

## Supplementary information

### **Synthesis, crystal growth, structural and physico-chemical properties of an Organic single crystal (C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) for fast scintillation and NLO applications**

D. Joseph Daniel<sup>a</sup>, P. Karuppasamy<sup>b</sup>, P.Q. Vuong<sup>a</sup>, H. J. Kim<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Center for High-energy Physics, Kyungpook National University, Daegu 41566, South  
Korea

<sup>b</sup>SSN Research Centre, Kalavakkam, Tamilnadu, India – 603 110

\*corresponding author E-mail - [hongjoo@knu.ac.kr](mailto:hongjoo@knu.ac.kr)

Table S1. Atomic coordinates (  $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for Glutaricacid.  $U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U^{ij}$  tensor.

	x	y	z	U(eq)
N(1)	5313(5)	7678(3)	10183(1)	38(1)
C(1)	3533(6)	8544(3)	10177(2)	46(1)
C(2)	2032(6)	8412(3)	9687(2)	48(1)
C(3)	2307(6)	7353(3)	9176(1)	38(1)
C(4)	4099(6)	6483(3)	9196(1)	37(1)
C(5)	5650(5)	6644(3)	9712(1)	34(1)
C(6)	610(6)	7188(4)	8638(2)	48(1)
N(2)	7432(5)	5855(3)	9762(1)	43(1)
N(3)	9683(5)	7188(3)	4821(1)	41(1)
C(7)	7900(7)	8058(4)	4834(2)	53(1)
C(8)	7618(7)	9057(4)	5327(2)	56(1)
C(9)	9212(6)	9190(3)	5838(1)	43(1)
C(10)	10948(6)	8276(3)	5820(1)	40(1)
C(11)	11188(6)	7235(3)	5303(1)	38(1)
C(12)	8902(8)	10316(4)	6378(2)	58(1)
N(4)	12801(5)	6313(3)	5257(1)	52(1)
O(1)	203(5)	6387(2)	875(1)	54(1)
O(2)	-1849(4)	8205(2)	1182(1)	51(1)
C(13)	-265(6)	7387(3)	1266(1)	36(1)

C(14)	1040(6)	7696(3)	1879(1)	39(1)
C(15)	2931(6)	6724(3)	1960(1)	39(1)
C(16)	4120(6)	7107(3)	2587(1)	40(1)
C(17)	6054(6)	6203(3)	2709(1)	37(1)
O(3)	6732(5)	5254(2)	2345(1)	51(1)
O(4)	6932(5)	6575(3)	3269(1)	59(1)
O(5)	3202(4)	4473(2)	4133(1)	49(1)
O(6)	272(5)	5501(3)	3773(1)	56(1)
C(18)	1836(6)	4609(3)	3714(1)	38(1)
C(19)	1906(6)	3671(3)	3099(1)	36(1)
C(20)	3988(6)	2746(3)	3017(1)	36(1)
C(21)	3905(6)	1877(3)	2378(1)	38(1)
C(22)	5784(6)	848(3)	2255(1)	36(1)
O(7)	7262(5)	650(3)	2617(1)	62(1)
O(8)	5654(4)	170(2)	1684(1)	48(1)

---

Table S2. Bond lengths [ $\text{\AA}$ ] and angles [ $^\circ$ ] for Glutaricacid.

---

N(1)-C(5)	1.341(4)
N(1)-C(1)	1.353(4)
N(1)-H(1N)	0.82(4)
C(1)-C(2)	1.348(5)
C(1)-H(1)	0.9400
C(2)-C(3)	1.408(4)
C(2)-H(2)	0.9400
C(3)-C(4)	1.366(4)
C(3)-C(6)	1.495(5)
C(4)-C(5)	1.408(4)
C(4)-H(4)	0.9400
C(5)-N(2)	1.319(4)
C(6)-H(6A)	0.9700
C(6)-H(6B)	0.9700
C(6)-H(6C)	0.9700
N(2)-H(2A)	0.8700
N(2)-H(2B)	0.8700
N(3)-C(11)	1.347(4)
N(3)-C(7)	1.353(4)
N(3)-H(3N)	0.97(4)
C(7)-C(8)	1.347(5)
C(7)-H(7)	0.9400
C(8)-C(9)	1.416(5)
C(8)-H(8)	0.9400
C(9)-C(10)	1.362(4)
C(9)-C(12)	1.494(4)
C(10)-C(11)	1.404(4)
C(10)-H(10)	0.9400
C(11)-N(4)	1.313(4)
C(12)-H(12A)	0.9700
C(12)-H(12B)	0.9700
C(12)-H(12C)	0.9700
N(4)-H(4A)	0.8700
N(4)-H(4B)	0.8700
O(1)-C(13)	1.230(4)
O(2)-C(13)	1.275(4)

