-398,180397	-398,220006	7,3	7,1	349,0	0,06	0,03	0,90	-12,3740858	10,8448334	-12,3753167
SER-H5	-398,185531	-398,177304	-398,217316	15,4	14,2	352,5	0,00	0,00	0,10	-0,73385682	0,64971195	-0,73393057
								1,00	6,79	-398,183064	347,737634	-398,222533

G4MP2

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,497522	-398,488878	-398,529749	0,9	0,0	360,1	1,00	0,36	3,06	-145,158115	131,170489	-145,1730035
SER2	-398,497544	-398,489215	-398,529329	0,0	1,1	353,4	0,64	0,23	2,83	-93,3859069	82,8240566	-93,39530766
SER3	-398,496029	-398,487832	-398,52744	3,6	6,1	349,0	0,09	0,03	0,92	-12,8444161	11,2480691	-12,8456928
SER4	-398,496862	-398,488363	-398,528765	2,2	2,6	356,0	0,36	0,13	2,20	-51,6466589	46,1344355	-51,65189528
SER5	-398,495404	-398,486974	-398,527292	5,9	6,5	355,2	0,08	0,03	0,82	-10,9954046	9,80148374	-10,99651708
SER6	-398,494909	-398,486239	-398,527748	7,8	5,3	365,7	0,12	0,04	1,15	-17,7496674	16,2897688	-17,7515163
SER7	-398,495297	-398,486725	-398,527249	6,5	6,6	357,0	0,07	0,03	0,80	-10,5099055	9,41657607	-10,51097433
SER8	-398,494952	-398,486484	-398,526786	7,2	7,8	355,1	0,04	0,02	0,56	-6,46287969	5,75883762	-6,463533333
SER9	-398,494862	-398,486151	-398,52701	8,0	7,2	360,0	0,06	0,02	0,66	-8,17694783	7,38688753	-8,177786262
SER10	-398,494181	-398,48553	-398,526986	9,7	7,3	365,2	0,05	0,02	0,65	-7,97341272	7,30827437	-7,974242228
SER11	-398,495349	-398,486424	-398,527786	7,3	5,2	364,4	0,13	0,05	1,18	-18,4723467	16,892963	-18,47426409
SER12A	-398,494163	-398,485594	-398,526235	9,5	9,2	358,1	0,02	0,01	0,36	-3,62339908	3,25584475	-3,623768626
SER12B	-398,493627	-398,48488	-398,5259	11,4	10,1	361,4	0,02	0,01	0,27	-2,54872636	2,31154726	-2,548988721
SER13	-398,494656	-398,485967	-398,527095	8,5	7,0	362,4	0,06	0,02	0,71	-8,94044616	8,12979341	-8,941368908
								1,00	16,17	-398,488233	357,929027	-398,5288591
SERH+1	-398,843199	-398,834646	-398,874939	0,0	0,0	355,0	1,00	0,68	2,20	-269,846766	240,187113	-269,8740278
SERH+2	-398,842196	-398,833481	-398,87422	3,1	1,9	358,9	0,47	0,32	3,03	-126,818578	114,129363	-126,8315317
SERH+3	-398,837736	-398,828969	-398,869902	14,9	13,2	360,6	0,01	0,00	0,16	-1,36067735	1,23037584	-1,360817005
SERH+4	-398,836589	-398,827646	-398,869406	18,4	14,5	367,9	0,00	0,00	0,10	-0,80822088	0,74559169	-0,80830551
								1,00	5,49	-398,834242	356,292443	-398,874682
SER-H1	-397,968858	-397,960944	-398,000084	0,2	0,3	344,8	0,89	0,45	2,99	-178,233347	154,441883	-178,2508761
SER-H2	-397,968927	-397,961007	-398,000196	0,0	0,0	345,3	1,00	0,50	2,87	-200,48034	173,936693	-200,500082
SER-H4	-397,966284	-397,958357	-397,997895	7,0	6,0	348,3	0,09	0,04	1,16	-17,8892384	15,6590236	-17,89101577
SER-H5	-397,963712	-397,955566	-397,99544	14,3	12,5	351,3	0,01	0,00	0,16	-1,35791619	1,1987371	-1,358052253
								1,00	7,18	-397,960841	345,236337	-398,0000262

G4

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
SER1	-398,784309	-398,775664	-398,816538	1,2	0,0	360,1	1,00	0,35	3,05	-138,177067	124,781506	-138,19123
SER2	-398,784469	-398,776137	-398,81626	0,0	0,7	353,5	0,75	0,26	2,91	-103,19099	91,4748644	-103,201373
SER3	-398,78292	-398,774723	-398,814334	3,7	5,8	349,0	0,10	0,03	0,96	-13,6520924	11,9476684	-13,6534485
SER4	-398,783707	-398,775207	-398,815612	2,4	2,4	356,0	0,38	0,13	2,21	-52,250508	46,6437262	-52,2558022
SER5	-398,782141	-398,773712	-398,814026	6,4	6,6	355,2	0,07	0,02	0,76	-9,87917162	8,79925005	-9,88017035
SER6	-398,781748	-398,773078	-398,814587	8,0	5,1	365,7	0,13	0,04	1,15	-17,8069579	16,3305921	-17,8088115
SER7	-398,782193	-398,773621	-398,814145	6,6	6,3	357,0	0,08	0,03	0,83	-11,1942722	10,0225333	-11,1954098
SER8	-398,781841	-398,773373	-398,813675	7,3	7,5	355,1	0,05	0,02	0,58	-6,83329928	6,08452455	-6,83398989
SER9	-398,78169	-398,772979	-398,813838	8,3	7,1	360,0	0,06	0,02	0,66	-8,10911896	7,32034317	-8,10994984
SER10	-398,780919	-398,772268	-398,813725	10,2	7,4	365,3	0,05	0,02	0,60	-7,20168368	6,59633531	-7,20243238
SER11	-398,782097	-398,773172	-398,814534	7,8	5,3	364,4	0,12	0,04	1,11	-16,8428951	15,3917535	-16,8446421
SER12A	-398,780896	-398,772327	-398,812968	10,0	9,4	358,1	0,02	0,01	0,33	-3,25214114	2,92014567	-3,25247258
SER12B	-398,78041	-398,771663	-398,812683	11,7	10,1	361,4	0,02	0,01	0,26	-2,41091158	2,18498474	-2,41115958
SER13	-398,781383	-398,772694	-398,813822	9,0	7,1	362,4	0,06	0,02	0,65	-7,97399252	7,24575694	-7,97481493
								1,00	16,07	-398,775102	357,743984	-398,815707
SERH+1	-399,129967	-399,121415	-399,161708	0,0	0,0	355,0	1,00	0,68	2,17	-272,557563	242,42565	-272,585078
SERH+2	-399,128935	-399,12022	-399,16096	3,1	2,0	358,9	0,46	0,31	3,02	-124,250195	111,740377	-124,262878
SERH+3	-399,12457	-399,115802	-399,156735	14,7	13,1	360,6	0,01	0,00	0,17	-1,46989529	1,32817961	-1,47004604
SERH+4	-399,12339	-399,114446	-399,156206	18,3	14,4	367,9	0,00	0,00	0,11	-0,84335438	0,77744362	-0,84344262
								1,00	5,47	-399,121008	356,27165	-399,161445
SER-H1	-398,25644	-398,248526	-398,287666	0,3	0,5	344,8	0,83	0,43	3,01	-172,107191	149,025785	-172,124105
SER-H2	-398,256573	-398,248653	-398,287842	0,0	0,0	345,3	1,00	0,52	2,83	-207,048487	179,505469	-207,068861
SER-H4	-398,253897	-398,24597	-398,285508	7,0	6,1	348,3	0,09	0,04	1,16	-17,8460013	15,6098952	-17,847773
SER-H5	-398,251246	-398,243101	-398,282974	14,6	12,8	351,3	0,01	0,00	0,15	-1,24678154	1,09980774	-1,24690637
								1,00	7,15	-398,248461	345,240957	-398,287646

L-Threonine

Figure S4. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the ten most stable conformers of neutral L-threonine.

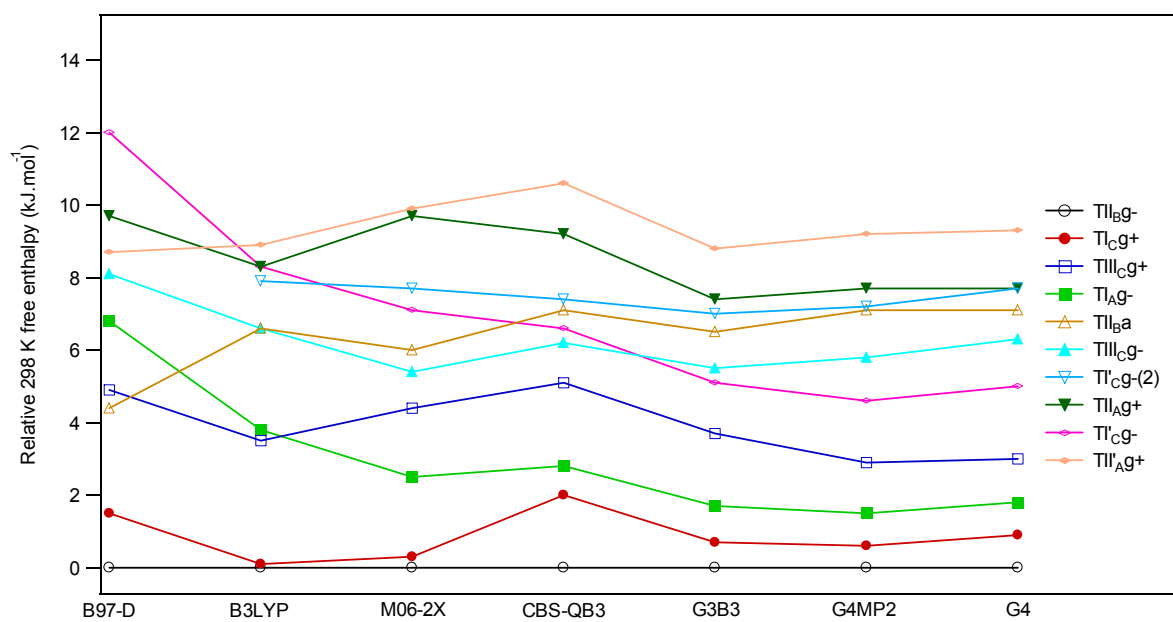
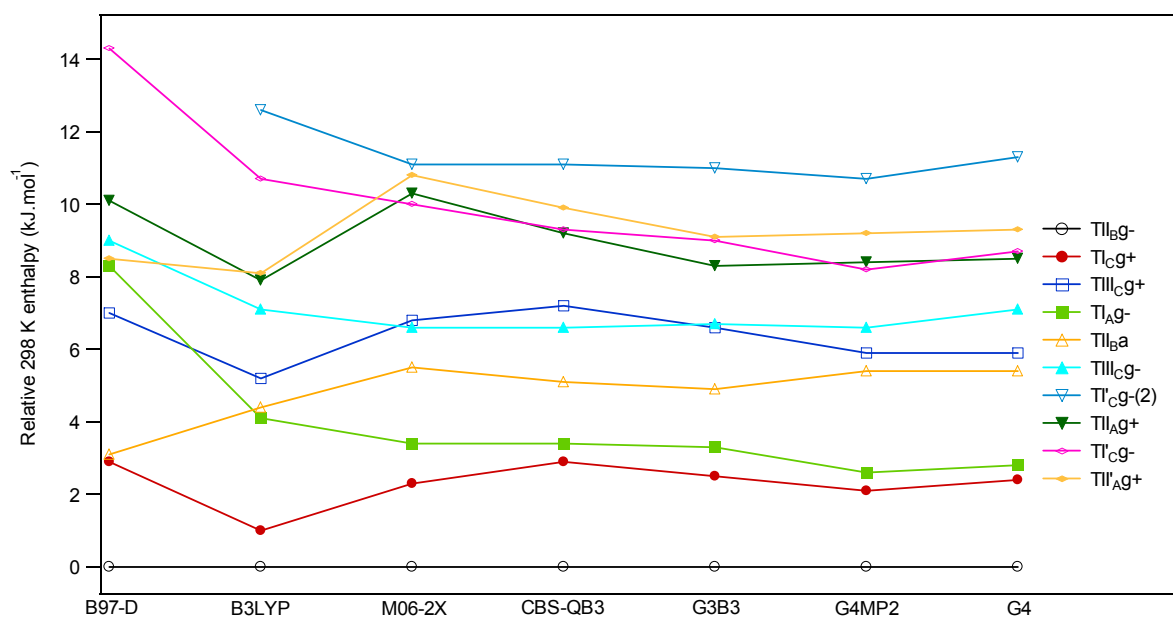


Figure S5 Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the four most stable conformers of deprotonated L-threonine.

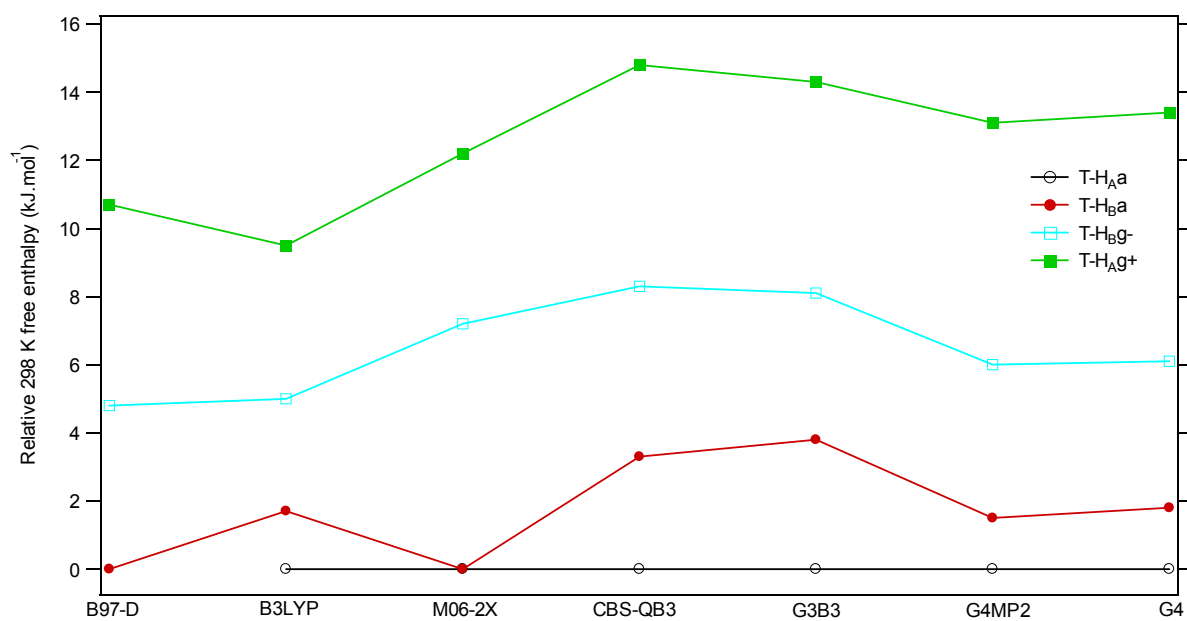
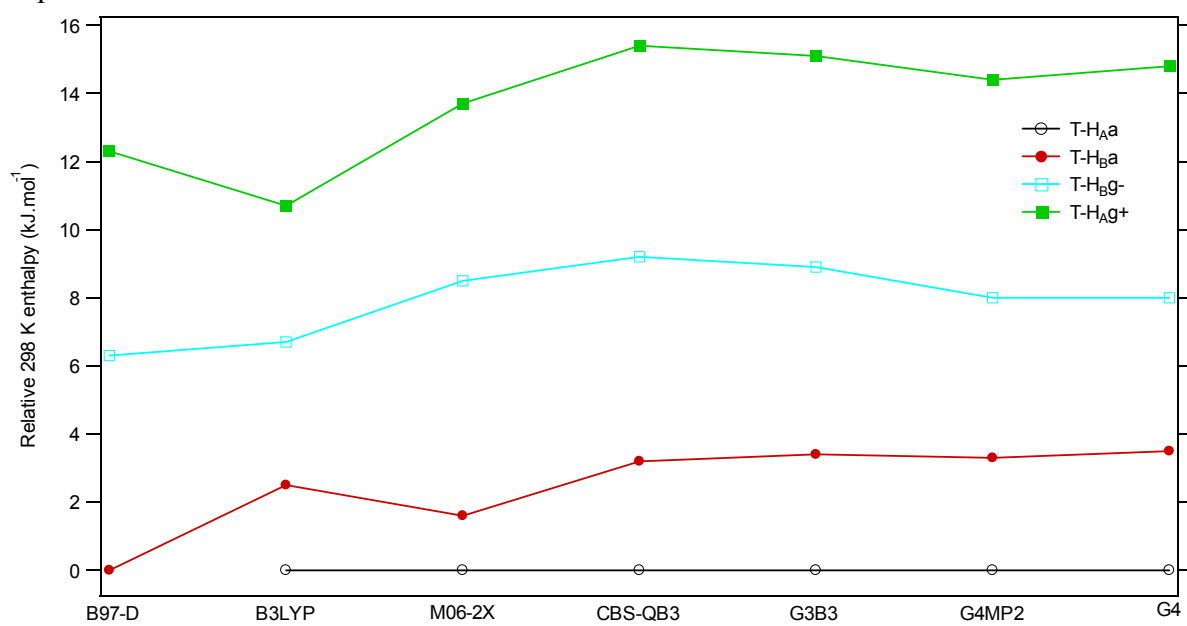


Figure S6 Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the four most stable conformers of protonated L-threonine.

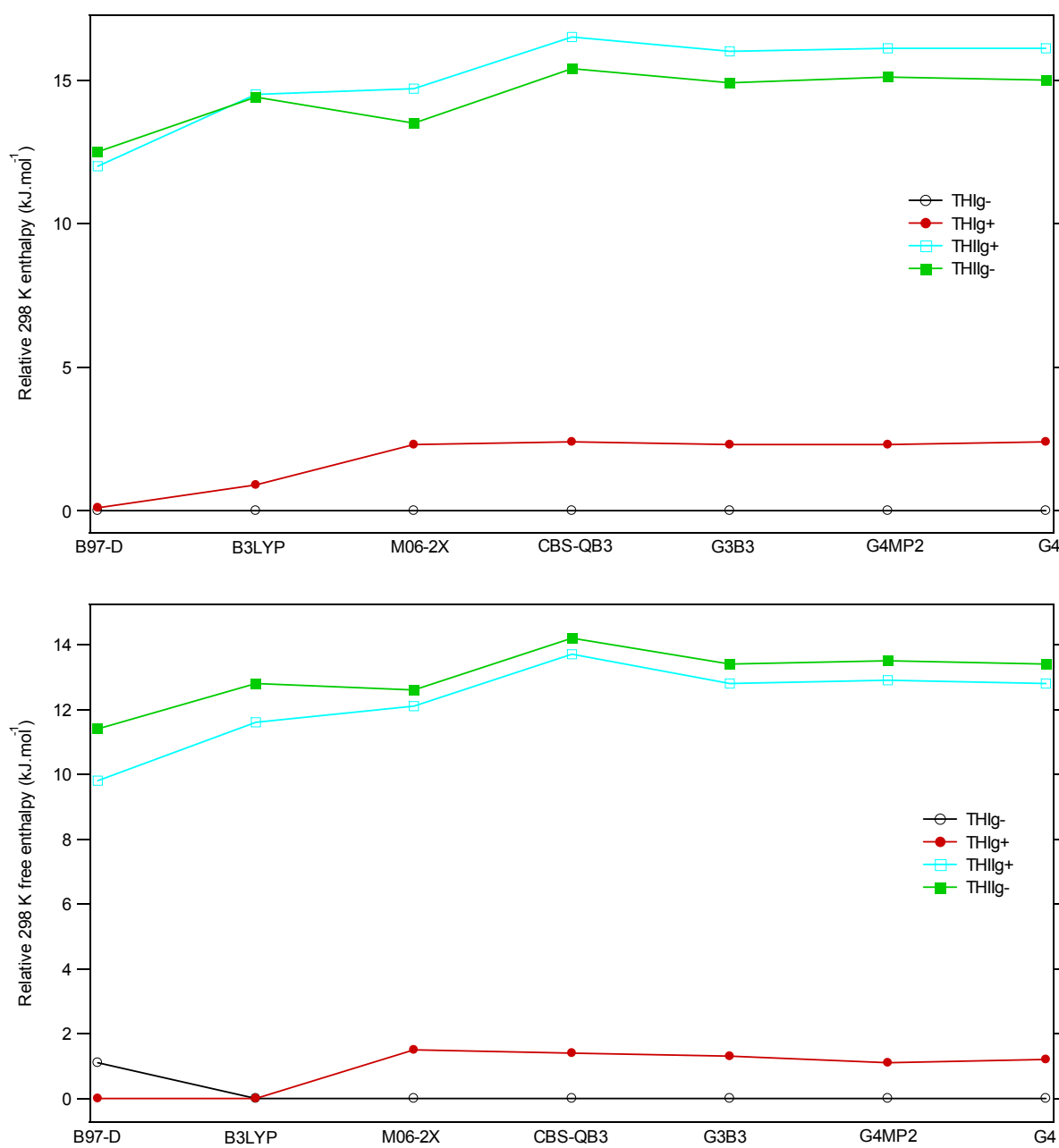
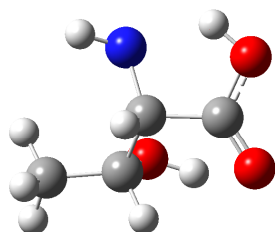
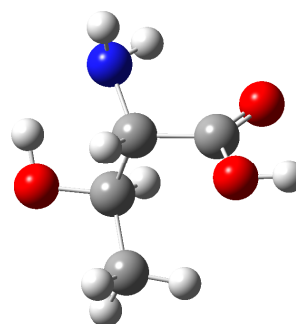


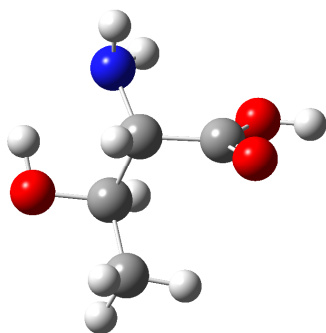
Figure S7. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twelve conformers of neutral L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated at the G4 level).



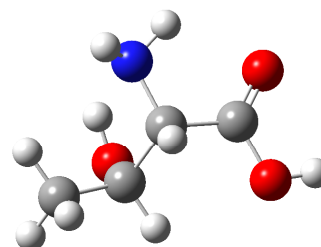
THR1 [0.0; 0.0]



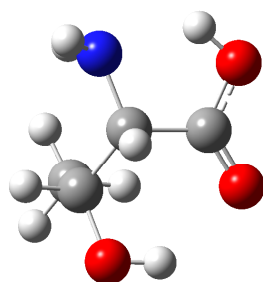
THR2 [1.0; 0.1]



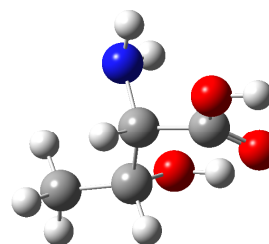
THR3 [5.2; 3.5]



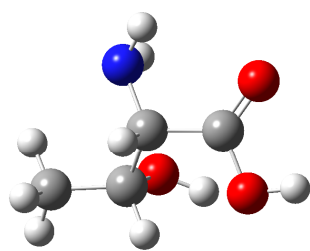
THR4 [4.1; 3.8]



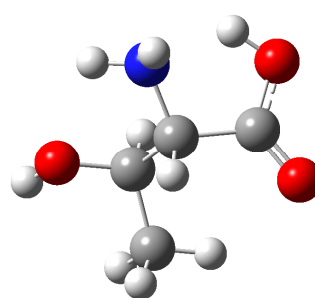
THR5 [4.4; 6.6]



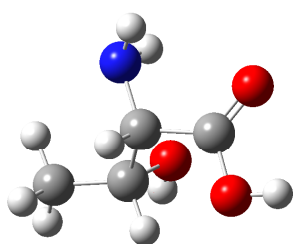
THR6 [7.1; 6.6]



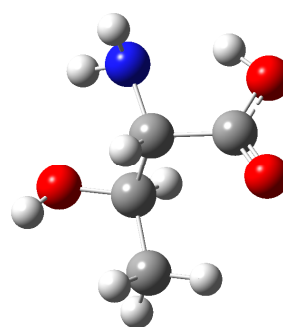
THR7 [12.6; 7.9]



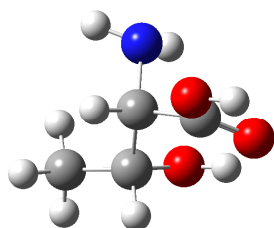
THR8 [7.9; 8.3]



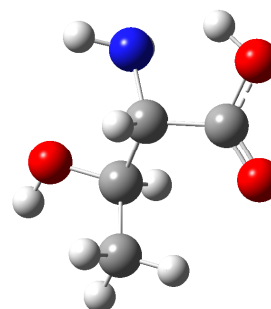
THR9 [10.7; 8.3]



THR10 [8.1; 8.9]

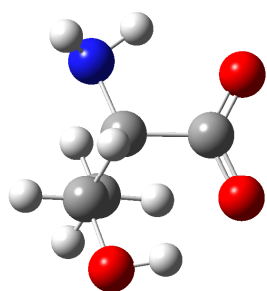


THR11 [10.3; 9.8]

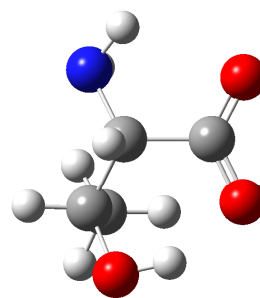


THR12 [11.1; 10.2]

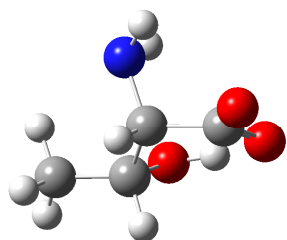
Figure S8. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first four conformers of deprotonated L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



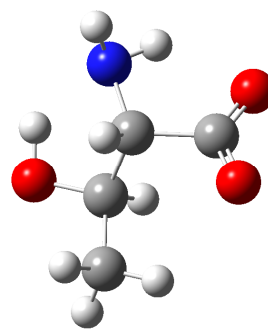
THR-H1 [0.0; 0.0]



THR-H2 [2.5; 1,7]

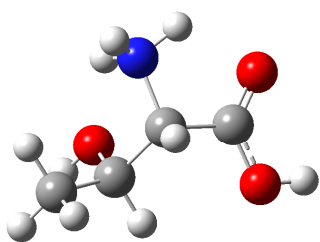


THR-H3 [6.7; 5.0]

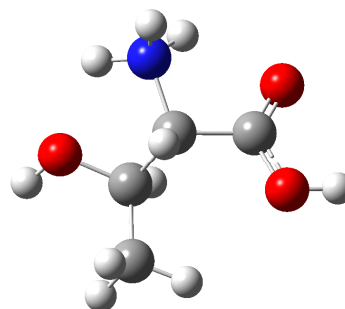


THR-H4 [10.7; 9.5]

