Электронное приложение

Молекулярное строение и спектры 4-(4-бензилоксифенилдиазенил]фталонитрила

А.Е. Погонин, И.Ю. Курочкин, А.Н. Бычкова, Т.В. Тихомирова

Табл. S1. Рассчитанные (B3LYP-D3/pcseg-2) значения частот ω_i ($см^{-1}$), интенсивностей $I_{IR\ i}$ ($км \cdot моль^{-1}$) и приближенное описание [а] колебаний для BOPhDAPN и HOPhDAPN.

i	BOPhDAPN						HOPhDAPN			
	модель *b*			модель *a*						
	ω_i	$I_{IR\ i}$	Описание [а]	ω_i	$I_{IR\ i}$	Описание [а]	I [б]	ω_i [б]	$I_{IR\ i}$ [б]	Описание [а б]
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	9.0	0.9	rot(Ph);	21.4	0.0	rot(Ph, Ph^{Benz});	1	13.8	1.1	rot(Ph, Ph');
2	17.5	0.1	rot(Benz), π scissoring;	12.4	0.6	rot(Benz), π scissoring; rot(Ph);				
3	25.3	0.2	rot(Ph^{Benz});	7.1	0.4	rot(Ph^{Benz}); rot(Ph);				
4	36.6	0.8	rot(Benz); π scissoring;	41.9	0.9	rot(Benz); π scissoring;	2	34.9	0.4	π scissoring;
5	42.2	0.5	δ scissoring; rot(Benz);	30.2	0.4	δ scissoring; π(Benz);	3	53.5	0.5	δ scissoring;
6	57.6	0.2	rot(Benz); δ scissoring;	61.7	0.5	π(Benz); δ scissoring;				
7	71.2	1.1	π shearing (rot(Ph')); rot(O-Benz);	66.0	1.7	π shearing (rot(Ph')); rot(O-Benz);	4	73.5	2.5	π shearing (rot(Ph, Ph'));
8	112.9	0.8	δ(C4,5-CN(4,5));	113.1	1.1	δ(C4,5-CN(4,5));	5	114.0	0.9	$\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$;
9	122.4	0.0	$\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; τ(Ph);	127.8	0.0	$\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; rot(Ph', O-Benz);	6	123.8	0.0	$\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; τ(Ph, Ph');
10	138.2	3.0	$\delta(C5,4\text{-}CN^{(5,4)})$; δ scissoring;	137.5	0.9	$\delta(C5,4\text{-}CN^{(5,4)})$; δ scissoring; π(Benz)	7	150.1	4.2	$\delta(C5,4\text{-}CN^{(5,4)})$; δ(N1-N1'-C2'); δ(N1'-C2'-C');
11	156.7	2.3	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; τ(Benz);	106.8	0.0	rot(O-Benz);				
12	158.7	5.6	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; τ(N1-N1'-C2'-C');	158.9	7.9	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; τ(N1-N1'-C2'-C');	8	157.2	7.1	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; τ(N1-N1'-C2'-C');
13	168.2	0.1	τ(N1-N1'-C2'-C'); δ(C-O-C);	145.3	0.9	δ shearing; $\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$;				
14	208.2	10.5	$\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; δ(C-C-C); δ(N1'-N1-C2);	200.5	12.2	$\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; δ(C-C-C); δ(N1'-N1-C2);	9	207.3	7.3	$\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; ν(N-C); δ(C-C-C); δ(N1'-N1-C2);
15	235.4	6.7	τ(Ph'); $\tau(C'\text{-}C5'\text{-}O\text{-}C1^{BENZ})$;	207.8	2.7	τ(Ph'); $\tau(C'\text{-}C5'\text{-}O\text{-}C1^{BENZ})$; τ(C2-N1-N1'-C2')	10	198.9	0.5	τ(N1-N1'-C2'-C'); τ(Ph'); τ(C'-C'-C5'-O);
16	270.0	2.0	δ(C-C-O); π(Benz);	266.4	0.5	δ(C-C-O); π(Benz);				
17	292.3	0.2	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; $\tau(C\text{-}C2\text{-}N_1.N_1')$;	291.9	0.1	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; $\tau(C\text{-}C2\text{-}N_1.N_1')$;	12	291.1	0.0	$\pi(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$; τ(N1-N1'-C2'-C');
18	320.1	2.9	δ(N-C-C): δ(N1-C2-C), δ(N1'-C2'-C'); $\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$;	309.1	0.5	δ(N-C-C): δ(N1-C2-C), δ(N1'-C2'-C'); $\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$;	11	285.3	2.3	δ(N-C-C): δ(N1-C2-C), δ(N1'-C2'-C'); $\delta(C4,5\text{-}CN^{(4,5)})$;
19	340.8	2.7	$\delta(C\text{-}C\text{-}C)^{Benz}$: $\delta(C1^{Benz}\text{-}C2^{Benz}\text{-}C^{Benz})$; δ(C-O-C);	365.9	0.4	$\delta(C\text{-}C\text{-}C)^{Benz}$: $\delta(C1^{Benz}\text{-}C2^{Benz}\text{-}C^{Benz})$;	16	409.2	8.6	δ(C5'-OH); δ(C-C-C);
							13	380.6	24.4	$\tau(Ph');\ \tau(C'\text{-}C_5'\text{-}O\text{-}H)$;
20	387.4	0.1	π(Ph, Ph'); $\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$;	385.7	0.6	π(Ph, Ph'); $\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$;	14	390.8	10.8	π(Ph); $\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; τ(C'-C5'-O-H);
21	394.2	0.2	$\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; π(Ph, Ph');	393.0	0.0	$\pi(C4\text{-}CN^{(4)})$; π(Ph, Ph');	15	398.5	71.4	τ(C'-C5'-O-H); τ(Ph');

