

# Intramolecular OHO Bonding in Dibenzoylmethane: Symmetry and Spectral Manifestations

Milena Petković and Mihajlo Etinski

## Supplementary Information

Selected structural parameters obtained at different levels of theory are compiled in Tables S1-S2.

Table S1: Selected bond lengths of the asymmetric structure in Å.

bond	B3LYP/cc-pVDZ	M06-2X/cc-pVDZ	MP2/cc-pVDZ	B3LYP/cc-pVTZ	CC2/cc-pVTZ
O <sub>1</sub> -H	1.029	1.025	1.014	1.014	1.039
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.323	1.315	1.330	1.322	1.325
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.386	1.379	1.385	1.376	1.384
C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub>	1.439	1.440	1.450	1.436	1.427
C <sub>3</sub> -O <sub>2</sub>	1.261	1.249	1.258	1.253	1.275
C <sub>3</sub> -C <sub>5</sub>	1.498	1.496	1.499	1.493	1.484
C <sub>5</sub> -C <sub>11</sub>	1.406	1.399	1.411	1.398	1.401
C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	1.396	1.393	1.404	1.388	1.393
C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub>	1.398	1.394	1.406	1.390	1.396
C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	1.399	1.396	1.407	1.392	1.397
C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	1.394	1.391	1.402	1.386	1.392
C <sub>5</sub> -C <sub>15</sub>	1.406	1.400	1.411	1.398	1.401
C <sub>2</sub> -C <sub>4</sub>	1.482	1.482	1.481	1.475	1.469
C <sub>4</sub> -C <sub>6</sub>	1.407	1.400	1.412	1.399	1.402
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.395	1.392	1.403	1.387	1.392
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	1.398	1.394	1.406	1.390	1.396
C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	1.399	1.395	1.406	1.391	1.396
C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>	1.394	1.391	1.403	1.386	1.392
C <sub>4</sub> -C <sub>10</sub>	1.407	1.401	1.412	1.399	1.402

Table S2: Selected bond lengths of the symmetric structure in Å.

bond	B3LYP/cc-pVDZ	M06-2X/cc-pVDZ	MP2/cc-pVDZ	B3LYP/cc-pVTZ	CC2/cc-pVTZ
O <sub>1</sub> -H	1.203	1.197	1.201	1.202	1.203
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.291	1.281	1.291	1.287	1.296
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.411	1.407	1.414	1.404	1.406
C <sub>2</sub> -C <sub>4</sub>	1.487	1.487	1.488	1.482	1.481
C <sub>4</sub> -C <sub>6</sub>	1.407	1.400	1.411	1.399	1.402
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.394	1.391	1.402	1.387	1.393
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	1.399	1.395	1.406	1.391	1.397
C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	1.399	1.395	1.406	1.391	1.397
C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>	1.395	1.392	1.403	1.387	1.394
C <sub>4</sub> -C <sub>10</sub>	1.406	1.400	1.411	1.399	1.402

Absolute values of cubic force constants larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$  for the *A/S* species are given in Table /, and absolute values of quartic force constants larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$  for the *A/S* species are given in Table /. For simplicity, mode numbering in ascending order is used instead of labels. for the *A* conformer, mode numbers 35, 58 and 70 correspond to  $\gamma_{\text{OH}}$ ,  $\delta_{\text{OH}}$  and  $\nu_{\text{OH}}$ , respectively. For the *S* conformer, mode numbers 1, 27, 53, 64, 66 and 70 correspond to  $\nu_{\text{OHO}}$ ,  $\nu_{\text{OO}}$ ,  $\gamma_{\text{HO}}$ ,  $\nu_{\text{CO}}$ ,  $\nu_{\text{CC}}$  and  $\delta_{\text{OHO}}$ , respectively.

Table S3: Absolute values of cubic anharmonic force constants of the *A* species (in  $\text{cm}^{-1}$ ) larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$ .