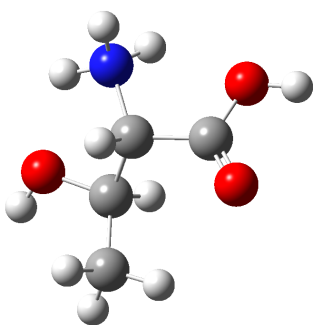
Figure S9. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first four conformers of protonated L-threonine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



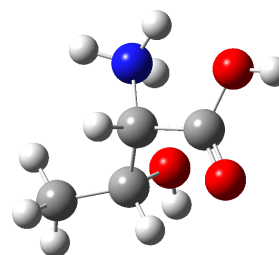
THR+1 [0.0; 0.0]



THR+2 [0.9; 0.0]



THR+3 [14.5; 11.6]



THR+4 [14.4; 12.8]

Table T2. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-threonine.
B97D/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-437,902638	-437,89279	-437,936239	0,0	0,0	382,8	1,00	0,49	2,91	-213,077339	186,2709	-213,098481
THR2	-437,901727	-437,891673	-437,935677	2,9	1,5	387,7	0,55	0,27	2,94	-118,089197	104,551772	-118,101063
THR3	-437,900212	-437,890105	-437,934358	7,0	4,9	389,9	0,14	0,07	1,51	-29,5541112	26,3142652	-29,5570979
THR4	-437,899762	-437,889632	-437,933646	8,3	6,8	387,8	0,07	0,03	0,91	-13,9919111	12,3907893	-13,9933174
THR5	-437,90133	-437,891611	-437,934554	3,1	4,4	378,3	0,17	0,08	1,72	-36,3089948	31,3715329	-36,3125555
THR6	-437,899346	-437,889381	-437,933164	9,0	8,1	385,7	0,04	0,02	0,63	-8,43409491	7,42976957	-8,4349382
THR8	-437,898907	-437,888945	-437,932549	10,1	9,7	384,2	0,02	0,01	0,39	-4,42118789	3,87879726	-4,42162814
THR9	-437,89766	-437,887328	-437,93168	14,3	12,0	390,8	0,01	0,00	0,19	-1,77496538	1,5839318	-1,77514516
THR10	-437,899388	-437,889538	-437,932922	8,5	8,7	382,2	0,03	0,01	0,52	-6,54128982	5,70984307	-6,5419379
THR11	-437,8982	-437,888098	-437,932356	12,3	10,2	389,9	0,02	0,01	0,33	-3,61003648	3,21466701	-3,61040135
THR12	-437,897855	-437,887814	-437,931835	13,1	11,6	387,8	0,01	0,00	0,21	-2,08874421	1,85002698	-2,08895419
THR7	-437,899346	-437,889381	-437,933166	9,0	8,1	387,8	0,01	1,00	12,26	-437,891871	384,566295	-437,93552
THR+1	-438,25327	-438,242971	-438,28717	0,0	1,1	389,4	0,65	0,39	3,05	-169,638511	150,736246	-169,65562
THR+2	-438,253325	-438,24293	-438,287579	0,1	0,0	393,4	1,00	0,59	2,57	-260,655986	233,970056	-260,682542
THR+3	-438,248977	-438,238386	-438,283856	12,0	9,8	400,6	0,02	0,01	0,44	-5,22417299	4,77559894	-5,22471503
THR+4	-438,248782	-438,238216	-438,283236	12,5	11,4	396,6	0,01	0,01	0,26	-2,72419267	2,46563521	-2,72447253
THR-H2	-437,373831	-437,364362	-437,407003	0,0	0,0	375,7	1,00	0,86	1,08	-376,154389	323,106638	-376,191062
THR-H3	-437,371486	-437,361945	-437,405188	6,3	4,8	381,0	0,15	0,13	2,19	-55,9177097	48,710205	-55,9232384
THR-H4	-437,369372	-437,359689	-437,402943	12,3	10,7	381,1	0,01	0,01	0,44	-5,29189806	4,61099607	-5,29242142
THR-H1	-437,373825	-437,364357	-437,406994	0,0	0,0	375,7	1,00	0,86	1,08	-376,154389	323,106638	-376,191062

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

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-438,17654	-438,16679	-438,210241	0,0	0,0	382,8	1,00	0,36	3,06	-158,517802	138,495008	-158,533522
THR2	-438,176303	-438,166416	-438,21022	1,0	0,1	385,9	0,98	0,35	3,06	-155,059955	136,57465	-155,075457
THR3	-438,174764	-438,1648	-438,208911	5,2	3,5	388,6	0,25	0,09	1,80	-39,2164524	34,7835161	-39,2204004
THR4	-438,175119	-438,165216	-438,208783	4,1	3,8	383,8	0,22	0,08	1,66	-34,283758	30,033361	-34,2871668
THR5	-438,174651	-438,165101	-438,207736	4,4	6,6	375,6	0,07	0,03	0,79	-11,4170979	9,78768465	-11,4182089
THR6	-438,173958	-438,164085	-438,207725	7,1	6,6	384,5	0,07	0,03	0,78	-11,2859381	9,90333309	-11,2870621
THR7	-438,172275	-438,161993	-438,207216	12,6	7,9	398,4	0,04	0,02	0,53	-6,61275895	6,01316494	-6,61344146
THR8	-438,173555	-438,163771	-438,207081	7,9	8,3	381,6	0,04	0,01	0,47	-5,73867309	4,99757088	-5,73924033
THR9	-438,172976	-438,162705	-438,207065	10,7	8,3	390,8	0,04	0,01	0,47	-5,64303692	5,03343864	-5,64360823
THR10	-438,173403	-438,163689	-438,206865	8,1	8,9	380,4	0,03	0,01	0,40	-4,57398414	3,97096842	-4,57443485
THR11	-438,172786	-438,16286	-438,206498	10,3	9,8	384,5	0,02	0,01	0,29	-3,11104703	2,72980491	-3,11135687
THR12	-438,172473	-438,162556	-438,206365	11,1	10,2	386,0	0,02	0,01	0,26	-2,7054873	2,38324854	-2,7057578
							1,00		13,56	-438,165992	384,705749	-438,209657
THR+1	-438,524901	-438,51488	-438,558546	0,0	0,0	384,7	1,00	0,50	2,88	-219,028631	192,156785	-219,050441
THR+2	-438,524607	-438,514519	-438,558533	0,9	0,0	387,8	0,99	0,49	2,90	-216,058463	191,061817	-216,080149
THR+3	-438,519652	-438,509358	-438,554131	14,5	11,6	394,5	0,01	0,00	0,21	-2,12241982	1,90925695	-2,12263653
THR+4	-438,51963	-438,509396	-438,553668	14,4	12,8	390,1	0,01	0,00	0,14	-1,30514527	1,16092683	-1,30527703
							1,00		6,14	-438,514659	386,288785	-438,558504
THR-H1	-437,651735	-437,642328	-437,684881	0,0	0,0	374,9	1,00	0,60	2,54	-262,956947	225,26373	-262,982515
THR-H2	-437,650883	-437,641386	-437,684232	2,5	1,7	377,5	0,51	0,30	3,01	-133,007879	114,726838	-133,0209
THR-H3	-437,649247	-437,639794	-437,682985	6,7	5,0	380,5	0,14	0,08	1,71	-35,9024424	31,2173625	-35,9059857
THR-H4	-437,647719	-437,638253	-437,681245	10,7	9,5	378,8	0,02	0,01	0,47	-5,77451232	4,99785261	-5,77507959
							1,00		7,73	-437,64178	376,205783	-437,68448

M06-2X/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-437,98531	-437,975793	-438,018456	0,0	0,0	375,9	1,00	0,35	3,06	-154,716491	132,780301	-154,731562
THR2	-437,984697	-437,974926	-438,01836	2,3	0,3	382,7	0,90	0,32	3,03	-139,878358	122,215661	-139,89223
THR3	-437,982983	-437,973199	-438,016794	6,8	4,4	384,1	0,17	0,06	1,43	-27,0086188	23,6857576	-27,0113072
THR4	-437,984203	-437,974496	-438,017512	3,4	2,5	379,0	0,37	0,13	2,21	-57,4090864	49,6772557	-57,4147249
THR5	-437,98318	-437,973713	-438,016182	5,5	6,0	374,2	0,09	0,03	0,92	-14,2027386	12,1336606	-14,2041158
THR6	-437,982964	-437,973279	-438,016402	6,6	5,4	379,9	0,12	0,04	1,09	-17,894221	15,5227945	-17,8959829
THR7	-437,981532	-437,971554	-438,015535	11,1	7,7	387,5	0,05	0,02	0,56	-7,19906008	6,36928602	-7,19978301
THR8	-437,981462	-437,971868	-438,014763	10,3	9,7	377,9	0,02	0,01	0,30	-3,20014714	2,76137992	-3,20046056
THR9	-437,982019	-437,972003	-438,015739	10,0	7,1	385,3	0,06	0,02	0,66	-8,9190755	7,84708416	-8,91996616
THR10	-437,981307	-437,971696	-438,014693	10,8	9,9	378,8	0,02	0,01	0,28	-2,97332958	2,57176286	-2,97362148
THR11	-437,981241	-437,971554	-438,014686	11,1	9,9	380,0	0,02	0,01	0,28	-2,95155064	2,56094169	-2,95184131
THR12	-437,980517	-437,970757	-438,014116	13,2	11,4	382,0	0,01	0,00	0,17	-1,62208905	1,41483109	-1,62224963
							1,00	1,00	13,99	-437,974765	379,540716	-438,017844
THRH+1	-438,330732	-438,320762	-438,364287	0,0	0,0	383,5	1,00	0,64	2,39	-279,339836	244,385464	-279,367575
THRH+2	-438,329885	-438,319888	-438,363726	2,3	1,5	386,2	0,55	0,35	3,06	-154,975168	136,558089	-154,990668
THRH+3	-438,325305	-438,315153	-438,359883	14,7	12,1	392,3	0,01	0,01	0,22	-2,21953008	1,98665751	-2,21975557
THRH+4	-438,32564	-438,315611	-438,359476	13,5	12,6	386,5	0,01	0,00	0,19	-1,78586902	1,57462287	-1,78604774
							1,00	1,00	5,85	-438,320404	384,504833	-438,364046
THR-H1	-437,459368	-437,450086	-437,492367	0,0	0,0	372,5	0,99	0,48	2,93	-210,463325	179,221014	-210,483667
THR-H2	-437,45892	-437,449483	-437,492381	1,6	0,0	377,9	1,00	0,49	2,91	-213,580291	184,529612	-213,601235
THR-H3	-437,456172	-437,446853	-437,48962	8,5	7,2	376,8	0,06	0,03	0,81	-11,7564805	10,1264349	-11,7576299
THR-H4	-437,454286	-437,444883	-437,48775	13,7	12,2	377,7	0,01	0,00	0,17	-1,64958892	1,42420084	-1,64975057
							1,00	1,00	6,82	-437,449685	375,301262	-437,492283

CBS-QB3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-437,637325	-437,627609	-437,6709	0,0	0,0	381,4	1,00	0,45	2,99	-195,7709	170,622696	-195,790266
THR2	-437,636356	-437,626491	-437,670145	2,9	2,0	384,6	0,45	0,20	2,69	-88,5919984	77,859336	-88,6008356
THR3	-437,634828	-437,62488	-437,668944	7,2	5,1	388,2	0,13	0,06	1,36	-25,0969835	22,263795	-25,0995105
THR4	-437,636215	-437,626313	-437,669821	3,4	2,8	383,3	0,32	0,14	2,32	-63,0404343	55,217997	-63,0467017
THR5	-437,635197	-437,625668	-437,668192	5,1	7,1	374,7	0,06	0,03	0,79	-11,3929992	9,753605	-11,3941063
THR6	-437,634926	-437,625086	-437,66852	6,6	6,2	382,7	0,08	0,04	1,01	-16,0781842	14,059192	-16,0797799
THR7	-437,633559	-437,623385	-437,668094	11,1	7,4	393,9	0,05	0,02	0,73	-10,2787046	9,251850	-10,2797548
THR8	-437,6339	-437,624123	-437,667389	9,2	9,2	381,2	0,03	0,01	0,42	-4,90220415	4,270047	-4,90268881
THR9	-437,634332	-437,62405	-437,668401	9,3	6,6	390,8	0,07	0,03	0,92	-14,1892859	12,669472	-14,1907239
THR10	-437,63352	-437,623855	-437,666879	9,9	10,6	379,1	0,01	0,01	0,27	-2,86934081	2,485351	-2,8696229
THR11	-437,633629	-437,623747	-437,667201	10,1	9,7	382,8	0,02	0,01	0,36	-4,02387944	3,520218	-4,02427899
THR12	-437,632468	-437,622546	-437,66619	13,3	12,4	384,5	0,01	0,00	0,15	-1,391652	1,222788	-1,39179078
								1,00	14,02	-437,626566	383,196348	-437,67006
THRHH+1	-437,984029	-437,974037	-438,017586	0,0	0,0	383,7	1,00	0,63	2,40	-277,574373	243,167174	-277,601973
THRHH+2	-437,983197	-437,973129	-438,017051	2,4	1,4	387,0	0,57	0,36	3,06	-158,25851	139,829071	-158,274381
THRHH+3	-437,978003	-437,967756	-438,012383	16,5	13,7	393,2	0,00	0,00	0,13	-1,17572381	1,05549609	-1,17584361
THRHH+4	-437,978339	-437,968176	-438,012195	15,4	14,2	387,8	0,00	0,00	0,11	-0,9650719	0,85458063	-0,9651689
								1,00	5,71	-437,973679	384,906322	-438,017367
THR-H1	-437,111395	-437,102032	-437,144475	0,0	0,0	373,9	1,00	0,77	1,70	-334,468186	286,13687	-334,500664
THR-H2	-437,110185	-437,100798	-437,143223	3,2	3,3	373,8	0,27	0,21	2,70	-89,8093009	76,7993114	-89,8180178
THR-H3	-437,107904	-437,098543	-437,141301	9,2	8,3	376,7	0,04	0,03	0,82	-11,9317031	10,283388	-11,9328703
THR-H4	-437,105555	-437,096182	-437,138832	15,4	14,8	375,8	0,00	0,00	0,11	-0,89248085	0,76724963	-0,89256794
								1,00	5,33	-437,101671	373,986819	-437,14412

G3B3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-437,997985	-437,988198	-438,031447	0,0	0,0	381,0	1,00	0,33	3,05	-146,224043	127,212038	-146,238482
THR2	-437,997273	-437,987255	-438,031195	2,5	0,7	387,1	0,77	0,26	2,90	-112,222941	99,1918483	-112,234199
THR3	-437,995782	-437,985684	-438,030029	6,6	3,7	390,7	0,23	0,08	1,62	-32,981627	29,4206713	-32,9849663
THR4	-437,997016	-437,986952	-438,030803	3,3	1,7	386,3	0,51	0,17	2,50	-74,3518342	65,585189	-74,3592783
THR5	-437,995952	-437,986323	-438,028962	4,9	6,5	375,7	0,07	0,02	0,76	-10,755193	9,22487368	-10,75624
THR6	-437,995616	-437,985637	-438,029367	6,7	5,5	385,3	0,11	0,04	1,03	-16,4564606	14,4761075	-16,4581036
THR7	-437,99429	-437,984013	-438,028762	11,0	7,0	394,3	0,06	0,02	0,65	-8,71759531	7,84725091	-8,71848599
THR8	-437,994976	-437,985038	-438,028612	8,3	7,4	383,9	0,05	0,02	0,58	-7,44703356	6,52750516	-7,44777444
THR9	-437,995243	-437,984788	-438,029508	9,0	5,1	394,0	0,13	0,04	1,14	-19,0829335	17,1665753	-19,084882
THR10	-437,994565	-437,984733	-438,028086	9,1	8,8	382,0	0,03	0,01	0,38	-4,28623993	3,73794081	-4,28666642
THR11	-437,994287	-437,984289	-438,027975	10,3	9,1	384,9	0,03	0,01	0,34	-3,81460325	3,35219198	-3,81498373
THR12	-437,993352	-437,983329	-438,027175	12,9	11,2	386,6	0,01	0,00	0,17	-1,64653714	1,4535362	-1,64670212
								1,00	15,10	-437,987041	385,195728	-438,030762
THR+1	-438,345683	-438,335532	-438,379378	0,0	0,0	386,3	1,00	0,62	2,46	-272,650991	240,284713	-272,678264
THR+2	-438,344891	-438,334665	-438,378887	2,3	1,3	389,6	0,60	0,37	3,06	-162,803244	144,707612	-162,819669
THR+3	-438,33986	-438,329422	-438,374497	16,0	12,8	397,1	0,01	0,00	0,17	-1,61955662	1,46732733	-1,61972316
THR+4	-438,340199	-438,329842	-438,374259	14,9	13,4	391,3	0,00	0,00	0,14	-1,26137926	1,12613285	-1,26150708
								1,00	5,83	-438,335171	387,585785	-438,379163
THR-H1	-437,470787	-437,461318	-437,503932	0,0	0,0	375,4	1,00	0,80	1,51	-348,124349	298,774001	-348,15826
THR-H2	-437,469465	-437,460015	-437,502467	3,4	3,8	374,0	0,21	0,17	2,51	-74,7398757	63,9010394	-74,7471287
THR-H3	-437,467378	-437,457918	-437,500834	8,9	8,1	378,1	0,04	0,03	0,89	-13,4507164	11,6258343	-13,4520359
THR-H4	-437,46508	-437,45557	-437,498489	15,1	14,3	378,1	0,00	0,00	0,13	-1,14603482	0,99062484	-1,14614726
								1,00	5,04	-437,460976	375,2915	-437,503572

G4MP2

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-437,744103	-437,734376	-437,777588	0,0	0,0	380,7	1,00	0,32	3,03	-140,687906	122,361907	-140,701794
THR2	-437,743497	-437,733563	-437,777344	2,1	0,6	385,7	0,77	0,25	2,88	-108,885116	95,9489235	-108,896006
THR3	-437,742183	-437,732139	-437,776465	5,9	2,9	390,5	0,31	0,10	1,90	-43,2572259	38,5926438	-43,2616062
THR4	-437,743344	-437,733388	-437,777013	2,6	1,5	384,4	0,55	0,18	2,54	-76,9131409	67,5339376	-76,9208062
THR5	-437,741898	-437,732327	-437,774895	5,4	7,1	375,0	0,06	0,02	0,63	-8,31740844	7,12620666	-8,31821729
THR6	-437,741724	-437,731858	-437,775364	6,6	5,8	383,3	0,10	0,03	0,90	-13,6112064	11,9188232	-13,6125592
THR7	-437,740456	-437,730302	-437,774864	10,7	7,2	392,6	0,06	0,02	0,61	-8,05094838	7,22105849	-8,05176798
THR8	-437,741048	-437,731172	-437,774666	8,4	7,7	383,2	0,05	0,01	0,52	-6,53944489	5,72477626	-6,54009467
THR9	-437,741615	-437,731244	-437,775842	8,2	4,6	392,9	0,16	0,05	1,27	-22,485882	20,1842921	-22,488173
THR10	-437,740608	-437,730865	-437,774065	9,2	9,2	380,6	0,02	0,01	0,32	-3,47877904	3,02481752	-3,47912236
THR11	-437,74059	-437,730701	-437,774171	9,6	9,0	383,0	0,03	0,01	0,35	-3,88841728	3,40213275	-3,88880343
THR12	-437,739533	-437,729534	-437,773336	12,7	11,2	385,9	0,01	0,00	0,17	-1,61782482	1,42631465	-1,61798671
								1,00	15,12	-437,7333	384,465833	-437,776937
THRH+1	-438,092031	-438,08205	-438,125568	0,0	0,0	383,4	1,00	0,60	2,54	-263,283643	230,426862	-263,309797
THRH+2	-438,091284	-438,081188	-438,125163	2,3	1,1	387,4	0,65	0,39	3,05	-172,069587	152,177736	-172,08686
THRH+3	-438,086216	-438,075906	-438,120672	16,1	12,9	394,4	0,01	0,00	0,17	-1,53947079	1,38600927	-1,53962811
THRH+4	-438,086496	-438,076294	-438,120426	15,1	13,5	388,8	0,00	0,00	0,13	-1,18897358	1,05529	-1,18909336
								1,00	5,89	-438,081674	385,045898	-438,125378
THR-H1	-437,215778	-437,206458	-437,248698	0,0	0,0	372,2	1,00	0,61	2,50	-266,91744	227,200902	-266,943228
THR-H2	-437,214662	-437,205201	-437,248117	3,3	1,5	378,1	0,54	0,33	3,04	-145,005304	125,404628	-145,019538
THR-H3	-437,212826	-437,203429	-437,246399	8,0	6,0	378,6	0,09	0,05	1,32	-23,8676186	20,6674379	-23,8699644
THR-H4	-437,21037	-437,200959	-437,243709	14,4	13,1	376,6	0,01	0,00	0,15	-1,41549461	1,21943595	-1,41563302
								1,00	7,02	-437,205858	374,492404	-437,248364

G4

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
THR1	-438,069832	-438,060106	-438,103318	0,0	0,0	380,7	1,00	0,34	3,05	-150,141589	130,487055	-150,156399
THR2	-438,069136	-438,059202	-438,102983	2,4	0,9	385,7	0,70	0,24	2,85	-105,610702	92,9943486	-105,621257
THR3	-438,067887	-438,057843	-438,102169	5,9	3,0	390,5	0,30	0,10	1,94	-44,9204796	40,0467453	-44,925025
THR4	-438,068982	-438,059026	-438,102651	2,8	1,8	384,4	0,50	0,17	2,51	-74,52189	65,3856471	-74,5293114
THR5	-438,067604	-438,058033	-438,100601	5,4	7,1	375,0	0,06	0,02	0,64	-8,65537609	7,41025749	-8,65621717
THR6	-438,067273	-438,057408	-438,100914	7,1	6,3	383,3	0,08	0,03	0,82	-12,0238456	10,5210062	-12,0250398
THR7	-438,065971	-438,055817	-438,100379	11,3	7,7	392,6	0,05	0,02	0,54	-6,85536243	6,14414422	-6,8560598
THR8	-438,066762	-438,056886	-438,10038	8,5	7,7	383,2	0,05	0,02	0,54	-6,86258246	6,00319116	-6,86326384
THR9	-438,067176	-438,056804	-438,101402	8,7	5,0	392,9	0,13	0,05	1,17	-20,0732491	18,005218	-20,0752927
THR10	-438,0663	-438,056557	-438,099757	9,3	9,3	380,6	0,02	0,01	0,33	-3,56729809	3,09947916	-3,56764989
THR11	-438,066114	-438,056225	-438,099695	10,2	9,5	383,0	0,02	0,01	0,31	-3,34242073	2,92224523	-3,34275241
THR12	-438,06512	-438,055121	-438,098922	13,1	11,5	385,9	0,01	0,00	0,16	-1,48421824	1,30752134	-1,48436664
								1,00	14,87	-438,059013	384,326859	-438,102635
THR+1	-438,417594	-438,407612	-438,451113	0,0	0,0	383,4	1,00	0,61	2,50	-268,272842	234,619071	-268,299472
THR+2	-438,416801	-438,406704	-438,45068	2,4	1,2	387,4	0,62	0,38	3,06	-167,237082	147,797428	-167,253857
THR+3	-438,411804	-438,401495	-438,446261	16,1	12,8	394,4	0,01	0,00	0,17	-1,61375986	1,45181384	-1,61392465
THR+4	-438,412113	-438,401911	-438,446043	15,0	13,4	388,8	0,00	0,00	0,14	-1,28354287	1,13838014	-1,28367208
								1,00	5,87	-438,407226	385,006693	-438,450926
THR-H1	-437,542235	-437,532915	-437,575155	0	0	372,2	1,00	0,63	2,42	-275,310333	234,170104	-275,336911
THR-H2	-437,541032	-437,531571	-437,574487	3,5	1,8	378,1	0,50	0,31	3,02	-136,50514	117,965389	-136,51853
THR-H3	-437,539276	-437,529879	-437,572849	8,0	6,1	378,6	0,09	0,06	1,34	-24,4377925	21,1453738	-24,4401925
THR-H4	-437,536701	-437,52729	-437,57004	14,8	13,4	376,6	0,00	0,00	0,14	-1,27904421	1,1010633	-1,27916918
								1,00	6,93	-437,53231	374,381931	-437,574803

L-Cysteine

Figure S10. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the eight most stable conformers of neutral L-cysteine.