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
22	414.5	0.4	π(Benz);	415.3	0.0	π(Benz);				
23	425.2	20.0	δ(C-C-C); ν(C4,5-$C^{CN(4,5)}$);	430.2	6.1	δ(C-C-C); ν(C4,5-$C^{CN(4,5)}$);	17	427.9	30.9	δ(C-C-C); ν(C4,5-$C^{CN(4,5)}$); δ(C5'-OH);
24	439.3	0.1	π(Ph');	440.5	0.0	π(Ph');	18	434.6	0.3	π(Ph');
25	458.4	17.1	π(Ph^{Benz}); δ(C-C-C); ν(C-C); δ(C5,4-CN(5,4));	415.2	9.0	δ(C-C-O); π(Ph^{Benz}); δ(C-C-C);	19	467.4	10.2	δ(C5,4-$CN^{(5,4)}$); δ(C-C-C); ν(C-C);
26	471.0	1.0	π(Ph, Ph'); π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);	470.5	0.2	π(Ph, Ph'); π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);	20	469.0	0.2	τ(Ph); π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);
27	476.8	0.2	π(Ph^{Benz});	515.4	2.5	π(Ph^{Benz}); δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C); δ(N-C-C);				
28	501.6	1.1	δ(C4-$CN^{(4)}$); δ(N-N-C); δ(C-C-C);	476.1	11.7	δ(C4-$CN^{(4)}$); δ(C-C-C);	21	516.2	7.4	δ(C4-$CN^{(4)}$); δ(N-N-C); δ(N-C-C); δ(C-C-C);
29	535.4	15.3	δ(N-N-C); δ(N-C-C); δ(C-C-C);	543.5	12.4	δ(N-N-C); δ(N-C-C); δ(C-C-C);	23	541.0	0.5	δ(N1'-N1-C2); δ(N-N-C); δ(C-C-C);
30	539.4	4.5	π(Ph'); π(C-H)$^{Ph'}$;	539.0	3.5	π(Ph'); π(C-H)$^{Ph'}$;	22	534.8	7.5	τ(Ph');
31	541.0	7.4	δ(C-O-C); δ(C4-$CN^{(4,5)}$); δ(C-C-C);	529.2	14.3	δ(C4-$CN^{(4)}$); δ(C-C-O); π(Ph^{Benz}); δ(C-C-C);				
32	549.5	24.0	π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);	549.4	23.7	π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);	24	548.7	22.4	π(C4,5-$CN^{(4,5)}$);
33	609.9	3.7	ν(C-C): ν(C5,4-$C^{CN(5,4)}$); δ(N-N-C); δ(C-C-C);	592.2	8.8	δ(C-C-C): δ(C-C-C)^{Benz}; ν(C-C);	25	611.4	5.2	ν(C-C): ν(C5-$C^{CN(5)}$); δ(N-N-C); δ(C-C-C);
34	628.9	7.4	δ(C-C-C)$^{Ph',Benz}$; δ(C-O-C), δ(C-C-O);	647.8	12.5	δ(C-C-C)$^{Ph'}$; δ(C-O-C), δ(C-C-O);				
35	636.0	0.7	δ(C-C-C)^{Benz};	638.1	0.0	δ(C-C-C)^{Benz};				
36	647.4	2.7	δ(C4,5-$CN^{(4,5)}$); δ(C-C-C);	639.4	16.2	δ(C4,5-$CN^{(4,5)}$); δ(C-C-C);	26	644.9	0.6	δ(C4,5-$CN^{(4,5)}$); δ(Ph');
37	653.7	5.0	π(Ph; $C^{CN(4)}$);	653.7	5.3	π(Ph; $C^{CN(4)}$);	27	652.8	5.9	π(Ph; $C^{CN(4)}$);
38	665.4	26.3	δ(C-C-C); ν(C-C);	660.3	24.6	δ(C-C-C); ν(C-C);	28	659.5	2.9	δ(Ph'): δ(C5'-C6'-C7'), δ(C2'-C7'-C6'), δ(C2'-C3'-C4'), δ(C3'-C4'-C5'); ν(C-C); δ(C-H);
39	717.3	34.7	τ(Ph^{Benz}); π(C-H)^{Benz};	715.0	40.7	τ(Ph^{Benz}); π(C-H)^{Benz};				
40	736.8	1.8	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C5-$C^{CN(5)}$), ν(C4-$C^{CN(4)}$); δ(C-C-C)^{Ph};	736.8	1.8	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C5-$C^{CN(5)}$), ν(C4-$C^{CN(4)}$); δ(C-C-C)^{Ph};	30	736.8	1.4	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C_5-$C^{CN(5)}$), ν(C_4-$C^{CN(4)}$); δ(C-C-C);
41	743.1	16.9	π(C-H)^{Benz}; δ(C-C-C);	756.5	20.6	π(C-H)^{Benz}; δ(C-C-C);				
42	746.1	0.4	τ(Ph', Ph);	745.4	0.4	τ(Ph', Ph);	29	738.2	0.6	τ(Ph');
43	757.7	2.3	τ(Ph, Ph');	757.5	2.0	τ(Ph, Ph');	31	756.7	1.6	τ(Ph);
44	760.1	46.4	π(C-H)^{Benz}; π(Ph^{Benz});	781.0	26.5	π(C-H)^{Benz}; π(Ph^{Benz}); ν(C-C);	32	759.9	4.0	δ(Ph): δ(C2-C7-C6); ν(C-C): ν(C5-$C^{CN(5)}$); ν(N-C);
45	813.3	4.0	ν(C-C); ν(C-O); δ(C-C-C); δ(N-N-C);	875.8	40.3	ν(C-C); δ(C-C-C); δ(C-C-O); δ(C-O-C); π(C-H)^{Benz};	34	836.2	13.5	ν(C-C): ν(C5'-C6'); δ(C-C-C): δ(C3'-C2'-C7'); ν(O-C5'); δ(N-N-C);
46	822.7	3.7	ν(C-C): ν(C1^{Benz}-C2^{Benz}), ν(C2^{Benz} -C7^{Benz}); δ(C-C-C)^{Benz};	825.6	0.5	ν(C-C): ν(C1^{Benz}-C2^{Benz}); δ(C-C-C);				