$K_{4,4,70}$	27	$K_{35,21,70}$	46	$K_{58,44,70}$	32	$K_{66,55,70}$	52	$K_{70,28,70}$	49
$K_{5,4,70}$	29	$K_{35,24,70}$	34	$K_{58,56,70}$	57	$K_{66,59,70}$	60	$K_{70,32,70}$	229
$K_{5,5,70}$	49	$K_{35,25,70}$	174	$K_{58,57,70}$	28	$K_{66,61,70}$	40	$K_{70,45,70}$	32
$K_{6,4,70}$	26	$K_{35,26,70}$	57	$K_{58,58,70}$	180	$K_{66,63,70}$	33	$K_{70,50,70}$	37
$K_{9,9,70}$	30	$K_{35,29,70}$	102	$K_{59,53,70}$	37	$K_{66,64,70}$	58	$K_{70,52,70}$	45
$K_{10,9,70}$	45	$K_{35,34,70}$	71	$K_{59,55,70}$	42	$K_{66,66,70}$	72	$K_{70,53,70}$	222
$K_{10,10,70}$	58	$K_{35,35,70}$	989	$K_{59,59,70}$	37	$K_{68,66,70}$	31	$K_{70,54,70}$	92
$K_{15,9,70}$	31	$K_{39,35,70}$	29	$K_{60,58,70}$	26	$K_{70,3,70}$	136	$K_{70,55,70}$	288
$K_{15,10,70}$	42	$K_{53,53,70}$	26	$K_{61,53,70}$	27	$K_{70,6,70}$	35	$K_{70,56,70}$	283
$K_{16,9,70}$	29	$K_{55,18,70}$	25	$K_{61,55,70}$	31	$K_{70,7,70}$	79	$K_{70,57,70}$	82
$K_{16,10,70}$	38	$K_{55,53,70}$	29	$K_{63,55,70}$	25	$K_{70,8,70}$	47	$K_{70,58,70}$	703
$K_{16,15,70}$	29	$K_{55,55,70}$	34	$K_{64,18,70}$	31	$K_{70,9,70}$	258	$K_{70,59,70}$	184
$K_{16,16,70}$	25	$K_{56,9,70}$	27	$K_{64,53,70}$	32	$K_{70,10,70}$	419	$K_{70,60,70}$	124
$K_{25,25,70}$	30	$K_{56,10,70}$	33	$K_{64,55,70}$	36	$K_{70,11,70}$	31	$K_{70,61,70}$	66
$K_{32,10,70}$	27	$K_{56,15,70}$	25	$K_{64,59,70}$	48	$K_{70,12,70}$	32	$K_{70,63,70}$	78
$K_{35,2,70}$	43	$K_{56,16,70}$	25	$K_{64,61,70}$	35	$K_{70,14,70}$	46	$K_{70,64,70}$	195
$K_{35,3,70}$	28	$K_{58,3,70}$	37	$K_{64,63,70}$	28	$K_{70,15,70}$	285	$K_{70,66,70}$	140
$K_{35,4,70}$	46	$K_{58,9,70}$	81	$K_{64,64,70}$	43	$K_{70,16,70}$	282	$K_{70,68,70}$	77
$K_{35,5,70}$	167	$K_{58,10,70}$	110	$K_{66,10,70}$	27	$K_{70,17,70}$	53	$K_{70,69,70}$	142
$K_{35,6,70}$	73	$K_{58,15,70}$	76	$K_{66,18,70}$	38	$K_{70,18,70}$	101	$K_{70,70,70}$	2606
$K_{35,7,70}$	78	$K_{58,16,70}$	76	$K_{66,32,70}$	27	$K_{70,20,70}$	51		
$K_{35,15,70}$	63	$K_{58,22,70}$	29	$K_{66,53,70}$	44	$K_{70,22,70}$	151		
$K_{35,16,70}$	49	$K_{58,32,70}$	52	$K_{66,54,70}$	31	$K_{70,27,70}$	55		

Table S4: Absolute values of cubic anharmonic force constants of the *S* species (in  $\text{cm}^{-1}$ ) larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$ .