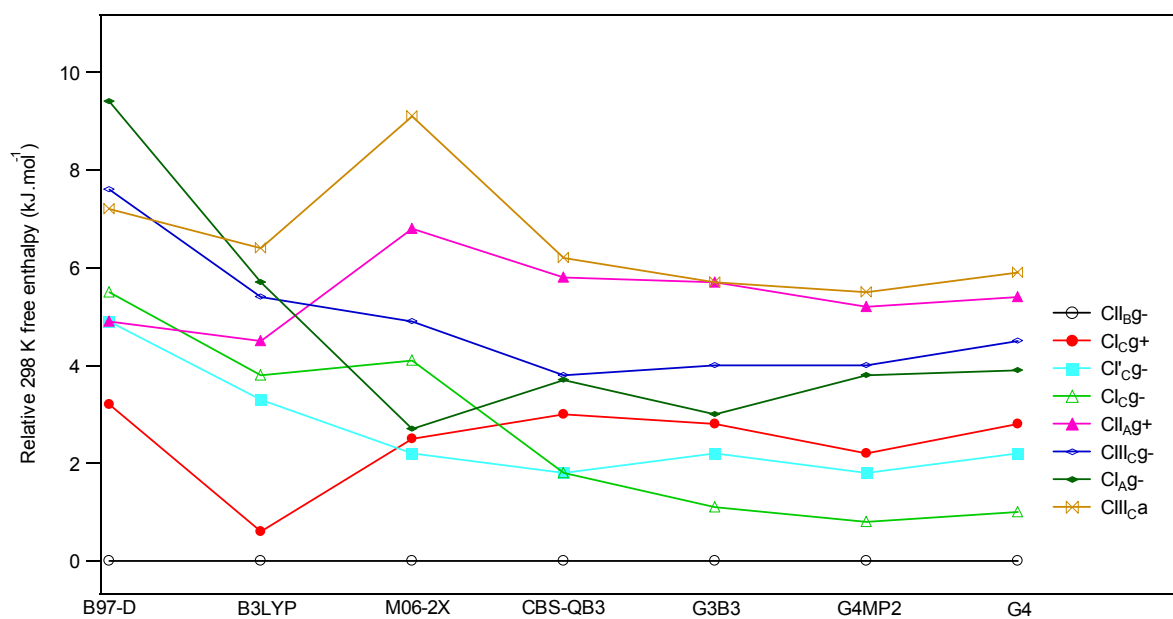
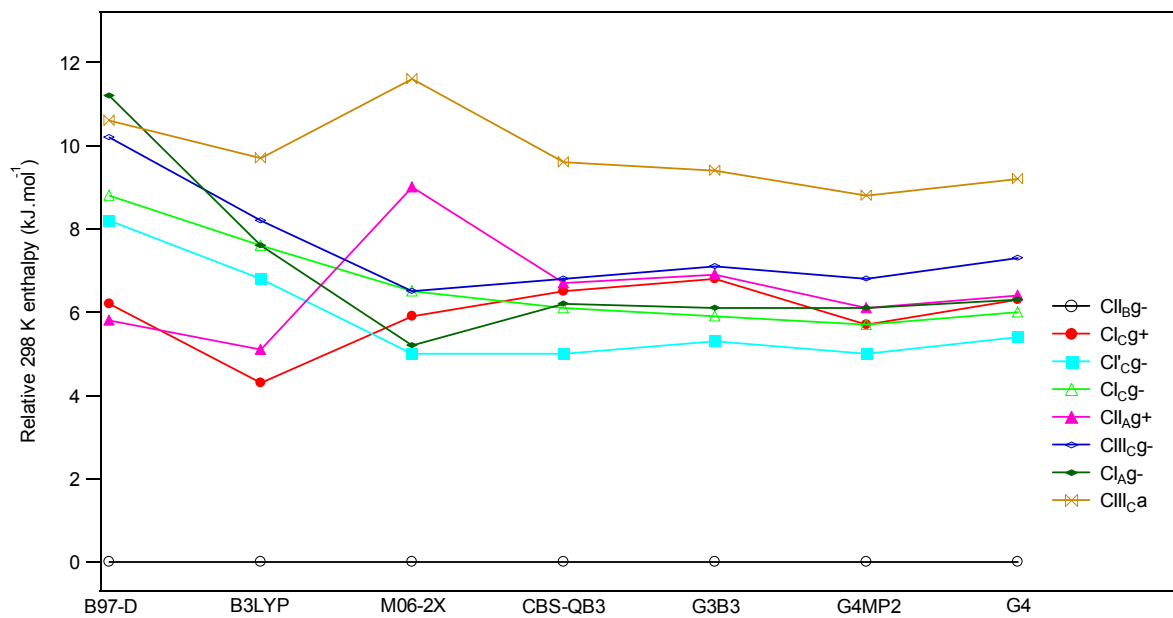


Figure S11 Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the five most stable conformers of deprotonated L-cysteine.

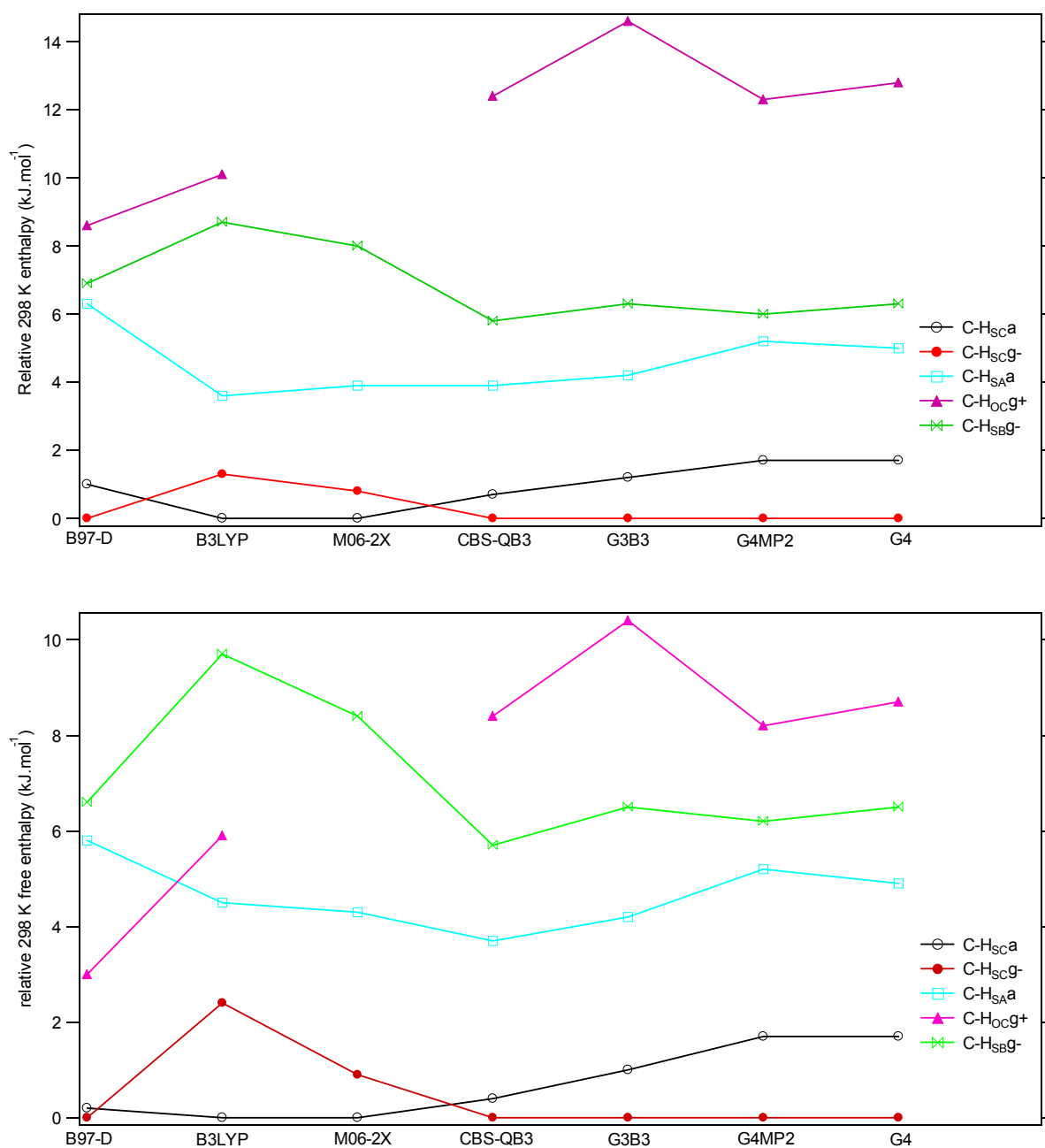


Figure S12 Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the six most stable conformers of protonated L-cysteine.

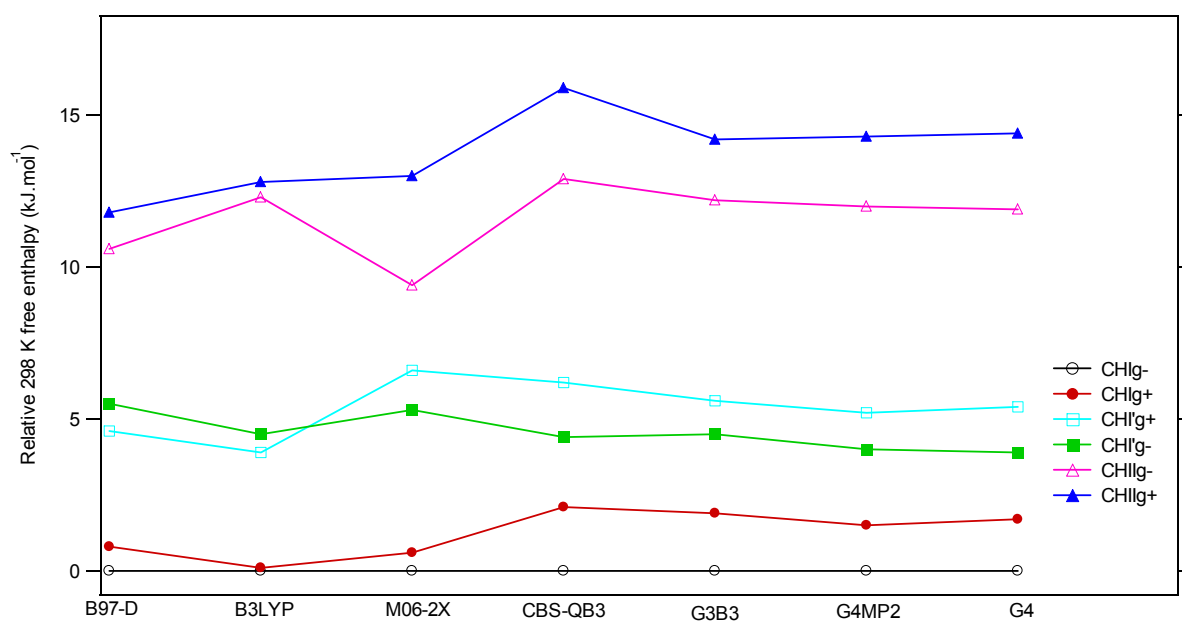
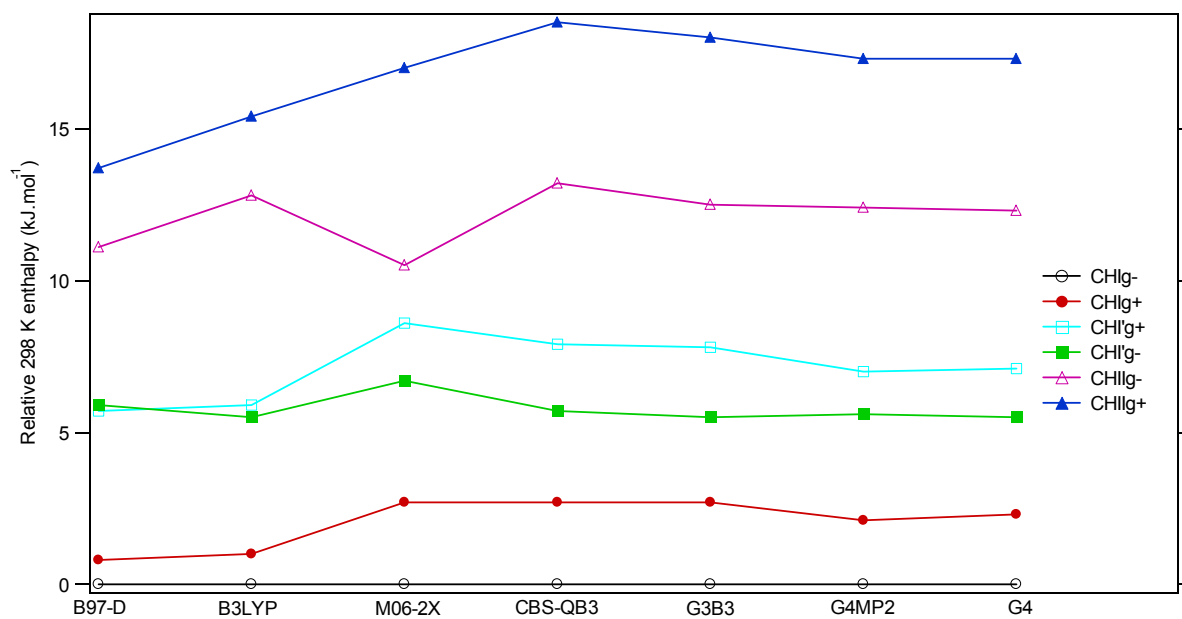
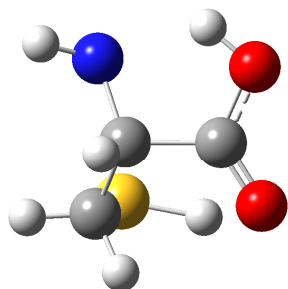
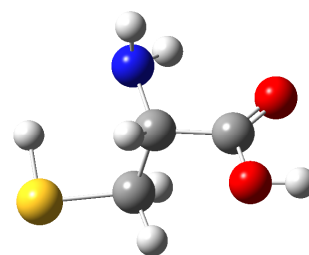


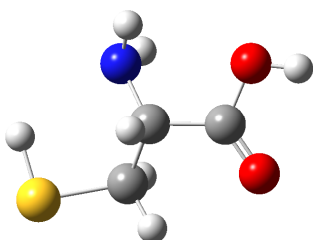
Figure S13. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirteen conformers of neutral L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



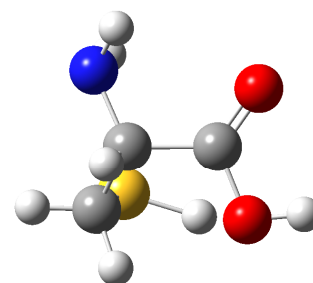
CYS1 [0.0; 0.0]



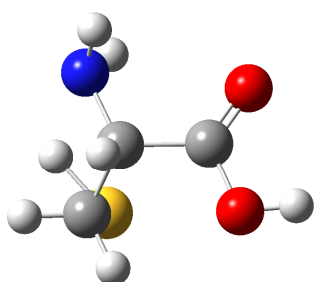
CYS2 [4.3; 0.6]



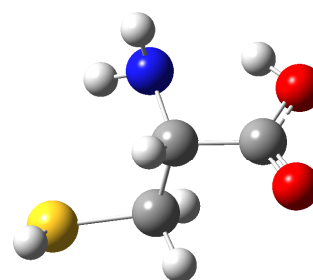
CYS3 [11.1; 3.1]



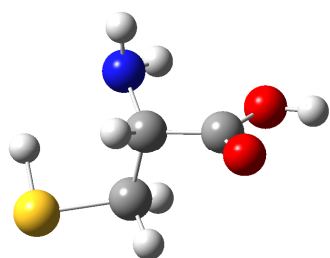
CYS4 [6.8; 3.3]



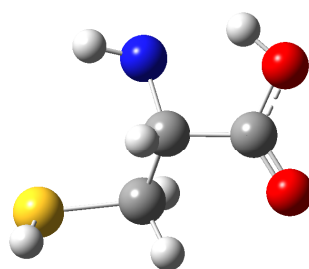
CYS5 [7.6; 3.8]



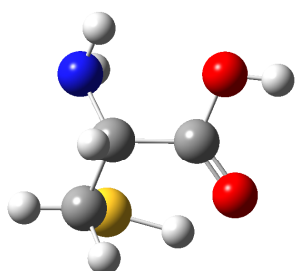
CYS6 [5.1; 4.5]



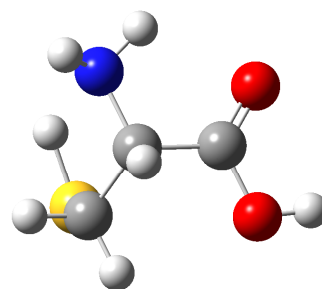
CYS7 [10.0; 4.8]



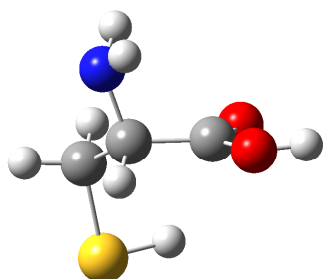
CYS8 [6.8; 5.0]



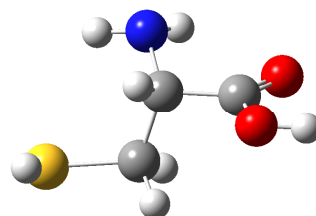
CYS9 [8.2; 5.4]



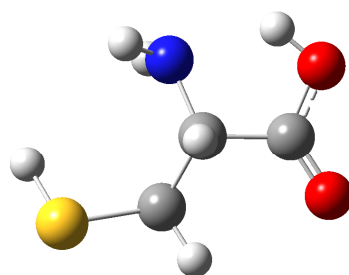
CYS10 [7.6; 5.7]



CYS11 [9.7; 6.4]

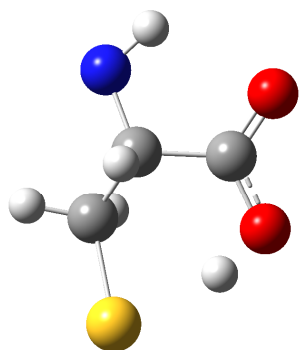


CYS12 [9.9; 6.7]

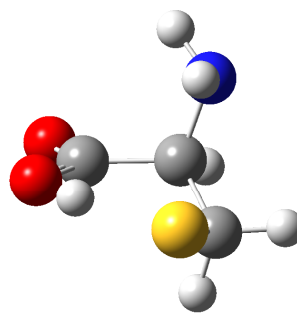


CYS13 [8.1; 6.8]

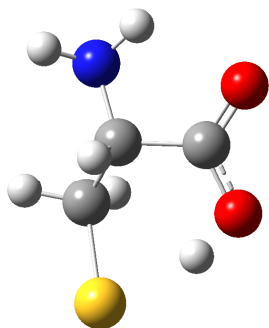
Figure S14. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first eight conformers of deprotonated L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



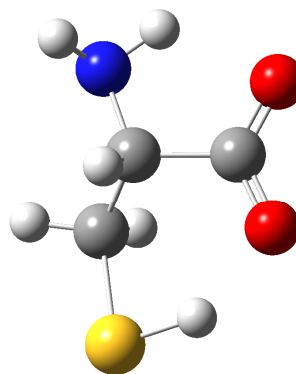
CYS-H1 [0.0; 0.0]



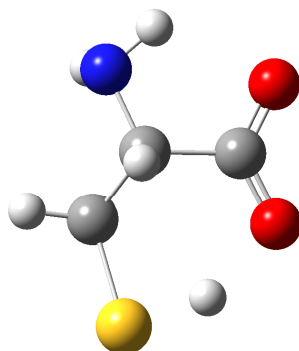
CYS-H2 [1.3; 2.4]



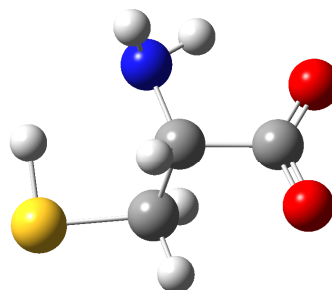
CYS-H3 [3.6; 4.5]



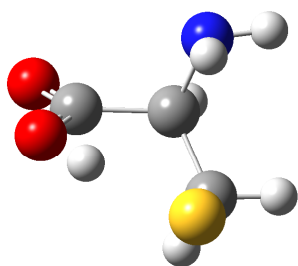
CYS-H4 [8.4; 4.8]



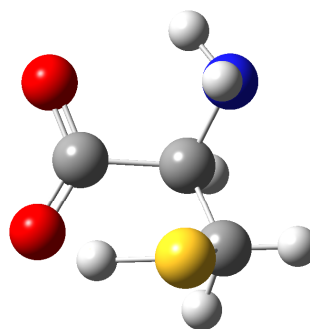
CYS-H5 [8.1; 4.9]



CYS-H6 [10.1; 5.9]

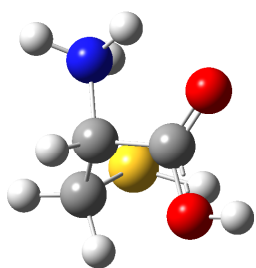


CYS-H7 [8.7; 9.7]

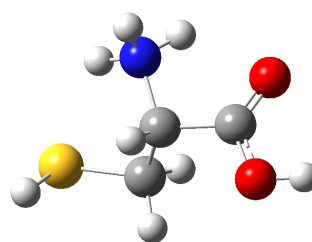


CYS-H8 [$1\Delta G = 11.1 \text{ kJ.mol}^{-1}$]

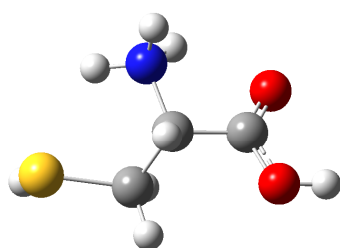
Figure S15. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first six conformers of protonated L-cysteine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



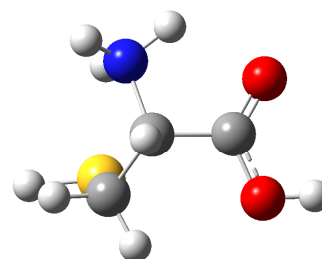
CYSH+1 [0.0; 0.0]



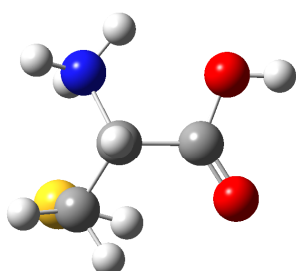
CYSH+2 [1.0; 0.1]



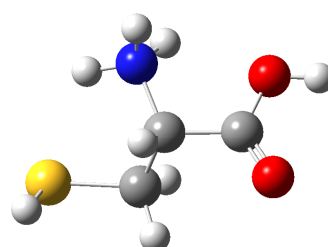
CYSH+3 [5.9; 3.9]



CYSH+4 [5.5; 4.5]



CYSH+5 [12.8; 12.3]



CYSH+6 [15.4; 12.8]

Table T3. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-cysteine.
B97D/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,648419	-721,639517	-721,681271	0,0	0,0	367,9	1,00	0,49	2,90	-355,186963	181,063352	-355,207514
CYS2	-721,646466	-721,637169	-721,680043	6,2	3,2	377,7	0,28	0,14	2,25	-97,806932	51,1965274	-97,8127429
CYS3	-721,64442	-721,635107	-721,678339	11,6	7,7	380,9	0,05	0,02	0,71	-16,3373157	8,62311412	-16,3382944
CYS4	-721,645697	-721,63641	-721,679423	8,2	4,9	379,0	0,14	0,07	1,56	-51,0022833	26,7834596	-51,0053233
CYS5	-721,645544	-721,636173	-721,679186	8,8	5,5	379,0	0,11	0,06	1,33	-39,7644252	20,8819911	-39,7667954
CYS6	-721,646359	-721,637313	-721,67939	5,8	4,9	370,7	0,14	0,07	1,52	-49,2650573	25,3081581	-49,2679299
CYS8	-721,645645	-721,636435	-721,679017	8,1	5,9	375,2	0,09	0,05	1,18	-33,2977303	17,3108341	-33,2996952
CYS9	-721,644747	-721,635623	-721,678375	10,2	7,6	376,7	0,05	0,02	0,73	-16,9668207	8,85594072	-16,9678258
CYS10	-721,644489	-721,635254	-721,677691	11,2	9,4	373,9	0,02	0,01	0,43	-8,2723812	4,2860105	-8,27286768
CYS11	-721,644839	-721,635463	-721,678532	10,6	7,2	379,5	0,06	0,03	0,83	-20,008174	10,5208332	-20,0093681
CYS12	-721,644143	-721,634867	-721,677651	12,2	9,5	376,9	0,02	0,01	0,41	-7,93206864	4,14329732	-7,93253891
CYS13	-721,645384	-721,636166	-721,678774	8,8	6,6	375,4	0,07	0,04	0,99	-25,797827	13,4199761	-25,7993502
CYS7	-721,64442	-721,635108	-721,678336	11,6	7,7			1,00	14,84	-721,637979	372,393494	-721,680246
CYSH+1	-721,994241	-721,985014	-722,027646	0,0	0,0	375,6	1,00	0,49	2,90	-355,904541	185,155583	-355,925557
CYSH+2	-721,993966	-721,984695	-722,027355	0,8	0,8	375,9	0,74	0,36	3,06	-262,185931	136,48911	-262,201422
CYSH+3	-721,992261	-721,98284	-722,025891	5,7	4,6	379,3	0,16	0,08	1,66	-56,3486646	29,603002	-56,3520246
CYSH+4	-721,992095	-721,982761	-722,025549	5,9	5,5	377,0	0,11	0,05	1,32	-39,3458314	20,5442194	-39,3481632
CYSH+5	-721,990021	-721,980786	-722,023592	11,1	10,6	377,1	0,01	0,01	0,29	-5,03868884	2,63203891	-5,03898758
CYSH+6	-721,989184	-721,979788	-722,023148	13,7	11,8	382,0	0,01	0,00	0,20	-3,16089658	1,67251599	-3,16108641
CYS-H1	-721,118814	-721,110439	-721,151036	1,0	0,2			0,38	3,06	-270,850003	134,343532	-270,865252
CYS-H2	-721,119043	-721,110814	-721,151123	0,0	0,0	355,1	1,00	0,41	3,04	-296,762779	146,152148	-296,779367
CYS-H3	-721,116758	-721,108398	-721,148898	6,3	5,8	356,8	0,10	0,04	1,07	-28,680996	14,1920279	-28,6826069
CYS-H6	-721,11662	-721,107543	-721,149997	8,6	3,0	374,0	0,31	0,13	2,17	-90,9585	47,1799662	-90,963855
CYS-H7	-721,116516	-721,108178	-721,1486	6,9	6,6	356,1	0,07	0,03	0,86	-20,9738168	10,3583506	-20,9749925
CYS-H8	-721,115212	-721,106483	-721,148136	11,4	7,8	367,0	0,04	0,02	0,60	-12,8839157	6,5567786	-12,8846599
CYS-H4	-721,118808	-721,110435	-721,151027	1,0	0,3			1,00	10,79	-721,11001	358,782804	-721,150733
CYS-H5	-721,118825	-721,110454	-721,151041	0,9	0,2							