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
47	827.7	3.8	π(C-H): π(C6'-H6'), π(C7'-H7'), π(C4'-H4'), π(C3'-H3');	824.6	3.2	π(C-H): π(C6'-H6'), π(C7'-H7'), π(C4'-H4'), π(C3'-H3');	33	821.1	8.9	π(C-H): π(C6'-H6'), π(C7'-H7'), π(C4'-H4');
48	865.2	5.1	π(C-H): π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$);	861.7	0.2	π(C-H): π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$);				
49	867.0	11.2	π(C-H): π(C4'-H4'), π(C6'-H6'), π(C3'-H3'), π(C7'-H7');	866.2	15.3	π(C-H): π(C4'-H4'), π(C3'-H3'), π(C6'-H6'), π(C7'-H7');	35	863.8	21.4	π(C-H): π(C4'-H4'), π(C3'-H3'), π(C6'-H6');
50	875.2	61.1	π(C-H): π(C6-H6), π(C7-H7);	875.1	55.1	π(C-H): π(C6-H6), π(C7-H7);	36	874.8	49.3	π(C-H): π(C6-H6), π(C7-H7);
51	900.7	2.7	δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N1-N1'-C2'); ν(C-C): ν(C2'-C3'); δ(C-C-C);	902.1	0.6	δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N1-N1'-C2'); ν(C-C): ν(C2'-C3'); δ(C-C-C);	37	900.5	2.6	ν(C-C): ν(C2'-C3'); δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N_1-N1'-C2'); δ(C-C-C);
52	931.2	10.3	π(C-H)^{Benz}: π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);	947.7	48.2	π(C-H)^{Benz}: π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);				
53	953.4	12.9	π(C-H): π(C3-H3);	953.1	12.5	π(C-H): π(C3-H3);	38	953.0	12.2	π(C-H): π(C3-H3);
54	980.7	1.2	π(C-H): π(C7'-H7'), π(C6'-H6');	977.6	3.0	π(C-H): π(C7'-H7'), π(C6'-H6');	39	969.0	2.9	π(C-H): π(C7'-H7'), π(C6'-H6');
55	990.5	5.0	ν(C-C): ν(C2-C3); δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N1-N1'-C2'); ν(N1-C2);	990.2	12.9	ν(C-C): ν(C2-C3); δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N1-N1'-C2'); ν(N1-C2);	42	990.7	0.9	ν(C-C): ν(C2-C3); δ(N-N-C): δ(N1'-N1-C2), δ(N1N1'-C2'); ν(N1-C2);
56	1000.5	0.2	π(C-H)^{Benz}: π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$);	996.8	0.0	π(C-H)^{Benz}: π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$), π($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), π($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$);				
57	1002.3	0.1	π(C-H): π(C7-H7), π(C6-H6);	1002.4	0.1	π(C-H): π(C7-H7), π(C6-H6);	41	1002.9	0.0	π(C-H): π(C7-H7), π(C6-H6);
58	1005.6	0.0	π(C-H): π(C3'-H3'), π(C4'-H4');	1005.9	0.1	π(C-H): π(C3'-H3'), π(C4'-H4');	40	1002.0	0.1	π(C-H): π(C3'-H3'), π(C4'-H4');
59	1019.7	0.1	π(C-H)^{Benz}: π($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$);	1018.9	29.8	π(C-H)^{Benz}: π($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), π($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), π($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$);				
60	1021.7	3.7	δ(C-C-C)^{Benz}; ν(C^{Benz}-C^{Benz}); π(C^{Benz}-H^{Benz});	1023.7	0.4	δ(C-C-C)^{Benz}; ν(C^{Benz}-C^{Benz});				
61	1022.4	1.2	ν(C-C)$^{Ph'}$; δ(Ph'); δ(C-H)$^{Ph'}$; π(C-H)^{Benz};	1021.4	0.6	ν(C-C)$^{Ph'}$; δ(Ph'); δ(C-H)$^{Ph'}$; π(C-H)^{Benz};	43	1023.6	1.6	ν(C'-C'): ν(C2'-C3'); δ(Ph'); δ(C'-H');
62	1034.5	58.3	ν(O-$C1^{Benz}$), δ($C1^{Benz}$ -H); ν(C-C);	1010.9	2.9	ν(C-C)^{Benz}, δ($C1^{Benz}$ -H);				
63	1042.0	131.3	ν(O-$C1^{Benz}$), δ($C1^{Benz}$ -H); π(C-H)^{Benz};	1012.6	209.5	ν(O-$C1^{Benz}$), π(C-H)^{Benz};				
64	1055.7	5.6	ν(C-C)^{Benz}: ν($C5^{Benz}$ -$C6^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$C5^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz}; ν(O-$C1^{Benz}$);	1054.6	2.4	ν(C-C)^{Benz}: ν($C5^{Benz}$ -$C6^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$C5^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz};				
65	1107.9	55.9	ν(C-C): ν(C4-$C^{CN(4)}$); ν(N1-C2); δ(C-C-C)^{Ph}; δ(C-H)^{Ph}: δ(C7-H7);	1108.1	55.3	ν(C-C): ν(C4-$C^{CN(4)}$); ν(N1-C2); δ(C-C-C)^{Ph}; δ(C-H)^{Ph}: δ(C7-H7);	44	1108.5	22.9	ν(C-C): ν(C4-$C^{CN(4)}$); δ(C-H): δ(C7-H7); δ(C-C-C); ν(N1-C2);
66	1116.2	9.0	ν(C-C)^{Benz}: ν($C3^{Benz}$-$C4^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$ -$C7^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz}:δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);	1118.0	3.1	ν(C-C)^{Benz}: ν($C3^{Benz}$-$C4^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$ -$C7^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz}:δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);				
67	1146.1	65.3	δ(C-H)Ph': δ(C3'-H3'), δ(C4'-H4'); ν(C-C)Ph';	1145.2	35.8	δ(C-H)Ph': δ(C3'-H3'), δ(C4'-H4'); ν(C-C)Ph';	45	1133.7	22.8	δ(C'-H'): δ(C3'-H3'), δ(C7'-H7'), δ(C4'-H4'); ν(C'-C');
68	1166.0	300.0	ν(N-C): ν(N1'-C2'), ν(N1-C2); δ(C-H): δ(C7'-H7'); ν(C-C);	1164.8	409.5	ν(N-C): ν(N1'-C2'), ν(N1-C2); δ(C-H): δ(C7'-H7'); ν(C-C);	46	1163.6	327.8	δ(C-H): δ(C7'-H7'); ν(N-C): ν(N1'-C2'), ν(N1-C2); ν(C-C);
69	1182.3	211.4	δ(C-H): δ(C7'-H7'); ν(C-C); ν(N-C);	1181.1	208.4	δ(C-H): δ(C7'-H7'); ν(C-C); ν(N-C);	47	1180.0	171.3	δ(C-H): δ(C6-H6), δ(C3-H3); ν(C-C); ν(N-C);
							48	1188.7	134.7	δ(O-H); ν(C-C); δ(C-H): δ(C6'-H6');
70	1194.5	0.1	δ(C-H)^{Benz}: δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), δ($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$), δ($C6^{Benz}$ -$H6^{Benz}$); ν(C-C)^{Benz};	1194.7	0.0	δ(C-H)^{Benz}: δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), δ($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$), δ($C6^{Benz}$ -$H6^{Benz}$); ν(C-C)^{Benz};				