$K_{4,1,1}$	68	$K_{35,1,1}$	298	$K_{60,1,1}$	44	$K_{65,61,1}$	27	$K_{70,11,1}$	56
$K_{10,1,1}$	93	$K_{39,1,1}$	43	$K_{62,1,1}$	43	$K_{65,63,1}$	26	$K_{70,15,1}$	55
$K_{12,1,1}$	175	$K_{45,1,1}$	59	$K_{63,58,1}$	29	$K_{65,64,1}$	34	$K_{70,17,1}$	139
$K_{13,1,1}$	29	$K_{46,1,1}$	66	$K_{64,12,1}$	47	$K_{66,21,1}$	52	$K_{70,18,1}$	45
$K_{16,1,1}$	72	$K_{50,1,1}$	26	$K_{64,19,1}$	26	$K_{66,26,1}$	30	$K_{70,20,1}$	73
$K_{19,1,1}$	81	$K_{53,6,1}$	142	$K_{64,21,1}$	105	$K_{66,27,1}$	90	$K_{70,28,1}$	60
$K_{21,1,1}$	366	$K_{53,7,1}$	74	$K_{64,26,1}$	63	$K_{66,35,1}$	35	$K_{70,29,1}$	101
$K_{22,5,1}$	36	$K_{53,9,1}$	125	$K_{64,27,1}$	183	$K_{66,46,1}$	29	$K_{70,52,1}$	32
$K_{25,1,1}$	45	$K_{53,15,1}$	44	$K_{64,35,1}$	73	$K_{66,58,1}$	44	$K_{70,59,1}$	53
$K_{26,1,1}$	189	$K_{53,22,1}$	27	$K_{64,45,1}$	52	$K_{67,1,1}$	38	$K_{70,64,1}$	206
$K_{27,1,1}$	560	$K_{58,1,1}$	177	$K_{64,46,1}$	59	$K_{69,27,1}$	36	$K_{70,66,1}$	96
$K_{27,7,1}$	26	$K_{59,21,1}$	26	$K_{64,58,1}$	94	$K_{70,1,1}$	685	$K_{70,69,1}$	44
$K_{30,1,1}$	38	$K_{59,27,1}$	45	$K_{64,60,1}$	31	$K_{70,7,1}$	106		
$K_{34,1,1}$	67	$K_{59,58,1}$	27	$K_{65,47,1}$	37	$K_{70,9,1}$	57		

Table S5: Absolute values of quartic anharmonic force constants of the A species (in  $\text{cm}^{-1}$ ) larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$ .

