

Table S1: Electronic energies, Zero-Point Vibrational Energies, Thermal Energies, Entropies and relative free energies for species calculated at B3LYP\LANL2DZ. Italicized values are for PCM calculations in a water solvent.

Structure	Electronic energy (Hartrees)	ZPE (kcal mol ⁻¹)	H ₂₉₈ ⁰ - H ₀ ⁰ (kcal mol ⁻¹)	Entropy (cal mol ⁻¹ K ⁻¹)	Relative free energy at 298 K (kcal mol ⁻¹)
1	-1017.30979571	191.0	14.4	168.2	0.0
2A	-843.220209398	157.3	9.7	122.4	0.0
2B	-843.212536339	157.0	9.8	123.3	4.3
3A	-1860.21631009	344.3	24.2	239.8	0.0
	<i>-1860.31719602</i>	<i>344.2</i>	<i>24.4</i>	<i>239.6</i>	<i>4.8</i>
3B	-1860.19873053	341.6	24.6	251.4	3.4
	<i>-1860.31720783</i>	<i>341.6</i>	<i>24.5</i>	<i>247.3</i>	<i>0.0</i>
3C	-1860.19208781	341.8	24.4	241.1	10.8
	<i>-1860.29578354</i>	<i>341.6</i>	<i>24.5</i>	<i>242.5</i>	<i>14.9</i>
3D	-1860.18236357	339.6	24.5	249.9	12.1
	<i>-1860.29472864</i>	<i>338.3</i>	<i>24.0</i>	<i>242.0</i>	<i>11.8</i>
3E	-1860.17516672	341.3	24.3	241.8	20.6
	<i>-1860.28409844</i>	<i>341.0</i>	<i>24.4</i>	<i>241.4</i>	<i>21.9</i>
4A	-1481.92276603	313.5	19.6	197.2	0.0
	<i>-1482.01472460</i>	<i>313.6</i>	<i>19.6</i>	<i>197.7</i>	<i>1.7</i>
4B	-1481.91962971	313.7	19.5	199.2	1.4
	<i>-1482.01650165</i>	<i>314.0</i>	<i>19.7</i>	<i>201.0</i>	<i>0.0</i>
4C	-1481.91362745	312.5	20.1	205.5	2.8
	<i>-1482.00320286</i>	<i>312.9</i>	<i>20.1</i>	<i>204.2</i>	<i>6.7</i>
4D	-1481.91157780	312.7	19.9	204.7	4.3
	<i>-1481.99859236</i>	<i>312.4</i>	<i>20.0</i>	<i>204.8</i>	<i>8.9</i>
4E	-1481.90373487	311.8	19.7	197.4	10.3
	<i>-1481.99887712</i>	<i>312.0</i>	<i>19.9</i>	<i>200.8</i>	<i>9.4</i>
4F	-1481.90264578	311.6	19.7	198.8	10.4
	<i>-1481.99827363</i>	<i>311.9</i>	<i>19.9</i>	<i>202.7</i>	<i>9.1</i>
4G	-1481.88932684	310.7	20.2	209.1	15.3
	<i>-1482.00337269</i>	<i>311.5</i>	<i>20.1</i>	<i>206.2</i>	<i>4.7</i>
4H	-1481.88845751	311.9	19.6	195.2	20.5
	<i>-1481.98119466</i>	<i>311.7</i>	<i>19.9</i>	<i>201.2</i>	<i>20.1</i>
4I	-1481.88495103	311.2	19.7	197.6	21.4
	<i>-1481.99738203</i>	<i>312.3</i>	<i>19.8</i>	<i>200.3</i>	<i>10.6</i>
4J	-1481.88370360	310.3	19.5	194.0	22.2
	<i>-1481.98124598</i>	<i>311.4</i>	<i>19.8</i>	<i>197.5</i>	<i>20.7</i>
4K	-1481.86227783	310.5	19.7	197.9	34.8
	<i>-1481.97398714</i>	<i>311.1</i>	<i>20.1</i>	<i>204.0</i>	<i>23.3</i>
4L	-1481.85401975	310.2	20.0	207.0	37.3
	<i>-1481.98182343</i>	<i>311.2</i>	<i>20.0</i>	<i>206.9</i>	<i>17.5</i>
4N	-1481.84125844	309.6	20.3	205.1	45.6
	<i>-1481.94061505</i>	<i>310.2</i>	<i>20.4</i>	<i>207.0</i>	<i>42.8</i>
5A	-1405.45626421	297.1	18.1	187.8	0.0
5B	-1405.43725726	296.2	18.3	184.8	12.1
5C	-1405.43503283	297.0	17.9	178.6	15.8
5D	-1405.41026591	294.3	18.9	191.8	25.8
5E	-1405.41533057	296.4	18.1	185.2	25.9

