

Supplementary materials.

NEW DINITRILE: SYNTHESIS, STRUCTURE, AND SPECTRA

НОВЫЙ ДИНИТРИЛ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ

Shagalov E.V., Pogonin A.E., Kiselev A.N., Syrbu S.A., Maizlish V.E.

Е.В. Шагалов, А.Е. Погонин, А.Н. Киселев, С.А. Сырбу, В.Е. Майзлиш

Table S1. Internuclear distances for **5**, pyrazine-2,3-dicarbonitrile, benzene and benzothiazole optimized at B3LYP/cc-pVTZ level.

Таблица S1. Межъядерные расстояния молекул **5**, пиразин-2,3-дикарбонитрила, бензола и бензотиазола.

Internuclear distances, Å	5	Benzene	Benzothiazole	Pyrazine-2,3-dicarbonitrile
C ₂ ^{Py} -C ₃ ^{Py}	1.404	-	-	1.407
C ₂ ^{Py} -C ^{CN}	1.433	-	-	1.435
C ^{CN} -N ^{CN}	1.151	-	-	1.151
N ₁ ^{Py} -C ₂ ^{Py}	1.329	-	-	1.335
N ₁ ^{Py} -C ₆ ^{Py}	1.332	-	-	1.326
C ₅ ^{Py} -C ₆ ^{Py}	1.430	-	-	1.395
C ₆ ^{Py} -C ₁ ^{Ph}	1.478	-	-	-
C ₁ ^{Ph} -C ₆ ^{Ph}	1.399	1.391	-	-
C ₅ ^{Ph} -C ₆ ^{Ph}	1.383	1.391	-	-
C ₄ ^{Ph} -C ₅ ^{Ph}	1.398	1.391	-	-
C ₄ ^{Ph} -C ₂ ^{Bt}	1.464	-	-	-
N ₃ ^{Bt} -C ₂ ^{Bt}	1.294	-	1.286	-
N ₃ ^{Bt} -C _{3a} ^{Bt}	1.375	-	1.385	-
C _{3a} ^{Ph} -C _{7a} ^{Bt}	1.412	-	1.411	-
S ₁ ^{Bt} -C _{7a} ^{Bt}	1.742	-	1.745	-
S ₁ ^{Bt} -C ₂ ^{Bt}	1.778	-	1.758	-
C _{3a} ^{Ph} -C ₄ ^{Bt}	1.399	-	1.397	-
C ₄ ^{Ph} -C ₅ ^{Bt}	1.382	-	1.383	-
C ₅ ^{Ph} -C ₆ ^{Bt}	1.402	-	1.402	-
C ₆ ^{Ph} -C ₇ ^{Bt}	1.386	-	1.385	-
C _{7a} ^{Ph} -C ₇ ^{Bt}	1.392	-	1.393	-

Table S2. Natural charges at atoms calculated ^a in the framework of natural population analysis for **5**, pyrazine-2,3-dicarbonitrile, benzene and benzothiazole.

Таблица S2. Натуральные заряды на атомах, рассчитанные ^a в рамках анализа заселенности натуральных атомных орбиталей для **5**, пиразин-2,3-дикарбонитрила, бензола и бензотиазола.

Natural charges	5	Benzene	Benzothiazole	Pyrazine-2,3-dicarbonitrile
C ₂ ^{Py}	0.09	-	-	0.09
C ₃ ^{Py}	0.09	-	-	0.09
N ₄ ^{Py}	-0.36	-	-	-0.34
C ₅ ^{Py}	0.20	-	-	0.03
C ₆ ^{Py}	0.20	-	-	0.03
N ₁ ^{Py}	-0.36	-	-	-0.34
C ^{CN}	0.24	-	-	0.24
N ^{CN}	-0.24	-	-	-0.23
C ₁ ^{Ph}	-0.07	-0.20	-	-
C ₂ ^{Ph}	-0.17	-0.20	-	-
C ₃ ^{Ph}	-0.16	-0.20	-	-
C ₄ ^{Ph}	-0.08	-0.20	-	-
C ₂ ^{Bt}	0.11	-	-0.07	-
N ₃ ^{Bt}	-0.43	-	-0.42	-
C _{3a} ^{Bt}	0.11	-	0.09	-
C _{7a} ^{Bt}	-0.20	-	-0.20	-
S ₁ ^{Bt}	0.35	-	0.35	-
C ₄ ^{Bt}	-0.18	-	-0.18	-
C ₇ ^{Bt}	-0.21	-	-0.21	-
C ₅ ^{Bt}	-0.20	-	-0.19	-
C ₆ ^{Bt}	-0.19	-	-0.07	-

^a B3LYP/cc-pVTZ

^a на основе результатов расчетов B3LYP/cc-pVTZ

Table S3. Wiberg bond indexes calculated^a for **5**, pyrazine-2,3-dicarbonitrile, benzene and benzothiazole.

Таблица S3. Порядки связей по Вайбергу, рассчитанные ^a для **5**, пиразин-2,3-дикарбонитрила, бензола и бензотиазола.