C(13)-C(14)	1.510(4)
C(14)-C(15)	1.506(4)
C(14)-H(14A)	0.9800
C(14)-H(14B)	0.9800
C(15)-C(16)	1.512(4)
C(15)-H(15A)	0.9800
C(15)-H(15B)	0.9800
C(16)-C(17)	1.502(4)
C(16)-H(16A)	0.9800
C(16)-H(16B)	0.9800
C(17)-O(3)	1.201(4)
C(17)-O(4)	1.314(4)
O(4)-H(4C)	0.8300
O(5)-C(18)	1.234(4)
O(6)-C(18)	1.270(3)
C(18)-C(19)	1.505(4)
C(19)-C(20)	1.511(4)
C(19)-H(19A)	0.9800
C(19)-H(19B)	0.9800
C(20)-C(21)	1.517(4)
C(20)-H(20A)	0.9800
C(20)-H(20B)	0.9800
C(21)-C(22)	1.497(4)
C(21)-H(21A)	0.9800
C(21)-H(21B)	0.9800
C(22)-O(7)	1.200(4)
C(22)-O(8)	1.321(4)
O(8)-H(8A)	0.8300
C(5)-N(1)-C(1)	122.2(3)
C(5)-N(1)-H(1N)	120(3)
C(1)-N(1)-H(1N)	117(3)
C(2)-C(1)-N(1)	120.9(3)
C(2)-C(1)-H(1)	119.5
N(1)-C(1)-H(1)	119.5
C(1)-C(2)-C(3)	119.6(3)
C(1)-C(2)-H(2)	120.2
C(3)-C(2)-H(2)	120.2

C(4)-C(3)-C(2)	118.4(3)
C(4)-C(3)-C(6)	121.9(3)
C(2)-C(3)-C(6)	119.6(3)
C(3)-C(4)-C(5)	120.9(3)
C(3)-C(4)-H(4)	119.5
C(5)-C(4)-H(4)	119.5
N(2)-C(5)-N(1)	117.6(3)
N(2)-C(5)-C(4)	124.4(3)
N(1)-C(5)-C(4)	117.9(3)
C(3)-C(6)-H(6A)	109.5
C(3)-C(6)-H(6B)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	109.5
C(3)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6A)-C(6)-H(6C)	109.5
H(6B)-C(6)-H(6C)	109.5
C(5)-N(2)-H(2A)	120.0
C(5)-N(2)-H(2B)	120.0
H(2A)-N(2)-H(2B)	120.0
C(11)-N(3)-C(7)	122.3(3)
C(11)-N(3)-H(3N)	121(2)
C(7)-N(3)-H(3N)	116(2)
C(8)-C(7)-N(3)	120.8(3)
C(8)-C(7)-H(7)	119.6
N(3)-C(7)-H(7)	119.6
C(7)-C(8)-C(9)	119.3(3)
C(7)-C(8)-H(8)	120.4
C(9)-C(8)-H(8)	120.4
C(10)-C(9)-C(8)	118.7(3)
C(10)-C(9)-C(12)	122.6(3)
C(8)-C(9)-C(12)	118.7(3)
C(9)-C(10)-C(11)	120.9(3)
C(9)-C(10)-H(10)	119.6
C(11)-C(10)-H(10)	119.6
N(4)-C(11)-N(3)	118.0(3)
N(4)-C(11)-C(10)	124.1(3)
N(3)-C(11)-C(10)	117.9(3)
C(9)-C(12)-H(12A)	109.5
C(9)-C(12)-H(12B)	109.5