$K_{1,1,70,70}$	252	$K_{26,3,70,70}$	26	$K_{48,2,70,70}$	32	$K_{61,58,70,70}$	34	$K_{68,55,70,70}$	35
$K_{2,1,70,70}$	28	$K_{26,6,70,70}$	33	$K_{49,1,70,70}$	28	$K_{61,59,70,70}$	30	$K_{68,58,70,70}$	33
$K_{2,2,70,70}$	245	$K_{26,25,70,70}$	29	$K_{49,2,70,70}$	57	$K_{63,53,70,70}$	31	$K_{68,59,70,70}$	31
$K_{3,1,70,70}$	28	$K_{29,4,70,70}$	35	$K_{49,4,70,70}$	30	$K_{63,55,70,70}$	39	$K_{68,64,70,70}$	41
$K_{3,3,70,70}$	55	$K_{29,5,70,70}$	35	$K_{50,2,70,70}$	36	$K_{63,58,70,70}$	25	$K_{68,66,70,70}$	48
$K_{4,1,70,70}$	34	$K_{33,1,70,70}$	34	$K_{50,3,70,70}$	26	$K_{63,59,70,70}$	28	$K_{70,1,70,70}$	50
$K_{5,1,70,70}$	66	$K_{33,2,70,70}$	38	$K_{51,2,70,70}$	48	$K_{64,6,70,70}$	26	$K_{70,3,70,70}$	38
$K_{5,2,70,70}$	38	$K_{34,4,70,70}$	28	$K_{51,30,70,70}$	27	$K_{64,7,70,70}$	32	$K_{70,6,70,70}$	44
$K_{5,4,70,70}$	32	$K_{34,5,70,70}$	35	$K_{52,1,70,70}$	38	$K_{64,18,70,70}$	28	$K_{70,7,70,70}$	37
$K_{5,5,70,70}$	82	$K_{34,6,70,70}$	25	$K_{53,6,70,70}$	26	$K_{64,32,70,70}$	34	$K_{70,9,70,70}$	67
$K_{6,1,70,70}$	66	$K_{35,1,70,70}$	67	$K_{53,7,70,70}$	28	$K_{64,53,70,70}$	63	$K_{70,10,70,70}$	132
$K_{6,3,70,70}$	34	$K_{35,2,70,70}$	70	$K_{53,53,70,70}$	51	$K_{64,54,70,70}$	39	$K_{70,14,70,70}$	30
$K_{6,4,70,70}$	75	$K_{35,3,70,70}$	48	$K_{54,53,70,70}$	30	$K_{64,55,70,70}$	67	$K_{70,15,70,70}$	103
$K_{7,7,70,70}$	42	$K_{35,4,70,70}$	148	$K_{55,1,70,70}$	27	$K_{64,56,70,70}$	34	$K_{70,16,70,70}$	98
$K_{8,8,70,70}$	31	$K_{35,5,70,70}$	277	$K_{55,6,70,70}$	25	$K_{64,58,70,70}$	53	$K_{70,18,70,70}$	66
$K_{9,7,70,70}$	26	$K_{35,6,70,70}$	117	$K_{55,7,70,70}$	30	$K_{64,59,70,70}$	67	$K_{70,22,70,70}$	46
$K_{10,4,70,70}$	25	$K_{35,7,70,70}$	126	$K_{55,32,70,70}$	26	$K_{64,61,70,70}$	42	$K_{70,28,70,70}$	30
$K_{11,7,70,70}$	26	$K_{35,8,70,70}$	44	$K_{55,53,70,70}$	53	$K_{64,63,70,70}$	41	$K_{70,32,70,70}$	109
$K_{12,1,70,70}$	45	$K_{35,10,70,70}$	26	$K_{55,54,70,70}$	35	$K_{64,64,70,70}$	77	$K_{70,35,70,70}$	42
$K_{13,1,70,70}$	65	$K_{35,15,70,70}$	77	$K_{55,55,70,70}$	54	$K_{66,6,70,70}$	26	$K_{70,47,70,70}$	27