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
71	1212.3	5.8	δ(C-H)^{Benz}: δ(C3^{Benz}-H3^{Benz}), δ(C7^{Benz} -H7^{Benz}), δ(C6^{Benz} -H6^{Benz}), δ(C4^{Benz} -H4^{Benz}); ν(C-C)^{Benz};	1214.6	3.8	δ(C-H)^{Benz}: δ(C3^{Benz}-H3^{Benz}), δ(C7^{Benz} -H7^{Benz}), δ(C6^{Benz} -H6^{Benz}), δ(C4^{Benz} -H4^{Benz}); ν(C-C)^{Benz};				
72	1213.1	1.4	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); δ(C-H): δ(C7-H7); δ(C-C-C)Ph; ν(N-C);	1212.9	2.0	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); δ(C-H): δ(C7-H7); δ(C-C-C)^{Ph}; ν(N-C);	49	1212.3	1.9	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); δ(C-H): δ(C7-H7); δ(C-C-C); ν(N-C);
73	1220.0	9.7	ν(C-C)^{Benz}: ν(C1^{Benz} -C2^{Benz}); δ(C-H)^{Benz};	1242.5	2.2	ν(C-C)^{Benz}: ν(C1^{Benz} -C2^{Benz}); δ(C-H)^{Benz};				
74	1236.1	42.4	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); ν(N-C): ν(N1'-C2'); δ(C-H);	1234.8	67.6	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); ν(N-C): ν(N1'-C2'); δ(C-H);	50	1233.5	26.3	ν(C-C): ν(C5-C$^{CN(5)}$); ν(N-C): ν(N1'-C2'); δ(C-H);
75	1257.4	347.0	ν(O-C): ν(O-C5'), π(C1^{Benz}-H); δ(C-H);	1279.4	893.3	ν(O-C): ν(O-C5'), π(C1^{Benz}-H); δ(C-H); ν(C-C);	52	1299.4	195.9	δ(C-H): δ(C3-H3); ν(O-C); ν(N-C); ν(C-C);
76	1270.6	56.9	δ(C-H): δ(C_6-H_6); ν(C-C); ν(N-C): ν(N1'-C2');	1270.1	0.2	δ(C-H): δ(C_6-H_6); ν(C-C); ν(N-C): ν(N1'-C2');	51	1267.8	0.2	δ(C-H): δ(C_6-H_6); ν(C-C); ν(N-C): ν(N1'-C2');
77	1296.2	230.6	π(C1^{Benz}-H); ν(C-C); ν(C-O): ν(O-C5');	1252.3	1.4	π(C1^{Benz}-H); ν(C-C)^{Benz};				
78	1305.5	5.9	ν(C-C); ν(N-C); δ(C-H)^{Ph}: δ(C3-H3), δ(C6-H6);	1305.4	8.7	ν(C-C); ν(N-C); δ(C-H)^{Ph}: δ(C3-H3), δ(C6-H6);	53	1306.3	80.0	ν(O-C); ν(C-C); δ(C-H); ν(N-C): ν(N1'-C2');
79	1326.0	7.5	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C3-C4), ν(C5-C6),ν(C7-C2);	1326.2	14.2	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C3-C4), ν(C5-C6),ν(C7-C2), ν(C2-C3);	55	1325.7	17.4	ν(C-C): ν(C4-C5), ν(C5-C6),ν(C2-C3),ν(C3-C4),ν(C2-C7);
80	1326.4	10.1	ν(C-C); δ(C-H);	1343.6	0.9	ν(C-C)^{Benz}: ν(C2^{Benz}-C3^{Benz}), ν(C3^{Benz}-C4^{Benz}), ν(C4^{Benz}-C5^{Benz}),ν(C5^{Benz}-C6^{Benz}), ν(C6^{Benz}-C7^{Benz}), ν(C7^{Benz}-C2^{Benz}); δ(C-H)^{Benz};				
81	1336.8	59.7	δ(C-H): δ(C7'-H7'), δ(C6'-H6'), δ(C3'-H3'); ν(C-C)^{Benz};	1332.4	73.8	δ(C-H): δ(C7'-H7'), δ(C6'-H6'), δ(C3'-H3'), δ(C4'-H4'); ν(C-C);	54	1338.5	14.6	δ(C-H): δ(C3'-H3'), δ(C7'-H7'), δ(C4'-H4'), δ(C6'-H6'); ν(C-C);
82	1356.6	33.2	ν(C-C): ν(C2'-C7'); δ(C-H)^{Benz};	1357.4	81.9	ν(C-C): ν(C2'-C7'), ν(C5'-C6'), ν(C2'-C3'), ν(C4'-C5'), ν(C3'-C4');	56	1374.7	48.5	ν(C-C): ν(C5'-C6'), ν(C2'-C7'),ν(C2'-C3'),ν(C3'-C4'),ν(C4'-C5'); δ(O-H);
83	1367.1	58.1	δ(C-H)^{Benz}: δ(C3^{Benz}-H3^{Benz}), δ(C7^{Benz}-H7^{Benz}); ν(C-C)$^{Ph'}$;	1370.8	0.3	δ(C-H)^{Benz}: δ(C3^{Benz}-H3^{Benz}), δ(C7^{Benz}-H7^{Benz}), δ(C6^{Benz}-H6^{Benz}), δ(C4^{Benz}-H4^{Benz});				
84	1408.8	7.0	π(C1^{Benz}-H);	1414.3	91.5	π(C1^{Benz}-H);				
85	1427.7	83.6	ν(C-C): ν(C3-C4), ν(C6-C7); δ(C-H): δ(C7-H7); ν(N1-N1');	1427.9	70.6	ν(C-C): ν(C3-C4), ν(C6-C7); δ(C-H): δ(C7-H7); ν(N1-N1');	57	1428.5	51.0	ν(C-C): ν(C3-C4), ν(C6-C7); δ(C-H): δ(C7-H7);
86	1460.4	139.8	ν(C-C): ν(C6'-C7'), ν(C3'-C4'); δ(C-H): δ(C6'-H6'); ν(N_1-N1');	1460.1	136.0	ν(C-C): ν(C6'-C7'), ν(C3'-C4'); δ(C-H): δ(C6'-H6'), δ(C7'-H7'); ν(N_1-N1');	58	1471.5	44.3	ν(C-C): ν(C6'-C7'), ν(C3'-C4'); δ(C-H): δ(C4'-H4'), δ(C6'-H6'); ν(N_1-N1');
87	1490.4	15.6	ν(C-C)^{Benz}: ν(C3^{Benz}-C4^{Benz}), ν(C6^{Benz}-C7^{Benz}); δ(C-H)^{Benz}: δ(C5^{Benz}-H5^{Benz}), δ(C4^{Benz}-H4^{Benz});	1492.2	6.6	ν(C-C)^{Benz}: ν(C3^{Benz}-C4^{Benz}), ν(C6^{Benz}-C7^{Benz}); δ(C-H)^{Benz}: δ(C5^{Benz}-H5^{Benz}), δ(C4^{Benz}-H4^{Benz}), δ(C6^{Benz}-H6^{Benz});				
88	1503.1	10.7	δ(C1^{Benz}-H);	1518.5	84.2	δ(C1^{Benz}-H);				
89	1504.3	155.1	ν(N1-N1'); ν(C-C); δ(C-H): δ(C3-H3);	1504.1	154.9	ν(N1-N1'); ν(C-C); δ(C-H): δ(C3-H3);	59	1507.8	119.6	ν(C-C): ν(C4-C5); δ(C-H);
90	1515.3	25.9	ν(C-C): ν(C4-C5); δ(C-H): δ(C6-H6); ν(N_1-N1');	1515.1	13.5	ν(C-C): ν(C4-C5); δ(C-H): δ(C6-H6); ν(N_1-N1');	60	1519.1	89.6	ν(N_1-N1'); ν(C-C); δ(C-H);
91	1534.1	11.2	δ(C-H)^{Benz}: δ(C6^{Benz} -H6^{Benz}), δ(C4^{Benz} -H4^{Benz}), δ(C3^{Benz} -H3^{Benz}), δ(C7^{Benz} -H7^{Benz}); ν(C-C)^{Benz};	1535.0	92.9	δ(C-H)$^{Benz, Ph'}$: δ(C6^{Benz} -H6^{Benz}), δ(C4^{Benz} -H4^{Benz}); ν(C-C);				
92	1538.3	332.7	δ(C-H): δ(C4'-H4'); ν(C-C); ν(N1-N1');	1539.5	234.3	δ(C-H); ν(C-C); ν(N1-N1');	61	1541.8	234.5	δ(C-H); ν(C-C); ν(N_1-N1');