H(12A)-C(12)-H(12B)	109.5
C(9)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(12)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(12)-H(12C)	109.5
C(11)-N(4)-H(4A)	120.0
C(11)-N(4)-H(4B)	120.0
H(4A)-N(4)-H(4B)	120.0
O(1)-C(13)-O(2)	122.6(3)
O(1)-C(13)-C(14)	120.6(3)
O(2)-C(13)-C(14)	116.8(2)
C(15)-C(14)-C(13)	115.4(2)
C(15)-C(14)-H(14A)	108.4
C(13)-C(14)-H(14A)	108.4
C(15)-C(14)-H(14B)	108.4
C(13)-C(14)-H(14B)	108.4
H(14A)-C(14)-H(14B)	107.5
C(14)-C(15)-C(16)	111.6(2)
C(14)-C(15)-H(15A)	109.3
C(16)-C(15)-H(15A)	109.3
C(14)-C(15)-H(15B)	109.3
C(16)-C(15)-H(15B)	109.3
H(15A)-C(15)-H(15B)	108.0
C(17)-C(16)-C(15)	115.4(2)
C(17)-C(16)-H(16A)	108.4
C(15)-C(16)-H(16A)	108.4
C(17)-C(16)-H(16B)	108.4
C(15)-C(16)-H(16B)	108.4
H(16A)-C(16)-H(16B)	107.5
O(3)-C(17)-O(4)	123.5(3)
O(3)-C(17)-C(16)	124.9(3)
O(4)-C(17)-C(16)	111.6(2)
C(17)-O(4)-H(4C)	109.5
O(5)-C(18)-O(6)	123.3(3)
O(5)-C(18)-C(19)	120.6(3)
O(6)-C(18)-C(19)	116.1(3)
C(18)-C(19)-C(20)	115.0(3)
C(18)-C(19)-H(19A)	108.5
C(20)-C(19)-H(19A)	108.5

C(18)-C(19)-H(19B)	108.5
C(20)-C(19)-H(19B)	108.5
H(19A)-C(19)-H(19B)	107.5
C(19)-C(20)-C(21)	110.2(3)
C(19)-C(20)-H(20A)	109.6
C(21)-C(20)-H(20A)	109.6
C(19)-C(20)-H(20B)	109.6
C(21)-C(20)-H(20B)	109.6
H(20A)-C(20)-H(20B)	108.1
C(22)-C(21)-C(20)	115.1(3)
C(22)-C(21)-H(21A)	108.5
C(20)-C(21)-H(21A)	108.5
C(22)-C(21)-H(21B)	108.5
C(20)-C(21)-H(21B)	108.5
H(21A)-C(21)-H(21B)	107.5
O(7)-C(22)-O(8)	122.9(3)
O(7)-C(22)-C(21)	125.6(3)
O(8)-C(22)-C(21)	111.5(3)
C(22)-O(8)-H(8A)	109.5

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table S3. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for Glutaricacid. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2 [ h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12} ]$

	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
N(1)	40(2)	39(1)	33(1)	1(1)	-5(1)	14(1)
C(1)	51(2)	42(2)	41(2)	-5(1)	-4(2)	20(2)
C(2)	44(2)	47(2)	49(2)	-5(2)	-8(2)	21(2)
C(3)	33(2)	41(2)	39(2)	7(1)	1(1)	6(1)
C(4)	36(2)	37(2)	34(2)	0(1)	1(1)	8(1)
C(5)	32(2)	34(2)	36(2)	4(1)	3(1)	6(1)
C(6)	40(2)	59(2)	44(2)	9(2)	-8(2)	7(2)
N(2)	44(2)	43(2)	40(1)	-2(1)	-6(1)	20(1)
N(3)	46(2)	46(2)	29(1)	1(1)	-4(1)	18(1)
C(7)	55(2)	66(2)	40(2)	2(2)	-9(2)	32(2)
C(8)	70(3)	54(2)	44(2)	0(2)	-6(2)	40(2)
C(9)	52(2)	37(2)	39(2)	4(1)	3(2)	13(2)
C(10)	46(2)	39(2)	32(2)	3(1)	-4(1)	10(1)
C(11)	40(2)	40(2)	34(2)	4(1)	-5(1)	13(1)
C(12)	82(3)	40(2)	50(2)	-2(2)	4(2)	22(2)
N(4)	56(2)	57(2)	40(2)	-6(1)	-13(1)	31(2)
O(1)	62(2)	56(1)	38(1)	-9(1)	-12(1)	34(1)
O(2)	58(2)	51(1)	40(1)	-5(1)	-10(1)	33(1)
C(13)	38(2)	37(2)	33(2)	2(1)	-2(1)	12(1)
C(14)	40(2)	36(2)	39(2)	2(1)	-5(1)	12(1)
C(15)	43(2)	33(2)	40(2)	2(1)	-6(1)	11(1)
C(16)	44(2)	34(2)	39(2)	0(1)	-8(1)	14(1)
C(17)	42(2)	34(2)	34(2)	2(1)	-4(1)	7(1)
O(3)	63(2)	49(1)	41(1)	-1(1)	-3(1)	29(1)
O(4)	72(2)	56(2)	44(1)	-6(1)	-20(1)	38(1)
O(5)	54(2)	56(1)	34(1)	-3(1)	-8(1)	31(1)
O(6)	65(2)	67(2)	36(1)	-6(1)	-10(1)	45(1)
C(18)	37(2)	44(2)	33(2)	4(1)	-4(1)	17(1)
C(19)	34(2)	38(2)	34(2)	1(1)	-2(1)	13(1)
C(20)	36(2)	35(2)	35(2)	4(1)	0(1)	13(1)
C(21)	39(2)	38(2)	37(2)	2(1)	-2(1)	13(1)
C(22)	40(2)	31(2)	36(2)	0(1)	-2(1)	9(1)
O(7)	67(2)	66(2)	47(1)	-8(1)	-19(1)	39(1)