$K_{14,1,70,70}$	41	$K_{35,16,70,70}$	48	$K_{56,1,70,70}$	46	$K_{66,7,70,70}$	37	$K_{70,50,70,70}$	37
$K_{14,2,70,70}$	28	$K_{35,24,70,70}$	33	$K_{56,53,70,70}$	27	$K_{66,10,70,70}$	31	$K_{70,53,70,70}$	133
$K_{15,3,70,70}$	33	$K_{35,25,70,70}$	175	$K_{56,55,70,70}$	31	$K_{66,15,70,70}$	26	$K_{70,54,70,70}$	66
$K_{15,7,70,70}$	27	$K_{35,26,70,70}$	46	$K_{57,2,70,70}$	26	$K_{66,18,70,70}$	32	$K_{70,55,70,70}$	168
$K_{16,1,70,70}$	52	$K_{35,29,70,70}$	108	$K_{57,4,70,70}$	35	$K_{66,22,70,70}$	27	$K_{70,56,70,70}$	125
$K_{16,2,70,70}$	35	$K_{35,34,70,70}$	82	$K_{58,2,70,70}$	33	$K_{66,32,70,70}$	42	$K_{70,58,70,70}$	241
$K_{17,1,70,70}$	33	$K_{35,35,70,70}$	1071	$K_{58,53,70,70}$	41	$K_{66,45,70,70}$	32	$K_{70,59,70,70}$	140
$K_{17,2,70,70}$	28	$K_{37,1,70,70}$	46	$K_{58,54,70,70}$	29	$K_{66,47,70,70}$	26	$K_{70,60,70,70}$	58
$K_{17,5,70,70}$	31	$K_{38,1,70,70}$	31	$K_{58,55,70,70}$	45	$K_{66,53,70,70}$	81	$K_{70,61,70,70}$	77
$K_{20,1,70,70}$	39	$K_{39,1,70,70}$	30	$K_{58,58,70,70}$	25	$K_{66,54,70,70}$	46	$K_{70,62,70,70}$	25
$K_{22,2,70,70}$	35	$K_{39,2,70,70}$	30	$K_{59,7,70,70}$	27	$K_{66,55,70,70}$	83	$K_{70,63,70,70}$	72
$K_{23,1,70,70}$	34	$K_{40,1,70,70}$	26	$K_{59,32,70,70}$	31	$K_{66,56,70,70}$	37	$K_{70,64,70,70}$	164
$K_{23,2,70,70}$	57	$K_{40,2,70,70}$	34	$K_{59,45,70,70}$	31	$K_{66,58,70,70}$	72	$K_{70,65,70,70}$	38
$K_{24,2,70,70}$	70	$K_{42,1,70,70}$	40	$K_{59,53,70,70}$	51	$K_{66,59,70,70}$	73	$K_{70,66,70,70}$	174
$K_{25,1,70,70}$	27	$K_{43,1,70,70}$	28	$K_{59,54,70,70}$	30	$K_{66,61,70,70}$	52	$K_{70,68,70,70}$	70
$K_{25,4,70,70}$	42	$K_{44,2,70,70}$	39	$K_{59,55,70,70}$	58	$K_{66,62,70,70}$	29	$K_{70,69,70,70}$	42
$K_{25,6,70,70}$	31	$K_{45,1,70,70}$	42	$K_{59,58,70,70}$	46	$K_{66,63,70,70}$	49	$K_{70,70,70,70}$	490
$K_{25,7,70,70}$	46	$K_{46,2,70,70}$	39	$K_{59,59,70,70}$	46	$K_{66,64,70,70}$	99	$K_{73,1,70,70}$	31
$K_{25,25,70,70}$	68	$K_{46,4,70,70}$	30	$K_{61,53,70,70}$	34	$K_{66,66,70,70}$	118	$K_{75,3,70,70}$	38
$K_{26,1,70,70}$	72	$K_{46,30,70,70}$	26	$K_{61,55,70,70}$	36	$K_{68,53,70,70}$	34	$K_{81,4,70,70}$	36