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
93	1595.7	15.3	ν(C-C): ν(C2-C7), ν(C5-C6), ν(C2-C3), ν(C4-C5); δ(C-H);	1595.6	22.4	ν(C-C): ν(C2-C7), ν(C5-C6), ν(C2-C3), ν(C4-C5); δ(C-H);	62	1596.3	8.6	ν(C-C): ν(C2-C7), ν(C5-C6), ν(C2-C3), ν(C4-C5); δ(C-H);
94	1603.9	39.8	ν(C-C): ν(C5'-C6'), ν(C2'-C3'), ν(C2'-C7'); δ(C-H);	1601.4	52.3	ν(C-C): ν(C5'-C6'), ν(C2'-C3'), ν(C2'-C7'); δ(C-H);	63	1616.4	54.1	ν(C-C): ν(C5'-C6'), ν(C2'-C3'), ν(C2'-C7'); δ(C-H);
95	1627.1	5.0	ν(C-C): ν($C4^{Benz}$ -$C5^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$-$C6^{Benz}$), ν($C2^{Benz}$-$C3^{Benz}$), ν($C2^{Benz}$-$C7^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz}: δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);	1628.4	0.5	ν(C-C): ν($C4^{Benz}$ -$C5^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$-$C6^{Benz}$), ν($C2^{Benz}$-$C3^{Benz}$), ν($C2^{Benz}$-$C7^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz}: δ($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);				
96	1631.2	5.1	ν(C-C): ν(C6-C7), ν(C3-C4); δ(C-H)^{Ph};	1631.2	5.0	ν(C-C): ν(C6-C7), ν(C3-C4); δ(C-H)^{Ph};	64	1631.8	4.2	ν(C-C): ν(C6-C7), ν(C3-C4); δ(C-H);
97	1645.7	171.1	ν(C-C): ν(C3'-C4'); δ(C-H);	1647.0	353.4	ν(C-C): ν(C3'-C4'), ν(C6'-C7'), ν(C2'-C7'); δ(C-H)$^{Ph'}$;	65	1649.9	235.4	ν(C-C): ν(C6'-C7'), ν(C3'-C4'), ν(C4'-C5'), ν(C2'-C7'); δ(C-H);
98	1648.0	129.9	ν(C-C): ν(C3'-C4'), ν($C3^{Benz}$-$C4^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$-$C7^{Benz}$); δ(C-H);	1648.7	0.2	ν(C-C)^{Benz}: ν($C3^{Benz}$-$C4^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$-$C7^{Benz}$); δ(C-H)^{Benz};				
99	2334.5	45.8	ν(N-C): ν(N5-$C^{CN(5)}$); ν(C5-$C^{CN(5)}$);	2334.5	47.2	ν(N-C): ν(N5-$C^{CN(5)}$); ν(C5-$C^{CN(5)}$);	66	2335.1	38.0	ν(N-C): ν(N5-$C^{CN(5)}$); ν(C5-$C^{CN(5)}$);
100	2341.2	9.6	ν(N-C): ν(N4-$C^{CN(4)}$); ν(C4-$C^{CN(4)}$);	2341.2	9.9	ν(N-C): ν(N4-$C^{CN(4)}$); ν(C4-$C^{CN(4)}$);	67	2341.5	9.1	ν(N-C): ν(N4-$C^{CN(4)}$); ν(C4-$C^{CN(4)}$);
101	3027.7	41.1	ν($C1^{Benz}$-H);	3014.2	26.2	ν($C1^{Benz}$-H);				
102	3082.4	12.8	ν($C1^{Benz}$-H);	3058.9	16.5	ν($C1^{Benz}$-H);				
103	3156.3	7.1	ν(C-H)^{Benz}: ν($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$);	3166.4	2.5	ν(C-H)^{Benz}: ν($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$);				
104	3171.1	0.3	ν(C-H)^{Benz}: ν($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$);	3164.2	5.7	ν($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$-$H7^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$);				
105	3180.8	8.8	ν(C-H)^{Benz}: ν($C4^{Benz}$-$H4^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$ -$H7^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$-$H6^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$ -$H5^{Benz}$);	3176.5	6.9	ν(C-H)^{Benz}: ν($C5^{Benz}$ -$H5^{Benz}$), ν($C3^{Benz}$-$H3^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$ -$H7^{Benz}$);				
106	3190.2	16.2	ν(C-H)^{Benz}: ν($C7^{Benz}$ -$H7^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$), ν($C5^{Benz}$ -$H5^{Benz}$);	3186.9	21.2	ν(C-H)^{Benz}: ν($C6^{Benz}$ -$H6^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$);				
107	3191.7	4.8	ν(C-H): ν(C4'-H4'), ν(C7'-H7');	3191.7	4.4	ν(C-H): ν(C7'-H7'), ν(C4'-H4');	69	3195.3	3.0	ν(C-H): ν(C4'-H4');
108	3193.9	0.4	ν(C-H): ν(C7'-H7'), ν(C4'-H4');	3194.2	1.1	ν(C-H): ν(C4'-H4'), ν(C7'-H7');	71	3199.3	3.1	ν(C-H): ν(C7'-H7');
109	3196.3	0.5	ν(C-H): ν(C7-H7), ν(C6-H6);	3196.4	0.5	ν(C-H): ν(C7-H7), ν(C6-H6);	70	3196.8	0.3	ν(C-H): ν(C7-H7), ν(C6-H6);
110	3198.0	10.2	ν(C-H)^{Benz}: ν($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$ -$H6^{Benz}$), ν($C7^{Benz}$ -$H7^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$);	3196.8	14.8	ν(C-H)^{Benz}: ν($C5^{Benz}$-$H5^{Benz}$), ν($C6^{Benz}$ -$H6^{Benz}$), ν($C4^{Benz}$ -$H4^{Benz}$);				
111	3210.5	1.3	ν(C-H): ν(C6-H6), ν(C7-H7);	3210.6	1.3	ν(C-H): ν(C6-H6), ν(C7-H7);	72	3210.9	1.0	ν(C-H): ν(C6-H6), ν(C7-H7);
112	3215.8	3.2	ν(C-H): ν(C3'-H3');	3215.7	2.6	ν(C-H): ν(C3'-H3'), ν(C4'-H4');	73	3216.5	3.4	ν(C-H): ν(C3'-H3'), ν(C4'-H4');
113	3224.2	3.4	ν(C3-H3);	3224.2	3.3	ν(C3-H3);	74	3224.3	3.4	ν(C3-H3);
114	3227.4	7.8	ν(C-H): ν(C6'-H6');	3220.2	15.1	ν(C-H): ν(C6'-H6');	68	3166.4	16.9	ν(C-H): ν(C6'-H6');
							75	3817.1	165.9	ν(O-H);