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

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,855249	-721,846482	-721,888083	0,0	0,0	366,5	1,00	0,29	2,99	-209,864661	106,559948	-209,876756
CYS2	-721,854145	-721,844852	-721,887852	4,3	0,6	378,8	0,78	0,23	2,80	-164,656979	86,4172604	-164,666788
CYS3	-721,851521	-721,842245	-721,886918	11,1	3,1	393,6	0,29	0,09	1,75	-61,742591	33,6653731	-61,7464121
CYS4	-721,85313	-721,84388	-721,886835	6,8	3,3	378,5	0,27	0,08	1,66	-56,5887187	29,6685324	-56,5920861
CYS5	-721,852893	-721,843592	-721,886641	7,6	3,8	379,3	0,22	0,06	1,46	-46,1580072	24,2528495	-46,16076
CYS6	-721,85341	-721,844521	-721,886352	5,1	4,5	368,5	0,16	0,05	1,20	-34,0749986	17,3974737	-34,0769733
CYS7	-721,851985	-721,842656	-721,886243	10,0	4,8	384,0	0,14	0,04	1,11	-30,389269	16,1670376	-30,391104
CYS8	-721,852914	-721,843879	-721,886163	6,8	5,0	372,5	0,13	0,04	1,05	-27,9404441	14,4198867	-27,9420808
CYS9	-721,852445	-721,843345	-721,886016	8,2	5,4	375,9	0,11	0,03	0,94	-23,9434574	12,4701732	-23,9448728
CYS10	-721,852756	-721,843605	-721,885919	7,6	5,7	372,8	0,10	0,03	0,87	-21,6244813	11,1681806	-21,6257489
CYS11	-721,852041	-721,842792	-721,885645	9,7	6,4	377,6	0,08	0,02	0,71	-16,2171633	8,48221456	-16,218126
CYS12	-721,851952	-721,842699	-721,885544	9,9	6,7	377,5	0,07	0,02	0,66	-14,5850906	7,62715317	-14,5859563
CYS13	-721,852393	-721,84341	-721,885509	8,1	6,8	370,9	0,07	0,02	0,64	-14,0587334	7,22388358	-14,0595533
								1,00	17,83	-721,844595	375,519966	-721,887218
CYSH+1	-722,197086	-722,18818	-722,23003	0,0	0,0	368,7	1,00	0,43	3,02	-307,190674	156,837125	-307,208475
CYSH+2	-722,196881	-722,187818	-722,229996	1,0	0,1	371,6	0,96	0,41	3,04	-296,415249	152,521871	-296,432561
CYSH+3	-722,195165	-722,18594	-722,22854	5,9	3,9	375,3	0,21	0,09	1,79	-64,2426641	33,3871902	-64,2464536
CYSH+4	-722,195148	-722,186078	-722,228307	5,5	4,5	372,1	0,16	0,07	1,54	-50,2982926	25,9125818	-50,3012337
CYSH+5	-722,192255	-722,18329	-722,225334	12,8	12,3	370,4	0,01	0,00	0,15	-2,21604189	1,13665932	-2,2161709
CYSH+6	-722,191487	-722,182297	-722,225149	15,4	12,8	377,5	0,01	0,00	0,13	-1,82473413	0,95393682	-1,82484241
								1,00	9,67	-722,187656	370,749364	-722,229737
CYS-H1	-721,329894	-721,321579	-721,362098	0,0	0,0	357,0	1,00	0,51	2,85	-369,203816	182,722376	-369,224555
CYS-H2	-721,329186	-721,321072	-721,361166	1,3	2,4	353,2	0,38	0,19	2,64	-138,734459	67,9408332	-138,74217
CYS-H3	-721,328399	-721,320196	-721,36039	3,6	4,5	354,1	0,17	0,09	1,74	-61,412004	30,1496423	-61,4154261
CYS-H4	-721,326994	-721,318368	-721,36026	8,4	4,8	369,1	0,15	0,07	1,61	-53,5746917	27,4131879	-53,5778032
CYS-H5	-721,327172	-721,318501	-721,36022	8,1	4,9	367,6	0,14	0,07	1,56	-51,3707514	26,1769169	-51,3737225
CYS-H6	-721,326619	-721,317733	-721,359859	10,1	5,9	371,1	0,10	0,05	1,22	-35,1612881	18,0918988	-35,1633415
CYS-H7	-721,326451	-721,318251	-721,358401	8,7	9,7	353,7	0,02	0,01	0,40	-7,60461139	3,72933513	-7,60503467
CYS-H8	-721,325503	-721,316401	-721,357849	13,6	11,2	365,2	0,01	0,01	0,25	-4,25903181	2,15617703	-4,25927654
								1,00	12,28	-721,320653	358,380367	-721,36133

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
M06-2X/6-31+G(d,p)												
CYS1	-721,675673	-721,66711	-721,708162	0,0	0,0	361,7	1,00	0,35	3,05	-251,039958	125,816042	-251,054238
CYS2	-721,673874	-721,664865	-721,707198	5,9	2,5	373,0	0,36	0,13	2,17	-91,214713	47,1415805	-91,2200636
CYS3	-721,671536	-721,662545	-721,705311	12,0	7,5	376,8	0,05	0,02	0,59	-12,5721694	6,56402838	-12,5729145
CYS4	-721,674237	-721,665206	-721,707307	5,0	2,2	370,9	0,41	0,14	2,30	-102,277375	52,5692735	-102,283341
CYS5	-721,673568	-721,664619	-721,706615	6,5	4,1	370,0	0,20	0,07	1,53	-49,4493676	25,35298	-49,4522452
CYS6	-721,672541	-721,663687	-721,705578	9,0	6,8	369,1	0,07	0,02	0,72	-16,6413503	8,51079628	-16,6423163
CYS7	-721,671839	-721,662651	-721,706099	11,7	5,4	382,8	0,11	0,04	1,07	-28,7616627	15,2561625	-28,7633943
CYS8	-721,671888	-721,663134	-721,704761	10,4	8,9	366,8	0,03	0,01	0,38	-7,05598654	3,58586632	-7,05639355
CYS9	-721,67342	-721,664626	-721,706307	6,5	4,9	367,2	0,14	0,05	1,24	-35,7835281	18,2088127	-35,7855949
CYS10	-721,674162	-721,665116	-721,707121	5,2	2,7	370,1	0,34	0,12	2,08	-84,1289851	43,1426368	-84,1338819
CYS11	-721,671623	-721,66268	-721,704696	11,6	9,1	370,2	0,03	0,01	0,36	-6,59039168	3,38055061	-6,59077538
CYS12	-721,671349	-721,662248	-721,704621	12,8	9,3	373,3	0,02	0,01	0,34	-6,09121265	3,15104602	-6,0915703
CYS13	-721,672295	-721,663145	-721,706141	10,4	5,3	378,8	0,12	0,04	1,10	-30,0587087	15,7782781	-30,0604996
								1,00	16,92	-721,665408	368,458054	-721,707229
CYSH+1	-722,014026	-722,00522	-722,046734	0,0	0,0	365,8	1,00	0,50	2,89	-357,735034	181,222232	-357,755603
CYSH+2	-722,013279	-722,004177	-722,046517	2,7	0,6	373,0	0,80	0,39	3,05	-284,831489	147,161736	-284,848192
CYSH+3	-722,011027	-722,001952	-722,044211	8,6	6,6	372,3	0,07	0,04	0,98	-25,2830309	13,0378427	-25,2845108
CYSH+4	-722,011648	-722,002671	-722,044733	6,7	5,3	370,6	0,12	0,06	1,41	-43,7433172	22,4521837	-43,7458656
CYSH+5	-722,010153	-722,001224	-722,043169	10,5	9,4	369,6	0,02	0,01	0,43	-8,46401839	4,33226109	-8,46451011
CYSH+6	-722,007886	-721,998738	-722,04177	17,0	13,0	379,1	0,01	0,00	0,13	-1,94758629	1,02269836	-1,94770237
								1,00	8,90	-722,004475	369,228954	-722,046384
CYS-H1	-721,152353	-721,144177	-721,184374	0,0	0,0	354,2	1,00	0,52	2,83	-373,917083	183,629566	-373,937926
CYS-H2	-721,151981	-721,143891	-721,18405	0,8	0,9	353,8	0,71	0,37	3,06	-266,072512	130,543944	-266,087329
CYS-H3	-721,150813	-721,142702	-721,182744	3,9	4,3	352,8	0,18	0,09	1,84	-67,5052941	33,0238833	-67,5090424
CYS-H4	-721,144617	-721,136015	-721,177642	21,4	17,7	366,8	0,00	0,00	0,03	-0,31793013	0,16169082	-0,31794848
CYS-H7	-721,149268	-721,141135	-721,181185	8,0	8,4	352,9	0,04	0,02	0,61	-13,1305563	6,42482251	-13,1312855
CYS-H8	-721,144942	-721,136545	-721,177203	20,0	18,8	358,2	0,00	0,00	0,02	-0,20049605	0,09959329	-0,20050736
CYS-H5	-721,152363	-721,144183	-721,184391	0,0	0,0			1,00	8,39	-721,143872	353,8835	-721,184039
E-T												
CYS-H6	-721,145442	-721,137264	-721,177511	18,2	18,0							

CBS-QB3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,013562	-721,004788	-721,046326	0,0	0,0	366,0	1,00	0,32	3,03	-230,532477	117,013322	-230,545758
CYS2	-721,011583	-721,002299	-721,045182	6,5	3,0	377,8	0,30	0,10	1,87	-69,3356704	36,3329774	-69,3397943
CYS3	-721,00891	-720,999615	-721,043356	13,6	7,8	385,4	0,04	0,01	0,50	-10,1888153	5,44594338	-10,1894334
CYS4	-721,012116	-721,002867	-721,045632	5,0	1,8	376,8	0,48	0,15	2,40	-111,224456	58,1229346	-111,231053
CYS5	-721,011833	-721,00247	-721,04563	6,1	1,8	380,3	0,48	0,15	2,40	-110,991024	58,5367089	-110,997668
CYS6	-721,011159	-721,002248	-721,044108	6,7	5,8	368,8	0,10	0,03	0,90	-22,4444783	11,480687	-22,4457814
CYS7	-721,008888	-720,999597	-721,043283	13,6	8,0	384,9	0,04	0,01	0,47	-9,43688504	5,03769282	-9,43745683
CYS8	-721,010266	-721,001197	-721,043485	9,4	7,5	372,6	0,05	0,02	0,55	-11,6670493	6,02889822	-11,6677336
CYS9	-721,011343	-721,00221	-721,044875	6,8	3,8	375,9	0,22	0,07	1,54	-50,2267612	26,1858145	-50,2297333
CYS10	-721,011639	-721,002435	-721,044935	6,2	3,7	374,4	0,23	0,07	1,60	-53,4935073	27,7810739	-53,4966605
CYS11	-721,01039	-721,001129	-721,043946	9,6	6,2	377,2	0,08	0,03	0,79	-18,9330804	9,90597727	-18,9342047
CYS12	-721,010245	-721,000965	-721,043797	10,0	6,6	377,4	0,07	0,02	0,71	-16,1905971	8,47405215	-16,1915589
CYS13	-721,009827	-721,000818	-721,042904	10,4	9,0	370,8	0,03	0,01	0,35	-6,33824455	3,25961752	-6,33861452
								1,00	17,12	-721,003046	373,6057	-721,045451
CYSH+1	-721,354834	-721,345907	-721,387783	0,0	0,0	368,9	1,00	0,59	2,59	-426,115025	217,943653	-426,139762
CYSH+2	-721,353927	-721,344869	-721,386973	2,7	2,1	371,0	0,43	0,25	2,89	-182,007134	93,5975712	-182,017757
CYSH+3	-721,352123	-721,342905	-721,385422	7,9	6,2	374,6	0,08	0,05	1,24	-35,7011521	18,5395351	-35,7032564
CYSH+4	-721,352855	-721,343738	-721,386121	5,7	4,4	373,4	0,17	0,10	1,95	-74,3864585	38,5069454	-74,3908291
CYSH+5	-721,349847	-721,340883	-721,382852	13,2	12,9	369,8	0,01	0,00	0,16	-2,40167439	1,23111312	-2,40181413
CYSH+6	-721,348049	-721,338855	-721,381723	18,5	15,9	377,7	0,00	0,00	0,06	-0,73380463	0,38421127	-0,73384824
								1,00	8,88	-721,345249	370,203029	-721,387268
CYS-H1	-720,4853	-720,477011	-720,517404	0,7	0,4	355,9	0,85	0,37	3,06	-267,583148	132,172316	-267,59815
CYS-H2	-720,485458	-720,477278	-720,517557	0,0	0,0	354,9	1,00	0,44	3,01	-314,225639	154,773202	-314,243206
CYS-H3	-720,484047	-720,475778	-720,516136	3,9	3,7	355,6	0,22	0,10	1,89	-70,6526092	34,8685763	-70,6565669
CYS-H4	-720,481471	-720,472797	-720,514857	11,8	7,1	370,6	0,06	0,03	0,78	-18,4407908	9,48477385	-18,4418674
CYS-H6	-720,481342	-720,472538	-720,514356	12,4	8,4	368,4	0,03	0,02	0,53	-10,8962048	5,57207357	-10,8968372
CYS-H7	-720,483337	-720,475083	-720,515369	5,8	5,7	354,9	0,10	0,04	1,14	-31,5720008	15,5536759	-31,5737661
CYS-H8	-720,481317	-720,47276	-720,513949	11,9	9,5	362,9	0,02	0,01	0,38	-7,10631234	3,57934642	-7,10671861
								1,00	10,79	-720,476705	356,003964	-720,517112
CYS-H5	-720,485296	-720,477004	-720,517407	0,7	0,4							

G3B3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,587446	-721,57856	-721,620242	0,0	0,0	367,2	1,00	0,30	3,01	-217,415569	110,649977	-217,428128
CYS2	-721,58538	-721,575954	-721,619164	6,8	2,8	380,7	0,32	0,10	1,88	-70,0837793	36,9756218	-70,0879761
CYS3	-721,582585	-721,573196	-721,616988	14,1	8,5	385,8	0,03	0,01	0,38	-7,13100623	3,8129487	-7,13143901
CYS4	-721,585871	-721,576529	-721,619416	5,3	2,2	377,9	0,42	0,13	2,18	-91,3175114	47,8181859	-91,3229389
CYS5	-721,585786	-721,57631	-721,619809	5,9	1,1	383,2	0,63	0,19	2,63	-137,974773	73,2811801	-137,983091
CYS6	-721,584991	-721,57595	-721,618069	6,9	5,7	371,1	0,10	0,03	0,89	-22,1917893	11,4125864	-22,1930846
CYS7	-721,582586	-721,573197	-721,616974	14,1	8,6	385,7	0,03	0,01	0,38	-7,02692749	3,75601081	-7,0273538
CYS8	-721,584142	-721,57495	-721,61747	9,5	7,3	374,6	0,05	0,02	0,56	-11,8301479	6,1418293	-11,830845
CYS9	-721,58512	-721,575859	-721,61872	7,1	4,0	377,6	0,20	0,06	1,42	-43,9653772	23,0084237	-43,9679887
CYS10	-721,585606	-721,576245	-721,619107	6,1	3,0	377,6	0,30	0,09	1,82	-66,0115929	34,5466688	-66,015514
CYS11	-721,584355	-721,574963	-721,618079	9,4	5,7	379,9	0,10	0,03	0,90	-22,4260449	11,8060727	-22,4273849
CYS12	-721,583963	-721,574561	-721,617708	10,5	6,7	380,1	0,07	0,02	0,68	-15,1894065	8,00213647	-15,1903147
CYS13	-721,583866	-721,574664	-721,617211	10,2	8,0	374,9	0,04	0,01	0,46	-9,01282881	4,68214165	-9,01336024
								1,00	17,16	-721,576754	375,893783	-721,619419
CYSH+1	-721,929307	-721,920217	-721,962448	0,0	0,0	372,1	1,00	0,57	2,66	-411,970509	212,326425	-411,994608
CYSH+2	-721,928444	-721,919181	-721,961732	2,7	1,9	374,9	0,47	0,27	2,94	-194,223029	100,8597	-194,234476
CYSH+3	-721,926693	-721,917238	-721,960323	7,8	5,6	379,6	0,11	0,06	1,42	-44,2242216	23,2538379	-44,226861
CYSH+4	-721,927366	-721,918106	-721,960717	5,5	4,5	375,4	0,16	0,09	1,83	-66,8902115	34,785009	-66,8941597
CYSH+5	-721,924609	-721,915453	-721,957818	12,5	12,2	373,3	0,01	0,00	0,20	-3,18521301	1,64685405	-3,18539993
CYSH+6	-721,922826	-721,913375	-721,957053	18,0	14,2	384,8	0,00	0,00	0,10	-1,42634223	0,7603213	-1,42642853
								1,00	9,15	-721,919526	373,632147	-721,961934
CYS-H1	-721,058367	-721,049963	-721,090577	1,2	1,0	357,8	0,68	0,34	3,05	-246,492994	122,323738	-246,506878
CYS-H2	-721,058713	-721,050406	-721,090946	0,0	0,0	357,2	1,00	0,50	2,87	-363,165257	179,894619	-363,185676
CYS-H3	-721,057169	-721,048788	-721,089364	4,2	4,2	357,5	0,19	0,10	1,87	-68,9539811	34,1868971	-68,9578614
CYS-H4	-721,053561	-721,044817	-721,087293	14,7	9,6	374,2	0,02	0,01	0,41	-7,83397179	4,06592267	-7,83443328
CYS-H6	-721,05378	-721,04483	-721,086984	14,6	10,4	371,4	0,02	0,01	0,32	-5,66302302	2,91689375	-5,66335409
CYS-H7	-721,056359	-721,048003	-721,088475	6,3	6,5	356,6	0,07	0,04	1,03	-27,1075003	13,4052747	-27,1090218
CYS-H8	-721,053049	-721,044433	-721,08591	15,7	13,2	365,4	0,01	0,00	0,13	-1,83316229	0,92905619	-1,83326774
								1,00	9,67	-721,04989	357,722401	-721,090492
CYS-H5	-721,058363	-721,049961	-721,09057	1,2	1,0	357,8	0,68	0,34	3,05	-246,492994	122,323738	-246,506878

G4MP2

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,113373	-721,104536	-721,146171	0,0	0,0	366,8	1,00	0,28	2,95	-199,091499	101,276531	-199,102994
CYS2	-721,111683	-721,102353	-721,14533	5,7	2,2	378,6	0,41	0,11	2,06	-82,3141713	43,2224671	-82,3190771
CYS3	-721,108755	-721,099437	-721,143209	13,4	7,8	385,6	0,04	0,01	0,45	-8,87346213	4,74558867	-8,87400077
CYS4	-721,111915	-721,102621	-721,145477	5,0	1,8	377,6	0,48	0,13	2,23	-96,0552028	50,295741	-96,0609114
CYS5	-721,111815	-721,102365	-721,145881	5,7	0,8	383,4	0,74	0,20	2,69	-146,819435	78,0605049	-146,828295
CYS6	-721,111171	-721,102199	-721,144204	6,1	5,2	370,1	0,13	0,03	0,98	-25,229599	12,9482261	-25,2310687
CYS7	-721,109432	-721,10006	-721,143954	11,8	5,8	386,7	0,10	0,03	0,81	-19,403722	10,4061583	-19,4049031
CYS8	-721,110191	-721,101063	-721,143473	9,1	7,1	373,6	0,06	0,02	0,56	-11,7085588	6,06696285	-11,7092474
CYS9	-721,111086	-721,101943	-721,144657	6,8	4,0	376,3	0,20	0,06	1,35	-40,599596	21,1880529	-40,6020009
CYS10	-721,111427	-721,1022	-721,14473	6,1	3,8	374,7	0,22	0,06	1,42	-43,834583	22,7777698	-43,8371683
CYS11	-721,110488	-721,101195	-721,144081	8,8	5,5	377,8	0,11	0,03	0,89	-22,1722582	11,6178299	-22,1735769
CYS12	-721,110273	-721,100973	-721,143832	9,4	6,1	377,6	0,09	0,02	0,74	-17,0703283	8,93888983	-17,0713429
CYS13	-721,109903	-721,100805	-721,143102	9,8	8,1	372,7	0,04	0,01	0,41	-7,93033704	4,09827398	-7,9308022
								1,00	17,53	-721,102752	375,642996	-721,145389
CYSH+1	-721,455613	-721,446643	-721,488645	0,0	0,0	370,1	1,00	0,53	2,80	-382,118826	196,001749	-382,141073
CYSH+2	-721,454972	-721,445861	-721,488081	2,1	1,5	372,0	0,55	0,29	2,99	-211,329334	108,960735	-211,341701
CYSH+3	-721,45327	-721,443991	-721,486658	7,0	5,2	375,9	0,12	0,07	1,49	-47,4169874	24,7069538	-47,4197917
CYSH+4	-721,453695	-721,444511	-721,48711	5,6	4,0	375,3	0,20	0,11	1,97	-76,2236414	39,6535361	-76,2281421
CYSH+5	-721,450942	-721,441905	-721,484065	12,4	12,0	371,4	0,01	0,00	0,20	-3,11369168	1,60313687	-3,11387364
CYSH+6	-721,449345	-721,440067	-721,483191	17,3	14,3	379,9	0,00	0,00	0,09	-1,24350214	0,65487902	-1,24357647
								1,00	9,54	-721,445983	371,58099	-721,488158
CYS-H1	-720,582826	-720,574565	-720,614881	1,7	1,7	355,2	0,50	0,29	2,98	-207,292447	102,182787	-207,304045
CYS-H2	-720,583409	-720,575208	-720,615534	0,0	0,0	355,3	1,00	0,57	2,66	-411,542409	202,915949	-411,565441
CYS-H3	-720,581477	-720,573212	-720,613565	5,2	5,2	355,5	0,13	0,07	1,58	-52,0427504	25,6775577	-52,0456649
CYS-H6	-720,579355	-720,570528	-720,612412	12,3	8,2	369,0	0,04	0,02	0,69	-15,5052888	7,94048948	-15,5061901
CYS-H7	-720,58117	-720,572927	-720,613165	6,0	6,2	354,5	0,08	0,05	1,20	-34,1917747	16,821931	-34,193684
								1,00	9,11	-720,57467	355,538715	-720,615024
CYS-H4	-720,58148	-720,573214	-720,613567	5,2	5,2							
CYS-H5	-720,582823	-720,57456	-720,614883	1,7	1,7							
CYS-H8	-720,58341	-720,575208	-720,615535	0,0	0,0							

G4

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
CYS1	-721,658949	-721,650112	-721,691747	0,0	0,0	366,8	1,00	0,31	3,01	-220,251556	111,955808	-220,264263
CYS2	-721,657048	-721,647719	-721,690696	6,3	2,8	378,6	0,33	0,10	1,93	-73,0399691	38,3236789	-73,0443189
CYS3	-721,654142	-721,644824	-721,688596	13,9	8,3	385,6	0,04	0,01	0,42	-8,04928125	4,30155768	-8,04976949
CYS4	-721,657365	-721,648071	-721,690928	5,4	2,2	377,6	0,42	0,13	2,20	-93,1912377	48,7603877	-93,1967721
CYS5	-721,657295	-721,647845	-721,691361	6,0	1,0	383,4	0,67	0,20	2,69	-146,846818	78,0160481	-146,855673
CYS6	-721,656663	-721,647691	-721,689696	6,4	5,4	370,1	0,12	0,04	0,98	-25,55433	13,1049697	-25,5556175
CYS7	-721,65486	-721,645488	-721,689382	12,1	6,2	386,7	0,08	0,03	0,78	-18,3759165	9,84750083	-18,3770342
CYS8	-721,65567	-721,646543	-721,688952	9,4	7,3	373,6	0,05	0,02	0,56	-11,6984503	6,05700024	-11,6991378
CYS9	-721,656464	-721,647321	-721,690035	7,3	4,5	376,3	0,17	0,05	1,25	-36,4821851	19,0248763	-36,4843445
CYS10	-721,656944	-721,647717	-721,690247	6,3	3,9	374,7	0,21	0,06	1,45	-45,5799082	23,6667894	-45,5825945
CYS11	-721,6559	-721,646607	-721,689493	9,2	5,9	377,8	0,09	0,03	0,85	-20,6479217	10,8109304	-20,6491488
CYS12	-721,655588	-721,646288	-721,689147	10,0	6,8	377,6	0,07	0,02	0,65	-14,3571063	7,51242805	-14,357959
CYS13	-721,655338	-721,646241	-721,688538	10,2	8,4	372,7	0,03	0,01	0,40	-7,57363521	3,91097782	-7,57407912
								1,00	17,16	-721,648315	375,292953	-721,690912
CYSH+1	-722,000898	-721,991927	-722,033929	0,0	0,0	370,1	1,00	0,54	2,76	-391,457878	200,640418	-391,480651
CYSH+2	-722,000177	-721,991066	-722,033286	2,3	1,7	372,0	0,51	0,28	2,95	-199,257533	102,658973	-199,269185
CYSH+3	-721,998485	-721,989207	-722,031873	7,1	5,4	375,9	0,12	0,06	1,44	-45,1803813	23,5232256	-45,1830512
CYSH+4	-721,99902	-721,989836	-722,032435	5,5	3,9	375,3	0,21	0,11	2,05	-81,5222689	42,3779884	-81,5270789
CYSH+5	-721,996264	-721,987227	-722,029388	12,3	11,9	371,5	0,01	0,00	0,21	-3,32315026	1,7097284	-3,32334432
CYSH+6	-721,994611	-721,985333	-722,028457	17,3	14,4	379,9	0,00	0,00	0,09	-1,25003854	0,65782417	-1,25011321
								1,00	9,50	-721,99125	371,568158	-722,033424
CYS-H1	-721,129039	-721,120778	-721,161094	1,7	1,7	355,2	0,50	0,29	2,98	-206,546734	101,738075	-206,556281
CYS-H2	-721,129628	-721,121427	-721,161753	0,0	0,0	355,3	1,00	0,57	2,66	-412,653971	203,309903	-412,677047
CYS-H3	-721,127805	-721,11954	-721,159893	5,0	4,9	355,5	0,14	0,08	1,69	-58,5121709	28,8476562	-58,5154452
CYS-H6	-721,125396	-721,116569	-721,158453	12,8	8,7	369,0	0,03	0,02	0,60	-12,8963286	6,59940109	-12,8970776
CYS-H7	-721,127278	-721,119035	-721,159273	6,3	6,5	354,5	0,07	0,04	1,11	-30,5116959	15,0000094	-30,5133984
								1,00	9,04	-721,1209	355,495045	-721,161249
CYS-H4	-721,127808	-721,119543	-721,159896	4,9	4,9							
CYS-H5	-721,129037	-721,120774	-721,161097	1,7	1,7							
CYS-H8	-721,129629	-721,121426	-721,161754	0,0	0,0							

L-Methionine

Figure S16. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the most stable conformers of neutral L-methionine.