Table S6: Absolute values of quartic anharmonic force constants of the  $S$  species (in  $\text{cm}^{-1}$ ) larger than  $25 \text{ cm}^{-1}$ .

$K_{1,1,1,1}$	7789	$K_{16,4,1,1}$	44	$K_{33,14,1,1}$	30	$K_{53,30,1,1}$	64	$K_{66,7,1,1}$	62
$K_{2,1,1,1}$	82	$K_{16,10,1,1}$	35	$K_{34,3,1,1}$	103	$K_{53,53,1,1}$	650	$K_{66,9,1,1}$	27
$K_{2,2,1,1}$	323	$K_{17,1,1,1}$	369	$K_{34,4,1,1}$	57	$K_{54,53,1,1}$	27	$K_{66,11,1,1}$	30
$K_{3,3,1,1}$	108	$K_{17,2,1,1}$	67	$K_{34,10,1,1}$	41	$K_{55,1,1,1}$	83	$K_{66,15,1,1}$	33
$K_{4,2,1,1}$	30	$K_{18,2,1,1}$	36	$K_{34,13,1,1}$	31	$K_{55,2,1,1}$	27	$K_{66,17,1,1}$	49
$K_{4,3,1,1}$	133	$K_{19,5,1,1}$	28	$K_{34,27,1,1}$	27	$K_{57,1,1,1}$	114	$K_{66,20,1,1}$	26
$K_{4,4,1,1}$	75	$K_{20,1,1,1}$	231	$K_{35,5,1,1}$	27	$K_{57,7,1,1}$	31	$K_{66,44,1,1}$	37
$K_{5,2,1,1}$	101	$K_{22,1,1,1}$	28	$K_{35,27,1,1}$	30	$K_{58,4,1,1}$	27	$K_{66,59,1,1}$	49
$K_{5,3,1,1}$	138	$K_{23,16,1,1}$	27	$K_{36,2,1,1}$	32	$K_{58,21,1,1}$	33	$K_{66,63,1,1}$	37
$K_{5,5,1,1}$	26	$K_{24,1,1,1}$	34	$K_{36,24,1,1}$	31	$K_{58,26,1,1}$	30	$K_{66,64,1,1}$	206
$K_{6,1,1,1}$	55	$K_{24,2,1,1}$	45	$K_{37,2,1,1}$	39	$K_{58,27,1,1}$	37	$K_{66,66,1,1}$	99
$K_{6,6,1,1}$	29	$K_{24,9,1,1}$	27	$K_{37,3,1,1}$	43	$K_{59,1,1,1}$	466	$K_{69,1,1,1}$	335
$K_{7,1,1,1}$	537	$K_{24,15,1,1}$	26	$K_{37,4,1,1}$	60	$K_{59,7,1,1}$	43	$K_{69,7,1,1}$	25
$K_{7,3,1,1}$	39	$K_{24,17,1,1}$	26	$K_{37,5,1,1}$	50	$K_{59,17,1,1}$	30	$K_{69,64,1,1}$	81
$K_{7,7,1,1}$	48	$K_{25,2,1,1}$	46	$K_{37,23,1,1}$	29	$K_{59,59,1,1}$	29	$K_{69,66,1,1}$	42
$K_{8,3,1,1}$	89	$K_{25,3,1,1}$	44	$K_{42,3,1,1}$	33	$K_{60,3,1,1}$	30	$K_{70,3,1,1}$	35
$K_{8,4,1,1}$	69	$K_{25,5,1,1}$	27	$K_{42,5,1,1}$	52	$K_{61,1,1,1}$	57	$K_{70,4,1,1}$	40
$K_{8,5,1,1}$	55	$K_{25,23,1,1}$	27	$K_{43,2,1,1}$	65	$K_{61,2,1,1}$	38	$K_{70,10,1,1}$	58
$K_{9,1,1,1}$	197	$K_{26,3,1,1}$	84	$K_{44,1,1,1}$	226	$K_{62,3,1,1}$	27	$K_{70,12,1,1}$	52
$K_{9,2,1,1}$	47	$K_{26,4,1,1}$	37	$K_{46,3,1,1}$	26	$K_{62,5,1,1}$	29	$K_{70,16,1,1}$	45
$K_{9,6,1,1}$	33	$K_{26,8,1,1}$	30	$K_{46,4,1,1}$	40	$K_{63,1,1,1}$	225	$K_{70,19,1,1}$	30
$K_{9,7,1,1}$	36	$K_{26,10,1,1}$	36	$K_{46,5,1,1}$	57	$K_{63,2,1,1}$	35	$K_{70,21,1,1}$	133
$K_{9,9,1,1}$	43	$K_{27,3,1,1}$	26	$K_{47,1,1,1}$	156	$K_{64,1,1,1}$	1773	$K_{70,26,1,1}$	66
$K_{10,5,1,1}$	63	$K_{27,5,1,1}$	40	$K_{47,2,1,1}$	48	$K_{64,7,1,1}$	146	$K_{70,27,1,1}$	199
$K_{11,1,1,1}$	235	$K_{27,27,1,1}$	58	$K_{48,7,1,1}$	29	$K_{64,9,1,1}$	50	$K_{70,34,1,1}$	30
$K_{11,2,1,1}$	77	$K_{28,1,1,1}$	138	$K_{49,10,1,1}$	31	$K_{64,11,1,1}$	48	$K_{70,35,1,1}$	77
$K_{12,3,1,1}$	33	$K_{29,1,1,1}$	161	$K_{49,23,1,1}$	25	$K_{64,15,1,1}$	56	$K_{70,42,1,1}$	27
$K_{12,5,1,1}$	43	$K_{29,2,1,1}$	30	$K_{50,5,1,1}$	37	$K_{64,17,1,1}$	98	$K_{70,50,1,1}$	28
$K_{13,2,1,1}$	42	$K_{30,3,1,1}$	51	$K_{51,2,1,1}$	29	$K_{64,20,1,1}$	58	$K_{70,53,1,1}$	51
$K_{13,3,1,1}$	82	$K_{30,4,1,1}$	42	$K_{52,2,1,1}$	62	$K_{64,28,1,1}$	40	$K_{70,70,1,1}$	92
$K_{13,4,1,1}$	28	$K_{30,5,1,1}$	29	$K_{53,3,1,1}$	85	$K_{64,29,1,1}$	42	$K_{78,1,1,1}$	28
$K_{14,1,1,1}$	32	$K_{30,8,1,1}$	31	$K_{53,5,1,1}$	37	$K_{64,44,1,1}$	54	$K_{80,3,1,1}$	48
$K_{14,2,1,1}$	60	$K_{31,2,1,1}$	59	$K_{53,8,1,1}$	93	$K_{64,47,1,1}$	32	$K_{81,3,1,1}$	57
$K_{14,3,1,1}$	49	$K_{31,5,1,1}$	26	$K_{53,12,1,1}$	36	$K_{64,59,1,1}$	125	$K_{81,81,1,1}$	26
$K_{14,6,1,1}$	34	$K_{31,11,1,1}$	29	$K_{53,16,1,1}$	34	$K_{64,61,1,1}$	31		
$K_{15,1,1,1}$	217	$K_{32,3,1,1}$	50	$K_{53,23,1,1}$	37	$K_{64,63,1,1}$	78		
$K_{15,2,1,1}$	130	$K_{32,4,1,1}$	26	$K_{53,25,1,1}$	74	$K_{64,64,1,1}$	433		
$K_{16,3,1,1}$	90	$K_{33,2,1,1}$	102	$K_{53,27,1,1}$	26	$K_{66,1,1,1}$	866		