[a] приближенное описание колебательной моды в терминах внутренних колебательных координат составлено на основе РПЭ. Первой указана координата с наибольшим вкладом. Координаты с вкладом, не превышающим ~10%, не указаны. Обозначение «*Координата-1: Координата-2, Координата-3*»; означает, что смещение по *координате-2* и *координате-3* является частью общего смещения по *координате-1*. Используются

следующие обозначения для колебательных координат: ν(X-Y) - растяжение связи X–Y; δ – изгиб с сохранением плоскости фрагмента, указанного в скобках; π - изгиб фрагмента, указанного в скобках, вне плоскости; τ – торсионное колебание; rot - вращение фрагмента, указанного в скобках; π scissoring – внеплоскостное ножничное колебание азобензольного фрагмента (по аналогии с бифенилом [50]); δ scissoring –плоскостное ножничное колебание азобензольного фрагмента (по аналогии с [50]); π shearing – внеплоскостный сдфиг в азобензольном фрагменте (по аналогии с [50]). Используются следующие обозначения для фрагментов: Ph – фенильный фрагмент, замещенный двумя циано-группами; Benz – бензильная группа; Ph' – фенильный фрагмент, замещенный –OH или –O-Benz группой; Ph^{Benz} - фенильный фрагмент, являющийся частью бензильной группы. Используется нумерация атомов, указанная на рис. 1.

[б] нумерация и приближенное описание колебательных мод HOPhDAPN взяты из работы [56], тогда как значения ω_i и $I_{IR\ i}$ перерасчитаны на уровне теории B3LYP-D3/pcseg-2.