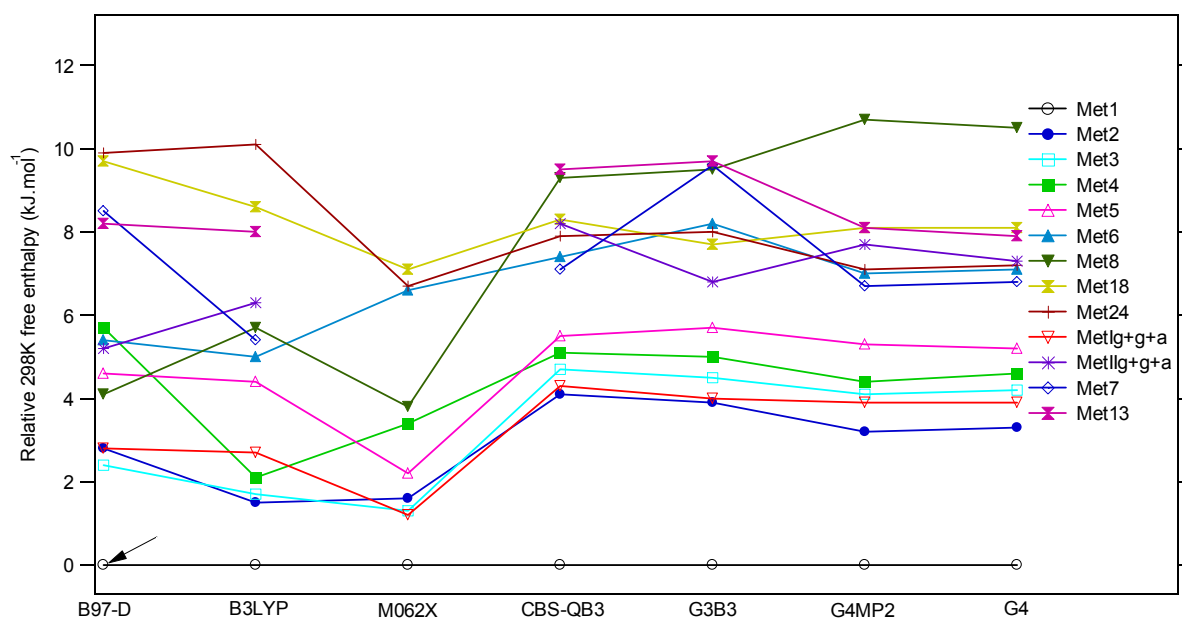
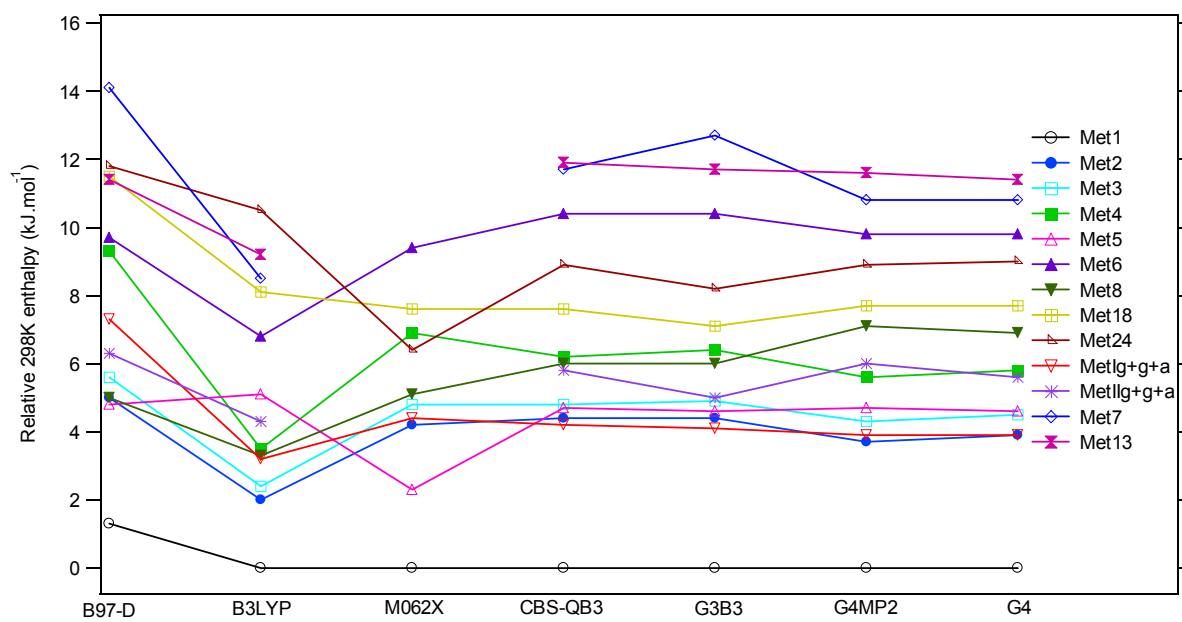


Figure S17 Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the nine most stable conformers of deprotonated L-methionine.

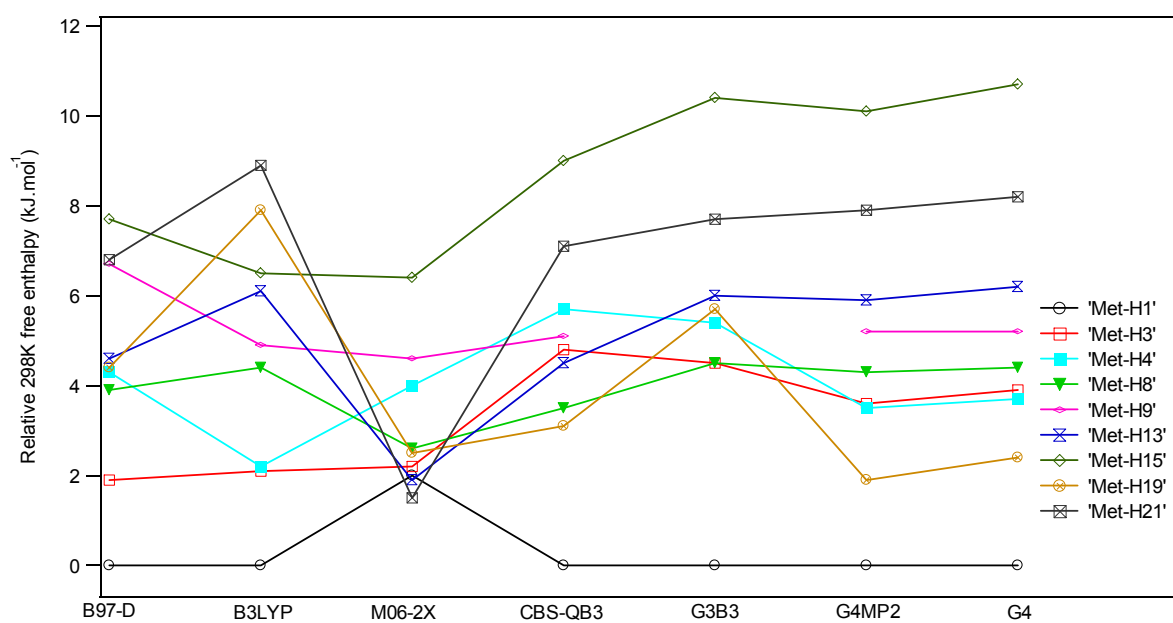
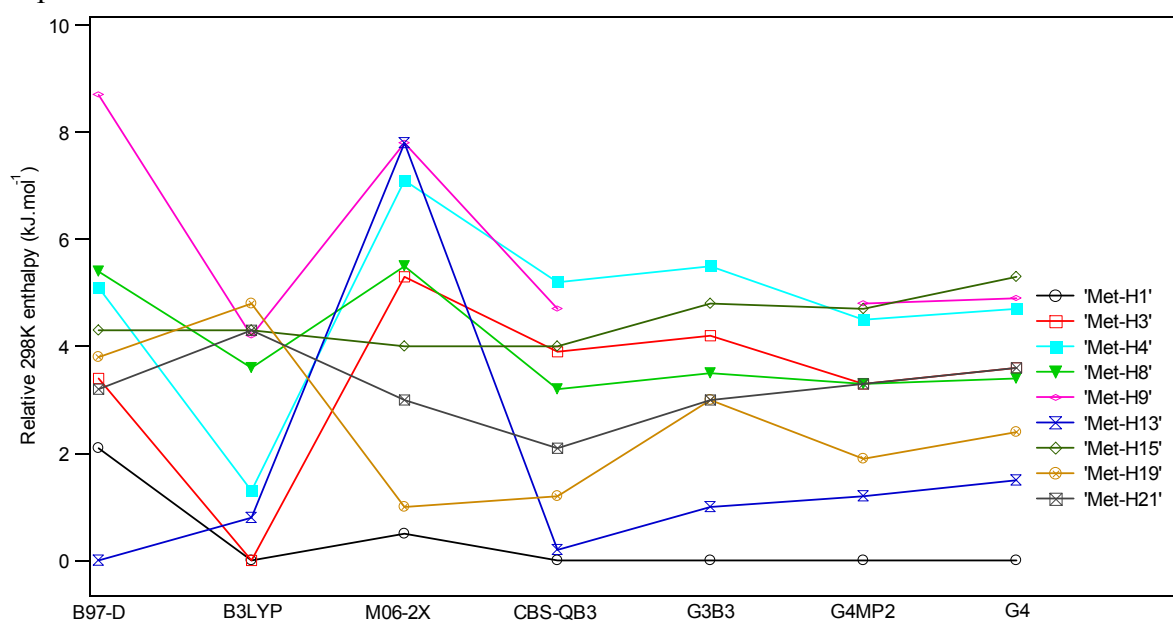


Figure S18. Relative H°_{298} and G°_{298} (kJ mol^{-1}) of the six most stable conformers of protonated L-methionine.

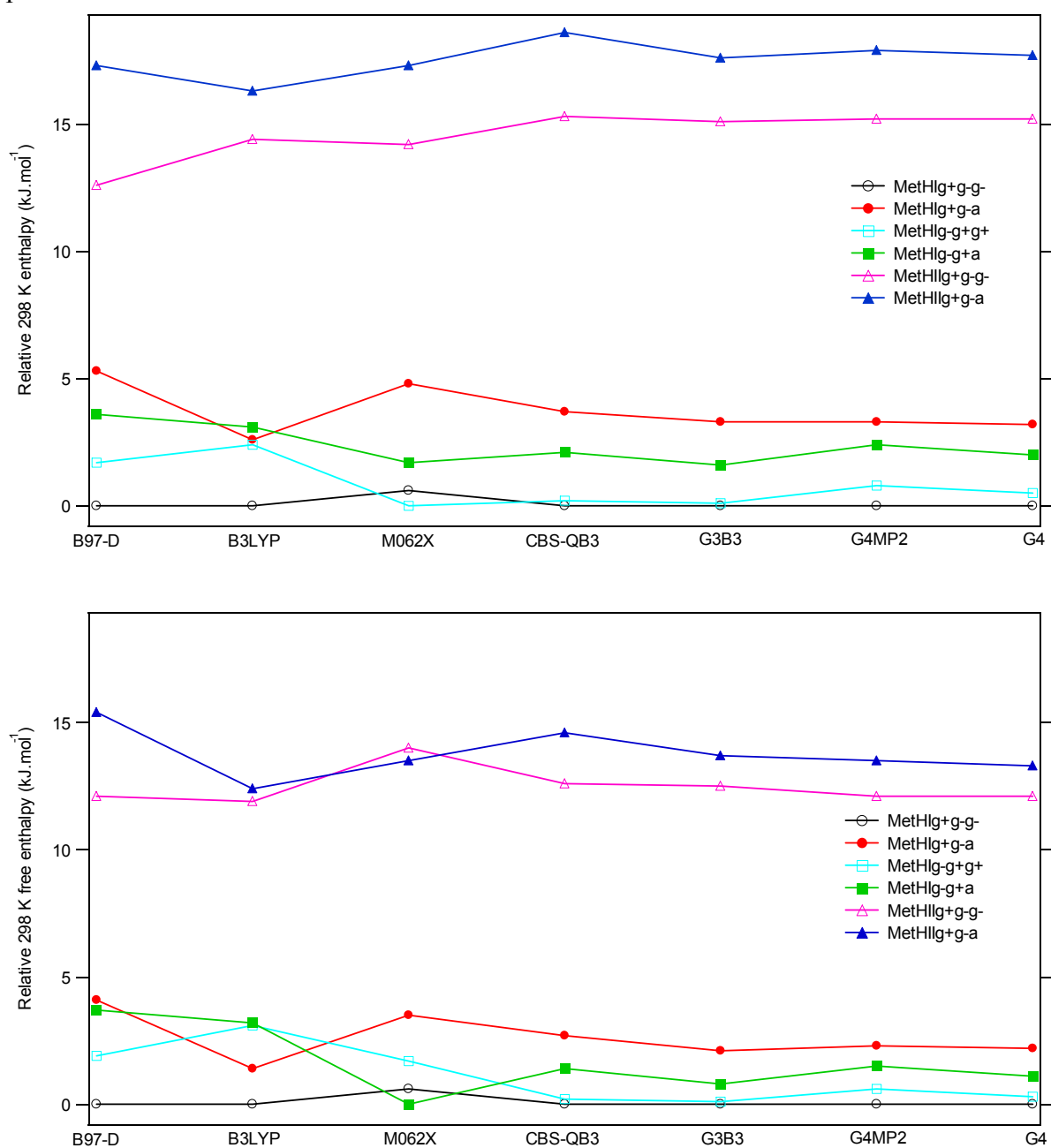
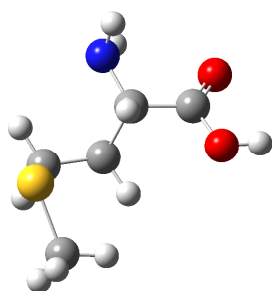
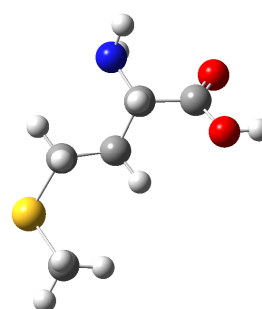


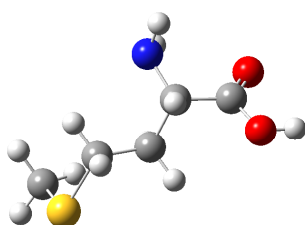
Figure S19. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first thirty two conformers of neutral L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



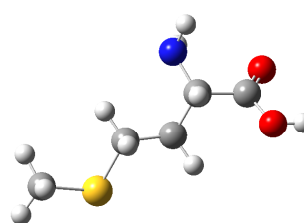
Met1 [0.0; 0.0]



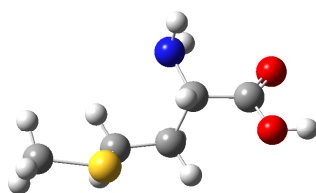
Met2 [2.0; 1.5]



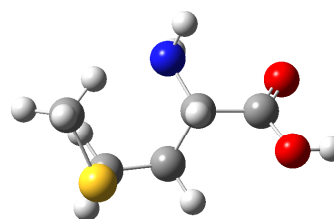
Met3 [2.4; 1.7]



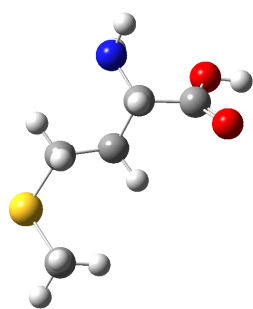
Met4 [3.5; 2.1]



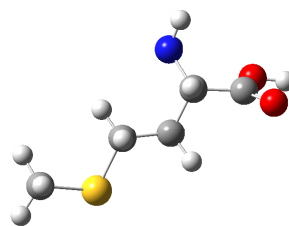
Met5 [3.2; 2.7]



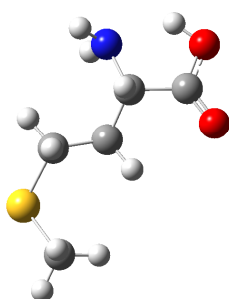
Met6 [5.1; 4.4]



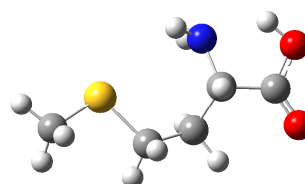
Met6 [6.8; 5.0]



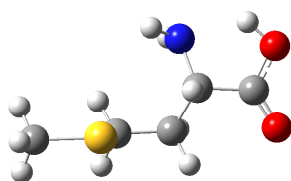
Met7 [8.5; 5.4]



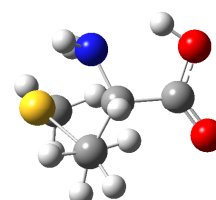
MetIIg+ag- [3.9; 5.5]



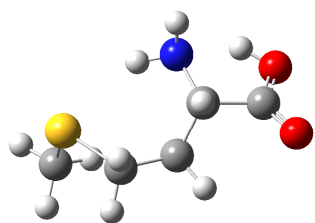
Met8 [3.3; 5.7]



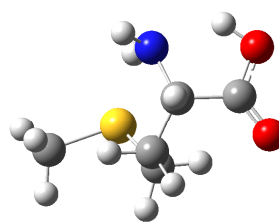
MetIIg+g+a [4.3; 6.3]



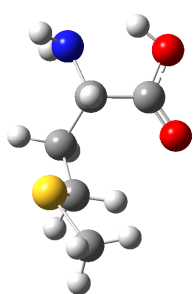
Met9 [2.5; 6.4]



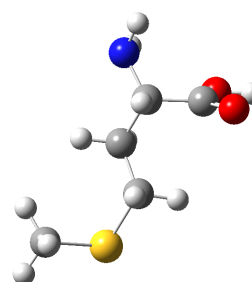
Met10 [2.1; 6.7]



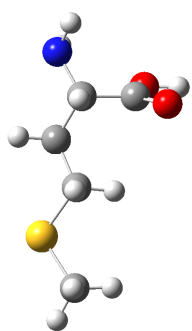
Met11 [2.7; 7.2]



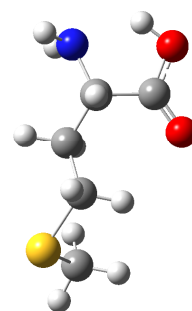
Met12 [6.3; 7.6]



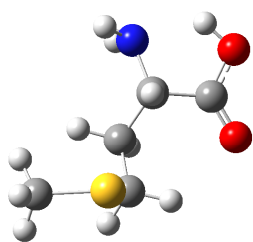
Met13 [9.8; 8.0]



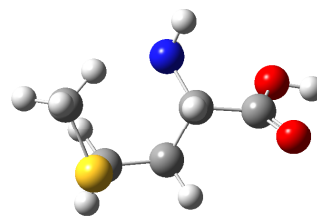
Met14 [10.2; 8.1]



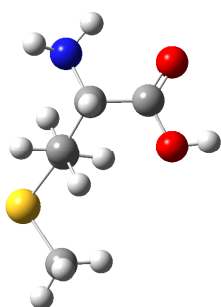
Met15 [6.9; 8.3]



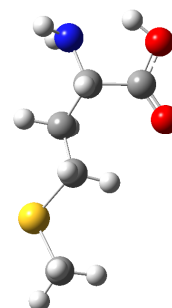
Met16 [5.6; 8.4]



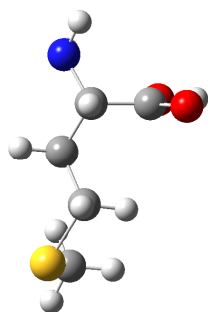
Met17 [11.5; 8.5]



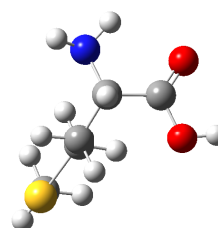
Met18 [8.1; 8.6]



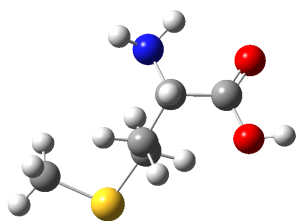
Met19 [8.1; 8.8]



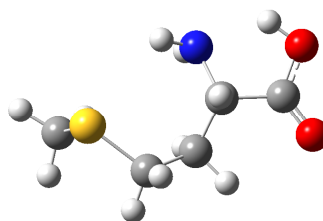
Met20 [10.4; 9.0]



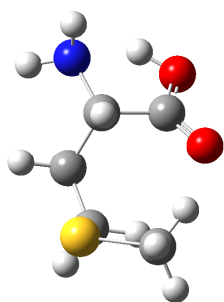
Met21 [9.1; 9.2]



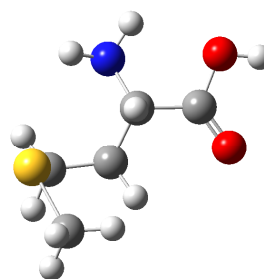
Met22 [9.1; 9.6]



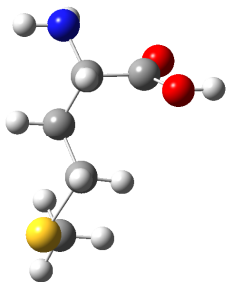
Met23 [5.8; 9.8]



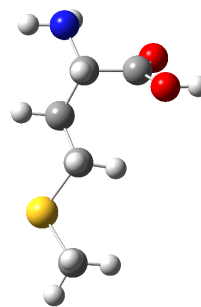
Met24 [10.5; 10.1]



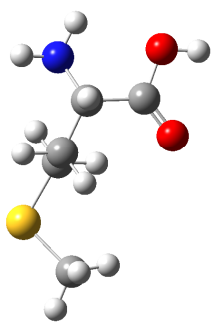
Met25 [6.9; 10.1]



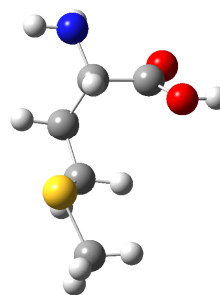
Met26 [11.4; 10.4]



Met27 [12.1; 10.5]

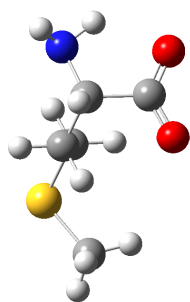


Met28 [11.7; 11.4]

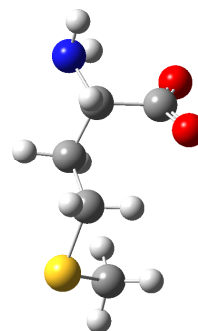


Met29 [14.6; 11.8]

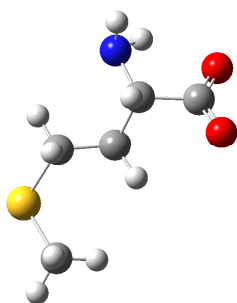
Figure S20. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first twenty four conformers of deprotonated L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



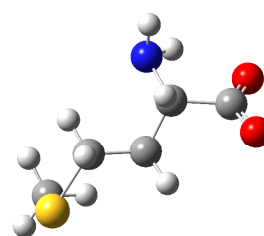
Met-H1 [0.0; 0.0]



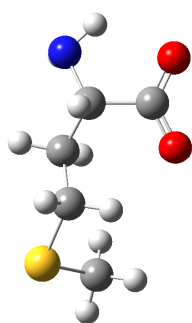
Met-H2 [1.6; 2.0]



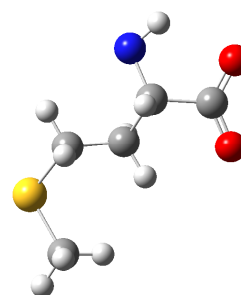
Met-H3 [0.0; 2.1]



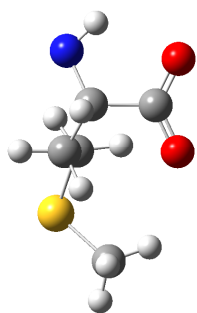
Met-H4 [1.3; 2.2]



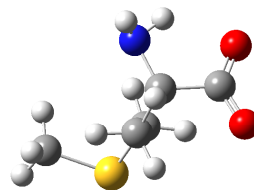
Met-H5 [2.4; 2.7]



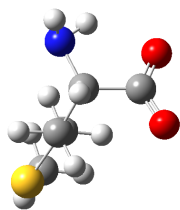
Met-H6 [2.6; 4.3]



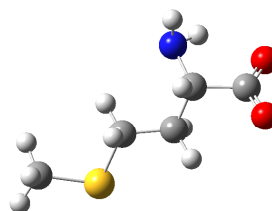
Met-H7 [5.2; 4.3]



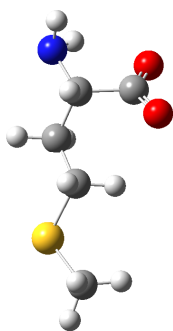
Met-H8 [3.6; 4.4]



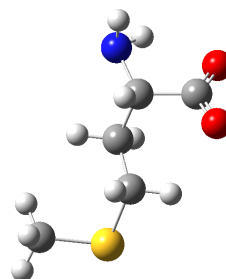
Met-H9 [4.2; 4.9]



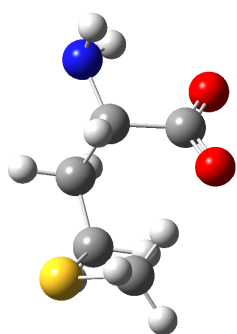
Met-H10 [4.1; 5.0]



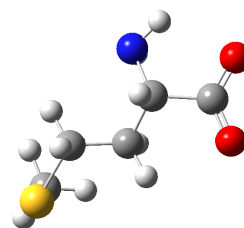
Met-H11 [4.1; 5.2]



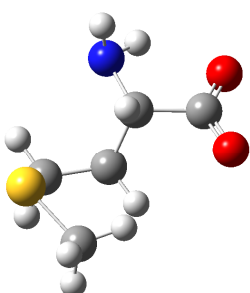
Met-H12 [3.7; 6.1]



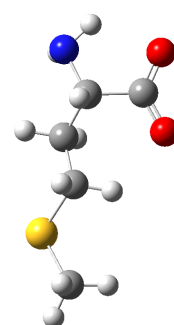
Met-H13 [0.8; 6.1]



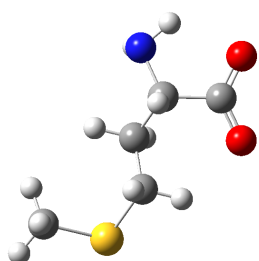
Met-H14 [5.6; 6.4]



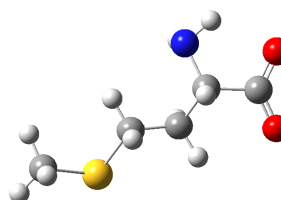
Met-H15 [4.3; 6.5]



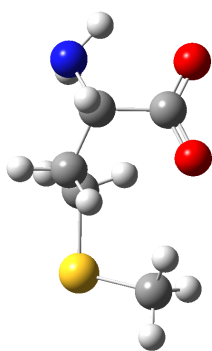
Met-H16 [5.6; 6.6]



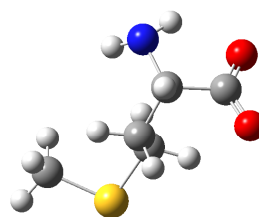
Met-H17 [4.6; 7.1]



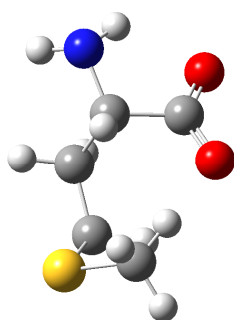
Met-H18 [6.9; 7.5]



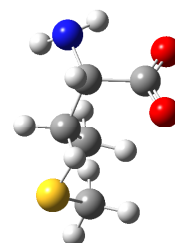
Met-H19 [4.8; 7.9]



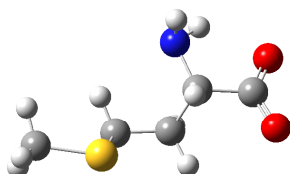
Met-H20 [9.0; 8.6]



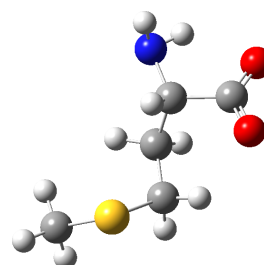
Met-H21 [4.3; 8.9]



Met-H22 [8.2; 10.2]

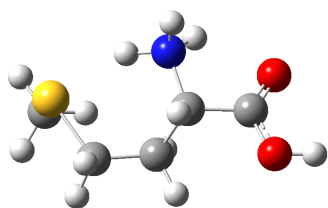


Met-H23 [10.2; 11.5]

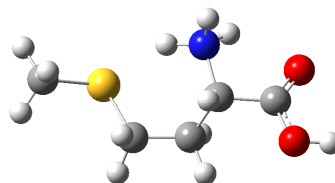


Met-H24 [9.1; 11.7]

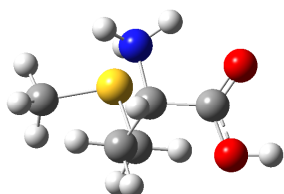
Figure S21. Optimized B3LYP/6-31+G(d,p) geometries of the first six conformers of protonated L-methionine (into brackets, relative H°_{298} and G°_{298} in kJ mol^{-1} calculated).