Bond critical points (3,-1) are depicted of Figure S1.

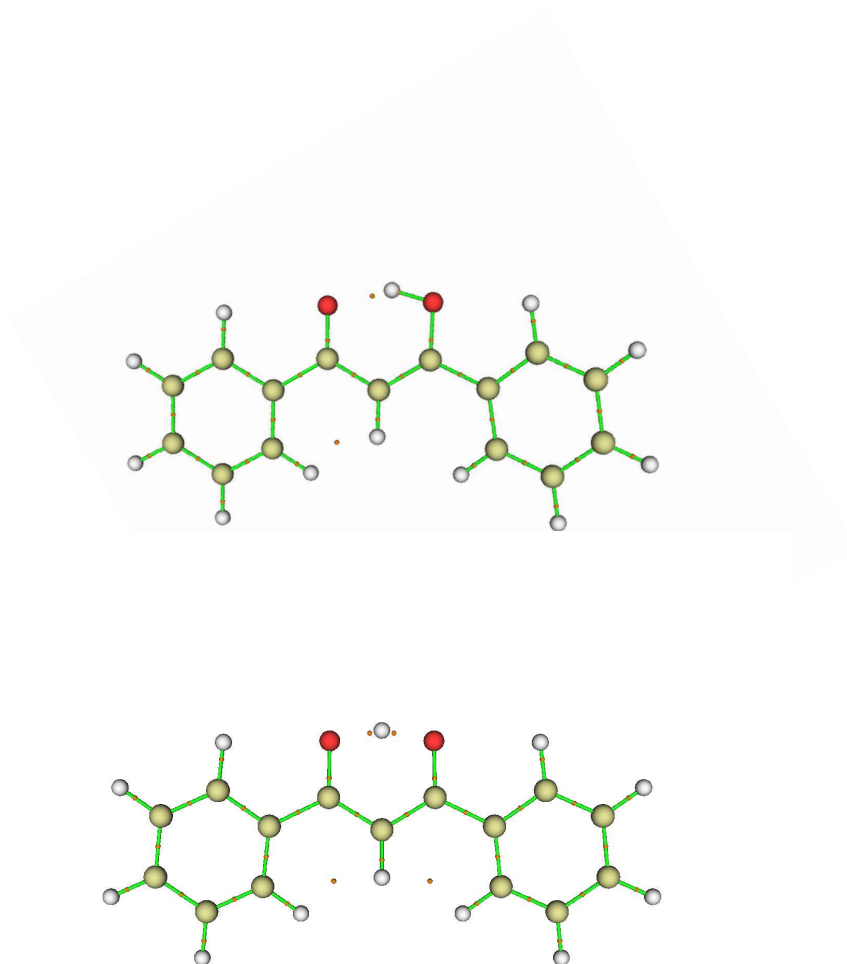


Figure S1: The asymmetric and the symmetric structure of DBM: orange circles represent (3,-1) bond critical points.