Wiberg bond indexes	5	Benzene	Benzothiazole	Pyrazine-2,3-dicarbonitrile
C ₂ ^{Py} -C ₃ ^{Py}	1.28	-	-	1.30
C ₂ ^{Py} -C ^{CN}	1.07	-	-	1.07
C ^{CN} -N ^{CN}	2.87	-	-	2.88
N ₁ ^{Py} -C ₂ ^{Py}	1.39	-	-	1.40
N ₁ ^{Py} -C ₆ ^{Py}	1.42	-	-	1.46
C ₅ ^{Py} -C ₆ ^{Py}	1.24	-	-	1.37
C ₆ ^{Py} -C ₁ ^{Ph}	1.06	-	-	-
C ₁ ^{Ph} -C ₆ ^{Ph}	1.37	1.44	-	-
C ₂ ^{Ph} -C ₃ ^{Ph}	1.48	1.44	-	-
C ₄ ^{Ph} -C ₅ ^{Ph}	1.37	1.44	-	-
C ₄ ^{Ph} -C ₂ ^{Bt}	1.09	-	-	-
N ₃ ^{Bt} -C ₂ ^{Bt}	1.61	-	1.70	-
N ₃ ^{Bt} -C _{3a} ^{Bt}	1.19	-	1.18	-
C _{3a} ^{Ph} -C _{7a} ^{Bt}	1.27	-	1.29	-
S ₁ ^{Bt} -C _{7a} ^{Bt}	1.14	-	1.14	-
S ₁ ^{Bt} -C ₂ ^{Bt}	1.11	-	1.16	-
C _{3a} ^{Ph} -C ₄ ^{Bt}	1.32	-	1.33	-
C ₄ ^{Ph} -C ₅ ^{Bt}	1.50	-	1.50	-
C ₅ ^{Ph} -C ₆ ^{Bt}	1.39	-	1.39	-
C ₆ ^{Ph} -C ₇ ^{Bt}	1.47	-	1.48	-
C _{7a} ^{Ph} -C ₇ ^{Bt}	1.37	-	1.37	-

^a B3LYP/cc-pVTZ

^a на основе результатов расчетов B3LYP/cc-pVTZ

Table S4. NICS(0) and NICS(1) values ^a for **5**, pyrazine-2,3-dicarbonitrile, benzene and benzothiazole

Таблица S4. Значения индексов NICS(0) и NICS(1) ^a для **5**, пиразин-2,3-дикарбонитрила, бензола и бензотиазола.

Moiety	Parameter	5	Benzene	Benzothiazole	Pyrazine-2,3-dicarbonitrile
pyrazine moiety	NICS(0)	-4.3	-	-	-6.0
	NICS(1)	-7.9	-	-	-10.0
phenylene moiety	NICS(0)	-6.0	-8.2	-	-
	NICS(1)	-8.1 ^b	-10.4	-	-
thiazole moiety in benzothiazole unit	NICS(0)	-7.9	-	-10.0	-
	NICS(1)	-7.8	-	-9.5	-
benzene moiety in benzothiazole unit	NICS(0)	-8.7	-	-9.3	-
	NICS(1)	-10.1	-	-10.8	-

^a B3LYP/cc-pVTZ; ^b average value of the NICS at 1 Å above and below the center of the benzene ring.

^a на основе результатов расчетов B3LYP/cc-pVTZ; ^b среднее значение индексов NICS, рассчитанных в точках, расположенной на 1 Å выше и ниже центра бензольного кольца.

Table S5. Cartesian coordinates of **5** according B3LYP/cc-pVTZ calculations

Таблица S5. Координаты атомов в молекуле **5** в соответствии с результатами расчетов B3LYP/cc-pVTZ.

C	0.127301000	0.703558000	3.236534000
C	-0.127301000	-0.703558000	3.236534000
N	-0.375766000	-1.320815000	4.390066000
C	-0.239867000	-0.659528000	5.535034000
C	0.239867000	0.659528000	5.535034000
N	0.375766000	1.320815000	4.390066000
C	0.577598000	1.346395000	6.746728000
N	0.851517000	1.888343000	7.724829000
C	-0.577598000	-1.346395000	6.746728000
N	-0.851517000	-1.888343000	7.724829000
C	0.099407000	1.574393000	2.042777000
C	-0.833013000	1.386978000	1.015056000
C	0.968689000	2.667230000	1.965521000
C	-0.887443000	2.255729000	-0.057762000
C	0.927741000	3.525916000	0.881846000
C	0.000394000	3.335804000	-0.147464000
H	-1.534442000	0.566711000	1.063003000
H	1.675026000	2.837289000	2.764553000
H	-1.616789000	2.116267000	-0.841490000
H	1.621636000	4.354743000	0.843041000
C	-0.099407000	-1.574393000	2.042777000
C	-0.968689000	-2.667230000	1.965521000
C	0.833013000	-1.386978000	1.015056000