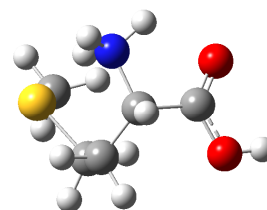
MetH+1 [0.0; 0.0]



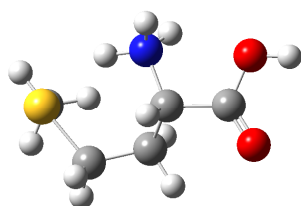
MetH+2 [2.6; 1.4]



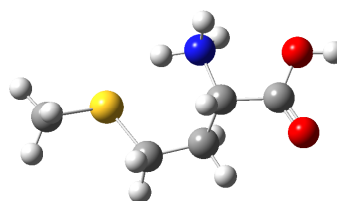
MetH+3 [2.4; 3.1]



MetH+4 [3.1; 3.2]



MetH+5 [14.4; 11.9]



MetH+6 [16.3; 12.4]

Table T4. Relative energies calculated with Composite methods and DFT for different forms of L-methionine.
B97D/6-31+G(d,p)

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
MethH+1	-800,529706	-800,517715	-800,56714	0,0	0,0	435,5	1,00	0,53	2,81	-420,998557	229,008761	-421,02455
MethH+2	-800,527765	-800,515698	-800,565572	5,3	4,1	439,4	0,19	0,10	1,93	-81,1186815	44,5267493	-81,1237354
MethH+3	-800,528989	-800,517085	-800,566416	1,7	1,9	434,6	0,47	0,25	2,87	-196,818861	106,859168	-196,83099
MethH+4	-800,528252	-800,516358	-800,565746	3,6	3,7	435,1	0,23	0,12	2,13	-97,3827325	52,9332968	-97,3887406
MethH+5	-800,524888	-800,512912	-800,562525	12,6	12,1	437,1	0,01	0,00	0,19	-3,30669898	1,80558346	-3,30690392
MethH+6	-800,523204	-800,511118	-800,561277	17,3	15,4	441,9	0,00	0,00	0,06	-0,89163231	0,49222431	-0,89168818
							1,00	9,99	9,99	-800,517163	435,625762	-800,566608
Met-H1	-799,63138	-799,619134	-799,670051	2,1	0,0	448,60	1,00	0,28	2,97	-225,359736	126,430459	-225,374086
Met-H2	-799,630501	-799,618451	-799,669192	3,9	2,3	447,05	0,41	0,11	2,06	-91,4301505	51,1165352	-91,4359523
Met-H3	-799,630837	-799,618627	-799,669309	3,4	1,9	446,53	0,46	0,13	2,20	-103,383866	57,7323679	-103,390419
Met-H4	-799,63009	-799,617977	-799,668407	5,1	4,3	444,31	0,18	0,05	1,25	-40,0916348	22,2769609	-40,0941633
Met-H5	-799,62988	-799,617631	-799,669332	6,0	1,9	455,51	0,47	0,13	2,23	-105,911334	60,3329803	-105,918182
Met-H8	-799,630094	-799,617854	-799,668572	5,4	3,9	446,85	0,21	0,06	1,40	-47,6770691	26,6431117	-47,6800932
Met-H9	-799,628852	-799,616628	-799,667507	8,7	6,7	448,26	0,07	0,02	0,64	-15,5799685	8,73411858	-15,5809598
Met-H10	-799,628213	-799,615955	-799,666977	10,4	8,1	449,52	0,04	0,01	0,42	-8,92966765	5,02003888	-8,93023743
Met-H11	-799,628789	-799,61658	-799,66731	8,8	7,2	446,95	0,06	0,02	0,55	-12,6682208	7,08099772	-12,6690245
Met-H12	-799,629817	-799,617723	-799,667939	5,8	5,5	442,42	0,11	0,03	0,89	-24,5245287	13,569259	-24,5260688
Met-H13	-799,631547	-799,619924	-799,668281	0,0	4,6	426,04	0,16	0,04	1,14	-35,122605	18,7136379	-35,124729
Met-H15	-799,63001	-799,618292	-799,667123	4,3	7,7	430,22	0,05	0,01	0,47	-10,4094214	5,6006089	-10,4100571
Met-H19	-799,630387	-799,618475	-799,668377	3,8	4,4	439,66	0,17	0,05	1,22	-38,8482227	21,3600392	-38,8506471
Met-H20	-799,628533	-799,616345	-799,667276	9,4	7,3	448,72	0,05	0,02	0,53	-12,2238561	6,85969063	-12,2246347
Met-H21	-799,630363	-799,618693	-799,667467	3,2	6,8	429,72	0,07	0,02	0,62	-14,93908	8,02832691	-14,9399913
Met-H22	-799,627962	-799,615744	-799,666657	11,0	8,9	448,56	0,03	0,01	0,32	-6,38093675	3,57954272	-6,38134304
Met-H23	-799,625945	-799,613833	-799,664416	16,0	14,8	445,66	0,00	0,00	0,05	-0,60641805	0,3379809	-0,60645641
Met-H24	-799,627878	-799,615814	-799,666521	10,8	9,3	446,75	0,02	0,01	0,29	-5,53165916	3,0905638	-5,53200995
Met-H6	-799,630838	-799,618627	-799,669316	3,4	1,9			1,00	19,22	-799,618376	446,50722	-799,669055
Met-H14	-799,630088	-799,617975	-799,66841	5,1	4,3							
Met-H18	-799,628213	-799,615956	-799,666977	10,4	8,1							
Met-H16	-799,628789	-799,616581	-799,667306	8,8	7,2							
Met-H17	-799,629815	-799,617722	-799,667937	5,8	5,6							

	-799,631378	-799,619132	-799,670048	2,1	0,0		1,00	0,22	2,78	-178,871457	99,7252269	-178,882776
Met-H7												
Met1	-800,167003	-800,154788	-800,205422	1,3	0,0	446,1	1,00	0,22	2,78	-178,871457	99,7252269	-178,882776
Met2	-800,165746	-800,153371	-800,204356	5,0	2,8	449,2	0,33	0,07	1,59	-58,3904566	32,7798388	-58,3941772
Met3	-800,165594	-800,153166	-800,204501	5,6	2,4	452,3	0,38	0,08	1,74	-67,9947982	38,4336726	-67,9991605
Met1g+g+a	-800,164882	-800,152501	-800,204356	7,3	2,8	456,9	0,33	0,07	1,59	-58,3903931	33,3391888	-58,3941772
Met1g+g+a	-800,165004	-800,152895	-800,203452	6,3	5,2	445,4	0,13	0,03	0,84	-22,5959586	12,5786735	-22,5973863
Met1g+ag-	-800,165386	-800,153212	-800,203706	5,4	4,5	444,9	0,16	0,04	1,01	-29,5038942	16,4036964	-29,5057561
Met4	-800,164243	-800,151752	-800,20324	9,3	5,7	453,6	0,10	0,02	0,71	-18,0858025	10,2533836	-18,0869663
Met5	-800,165702	-800,153443	-800,203666	4,8	4,6	442,5	0,16	0,04	0,98	-28,2901744	15,6444665	-28,2919501
Met6	-800,164035	-800,151602	-800,203353	9,7	5,4	455,9	0,11	0,03	0,78	-20,3646316	11,6042956	-20,3659487
Met7	-800,162505	-800,149924	-800,202175	14,1	8,5	460,4	0,03	0,01	0,30	-5,91009528	3,40027059	-5,91048122
Met8	-800,165458	-800,153366	-800,203879	5,0	4,1	445,0	0,20	0,04	1,15	-35,3821358	19,6793038	-35,3843695
Met9	-800,166158	-800,154246	-800,204044	2,7	3,6	438,7	0,24	0,05	1,29	-42,0765743	23,0714197	-42,0791929
Met10	-800,166792	-800,154857	-800,204693	1,1	1,9	439,1	0,47	0,10	1,96	-83,185389	45,6469686	-83,19057
Met11	-800,167055	-800,155284	-800,204278	0,0	3,0	431,7	0,30	0,07	1,51	-53,7981593	29,0222979	-53,8014534
Met12	-800,164944	-800,152941	-800,202863	6,2	6,7	439,8	0,07	0,02	0,53	-12,1727923	6,69121434	-12,1735518
Met13	-800,163358	-800,150942	-800,2023	11,4	8,2	452,5	0,04	0,01	0,33	-6,7391798	3,81100031	-6,73961236
Met14	-800,162348	-800,149848	-800,201462	14,3	10,4	454,7	0,02	0,00	0,16	-2,79510384	1,58850979	-2,79528414
Met15	-800,164198	-800,151978	-800,203051	8,7	6,2	450,0	0,08	0,02	0,61	-14,8298156	8,33969935	-14,8307622
Met16	-800,165119	-800,153125	-800,203169	5,7	5,9	440,9	0,09	0,02	0,67	-16,7863281	9,24975814	-16,787378
Met17	-800,163447	-800,151145	-800,202058	10,9	8,8	448,6	0,03	0,01	0,27	-5,22675214	2,93011268	-5,22708472
Met18	-800,163218	-800,150886	-800,201713	11,5	9,7	447,8	0,02	0,00	0,20	-3,63813343	2,03608999	-3,63836453
Met19	-800,162804	-800,150558	-800,201455	12,4	10,4	448,4	0,02	0,00	0,16	-2,77463372	1,55496956	-2,77481021
Met20	-800,163225	-800,150847	-800,202015	11,6	8,9	450,8	0,03	0,01	0,26	-4,9959676	2,81476372	-4,99628708
Met21	-800,161853	-800,149426	-800,200656	15,4	12,5	451,4	0,01	0,00	0,08	-1,19890367	0,67629053	-1,19898043
Met22	-800,162839	-800,150461	-800,201297	12,7	10,8	447,9	0,01	0,00	0,14	-2,35040352	1,31564251	-2,35055285
Met23	-800,165387	-800,153629	-800,202621	4,3	7,4	431,6	0,05	0,01	0,44	-9,4409422	5,09287348	-9,44152025
Met24	-800,162973	-800,150799	-800,201669	11,8	9,9	448,2	0,02	0,00	0,20	-3,4738443	1,94579016	-3,47406515
Met25	-800,164907	-800,153048	-800,20208	5,9	8,8	432,0	0,03	0,01	0,28	-5,3489317	2,88781492	-5,34925947
Met26	-800,162705	-800,150302	-800,201413	13,1	10,5	450,3	0,01	0,00	0,16	-2,65490806	1,49412884	-2,65507765
Met27	-800,161501	-800,148996	-800,200549	16,5	12,8	454,2	0,01	0,00	0,07	-1,07147435	0,60821988	-1,07154338
Met28	-800,161822	-800,149526	-800,200656	15,1	12,5	450,5	0,01	0,00	0,08	-1,19890382	0,67497042	-1,19898043
Met29	-800,161006	-800,148664	-800,200023	17,4	14,2	452,5	0,00	0,00	0,05	-0,61670159	0,34875199	-0,61674117
								1,00	22,94	-800,15364	445,643304	-800,204222

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

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
MetH+1	-800,786617	-800,77485	-800,823777	0,0	0,0	431,1	1,00	0,47	2,96	-373,084068	200,835566	-373,106863
MetH+2	-800,785745	-800,773872	-800,823237	2,6	1,4	434,9	0,57	0,26	2,92	-211,599335	114,926268	-211,612379
MetH+3	-800,785608	-800,773932	-800,822588	2,4	3,1	428,7	0,29	0,13	2,24	-107,030606	57,2967804	-107,037109
MetH+4	-800,785388	-800,773674	-800,822554	3,1	3,2	430,7	0,28	0,13	2,20	-103,276278	55,5415182	-103,282582
MetH+5	-800,78126	-800,769356	-800,819246	14,4	11,9	439,6	0,01	0,00	0,18	-3,20060776	1,75684833	-3,20080716
MetH+6	-800,780664	-800,768647	-800,819042	16,3	12,4	444,0	0,01	0,00	0,15	-2,58338106	1,43240101	-2,58354364
								1,00	10,65	-800,774275	431,789382	-800,823284
Met-H1	-799,897337	-799,885319	-799,936403	0,0	0,0	450,1	1,00	0,24	2,84	-189,917901	106,860901	-189,93003
Met-H2	-799,896773	-799,884704	-799,935631	1,6	2,0	448,7	0,44	0,11	1,97	-84,4227327	47,3560931	-84,4281077
Met-H3	-799,897319	-799,885325	-799,935592	0,0	2,1	442,9	0,43	0,10	1,93	-81,0348806	44,8665827	-81,039973
Met-H4	-799,896898	-799,884843	-799,935572	1,3	2,2	446,9	0,42	0,10	1,91	-79,3505266	44,3378271	-79,3555591
Met-H5	-799,896474	-799,884408	-799,935379	2,4	2,7	449,1	0,34	0,08	1,69	-64,7922463	36,3759813	-64,796375
Met-H6	-799,896384	-799,884343	-799,934768	2,6	4,3	444,3	0,18	0,04	1,12	-34,1073757	18,9436114	-34,1095259
Met-H7	-799,895497	-799,883333	-799,934783	5,2	4,3	453,3	0,18	0,04	1,13	-34,6488798	19,6355779	-34,6511085
Met-H8	-799,895974	-799,883956	-799,934744	3,6	4,4	447,5	0,18	0,04	1,10	-33,2584335	18,6050856	-33,2605452
Met-H9	-799,895788	-799,883738	-799,934531	4,2	4,9	447,5	0,14	0,03	0,94	-26,5921352	14,8773632	-26,5938238
Met-H10	-799,895872	-799,883771	-799,934503	4,1	5,0	447,0	0,14	0,03	0,92	-25,8215637	14,4289057	-25,8232014
Met-H11	-799,895865	-799,883774	-799,934405	4,1	5,2	446,1	0,12	0,03	0,86	-23,2962021	12,9918352	-23,2976767
Met-H12	-799,895898	-799,883911	-799,934093	3,7	6,1	442,1	0,09	0,02	0,67	-16,7873918	9,2789747	-16,788445
Met-H13	-799,896751	-799,885022	-799,934083	0,8	6,1	432,2	0,09	0,02	0,67	-16,6120362	8,97692217	-16,6130551
Met-H14	-799,895298	-799,883205	-799,933967	5,6	6,4	447,2	0,08	0,02	0,61	-14,7066833	8,22285525	-14,7076166
Met-H15	-799,895548	-799,883697	-799,93392	4,3	6,5	442,5	0,07	0,02	0,59	-13,998403	7,7437274	-13,9992819
Met-H16	-799,895254	-799,883203	-799,933884	5,6	6,6	446,5	0,07	0,02	0,57	-13,4790339	7,52442162	-13,4798879
Met-H17	-799,895527	-799,883571	-799,933709	4,6	7,1	441,7	0,06	0,01	0,50	-11,2161073	6,19409899	-11,2168103
Met-H18	-799,894827	-799,882684	-799,933551	6,9	7,5	448,2	0,05	0,01	0,44	-9,50120074	5,32333849	-9,50180495
Met-H19	-799,895392	-799,883483	-799,933387	4,8	7,9	439,7	0,04	0,01	0,38	-7,99795899	4,39626193	-7,99845798
Met-H20	-799,893932	-799,881891	-799,933133	9,0	8,6	451,5	0,03	0,01	0,31	-6,12533588	3,45721091	-6,12572828
Met-H21	-799,895345	-799,883689	-799,933008	4,3	8,9	434,5	0,03	0,01	0,28	-5,37178814	2,91811267	-5,37211936
Met-H22	-799,894164	-799,88222	-799,932519	8,2	10,2	443,2	0,02	0,00	0,18	-3,21430514	1,78080419	-3,21450727
Met-H23	-799,893395	-799,881437	-799,93201	10,2	11,5	445,6	0,01	0,00	0,12	-1,8833619	1,04911389	-1,88348098
Met-H24	-799,893766	-799,88187	-799,931939	9,1	11,7	441,1	0,01	0,00	0,11	-1,74803931	0,96402882	-1,74814873
								1,00	21,84	-799,884523	447,109635	-799,935271

Met1	-800,430345	-800,418124	-800,468948	0,0	0,0	447,8	1,00	0,24	2,84	-190,383164	106,506528	-190,395253
Met2	-800,429659	-800,41736	-800,468373	2,0	1,5	449,4	0,55	0,13	2,21	-104,081343	58,4430689	-104,087977
Met3	-800,429541	-800,417224	-800,468302	2,4	1,7	450,0	0,51	0,12	2,12	-96,6028623	54,3129274	-96,609027
MetIlg+g+a	-800,429158	-800,416912	-800,467909	3,2	2,7	449,3	0,34	0,08	1,68	-63,9357953	35,8895657	-63,9398689
MetIlg+g+a	-800,42836	-800,416476	-800,466551	4,3	6,3	441,2	0,08	0,02	0,63	-15,3590863	8,46576241	-15,3600471
MetIlg+ag-	-800,428623	-800,416646	-800,46685	3,9	5,5	442,3	0,11	0,03	0,79	-21,025106	11,6186632	-21,0264248
Met4	-800,429156	-800,416784	-800,468133	3,5	2,1	452,4	0,42	0,10	1,93	-80,8927353	45,7215645	-80,8979248
Met5	-800,42846	-800,416169	-800,467254	5,1	4,4	450,1	0,17	0,04	1,07	-32,1366606	18,0706614	-32,1387117
Met6	-800,427852	-800,415537	-800,467037	6,8	5,0	453,7	0,13	0,03	0,92	-25,5874824	14,5049099	-25,5891288
Met7	-800,427299	-800,41487	-800,466889	8,5	5,4	458,3	0,12	0,03	0,82	-21,904078	12,5420228	-21,9055016
Met8	-800,428726	-800,416855	-800,466795	3,3	5,7	440,0	0,10	0,02	0,76	-19,8450878	10,9089034	-19,8463326
Met9	-800,42886	-800,417169	-800,466513	2,5	6,4	434,7	0,08	0,02	0,61	-14,7582242	8,01581748	-14,7591341
Met10	-800,429002	-800,417335	-800,466388	2,1	6,7	432,2	0,07	0,02	0,55	-12,9426196	6,98822747	-12,9434128
Met11	-800,428726	-800,417081	-800,466219	2,7	7,2	432,9	0,06	0,01	0,48	-10,837817	5,86190398	-10,8384824
Met12	-800,427598	-800,415712	-800,466048	6,3	7,6	443,5	0,05	0,01	0,42	-9,05625503	5,01773242	-9,05682456
Met13	-800,426721	-800,414396	-800,465904	9,8	8,0	453,8	0,04	0,01	0,37	-7,78520579	4,41393213	-7,78570678
Met14	-800,426626	-800,414233	-800,465859	10,2	8,1	454,8	0,04	0,01	0,36	-7,42584167	4,21983158	-7,42632063
Met15	-800,427446	-800,415488	-800,465791	6,9	8,3	443,2	0,04	0,01	0,34	-6,91403914	3,82830028	-6,91447366
Met16	-800,427822	-800,415998	-800,465766	5,6	8,4	438,5	0,04	0,01	0,33	-6,73487763	3,68943527	-6,73529639
Met17	-800,426037	-800,413733	-800,465715	11,5	8,5	458,0	0,03	0,01	0,32	-6,38362814	3,65259729	-6,38404272
Met18	-800,427227	-800,415022	-800,465691	8,1	8,6	446,4	0,03	0,01	0,31	-6,22475087	3,47172115	-6,22514492
Met19	-800,427086	-800,415056	-800,465585	8,1	8,8	445,2	0,03	0,01	0,29	-5,56898195	3,09739807	-5,56933351
Met20	-800,42647	-800,414157	-800,465537	10,4	9,0	452,7	0,03	0,01	0,28	-5,29520418	2,99473093	-5,29554409
Met21	-800,42689	-800,414639	-800,465433	9,1	9,2	447,5	0,02	0,01	0,25	-4,74732519	2,65425187	-4,74762646
Met22	-800,42689	-800,414663	-800,465281	9,1	9,6	446,0	0,02	0,01	0,22	-4,04689926	2,25480037	-4,04715518
Met23	-800,427638	-800,415921	-800,465209	5,8	9,8	434,2	0,02	0,00	0,21	-3,75218428	2,03566071	-3,75241533
Met24	-800,426272	-800,414121	-800,465113	10,5	10,1	449,3	0,02	0,00	0,19	-3,39232896	1,90406172	-3,39254508
Met25	-800,427364	-800,415504	-800,465093	6,9	10,1	436,9	0,02	0,00	0,19	-3,32182531	1,8131862	-3,32203111
Met26	-800,426076	-800,413787	-800,464989	11,4	10,4	451,1	0,02	0,00	0,17	-2,97811776	1,67845611	-2,97830827
Met27	-800,425902	-800,413527	-800,464952	12,1	10,5	453,1	0,02	0,00	0,17	-2,8646144	1,62151814	-2,86479845
Met28	-800,425885	-800,413683	-800,464593	11,7	11,4	448,5	0,01	0,00	0,12	-1,96484261	1,10106288	-1,96496759
Met29	-800,424844	-800,412545	-800,464437	14,6	11,8	457,2	0,01	0,00	0,11	-1,66792364	0,952705	-1,66803178
					1,00	22,08	-800,416909	448,251909	-800,467786			

Met1	-800,206998	-800,195095	-800,244952	0,0	439,3	1,00	0,23	2,79	-180,243622	98,943193	-180,254852
Met2	-800,205648	-800,193478	-800,244357	4,2	448,3	0,54	0,12	2,12	-96,4899028	54,0531723	-96,4960379
Met3	-800,205493	-800,19325	-800,244439	4,8	451,0	0,58	0,13	2,22	-105,167517	59,2733049	-105,174245
MetIlg+g+a	-800,205555	-800,193401	-800,244501	4,4	450,2	0,62	0,14	2,29	-112,243102	63,1511631	-112,25027
MetIlg+ag-	-800,204137	-800,192176	-800,242941	7,7	447,3	0,12	0,03	0,82	-21,809672	12,1903165	-21,8110556
Met4	-800,204742	-800,192485	-800,243674	6,9	451,0	0,26	0,06	1,39	-47,0942319	26,5427339	-47,0972445
Met5	-800,206239	-800,194208	-800,244109	2,3	439,6	0,41	0,09	1,84	-74,3653183	40,8582767	-74,3699558
Met6	-800,203642	-800,191526	-800,242422	9,4	448,4	0,07	0,02	0,54	-12,6454685	7,0863139	-12,6462728
Met8	-800,204973	-800,193167	-800,243486	5,1	443,3	0,21	0,05	1,22	-38,6564553	21,4168182	-38,6588861
Met11	-800,205422	-800,194034	-800,24228	2,8	425,1	0,06	0,01	0,49	-10,8935804	5,78671916	-10,8942372
Met12	-800,203176	-800,191461	-800,241303	9,5	439,1	0,02	0,00	0,22	-3,9044817	2,14269669	-3,9047249
Met14	-800,202422	-800,19012	-800,242225	13,1	459,1	0,06	0,01	0,47	-10,2821334	5,89882089	-10,282803
Met15	-800,202882	-800,191128	-800,241032	10,4	439,7	0,02	0,00	0,17	-2,93738706	1,61398153	-2,93757025
Met16	-800,203974	-800,192258	-800,242122	7,4	439,3	0,05	0,01	0,43	-9,22797696	5,06634813	-9,228552
Met17	-800,203602	-800,191597	-800,242093	9,2	444,9	0,05	0,01	0,42	-8,95116076	4,97666155	-8,95172562
Met18	-800,204135	-800,192207	-800,242265	7,6	441,0	0,06	0,01	0,48	-10,723294	5,91021318	-10,7239648
Met19	-800,202161	-800,190157	-800,241012	13,0	448,1	0,02	0,00	0,17	-2,87633012	1,6105527	-2,87651292
Met20	-800,202478	-800,190369	-800,241255	12,4	448,3	0,02	0,00	0,21	-3,71253185	2,08003643	-3,71276794
Met21	-800,203608	-800,191502	-800,242382	9,4	448,3	0,07	0,02	0,53	-12,1252602	6,79266184	-12,1260312
Met22	-800,203959	-800,192016	-800,241827	8,1	438,9	0,04	0,01	0,34	-6,76952242	3,71265707	-6,76994382
Met23	-800,204397	-800,193026	-800,241043	5,4	423,0	0,02	0,00	0,17	-2,97152415	1,57099674	-2,97170246
Met24	-800,204504	-800,192639	-800,242397	6,4	438,4	0,07	0,02	0,53	-12,3177994	6,74834456	-12,3185653
Met26	-800,202217	-800,190059	-800,242076	13,2	458,3	0,05	0,01	0,41	-8,79275332	5,03585014	-8,7933249
Met27	-800,201383	-800,189254	-800,24031	15,3	449,8	0,01	0,00	0,09	-1,37612791	0,77358605	-1,37621571
Met28	-800,202739	-800,19084	-800,24123	11,2	444,0	0,02	0,00	0,20	-3,6163299	2,00638644	-3,61655763
E-T							1,00	20,54	-800,193483	445,241805	-800,244019
Met7	-800,202723	-800,19132	-800,240157	9,9	12,6						
Met9	-800,205244	-800,194406	-800,242204	1,8	7,2						
Met10	-800,204666	-800,193936	-800,240458	3,0	11,8						
Met13	-800,202861	-800,191549	-800,23985	9,3	13,4						
Met29	-800,201213	-800,190056	-800,238151	13,2	17,9						
Met25	-800,204911	-800,193978	-800,240968	2,9	10,5						
MIlg+g+a	-800,205148	-800,19426	-800,241473	2,2	9,1						