Selected normal mode displacements are shown on Figure S2.

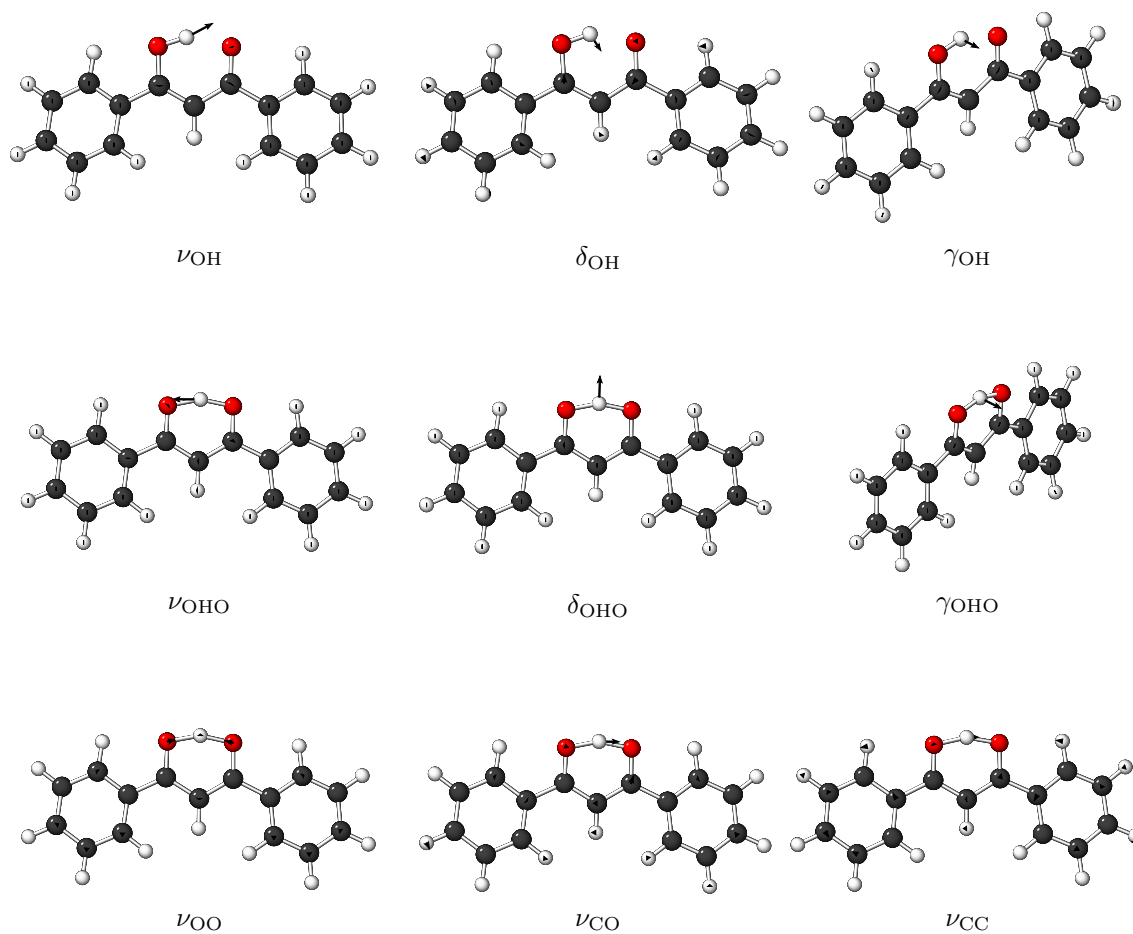


Figure S2: Normal mode vibrations of the two conformers:  $\nu_{\text{OH}}$  and  $\nu_{\text{OHO}}^a$  modes, as well as modes coupled to them.