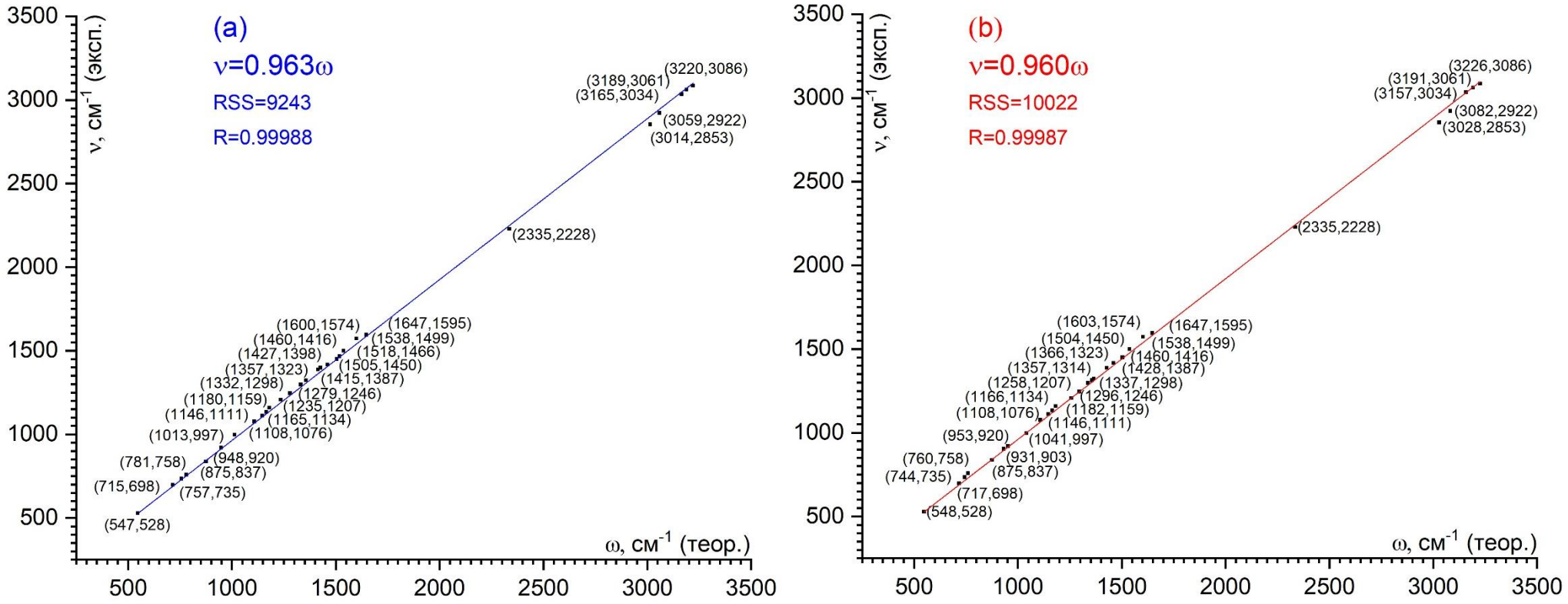


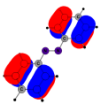
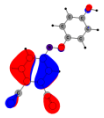
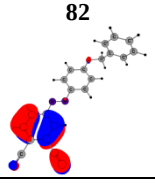
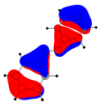
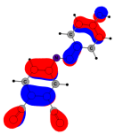
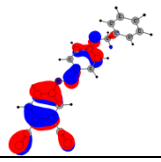
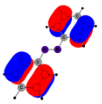
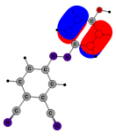
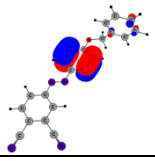
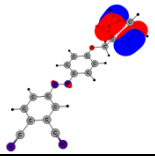
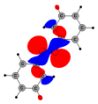
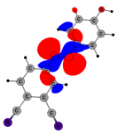
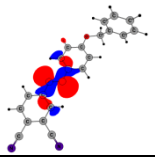
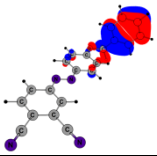
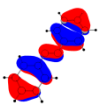
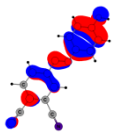
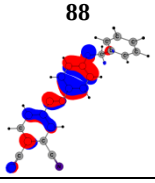
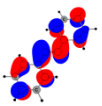
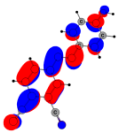
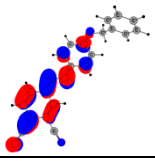
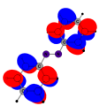
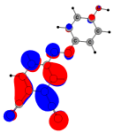
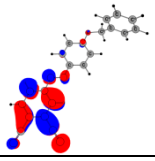
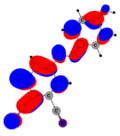
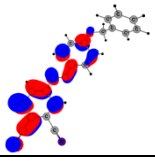
Рис. S1. Корреляционные зависимости между положениями максимумов полос в экспериментальном и теоретических спектрах BOPhDAPN.
ν – положения максимумов полос в экспериментальном ИК-спектре BOPhDAPN (рис. 4); ω - положения максимумов полос в теоретических ИК-спектрах BOPhDAPN (слева – для модели *a*, справа – для модели *b*), смоделированных на основе B3LYP-D3/pcseg-2 расчетов (рис. 4); RSS – остаточная сумма квадратов, R-скорректированный R^2.

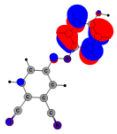
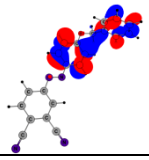
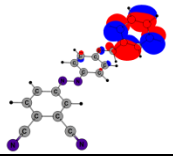
Табл. S2. Рассчитанные значения длин волн (λ, нм) и сил осцилляторов (в скобках), соответствующие энергиям переходов[a] из основного состояния в возбужденные состояния для молекул AB, HOPhDAPN, BOPhDAPN согласно TDDFT расчетам (B3LYP-D3/pcseg-2).

AB			HOPhDAPN			BOPhDAPN		
№	Описание	λ, nm	№	Описание	λ, nm	№	Описание	λ, nm
1^1B_g	47→49 (95)	456(0.000)	$1^1A''$	63→65 (86)	461(0.000)	1^1A	86→89 (85)	461(0.000)
2^1B_u	48→49 (97)	322(0.939)	$2^1A''$	64→65 (93)	358(1.212)	2^1A	88→89 (92)	364(1.328)