5F	-1405.40223282	294.3	18.9	194.6	30.3
5G	-1405.37892680	291.8	19.2	199.8	40.8
5H	-1405.33608263	293.2	18.9	190.6	71.6
6A	-1482.20748846	319.3	20.0	201.4	0.0
	<i>-1482.43954619</i>	<i>319.3</i>	<i>20.3</i>	<i>207.3</i>	<i>0.0</i>
6B	-1482.19970614	319.1	19.7	207.9	2.9
	<i>-1482.43481313</i>	<i>319.2</i>	<i>20.4</i>	<i>210.0</i>	<i>2.2</i>
6C	-1482.20178959	319.1	20.1	202.1	3.2
	<i>-1482.43488502</i>	<i>319.0</i>	<i>20.6</i>	<i>211.6</i>	<i>1.1</i>
6D	-1482.19436532	318.7	20.1	208.9	5.5
	<i>-1482.42978637</i>	<i>318.9</i>	<i>20.4</i>	<i>211.8</i>	<i>4.5</i>
6E	-1482.18833789	318.6	20.0	203.0	10.9
	<i>-1482.41055137</i>	<i>318.4</i>	<i>20.3</i>	<i>207.1</i>	<i>17.3</i>
6F	-1482.18325841	319.5	19.4	194.2	16.9
	<i>-1482.41599857</i>	<i>319.5</i>	<i>19.4</i>	<i>194.2</i>	<i>18.0</i>
6G	-1482.16929415	318.1	20.2	207.7	21.1
	<i>-1482.40995059</i>	<i>318.5</i>	<i>20.1</i>	<i>205.9</i>	<i>18.0</i>
6H	-1482.16845499	318.6	20.2	206.1	22.6
	<i>-1482.39802650</i>	<i>318.6</i>	<i>20.4</i>	<i>210.1</i>	<i>24.5</i>
6I	-1482.16944570	318.9	20.1	202.3	23.2
	<i>-1482.41853495</i>	<i>319.4</i>	<i>20.2</i>	<i>205.5</i>	<i>13.7</i>
6J	-1482.16658286	318.4	20.1	204.0	24.1
	<i>-1482.42055646</i>	<i>319.4</i>	<i>20.2</i>	<i>204.8</i>	<i>12.6</i>
6K	-1482.15311196	318.1	20.3	208.1	31.2
	<i>-1482.41699042</i>	<i>319.5</i>	<i>20.2</i>	<i>206.0</i>	<i>14.6</i>
6L	-1482.14990027	318.3	20.1	202.9	34.7
	<i>-1482.40688415</i>	<i>318.7</i>	<i>20.2</i>	<i>209.2</i>	<i>19.2</i>
6M	-1482.14780035	319.0	20.0	203.7	36.4
	<i>-1482.41510264</i>	<i>320.2</i>	<i>20.0</i>	<i>205.0</i>	<i>16.6</i>
6N	-1482.14610111	318.0	20.3	202.8	37.0
	-----	-----	----	-----	----
6O	-1482.14687311	320.3	20.0	201.3	39.0
	<i>-1482.38078503</i>	<i>320.2</i>	<i>20.0</i>	<i>202.2</i>	<i>35.9</i>