CBS-QB3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
MetH+1	-799,816553	-799,804765	-799,853599	0,0	0,0	430,2	1,00	0,35	3,06	-280,204061	150,733053	-280,221169
MetH+2	-799,815223	-799,803338	-799,852585	3,7	2,7	433,9	0,34	0,12	2,12	-96,6033619	52,4064288	-96,6093101
MetH+3	-799,816426	-799,804697	-799,85352	0,2	0,2	430,2	0,92	0,32	3,03	-257,894927	138,700833	-257,91067
MetH+4	-799,815735	-799,803982	-799,85308	2,1	1,4	432,6	0,58	0,20	2,69	-162,465122	87,8690924	-162,475096
MetH+5	-799,810875	-799,798921	-799,848809	15,3	12,6	439,5	0,01	0,00	0,12	-1,83134894	1,00642668	-1,83146317
MetH+6	-799,809746	-799,797692	-799,848027	18,6	14,6	443,5	0,00	0,00	0,06	-0,80557005	0,44667227	-0,80562075
								1,00	11,08	-799,804391	431,162506	-799,853329
Met-H1	-798,928125	-798,916205	-798,966544	0,0	0,0	443,5	1,00	0,36	3,06	-290,855805	161,464424	-290,874131
Met-H2	-798,925908	-798,914027	-798,964035	5,7	6,6	440,6	0,07	0,03	0,79	-20,8608271	11,5044728	-20,8621329
Met-H3	-798,926665	-798,914705	-798,964721	3,9	4,8	440,7	0,15	0,05	1,31	-42,8759537	23,6492893	-42,878638
Met-H4	-798,926174	-798,914207	-798,964373	5,2	5,7	442,0	0,10	0,04	1,02	-29,7503509	16,4587626	-29,752219
Met-H5	-798,926088	-798,914293	-798,963782	5,0	7,3	436,0	0,05	0,02	0,65	-15,9933472	8,72858028	-15,9943379
Met-H6	-798,925758	-798,913811	-798,963685	6,3	7,5	439,4	0,05	0,02	0,60	-14,4443427	7,94452278	-14,4452444
Met-H8	-798,926916	-798,914996	-798,965226	3,2	3,5	442,5	0,25	0,09	1,82	-72,8689421	40,3646163	-72,8735236
Met-H9	-798,926303	-798,914399	-798,964604	4,7	5,1	442,3	0,13	0,05	1,20	-37,9184335	20,9938877	-37,9208164
Met-H10	-798,924986	-798,912926	-798,963424	8,6	8,2	444,9	0,04	0,01	0,49	-10,9813626	6,11542605	-10,9820567
Met-H11	-798,925483	-798,913407	-798,963918	7,3	6,9	445,0	0,06	0,02	0,72	-18,4487926	10,2766121	-18,449959
Met-H12	-798,925828	-798,913832	-798,964053	6,2	6,5	442,5	0,07	0,03	0,80	-21,2589176	11,7739537	-21,2602539
Met-H13	-798,927735	-798,916119	-798,964816	0,2	4,5	429,0	0,16	0,06	1,39	-47,3743963	25,4413686	-47,3772839
Met-H14	-798,924762	-798,91274	-798,96304	9,1	9,2	443,2	0,03	0,01	0,36	-7,33694461	4,06986157	-7,33740655
Met-H15	-798,926218	-798,914685	-798,963118	4,0	9,0	426,7	0,03	0,01	0,38	-7,96327641	4,25332448	-7,96375917
Met-H16	-798,924741	-798,912765	-798,962991	9,0	9,3	442,5	0,02	0,01	0,34	-6,96893713	3,86003762	-6,96937526
Met-H17	-798,92541	-798,913505	-798,963304	7,1	8,5	438,7	0,03	0,01	0,44	-9,68110694	5,31669363	-9,68171039
Met-H18	-798,924104	-798,912014	-798,962528	11,0	10,5	445,0	0,01	0,01	0,23	-4,28542265	2,38727377	-4,28569361
Met-H19	-798,927536	-798,915732	-798,965364	1,2	3,1	437,3	0,29	0,11	1,97	-84,2333594	46,1042204	-84,2385923
Met-H20	-798,92497	-798,913	-798,963135	8,4	9,0	441,7	0,03	0,01	0,39	-8,10670758	4,48210264	-8,10721631
Met-H21	-798,926921	-798,915387	-798,963855	2,1	7,1	427,0	0,06	0,02	0,69	-17,267719	9,229646	-17,2687666
Met-H22	-798,925502	-798,913517	-798,964088	7,1	6,4	445,6	0,08	0,03	0,82	-22,0548617	12,2999082	-22,0562578
Met-H23	-798,923389	-798,911457	-798,961793	12,5	12,5	443,5	0,01	0,00	0,12	-1,98044484	1,09935653	-1,98056962
Met-H24	-798,924641	-798,912763	-798,962749	9,0	10,0	440,4	0,02	0,01	0,28	-5,40494524	2,97944987	-5,40528341
Met-H7	-798,927547	-798,915735	-798,965415	1,2	3,0			1,00	19,89	-798,915196	440,797791	-798,965228

Met1	-799,462681	-799,450419	-799,501352	0,0	448,7	1,00	0,43	3,01	-346,495988	194,491977	-346,518063
Met2	-799,461113	-799,448754	-799,499789	4,4	449,6	0,19	0,08	1,73	-67,1149322	37,7478659	-67,1192167
Met3	-799,460931	-799,448593	-799,499547	4,8	448,9	0,15	0,07	1,48	-52,0527671	29,2298993	-52,0560847
Met1g+g+a	-799,461103	-799,448815	-799,499725	4,2	448,5	0,18	0,08	1,66	-62,7522123	35,2076658	-62,7562084
Met1l1g+g+a	-799,460136	-799,448225	-799,498237	5,8	440,6	0,04	0,02	0,56	-13,1509697	7,24832094	-13,1517924
Met4	-799,460473	-799,448048	-799,499419	6,2	452,6	0,13	0,06	1,36	-45,5054306	25,7624262	-45,5083547
Met5	-799,460893	-799,448629	-799,49924	4,7	445,9	0,11	0,05	1,20	-37,7070319	21,0316073	-37,7094191
Met6	-799,45882	-799,446459	-799,498519	10,4	458,7	0,05	0,02	0,70	-17,6838127	10,1458035	-17,6849643
Met7	-799,458477	-799,444598	-799,498633	11,7	463,9	0,06	0,02	0,77	-19,9329051	11,5664572	-19,9342179
Met8	-799,459989	-799,448117	-799,497821	6,0	437,9	0,02	0,01	0,40	-8,49614184	4,65391631	-8,49667007
Met9	-799,460655	-799,448943	-799,498232	3,9	434,3	0,04	0,02	0,56	-13,0821067	7,10612297	-13,0829132
Met10	-799,460472	-799,448756	-799,497924	4,4	433,2	0,03	0,01	0,44	-9,46673012	5,1296492	-9,46731234
Met11	-799,460955	-799,449351	-799,497999	2,8	428,6	0,03	0,01	0,46	-10,2425366	5,49132716	-10,2431599
Met12	-799,458777	-799,446873	-799,497114	9,3	442,6	0,01	0,01	0,22	-4,04353457	2,23885303	-4,04378869
Met13	-799,45829	-799,445891	-799,497736	11,9	456,8	0,02	0,01	0,37	-7,7705611	4,43982592	-7,77106503
Met14	-799,45799	-799,445542	-799,497393	12,8	456,8	0,02	0,01	0,28	-5,42014918	3,09724278	-5,42050072
Met15	-799,458248	-799,44629	-799,496352	10,8	441,1	0,01	0,00	0,11	-1,81641735	1,0021444	-1,8165311
Met16	-799,459435	-799,447603	-799,497248	7,4	437,4	0,01	0,01	0,25	-4,65455782	2,54659393	-4,65484687
Met17	-799,458102	-799,44593	-799,496726	11,8	447,5	0,01	0,00	0,16	-2,69026694	1,50602282	-2,69043788
Met18	-799,459762	-799,447525	-799,498188	7,6	446,4	0,04	0,02	0,54	-12,4913302	6,97437649	-12,4921218
Met19	-799,457511	-799,445482	-799,495814	13,0	443,4	0,00	0,00	0,07	-1,03237034	0,57264651	-1,03243534
Met20	-799,457951	-799,445585	-799,497117	12,7	454,0	0,01	0,01	0,22	-4,05628769	2,30362932	-4,05654915
Met21	-799,459244	-799,446942	-799,497866	9,1	448,7	0,03	0,01	0,42	-8,90728686	4,99889554	-8,90785424
Met22	-799,459458	-799,44719	-799,497892	8,5	446,7	0,03	0,01	0,43	-9,1538559	5,11487636	-9,15443645
Met23	-799,459467	-799,447704	-799,497033	7,1	434,6	0,01	0,00	0,21	-3,71379418	2,01895129	-3,71402333
Met24	-799,459294	-799,447025	-799,498338	8,9	452,1	0,04	0,02	0,61	-14,6225403	8,269063	-14,6234788
Met25	-799,459692	-799,447844	-799,497159	6,8	434,5	0,01	0,01	0,23	-4,23922054	2,30393738	-4,23948204
Met26	-799,458134	-799,445828	-799,496894	12,1	449,9	0,01	0,00	0,18	-3,20936756	1,80616748	-3,20957257
Met27	-799,45781	-799,445427	-799,496691	13,1	451,7	0,01	0,00	0,15	-2,59317448	1,46504568	-2,59334077
Met28	-799,458246	-799,446027	-799,49679	11,5	447,2	0,01	0,00	0,17	-2,87730285	1,6096797	-2,87748555
Met29	-799,457491	-799,445169	-799,496646	13,8	453,5	0,01	0,00	0,15	-2,47347358	1,40322587	-2,47363285
							1,00	19,11	-799,449056	448,484217	-799,49996

G3B3

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
Meth+1	-800,483281	-800,471271	-800,520582	0,0	0,0	434,4	1,00	0,32	3,03	-255,517099	138,679986	-255,53284
Meth+2	-800,48214	-800,470028	-800,519765	3,3	2,1	438,2	0,42	0,14	2,25	-108,339995	59,3087921	-108,346726
Meth+3	-800,48318	-800,47123	-800,520548	0,1	0,1	434,5	0,96	0,31	3,02	-246,554356	133,834527	-246,569547
Meth+4	-800,482662	-800,47066	-800,520286	1,6	0,8	437,2	0,73	0,23	2,83	-187,247144	102,276254	-187,258753
Meth+5	-800,477709	-800,46552	-800,515825	15,1	12,5	443,2	0,01	0,00	0,11	-1,72889201	0,95726493	-1,72900066
Meth+6	-800,476858	-800,464569	-800,51538	17,6	13,7	447,7	0,00	0,00	0,07	-1,08343935	0,60592098	-1,08350812
								1,00	11,31	-800,470926	435,662745	-800,520374
Met-H1	-799,592649	-799,580568	-799,631161	0,0	0,0	445,7	1,00	0,40	3,04	-323,268669	180,213605	-323,289123
Met-H2	-799,591381	-799,579192	-799,630147	3,6	2,7	448,9	0,34	0,14	2,28	-111,450355	62,5752421	-111,457458
Met-H3	-799,591123	-799,578982	-799,62943	4,2	4,5	444,5	0,16	0,07	1,49	-52,4880532	29,1768772	-52,4913649
Met-H4	-799,590631	-799,57848	-799,629087	5,5	5,4	445,9	0,11	0,05	1,17	-36,611645	20,4157104	-36,6139622
Met-H5	-799,590278	-799,578375	-799,628053	5,8	8,2	437,7	0,04	0,02	0,54	-12,3599255	6,76573021	-12,3606935
Met-H6	-799,59022	-799,578075	-799,628477	6,5	7,0	444,1	0,06	0,02	0,75	-19,2930292	10,7147755	-19,2942454
Met-H8	-799,591275	-799,579248	-799,629453	3,5	4,5	442,3	0,17	0,07	1,51	-53,771335	29,7462371	-53,7747113
Met-H10	-799,589386	-799,577163	-799,628012	8,9	8,3	448,0	0,04	0,01	0,52	-11,8390064	6,6333521	-11,8397593
Met-H11	-799,589913	-799,577711	-799,628393	7,5	7,3	446,5	0,05	0,02	0,70	-17,6639634	9,86454321	-17,665083
Met-H12	-799,590298	-799,578147	-799,628744	6,4	6,3	445,8	0,08	0,03	0,91	-25,5374842	14,2376306	-25,5391002
Met-H13	-799,591892	-799,580204	-799,628886	1,0	6,0	428,9	0,09	0,04	1,02	-29,6445505	15,9018264	-29,6463554
Met-H14	-799,589159	-799,576992	-799,62763	9,4	9,3	446,1	0,02	0,01	0,38	-7,92659132	4,42281202	-7,92709332
Met-H15	-799,590381	-799,578736	-799,627186	4,8	10,4	426,9	0,02	0,01	0,26	-4,972566836	2,65466098	-4,97286967
Met-H16	-799,588982	-799,57684	-799,627464	9,8	9,7	446,0	0,02	0,01	0,33	-6,65846986	3,71420994	-6,65889143
Met-H17	-799,589657	-799,577583	-799,627825	7,8	8,8	442,7	0,03	0,01	0,45	-9,72804388	5,38551933	-9,72865515
Met-H18	-799,58845	-799,576211	-799,627067	11,4	10,7	448,1	0,01	0,01	0,24	-4,38837729	2,45913319	-4,3886564
Met-H19	-799,591312	-799,579425	-799,628981	3,0	5,7	436,6	0,10	0,04	1,09	-32,754696	17,8856186	-32,756726
Met-H20	-799,58938	-799,57727	-799,627646	8,7	9,2	443,8	0,02	0,01	0,39	-8,06091154	4,47448601	-8,06141941
Met-H21	-799,591072	-799,579427	-799,628234	3,0	7,7	430,0	0,05	0,02	0,62	-14,9475431	8,03870468	-14,9484555
Met-H22	-799,589131	-799,576964	-799,627625	9,5	9,3	446,3	0,02	0,01	0,38	-7,8850776	4,40164705	-7,8855772
Met-H23	-799,5879	-799,575761	-799,626649	12,6	11,8	448,3	0,01	0,00	0,17	-2,8291473	1,58637947	-2,82932735
Met-H24	-799,589007	-799,576961	-799,627282	9,5	10,2	443,3	0,02	0,01	0,28	-5,50002951	3,04964839	-5,50037566
Met-H7	-799,58938	-799,57727	-799,627647	8,7	9,2	443,3	0,02	0,01	18,51	-799,579472	444,31835	-799,629904
E-T								1,00	18,51	-799,579472	444,31835	-799,629904

Met-H9	-799,591289	-799,579926	-799,628633	1,7	6,6	0,0	452,2	1,00	0,42	3,03	-334,743746	189,180248	-334,765218
Met1	-800,128414	-800,115963	-800,167287	0,0	0,0	3,9	453,9	0,21	0,09	1,77	-69,8580126	39,631072	-69,8625108
Met2	-800,126814	-800,114275	-800,165795	4,4	4,5	4,5	453,4	0,16	0,07	1,52	-54,6947636	30,9926966	-54,6982813
Met3	-800,126626	-800,114102	-800,165562	4,9	4,0	4,0	452,4	0,20	0,08	1,73	-66,984212	37,8775555	-66,9885112
MetIlg+g+a	-800,12686	-800,114402	-800,165755	4,1	6,8	6,8	446,1	0,07	0,03	0,83	-22,3773154	12,4770301	-22,3787316
MetIIg+g+a	-800,126211	-800,114075	-800,164711	5,0	5,0	5,0	456,9	0,14	0,06	1,37	-46,1863856	26,3759054	-46,1893793
Met4	-800,126153	-800,113539	-800,165401	6,4	5,7	5,7	448,8	0,10	0,04	1,14	-34,9295333	19,5908317	-34,9317569
Met5	-800,126613	-800,1142	-800,165135	4,6	8,2	8,2	459,7	0,04	0,02	0,55	-12,7182446	7,30692427	-12,719074
Met6	-800,124528	-800,111998	-800,164173	10,4	9,6	9,6	462,5	0,02	0,01	0,35	-7,19062335	4,15659967	-7,19109514
Met7	-800,123743	-800,111134	-800,16363	12,7	9,5	9,5	440,2	0,02	0,01	0,36	-7,41301219	4,07886592	-7,41347515
Met8	-800,125712	-800,11369	-800,163659	6,0	7,5	7,5	438,3	0,05	0,02	0,67	-16,6763659	9,13506894	-16,6774028
Met9	-800,126594	-800,114684	-800,164431	3,4	8,3	8,3	438,0	0,04	0,02	0,53	-12,0550101	6,59957797	-12,0557592
Met10	-800,126338	-800,114405	-800,164122	4,1	8,0	8,0	434,2	0,04	0,02	0,58	-13,5882282	7,37355459	-13,5890651
Met11	-800,126789	-800,114956	-800,164236	2,6	10,4	10,4	447,3	0,02	0,01	0,27	-5,26388979	2,94249575	-5,26422377
Met12	-800,124672	-800,112568	-800,163333	8,9	9,7	9,7	458,9	0,02	0,01	0,34	-6,93840234	3,97932169	-6,938854
Met13	-800,124071	-800,111512	-800,163596	11,7	10,4	10,4	459,2	0,02	0,01	0,27	-5,1925035	2,97989948	-5,19284173
Met14	-800,123799	-800,111203	-800,16332	12,5	12,9	12,9	444,7	0,01	0,00	0,12	-1,91866038	1,06631384	-1,91878141
Met15	-800,124037	-800,111901	-800,162372	10,7	10,4	10,4	441,2	0,02	0,01	0,28	-5,30830579	2,92728187	-5,308663804
Met16	-800,12529	-800,113261	-800,163341	7,1	12,8	12,8	448,7	0,01	0,00	0,12	-1,9779926	1,10915549	-1,9781185
Met17	-800,123793	-800,111477	-800,162401	11,8	7,7	7,7	450,2	0,05	0,02	0,63	-15,3003287	8,60842024	-15,3013058
Met18	-800,125672	-800,113254	-800,164349	7,1	14,3	14,3	447,0	0,00	0,00	0,07	-1,08249354	0,60478934	-1,08256218
Met19	-800,1233	-800,111089	-800,161827	12,8	10,8	10,8	457,5	0,01	0,01	0,24	-4,44502906	2,54153733	-4,44531753
Met20	-800,123785	-800,111247	-800,163172	12,4	8,8	8,8	451,9	0,03	0,01	0,45	-9,96811952	5,63053716	-9,9687586
Met21	-800,125119	-800,112644	-800,163941	8,7	8,9	8,9	449,6	0,03	0,01	0,44	-9,45820129	5,31449014	-9,45880449
Met22	-800,125298	-800,112863	-800,163891	8,1	11,3	11,3	438,7	0,01	0,00	0,21	-3,70656011	2,03232137	-3,70679079
Met23	-800,125148	-800,113205	-800,162999	7,2	8,0	8,0	452,9	0,04	0,02	0,57	-13,5170274	7,65137579	-13,5178958
Met24	-800,125213	-800,112825	-800,164231	8,2	11,1	11,1	435,7	0,01	0,00	0,22	-3,90229383	2,12498916	-3,90253502
Met25	-800,125566	-800,113595	-800,163048	6,2	11,5	11,5	452,1	0,01	0,00	0,19	-3,39001808	1,9153174	-3,39023547
Met26	-800,124061	-800,111605	-800,162914	11,4	11,8	11,8	454,7	0,01	0,00	0,17	-2,96050221	1,6823945	-2,96069316
Met27	-800,123722	-800,111177	-800,162785	12,6	11,2	11,2	451,4	0,01	0,00	0,21	-3,81315867	2,15106888	-3,81340282
Met28	-800,124203	-800,111796	-800,163026	10,9	12,2	12,2	454,9	0,01	0,00	0,15	-2,55571163	1,45317649	-2,55587656
Met29	-800,123468	-800,111008	-800,162645	13,0	0,98	18,44	783,492967	442,163871	-783,543153	442,163871	442,163871	442,163871	-783,543153

G4MP2

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
MetH+1	-799,945016	-799,933205	-799,98202	0,0	0,0	430,1	1,00	0,36	3,06	-290,049819	155,943733	-290,067518
MetH+2	-799,943844	-799,931936	-799,981159	3,3	2,3	433,7	0,40	0,15	2,34	-117,428415	63,6625455	-117,43564
MetH+3	-799,944659	-799,93289	-799,981787	0,8	0,6	430,8	0,78	0,28	2,97	-227,092109	122,300002	-227,10599
MetH+4	-799,944097	-799,93229	-799,981464	2,4	1,5	433,2	0,56	0,20	2,69	-161,764302	87,6114275	-161,774246
MetH+5	-799,93944	-799,927418	-799,977404	15,2	12,1	440,4	0,01	0,00	0,14	-2,27577866	1,25292069	-2,27592087
MetH+6	-799,938527	-799,926402	-799,976887	17,9	13,5	444,8	0,00	0,00	0,09	-1,32229332	0,73525145	-1,32237677
							1,00	1,00	11,29	-799,932717	431,50588	-799,981693
Met-H1	-799,053693	-799,041776	-799,091957	0,0	0,0	442,1	1,00	0,33	3,04	-261,112618	144,475246	-261,129016
Met-H2	-799,050622	-799,038827	-799,088198	7,7	9,9	435,0	0,02	0,01	0,27	-5,03919481	2,74322195	-5,03950618
Met-H3	-799,052468	-799,040501	-799,090574	3,3	3,6	441,2	0,23	0,08	1,63	-61,1007172	33,7347026	-61,1045462
Met-H4	-799,052111	-799,04006	-799,090634	4,5	3,5	445,6	0,25	0,08	1,70	-65,0746487	36,2882765	-65,0787675
Met-H5	-799,051376	-799,039636	-799,088896	5,6	8,0	434,0	0,04	0,01	0,47	-10,4885787	5,69689854	-10,4892253
Met-H6	-799,05151	-799,039549	-799,089512	5,8	6,4	440,2	0,08	0,03	0,77	-20,0295767	11,0343755	-20,0308291
Met-H8	-799,052387	-799,040527	-799,090308	3,3	4,3	438,6	0,18	0,06	1,37	-46,2088084	25,3638594	-46,2116872
Met-H9	-799,051831	-799,039931	-799,089994	4,8	5,2	441,1	0,13	0,04	1,10	-33,2284651	18,3423268	-33,230547
Met-H10	-799,050873	-799,038781	-799,089412	7,9	6,7	446,1	0,07	0,02	0,71	-18,032741	10,067141	-18,0338837
Met-H11	-799,050873	-799,038763	-799,089553	7,9	6,3	447,5	0,08	0,03	0,79	-20,9108305	11,710553	-20,9121597
Met-H12	-799,051259	-799,0392	-799,089929	6,8	5,3	446,9	0,12	0,04	1,05	-31,0358497	17,3599158	-31,03782
Met-H13	-799,052875	-799,04133	-799,089691	1,2	5,9	426,1	0,09	0,03	0,88	-24,172075	12,8894896	-24,173538
Met-H14	-799,050517	-799,038502	-799,088821	8,6	8,2	443,3	0,04	0,01	0,45	-9,69412957	5,37859537	-9,69474005
Met-H15	-799,051474	-799,039979	-799,088129	4,7	10,1	424,2	0,02	0,01	0,25	-4,68695891	2,48836845	-4,68724134
Met-H16	-799,05035	-799,038342	-799,088731	9,0	8,5	443,9	0,03	0,01	0,41	-8,81982742	4,90031464	-8,82038362
Met-H17	-799,051032	-799,03907	-799,089173	7,1	7,3	441,4	0,05	0,02	0,59	-14,0299119	7,75079799	-14,0307916
Met-H18	-799,049799	-799,037741	-799,088131	10,6	10,0	444,0	0,02	0,01	0,25	-4,69680059	2,60960602	-4,69709678
Met-H19	-799,052858	-799,041066	-799,091239	1,9	1,9	442,0	0,47	0,15	2,39	-122,843024	67,9590387	-122,850737
Met-H20	-799,050601	-799,038663	-799,088691	8,2	8,6	440,8	0,03	0,01	0,40	-8,45700173	4,66506313	-8,45753122
Met-H21	-799,052001	-799,040523	-799,088954	3,3	7,9	426,7	0,04	0,01	0,50	-11,1473258	5,95279717	-11,1480015
Met-H22	-799,050446	-799,038398	-799,088887	8,9	8,1	444,8	0,04	0,01	0,47	-10,3898937	5,78410251	-10,3905502
Met-H23	-799,049265	-799,037297	-799,087755	11,8	11,0	444,6	0,01	0,00	0,18	-3,16453396	1,76063163	-3,16473379
Met-H24	-799,049894	-799,037986	-799,088127	10,0	10,1	441,8	0,02	0,01	0,25	-4,67711309	2,58582538	-4,67740658
Met-H7	-799,052859	-799,041067	-799,091235	1,9	1,9			1,00	19,92	-799,040624	441,541148	-799,09074

Met1	-799,590334	-799,578015	-799,629046	0,0	0,0	449,6	1,00	0,39	3,05	-311,967842	175,419885	-311,987752
Met2	-799,589024	-799,576593	-799,627846	3,7	3,2	451,6	0,28	0,11	2,03	-88,4695418	49,9630285	-88,4752127
Met3	-799,588758	-799,576364	-799,627476	4,3	4,1	450,3	0,19	0,08	1,62	-59,9843711	33,7828897	-59,9882055
MetIlg+g+a	-799,588853	-799,576511	-799,627556	3,9	3,9	449,7	0,21	0,08	1,70	-65,241791	36,6956693	-65,245956
MetIlg+g+a	-799,58775	-799,575741	-799,626113	6,0	7,7	443,8	0,05	0,02	0,60	-14,3343774	7,95617228	-14,3352804
MetIlg+ag-	-799,586978	-799,574878	-799,625268	8,2	9,9	444,0	0,02	0,01	0,30	-5,90170084	3,27686212	-5,90207277
Met4	-799,588355	-799,57587	-799,627367	5,6	4,4	453,7	0,17	0,07	1,50	-53,4962537	30,3557788	-53,4996992
Met5	-799,588552	-799,576224	-799,62703	4,7	5,3	447,6	0,12	0,05	1,19	-37,5507995	21,0218087	-37,5531856
Met6	-799,586713	-799,574295	-799,62638	9,8	7,0	458,9	0,06	0,02	0,74	-18,9738603	10,8894339	-18,9750963
Met7	-799,586443	-799,573905	-799,626476	10,8	6,7	463,2	0,07	0,03	0,79	-20,9865335	12,156935	-20,9879133
Met8	-799,587207	-799,57532	-799,624961	7,1	10,7	437,4	0,01	0,01	0,23	-4,27519511	2,33847558	-4,27546053
Met9	-799,587863	-799,576086	-799,625494	5,1	9,3	435,3	0,02	0,01	0,36	-7,48265218	4,07369767	-7,48311455
Met10	-799,587922	-799,576109	-799,625514	5,0	9,3	435,3	0,02	0,01	0,37	-7,64148019	4,15991393	-7,64195235
Met11	-799,588077	-799,576368	-799,62534	4,3	9,7	431,5	0,02	0,01	0,32	-6,36527127	3,43479298	-6,36566113
Met12	-799,586225	-799,57424	-799,624725	9,9	11,3	444,8	0,01	0,00	0,19	-3,33669631	1,85616255	-3,33690699
Met13	-799,586104	-799,573615	-799,625975	11,6	8,1	461,3	0,04	0,02	0,54	-12,4004208	7,15440243	-12,4012328
Met14	-799,585828	-799,573334	-799,625336	12,3	9,7	458,2	0,02	0,01	0,32	-6,33856408	3,63202131	-6,33897632
Met15	-799,585805	-799,573784	-799,624019	11,1	13,2	442,6	0,01	0,00	0,10	-1,58969062	0,87994642	-1,5897905
Met16	-799,586886	-799,574982	-799,624782	8,0	11,2	438,8	0,01	0,00	0,20	-3,54253835	1,94392929	-3,54275899
Met17	-799,585485	-799,573294	-799,624027	12,4	13,2	447,0	0,01	0,00	0,10	-1,60310185	0,89616739	-1,60320356
Met18	-799,587379	-799,575065	-799,625961	7,7	8,1	448,4	0,04	0,02	0,53	-12,2194558	6,85286275	-12,2202336
Met19	-799,585134	-799,573035	-799,623535	13,1	14,5	444,9	0,00	0,00	0,07	-0,95622856	0,53209687	-0,95628895
Met20	-799,585807	-799,573364	-799,625386	12,2	9,6	458,3	0,02	0,01	0,33	-6,68029597	3,82930704	-6,68073061
Met21	-799,586885	-799,574522	-799,625622	9,2	9,0	450,2	0,03	0,01	0,40	-8,55923607	4,81939715	-8,55978308
Met22	-799,587051	-799,574719	-799,625594	8,7	9,1	448,2	0,03	0,01	0,39	-8,31121318	4,65913773	-8,311742
Met23	-799,586762	-799,574945	-799,624419	8,1	12,1	435,9	0,01	0,00	0,15	-2,41964509	1,3190622	-2,4197948
Met24	-799,586695	-799,574613	-799,626332	8,9	7,1	455,7	0,06	0,02	0,71	-18,0411102	10,2813499	-18,0422772
Met25	-799,587046	-799,575184	-799,624416	7,4	12,2	433,8	0,01	0,00	0,15	-2,41203447	1,30848106	-2,41218299
Met26	-799,585659	-799,573336	-799,624269	12,3	12,5	448,7	0,01	0,00	0,13	-2,06698053	1,16004036	-2,06711219
Met27	-799,585366	-799,572968	-799,624136	13,3	12,9	450,8	0,01	0,00	0,11	-1,79752694	1,01347142	-1,79764197
Met28	-799,586014	-799,573722	-799,624717	11,3	11,4	449,3	0,01	0,00	0,19	-3,30877802	1,85922724	-3,30898904
Met29	-799,585009	-799,572705	-799,623843	13,9	13,7	450,5	0,00	0,00	0,09	-1,32141465	0,74459593	-1,32149917
								1,00	19,51	-799,576601	450,267002	-799,627707