3^1B_u	46→49 (84)	268(0.057)	$3^1A'$	60→65 (34)	276(0.011)	3^1A	84→89 (45)	278(0.008)
				64→66 (32)			88→90 (14)	
							82→89 (12)	
4^1A_g	45→49 (85)	268(0.000)	$4^1A'$	62→65 (65)	274(0.010)	4^1A	82→89 (30)	276(0.012)
				64→68 (10)			88→90 (22)	
							84→89 (21)	
5^1A_g	44→49 (86)	234(0.000)	$5^1A'$	61→65 (59)	249(0.173)	5^1A	83→89 (58)	250(0.130)
				64→66 (21)			88→90 (19)	
			$6^1A''$	63→66 (90)	248(0.000)	6^1A	86→90 (89)	249(0.000)
			$7^1A'$	60→65 (49)	242(0.105)	7^1A	82→89 (40)	244(0.122)
				64→66 (28)			88→90 (28)	
				61→65 (16)			83→89 (23)	
						8^1A	87→89 (82)	238(0.002)
6^1B_u	48→50 (67)	211(0.442)	$8^1A'$	64→68 (57)	229(0.074)	9^1A	88→92 (45)	230(0.077)
	46→49 (14)			62→65 (15)			84→89 (15)	
	44→51 (10)			64→67 (14)		10^1A	87→93 (23)	229(0.004)
			$9^1A'$	60→66 (35)	216(0.269)		85→89 (17)	
				64→67 (28)			85→93 (13)	
				61→65 (11)			85→92 (12)	
				61→66 (10)			87→94 (12)	
			$10^1A''$	63→67 (89)	214(0.000)	11^1A	85→89 (77)	228(0.004)
			$11^1A'$	61→66 (32)	210(0.347)	12^1A	88→91 (42)	217(0.234)
				64→67 (25)			82→90 (29)	
				64→68 (11)		13^1A	86→91 (88)	214(0.000)
				60→66 (11)		14^1A	83→90 (30)	212(0.392)
							82→90 (26)	
							88→91 (19)	

[a] Указаны переходы между занятыми и свободными МО и вклад (%) соответствующих электронных конфигураций в волновую функцию рассматриваемого электронного состояния (указаны конфигурации с весами, превышающими 10 %). Изображения граничных МО приведены в табл. S3.

Табл. S3. Изображение некоторых граничных МО AB, HOPhDAPN, BOPhDAPN

AB	HOPhDAPN	BOPhDAPN
45 	**60** 	**82** 
44 	**61** 	**83** 
46 	**62** 	**84** 
		85 
47 	**63** 	**86** 
		87 
48 	**64** 	**88** 
49 	**65** 	**89** 
51 	**66** 	**90** 
	67 	**91** 

AB	HOPhDAPN	BOPhDAPN
50 	**68** 	**92** 
		93 

50. Katon, J.E.; Lippincott, E.R. The vibrational spectra and geometrical configuration of biphenyl. Spectrochim. Acta 1959, 15, 627–650, doi:https://doi.org/10.1016/S0371-1951(59)80360-X.

56. Pogonin, A.E.; Kurochkin, I.Y.; Malyasova, A.S.; Ksenofontova, K. V.; Koifman, O.I. Molecular Structure and Vibrational Spectra of 4-(4-Hydroxyphenylazo)phthalonitrile: DFT Study. Macroheterocycles 2023, 16, 156–167, doi:10.6060/mhc235113p.