C	-0.927741000	-3.525916000	0.881846000
C	0.887443000	-2.255729000	-0.057762000
C	-0.000394000	-3.335804000	-0.147464000
H	-1.675026000	-2.837289000	2.764553000
H	1.534442000	-0.566711000	1.063003000
H	-1.621636000	-4.354743000	0.843041000
H	1.616789000	-2.116267000	-0.841490000
C	0.497462000	7.050827000	-3.866385000
C	0.239867000	6.008278000	-2.981282000
C	-0.780132000	5.064521000	-3.229973000
C	-1.552446000	5.175013000	-4.390955000
C	-1.295707000	6.210918000	-5.269477000
C	-0.279848000	7.141067000	-5.010170000
C	-0.073975000	4.231113000	-1.303687000
N	-0.922524000	4.089499000	-2.270390000
H	1.279361000	7.771085000	-3.671117000
H	-2.332758000	4.451153000	-4.578710000
H	-1.885785000	6.307545000	-6.170498000
H	-0.098471000	7.942863000	-5.712814000
C	-0.497462000	-7.050827000	-3.866385000
C	-0.239867000	-6.008278000	-2.981282000
C	0.780132000	-5.064521000	-3.229973000
C	1.552446000	-5.175013000	-4.390955000
C	1.295707000	-6.210918000	-5.269477000
C	0.279848000	-7.141067000	-5.010170000
C	0.073975000	-4.231113000	-1.303687000
N	0.922524000	-4.089499000	-2.270390000
H	-1.279361000	-7.771085000	-3.671117000
H	2.332758000	-4.451153000	-4.578710000
H	1.885785000	-6.307545000	-6.170498000
H	0.098471000	-7.942863000	-5.712814000
S	-1.023643000	-5.619039000	-1.475346000
S	1.023643000	5.619039000	-1.475346000

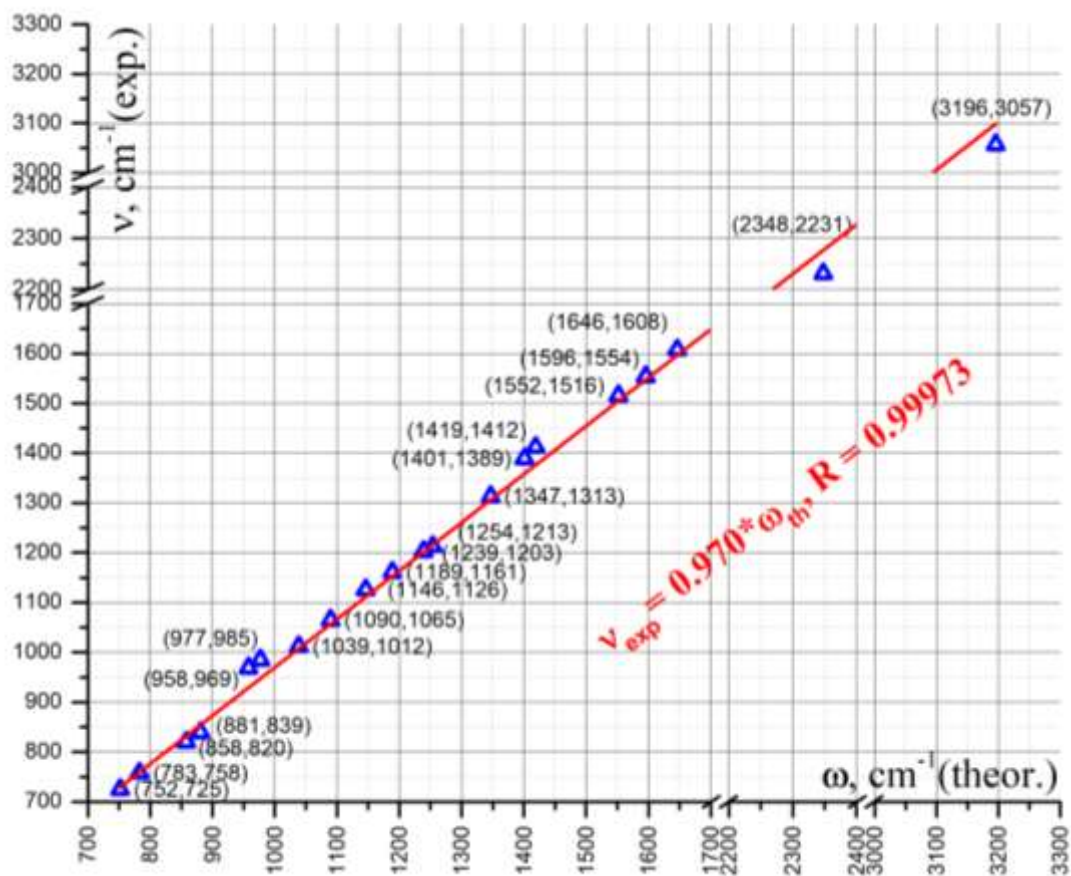


Figure S1. Correlation dependence $v = f(\omega)$: v and ω - the positions of the band maxima in the experimental and model spectra for **5**, respectively; R – adjusted R squared.

Рисунок S1. Корреляционная зависимость $v = f(\omega)$, где v и ω - положения максимумов полос в экспериментальном и модельном спектрах соединения **5**, соответственно.