Files	H(0K/hartree)	H(298/hartree)	G(298/hartree)	delta H	delta G	S	xibrut	xinorm	Smix	Hi	Si	Gi
G4												
MethH+1	-800,567879	-800,556068	-800,604883	0,0	0,0	430,1	1,00	0,34	3,05	-269,867138	144,979735	-269,883593
MethH+2	-800,566743	-800,554835	-800,604058	3,2	2,2	433,7	0,42	0,14	2,30	-113,467133	61,4671155	-113,474109
MethH+3	-800,567633	-800,555863	-800,604761	0,5	0,3	430,8	0,88	0,30	3,00	-237,413916	127,761907	-237,428418
MethH+4	-800,567111	-800,555304	-800,604478	2,0	1,1	433,2	0,65	0,22	2,77	-176,372423	95,4488364	-176,383257
MethH+5	-800,562314	-800,550291	-800,600277	15,2	12,1	440,4	0,01	0,00	0,13	-2,1397764	1,17712862	-2,13991001
MethH+6	-800,561438	-800,549314	-800,599799	17,7	13,3	444,8	0,00	0,00	0,09	-1,29525103	0,71965438	-1,29533271
								1,00	11,34	-800,555638	431,554377	-800,60462
Met-H1	-799,677266	-799,665349	-799,71553	0,0	0,0	442,1	1,00	0,36	3,06	-284,905106	157,516853	-284,922985
Met-H2	-799,674066	-799,662271	-799,711642	8,1	10,2	435,0	0,02	0,01	0,26	-4,80172254	2,61190957	-4,80201899
Met-H3	-799,675951	-799,663984	-799,714057	3,6	3,9	441,2	0,21	0,08	1,63	-60,6554722	33,4627649	-60,6592703
Met-H4	-799,675606	-799,663555	-799,71413	4,7	3,7	445,6	0,23	0,08	1,70	-65,4884585	36,4912814	-65,4926003
Met-H5	-799,674668	-799,662928	-799,712188	6,4	8,8	434,0	0,03	0,01	0,40	-8,51973074	4,62390681	-8,52025556
Met-H6	-799,674884	-799,662923	-799,712886	6,4	6,9	440,2	0,06	0,02	0,70	-17,7329472	9,76153747	-17,7340551
Met-H8	-799,675932	-799,664072	-799,713853	3,4	4,4	438,6	0,17	0,06	1,42	-48,9583123	26,8520984	-48,9613601
Met-H9	-799,675391	-799,663491	-799,713554	4,9	5,2	441,1	0,13	0,04	1,16	-35,7646023	19,7268963	-35,7668413
Met-H10	-799,674306	-799,662215	-799,712845	8,2	7,0	446,1	0,06	0,02	0,68	-16,9855884	9,47496702	-16,9866639
Met-H11	-799,67438	-799,66227	-799,71306	8,1	6,5	447,5	0,07	0,03	0,80	-21,2883146	11,9126573	-21,2896668
Met-H12	-799,674739	-799,66268	-799,713409	7,0	5,6	446,9	0,11	0,04	1,04	-30,712773	17,1658084	-30,7147214
Met-H13	-799,676335	-799,66479	-799,71315	1,5	6,2	426,1	0,08	0,03	0,86	-23,3986766	12,467098	-23,4000916
Met-H14	-799,673891	-799,661876	-799,712195	9,1	8,8	443,3	0,03	0,01	0,40	-8,58258218	4,75816326	-8,58312224
Met-H15	-799,674814	-799,663319	-799,711469	5,3	10,7	424,2	0,01	0,01	0,22	-4,00399025	2,12411432	-4,00423134
Met-H16	-799,673688	-799,66168	-799,712069	9,6	9,1	443,9	0,03	0,01	0,36	-7,51882124	4,17421652	-7,51929503
Met-H17	-799,674346	-799,662385	-799,712487	7,8	8,0	441,4	0,04	0,01	0,51	-11,6626783	6,43787368	-11,6634091
Met-H18	-799,673116	-799,661059	-799,711449	11,3	10,7	444,0	0,01	0,00	0,22	-3,92075642	2,17672734	-3,92100348
Met-H19	-799,676231	-799,664439	-799,714612	2,4	2,4	442,0	0,38	0,14	2,25	-108,643451	60,0567181	-108,650267
Met-H20	-799,674033	-799,662095	-799,712123	8,5	8,9	440,8	0,03	0,01	0,38	-7,95754627	4,38613063	-7,95804411
Met-H21	-799,675446	-799,663967	-799,7124	3,6	8,2	426,7	0,04	0,01	0,48	-10,6443415	5,68000086	-10,6449862
Met-H22	-799,673903	-799,661855	-799,712344	9,2	8,4	444,8	0,04	0,01	0,46	-10,036361	5,58293305	-10,0369946
Met-H23	-799,672745	-799,660777	-799,711235	12,0	11,3	444,6	0,01	0,00	0,18	-3,13159183	1,74094539	-3,13178943
Met-H24	-799,673314	-799,661406	-799,711548	10,4	10,5	441,8	0,02	0,01	0,24	-4,35034361	2,4033379	-4,3506164
Met-H7	-799,676232	-799,66444	-799,714608	2,4	2,4			1,00	19,41	-799,664168	441,588939	-799,714289

Met1	-800,213231	-800,200912	-800,251943	0,0	449,6	1,00	0,39	3,05	-311,566463	175,057814	-311,586333
Met2	-800,211875	-800,199444	-800,250697	3,9	451,6	0,27	0,11	1,97	-84,188779	47,5084668	-84,1941713
MetIlg+g+a	-800,211756	-800,199414	-800,25046	3,9	449,7	0,21	0,08	1,71	-65,6386178	36,8908509	-65,642805
Met3	-800,211611	-800,199217	-800,250329	4,5	450,3	0,18	0,07	1,57	-57,2019371	32,1907613	-57,2055908
Met4	-800,211192	-800,198708	-800,250204	5,8	453,7	0,16	0,06	1,44	-50,1647268	28,4426371	-50,1679551
MetIlg+ag-	-800,20994	-800,197839	-800,24823	8,1	444,0	0,02	0,01	0,32	-6,31050838	3,50119024	-6,31090577
Met5	-800,211486	-800,199158	-800,249964	4,6	447,6	0,13	0,05	1,22	-38,9884204	21,8096307	-38,9908958
Met6	-800,209587	-800,19717	-800,249255	9,8	458,9	0,06	0,02	0,72	-18,5166514	10,6187615	-18,5178567
Met7	-800,209329	-800,196792	-800,249362	10,8	463,2	0,07	0,03	0,79	-20,7187965	11,9922716	-20,7201577
Met8	-800,210188	-800,1983	-800,247941	6,9	437,4	0,01	0,01	0,25	-4,65857225	2,546194	-4,65886125
Met9	-800,210995	-800,199218	-800,248626	4,4	435,3	0,03	0,01	0,44	-9,56487145	5,20324227	-9,56546203
Met10	-800,210962	-800,199148	-800,248554	4,6	435,3	0,03	0,01	0,41	-8,86829606	4,82411388	-8,86884361
Met11	-800,211182	-800,199473	-800,248445	3,8	431,5	0,03	0,01	0,38	-7,90907854	4,26453052	-7,90956258
Met12	-800,209227	-800,197241	-800,247726	9,6	444,8	0,01	0,00	0,21	-3,71699183	2,06610637	-3,71722634
Met13	-800,209053	-800,196564	-800,248924	11,4	461,3	0,04	0,02	0,56	-13,0795958	7,54037663	-13,0804517
Met14	-800,208779	-800,196284	-800,248286	12,2	458,2	0,02	0,01	0,33	-6,69275432	3,83198816	-6,69318926
Met15	-800,20875	-800,196728	-800,246963	11,0	442,6	0,01	0,00	0,11	-1,6679769	0,92256171	-1,66808161
Met16	-800,209813	-800,19791	-800,247709	7,9	438,7	0,01	0,00	0,20	-3,65122281	2,0019688	-3,65145004
Met17	-800,208421	-800,19623	-800,246963	12,3	447,0	0,01	0,00	0,11	-1,66797586	0,93170744	-1,66808161
Met18	-800,210289	-800,197975	-800,248871	7,7	448,4	0,04	0,02	0,54	-12,3714897	6,93272481	-12,3722766
Met19	-800,208082	-800,195983	-800,246483	12,9	444,9	0,00	0,00	0,07	-1,00754283	0,56021442	-1,00760641
Met20	-800,208767	-800,196323	-800,24835	12,0	458,4	0,02	0,01	0,35	-7,15805536	4,10036997	-7,15852076
Met21	-800,209802	-800,197438	-800,248539	9,1	450,2	0,03	0,01	0,41	-8,72966975	4,91163194	-8,73022723
Met22	-800,20995	-800,197618	-800,248493	8,6	448,2	0,03	0,01	0,39	-8,31797274	4,65929726	-8,31850158
Met23	-800,209698	-800,197881	-800,247355	8,0	435,9	0,01	0,00	0,15	-2,51756281	1,37137333	-2,51771846
Met24	-800,209828	-800,197491	-800,249209	9,0	455,7	0,06	0,02	0,70	-17,643397	10,0466784	-17,6445373
MetIlg+g+a	-800,210781	-800,198771	-800,249144	5,6	443,8	0,05	0,02	0,66	-16,4792202	9,13970865	-16,4802576
Met25	-800,210086	-800,198223	-800,247456	7,1	433,8	0,01	0,00	0,16	-2,7992791	1,51740209	-2,79945133
Met26	-800,208568	-800,196245	-800,247178	12,3	448,7	0,01	0,00	0,13	-2,09050121	1,17232744	-2,09063427
Met27	-800,208254	-800,195856	-800,247024	13,3	450,8	0,01	0,00	0,11	-1,77832616	1,00186527	-1,77843987
Met28	-800,208892	-800,1966	-800,247595	11,3	449,3	0,01	0,00	0,19	-3,23923662	1,81873459	-3,23944305
Met29	-800,207889	-800,195585	-800,246722	14,0	450,5	0,00	0,00	0,09	-1,29500146	0,72913024	-1,29508422
							1,00	19,75	-800,199491	450,106632	-800,250579

Table T5. Signed deviation (method-G4) on the computed GB and PA of the studied amino acids.

M	Method	GB(M) ^a kJ mol ⁻¹		PA(M) ^a kJ mol ⁻¹	
		msc	average	msc	average
Serine	B97-D/6-31+G(d,p)	8.9	9.5	6.3	6.6
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	7.8		5.1	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-0.7	0.4	0.3	-0.6
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-1.7		-0.8	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-6.3	-5.7	-6.3	-6.9
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-10.3		-11	
	CBS-QB3	-1.7	-2.2	-2.4	-2.3
	G3B3	0.2	0.0	-0.3	-0.1
	G4MP2	0.1	0.3	0.4	0.2
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Threonine	B97-D/6-31+G(d,p)	9.2	10.2	7.0	7.3
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	8.3		6.5	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	1.3	2.0	1.5	1.0
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-0.3		-0.1	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-5.2	-5.3	-6.7	-6.6
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-8.7		-10.1	
	CBS-QB3	-3.0	-2.2	-2.9	-3.3
	G3B3	0.3	0.2	-0.5	-0.1
	G4MP2	0.4	0.2	0.4	0.6
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Cysteine	B97-D/6-31+G(d,p)	11.0	12.5	9.7	9.2
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	12.0		10.7	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-0.6	-0.2	-0.3	0.6
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	0.5		0.7	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-9.5	-9.1	-9.7	-9.7
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-10.3		-10.6	
	CBS-QB3	-1.9	-2.1	-1.8	-1.8
	G3B3	0.1	-0.2	-0.4	-0.4
	G4MP2	0.8	0.5	0.8	1.0
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Methionine	B97-D/6-31+G(d,p)	23.1	20.1	19.1	20.3
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	22.8		19.2	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	5.0	2.7	4.1	4.2
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	4.5		3.6	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-4.4	-6.4	-7.7	-6.7
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-6.1		-9.5	
	CBS-QB3	-1.8	-1.7	-2.2	-2.0
	G3B3	1.0	1.2	0.4	0.7
	G4MP2	0.1	-0.1	0.1	0.0
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0

a) "most stable conformer" (msc) value followed by the averaged values calculated over the 298 K distribution of conformers (including the entropy of mixing).

Table T6. Signed deviation (method-G4) on the computed deprotonation thermochemistry of the studied α -aminoacids.

M	Method	$\Delta_{\text{acid}}G(M)^a$ kJ mol ⁻¹		$\Delta_{\text{acid}}H(M)^a$ kJ mol ⁻¹	
		msc	average	msc	average
Serine	B97-D/6-31+G(d,p)	-1.4	-0.9	0.2	1.0
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	4.5		6.3	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-9.5	-10.0	-10.1	-9.5
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-4.9		-5.5	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-6.2	-6.0	-5.3	-5.1
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-3.3		-1.9	
	CBS-QB3	-5.3	-4.7	-4.3	-4.8
	G3B3	-1.4	-1.1	-0.6	-1.3
	G4MP2	2.2	2.0	1.9	2.0
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Threonine	B97-D/6-31+G(d,p)	2.8	2.8	3.3	3.1
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	8.4		8.9	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-7.4	-7.6	-7.1	-6.4
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-3.6		-3.4	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-5.5	-6.0	-3.9	-4.5
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-2.8		-1.2	
	CBS-QB3	-4.6	-4.8	-4.2	-4.6
	G3B3	-1.7	-0.9	-0.8	-2.0
	G4MP2	1.9	2.1	1.9	1.8
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Cysteine	B97-D/6-31+G(d,p)	0.4	-1.8	0.0	1.9
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	8.1		7.7	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-10.5	-10.7	-10.0	-9.1
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-2.2		-1.6	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-16.3	-17.0	-15.1	-15.3
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-9.1		-7.9	
	CBS-QB3	-3.2	-4.1	-3.1	-2.8
	G3B3	-1.8	-2.1	-1.4	-1.6
	G4MP2	1.7	1.9	1.7	1.7
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0
Methionine	B97-D/6-31+G(d,p)	-2.8	-1.7	-0.5	-0.5
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	1.5		4.1	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-10.2	-9.8	-7.2	-8.1
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-7.9		-4.9	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-7.3	-7.3	-6.8	-5.7
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-4.5		-3.8	
	CBS-QB3	-4.3	-4.2	-3.5	-4.2
	G3B3	-0.8	-0.5	-0.4	-0.8
	G4MP2	1.7	2.2	1.8	1.6
	G4	0.0	0.0	0.0	0.0

a) "most stable conformer" (msc) value followed by the averaged values calculated over the 298 K distribution of conformer.

Table T7. Signed deviation (method-experiment) on the computed protonation thermochemistry of the studied amino acids.

M	Method	GB(M) ^a kJ mol ⁻¹		PA(M) ^a kJ mol ⁻¹	
		msc	average	msc	average
Serine	B97-D/6-31+G(d,p)	10.5	9.8	7.4	8.6
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	9.4		6.2	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	0.9	0.7	1.4	1.4
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-0.1		0.3	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-4.7	-5.4	-5.2	-4.9
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-8.7		-9.9	
	CBS-QB3	-0.1	-1.9	-1.3	-0.3
	G3B3	1.8	0.3	0.8	1.9
	G4MP2	1.7	0.6	1.5	2.2
	G4	1.6	0.3	1.1	2.0
Threonine	B97-D/6-31+G(d,p)	7.6	7.4	4.6	6.2
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	6.7		4.1	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-0.3	-0.8	-0.9	-0.1
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-1.9		-2.5	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-6.8	-8.1	-9.1	-7.7
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-10.3		-12.5	
	CBS-QB3	-4.6	-5.0	-5.3	-4.4
	G3B3	-1.3	-2.6	-2.9	-1.2
	G4MP2	-1.2	-2.6	-2.0	-0.5
	G4	-1.6	-2.8	-2.4	-1.1
Cysteine	B97-D/6-31+G(d,p)	14.3	14.6	10.3	12.3
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	15.3		11.3	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	2.7	1.9	0.3	3.7
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	3.8		1.3	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-6.2	-7.0	-9.1	-6.6
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-7.0		-10.0	
	CBS-QB3	1.4	0.0	-1.2	1.3
	G3B3	3.4	1.9	0.2	2.7
	G4MP2	4.1	2.6	1.4	4.1
	G4	3.3	2.1	0.6	3.1
Methionine	B97-D/6-31+G(d,p)	23.8	14.6	20.3	22.5
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	23.5		20.4	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	5.7	1.9	5.3	6.4
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	5.2		4.8	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-3.7	-7.0	-6.5	-4.5
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-5.4		-8.3	
	CBS-QB3	-1.1	0.0	-1.0	0.2
	G3B3	1.7	1.9	1.6	2.9
	G4MP2	0.8	2.6	1.3	2.2
	G4	0.7	2.1	1.2	2.2

a) "most stable conformer" (msc) value followed by the averaged values calculated over the 298 K distribution of conformers.

Table T8. Signed deviation (method-experiment) on the computed deprotonation thermochemistry of the studied α -aminoacids.

M	Method	$\Delta_{\text{acid}}G$ (M) ^a kJ mol ⁻¹		$\Delta_{\text{acid}}H$ (M) ^a kJ mol ⁻¹	
		msc	average	msc	average
Serine	B97-D/6-31+G(d,p)	-3.1	-2.0	-1.8	-2.4
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	2.8		4.3	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-11.2	-11.1	-12.1	-12.9
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-6.6		-7.5	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-7.9	-7.1	-7.3	-8.5
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-5.0		-3.9	
	CBS-QB3	-7.0	-5.8	-6.3	-8.2
	G3B3	-3.1	-2.2	-2.6	-4.7
	G4MP2	0.5	0.9	-0.1	-1.4
	G4	-1.7	-1.1	-2.0	-3.4
Threonine	B97-D/6-31+G(d,p)	1.3	2.5	2.7	1.8
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	6.9		8.3	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-8.9	-7.9	-7.7	-7.7
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-5.1		-4.0	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-7.0	-6.3	-4.5	-5.8
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-4.3		-1.8	
	CBS-QB3	-6.1	-5.1	-4.8	-5.9
	G3B3	-3.2	-1.2	-1.4	-3.3
	G4MP2	0.4	1.8	1.3	0.5
	G4	-1.5	-0.3	-0.6	-1.3
Cysteine	B97-D/6-31+G(d,p)	-1.7	-2.4	-2.0	-3.3
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	6.0		5.7	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-12.6	-11.3	-12.0	-14.3
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-4.3		-3.6	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-18.4	-17.6	-17.1	-20.5
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-11.2		-9.9	
	CBS-QB3	-5.3	-4.7	-5.1	-8.0
	G3B3	-3.9	-2.7	-3.4	-6.8
	G4MP2	-0.4	1.3	-0.3	-3.5
	G4	-2.1	-0.6	-2.0	-5.2
Methionine	B97-D/6-31+G(d,p)	-1.4	-0.8	1.7	1.7
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	2.9		6.3	
	B3LYP/6-31+G(d,p)	-8.8	-8.9	-5.0	-5.9
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	-6.5		-2.7	
	M06-2X/6-31+G(d,p)	-5.9	-6.4	-4.6	-3.5
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	-3.1		-1.6	
	CBS-QB3	-2.9	-3.3	-1.3	-2.0
	G3B3	0.6	0.4	1.8	1.4
	G4MP2	3.1	3.1	4.0	3.8
	G4	1.4	0.9	2.2	2.2

a) "most stable conformer" (msc) value followed by the averaged values calculated over the 298 K distribution of conformers.

Table T9. Computed thermochemical data of reference compounds ammonia and benzoic acid.

M	Method	GB(M) kJ mol ⁻¹		PA (M) kJ mol ⁻¹	
		msc	deviation	msc	deviation
NH ₃	B97-D/6-31+G(d,p)	831.6	12.6	866.1	12.5
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	824.7	5.7	859.2	5.6
	B3LYP/6-31+G(d,p)	821.9	2.9	856.4	2.8
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	814.3	-4.7	848.8	-4.8
	M06-2X/6-31+G(d,p)	819.0	0.0	853.4	-0.2
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	808.7	-10.3	843.2	-10.4
	CBS-QB3	819.8	0.8	854.3	0.7
	G3B3	821.3	2.3	855.7	2.1
	G4MP2	819.9	0.9	854.3	0.7
	G4	820.6	1.6	855.1	1.5
	Tabulated^a	819.0		853.6	
M	Method	$\Delta_{\text{acid}}G(M)$ kJ mol ⁻¹		$\Delta_{\text{acid}}H(M)$ kJ mol ⁻¹	
		msc	deviation	msc	deviation
Benzoic acid	B97-D/6-31+G(d,p)	1393.3	-0.7	1424.1	0.6
	B97-D/6-311++G(3df,2p)	1396.5	2.5	1427.3	3.8
	B3LYP/6-31+G(d,p)	1387.5	-6.5	1417.8	-5.7
	B3LYP/6-311++G(3df,2p)	1390.5	-3.5	1420.8	-2.7
	M06-2X/6-31+G(d,p)	1388.2	-5.8	1418.7	-4.8
	M06-2X/6-311++G(3df,2p)	1389.0	-5.0	1419.5	-4.0
	CBS-QB3	1390.1	-3.9	1420.1	-3.4
	G3B3	1393.6	-0.4	1423.6	0.1
	G4MP2	1393.3	-0.6	1423.3	-0.2
	G4	1392.5	-1.5	1422.4	-1.1
	Tabulated^b	1394.0		1423.5	

a) from ref 47. b) from ref 56.

Table T10. Correspondence between conformers name in excels tables and charts.

SER1	SI _{Cg} ⁺	SERH+1	SHI _g ⁻
SER2	SII _{Bg} ⁻	SERH+2	SHI _g ⁺
SER3	SII _{Ba}	SERH+3	SHII _g ⁻
SER4	SI _{Ag} ⁻	SERH+4	SHII _g ⁺
SER5	SIII _{Cg} ⁻	SER-H1	S-H _{Ba}
SER6	SIII _{Cg} ⁺	SER-H2	S-H _{Aa}
SER7	SII _{Ag} ⁺	SER-H4	S-H _{Bg} ⁻
SER11	SI' _{Cg} ⁻	SER-H5	S-H _{Ag} ⁺

THR1	TII _{Bg} ⁻	THRH+1	THI _g ⁻
THR2	TI _{Cg} ⁺	THRH+2	THI _g ⁺
THR3	TIII _{Cg} ⁺	THRH+3	THII _g ⁺
THR4	TI _{Ag} ⁻	THRH+4	THII _g ⁻
THR5	TII _{Ba}	THR-H1	T-H _{Aa}
THR6	TIII _{Cg} ⁻	THR-H2	T-H _{Ba}
THR7	TI' _{Cg} ⁻ (2)	THR-H3	T-H _{Bg} ⁻
THR8	TII _{Ag} ⁺	THR-H4	T-H _{Ag} ⁺
THR9	TI' _{Cg} ⁻		
THR10	TII' _{Ag} ⁺		

CYS1	CII _{Bg} ⁻	CYSH+1	CHI _g ⁻
CYS2	CI _{Cg} ⁺	CYSH+2	CHI _g ⁺
CYS4	CI' _{Cg} ⁻	CYSH+3	CHI' _g ⁺
CYS5	CI _{Cg} ⁻	CYSH+4	CHI' _g ⁻
CYS6	CII _{Ag} ⁺	CYSH+5	CHII _g ⁻
CYS9	CIII _{Cg} ⁻	CYSH+6	CHII _g ⁺
CYS10	CI _{Ag} ⁻	CYS-H1	C-H _{Sca}
CYS11	CIII _{Ca}	CYS-H2	C-H _{Scg} ⁻
		CYS-H3	C-H _{Saa}
		CYS-H6	C-H _{Ocg} ⁺
		CYS-H7	C-H _{Sbg} ⁻

Met1	MetI _{Cg} ^{+g+g+}	MetH+4	MetHI _g ^{-g+a}
Met2	MetI _{Cg} ^{+ag-}	MetH+5	MetHII _g ^{+g-g-}
Met3	MetI _{Cg} ^{+ag+}	MetH+6	MetHII _g ^{+g-a}
Met4	MetI _{Cg} ^{+aa}	Met-H1	Met-H _{Ag} ^{-ag+}
Met5	MetI _{Cg} ^{+g+g-}	Met-H3	Met-H _{Ag} ^{+ag-}
Met9	MetII _{Bg} ^{-g+a}	Met-H4	Met-H _{Ag} ^{+ag+}
Met10	MetII _{Ag} ^{+g-g-}	Met-H8	Met-H _{Ag} ^{-ag-}
Met11	MetII _{Bg} ^{-g+g+}	Met-H9	Met-H _{Ag} ^{-aa}
MetI _g ^{+g+a}	MetI _{Cg} ^{+g+a}	Met-H13	Met-H _{Ag} ^{-g+}
MetH+1	MetHI _g ^{+g-g-}	Met-H19	Met-H _{Bg} ^{-ag+}
MetH+2	MetHI _g ^{+g-a}	Met-H21	Met-H _{Bag} ^{-g+}
MetH+3	MetHI _g ^{-g+g+}		