O(8) 54(2) 48(1) 38(1) -6(1) -4(1) 26(1)

---

Table S4. Hydrogen coordinates ( $\times 10^4$ ) and isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^{-3}$ ) for Glutaricacid.

	x	y	z	U(eq)
H(1N)	6280(70)	7860(40)	10475(17)	53(11)
H(1)	3340	9246	10519	55
H(2)	810	9024	9686	58
H(4)	4301	5766	8860	44
H(6A)	1221	6543	8300	72
H(6B)	498	8072	8529	72
H(6C)	-990	6842	8736	72
H(2A)	8338	6014	10093	52
H(2B)	7700	5174	9466	52
H(3N)	9780(70)	6490(40)	4451(17)	55(10)
H(7)	6843	7965	4494	64
H(8)	6376	9658	5332	67
H(10)	11999	8342	6159	48
H(12A)	9943	10198	6711	88
H(12B)	7217	10281	6495	88
H(12C)	9343	11199	6278	88
H(4A)	12873	5696	4923	63
H(4B)	13796	6318	5561	63
H(14A)	1829	8630	1950	47
H(14B)	-175	7683	2190	47
H(15A)	4180	6743	1658	47
H(15B)	2164	5785	1893	47
H(16A)	4843	8055	2652	48
H(16B)	2851	7088	2885	48
H(4C)	8049	6087	3317	88
H(19A)	2005	4236	2793	43
H(19B)	372	3093	3022	43
H(20A)	3877	2146	3309	43
H(20B)	5539	3308	3095	43
H(21A)	2290	1386	2296	46
H(21B)	4105	2492	2094	46
H(8A)	6658	-424	1633	72

---

Table S5. Torsion angles [°] for Glutaricacid.

---

C(5)-N(1)-C(1)-C(2)	-1.1(5)
N(1)-C(1)-C(2)-C(3)	0.5(6)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.2(5)
C(1)-C(2)-C(3)-C(6)	178.7(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.5(5)
C(6)-C(3)-C(4)-C(5)	-178.9(3)
C(1)-N(1)-C(5)-N(2)	-179.8(3)
C(1)-N(1)-C(5)-C(4)	0.8(5)
C(3)-C(4)-C(5)-N(2)	-179.4(3)
C(3)-C(4)-C(5)-N(1)	-0.1(5)
C(11)-N(3)-C(7)-C(8)	2.8(6)
N(3)-C(7)-C(8)-C(9)	-0.1(6)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-1.8(6)
C(7)-C(8)-C(9)-C(12)	179.1(4)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	1.2(5)
C(12)-C(9)-C(10)-C(11)	-179.7(3)
C(7)-N(3)-C(11)-N(4)	177.2(3)
C(7)-N(3)-C(11)-C(10)	-3.3(5)
C(9)-C(10)-C(11)-N(4)	-179.3(3)
C(9)-C(10)-C(11)-N(3)	1.3(5)
O(1)-C(13)-C(14)-C(15)	1.2(5)
O(2)-C(13)-C(14)-C(15)	-179.0(3)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-179.5(3)
C(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-179.4(3)
C(15)-C(16)-C(17)-O(3)	2.2(5)
C(15)-C(16)-C(17)-O(4)	-177.8(3)
O(5)-C(18)-C(19)-C(20)	-9.2(5)
O(6)-C(18)-C(19)-C(20)	172.4(3)
C(18)-C(19)-C(20)-C(21)	-178.6(3)
C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	-176.0(3)
C(20)-C(21)-C(22)-O(7)	1.7(5)
C(20)-C(21)-C(22)-O(8)	-177.6(3)

---

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: