

## *Electronic Supplementary Information for*

# **A combined structural and computational investigation of the aminobenzyl naphthols deriving from the Betti reaction with valine methyl ester.**

Maria Annunziata M. Capozzi, \*† Angel Alvarez-Larena,‡ Joan F. Piniella Febrer,‡ and Cosimo Cardellicchio.\*§

(†) Dipartimento di Chimica, Università di Bari, via Orabona 4, 70125 Bari, Italy.

(‡) Departament de Geologia, Servei de Diffracció de Raig X, Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, Spain.

(§) CNR ICCOM, Dipartimento di Chimica, Università di Bari, via Orabona 4, 70125 Bari, Italy.

### **Index of Electronic Supplementary Information**

Table S1-S5. Crystal data and structure refinements

p. 2-6

Figure S1-S10. ORTEP plots and packing plots of compounds **5-7**

p. 7-11

Figure S11-S13. Comparison between XRPD of compounds **5-7**.

p. 12-13

Figure S14-S19. *Crystal Explorer 17* estimates of lattice energies of compounds **5-7**

p. 14-19

Figure S20. Molecular Overlay of Structures

p. 20

**Table S1. Crystal data and structure refinement for (S, S)-(5)**

Empirical formula	C <sub>23</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>3</sub>	
Formula weight	363.44	
Solvent of crystallization	Ethanol	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P 2 <sub>1</sub>	
Unit cell dimensions	a = 9.6415(7) Å	α = 90°.
	b = 9.7108(8) Å	β = 97.262(1)°.
	c = 11.1357(9) Å	γ = 90°.
Volume	1034.24(14) Å <sup>3</sup>	
Z	2	
Z'	1	
Density (calculated)	1.167 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.077 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	388	
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.20 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	1.844 to 28.762°.	
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 12, -12 ≤ k ≤ 13, -14 ≤ l ≤ 14	
Reflections collected	8352	
Independent reflections	4719 [R(int) = 0.0170]	
Completeness to theta = 25.000°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.832	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	4719 / 8 / 254	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.034	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0619, wR2 = 0.1572	
R indices (all data)	R1 = 0.0962, wR2 = 0.1804	
Absolute structure parameter	-0.4(6)	
Largest diff. peak and hole	0.32 and -0.19 e.Å <sup>-3</sup>	

**Table S2. Crystal data and structure refinement for (S, S) + (R, R)-(5)**

Empirical formula	C <sub>23</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>3</sub>	
Formula weight	363.44	
Solvent of crystallization	Ethanol	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P 2 <sub>1</sub> /n	
Unit cell dimensions	a = 9.1174(7) Å	α = 90°.
	b = 13.0496(11) Å	β = 97.831(2)°.
	c = 16.4573(13) Å	γ = 90°.
Volume	1939.8(3) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Z'	1	
Density (calculated)	1.244 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.082 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	776	
Crystal size	0.40 x 0.30 x 0.30 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	1.999 to 28.809°.	
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 12, -16 ≤ k ≤ 16, -21 ≤ l ≤ 22	
Reflections collected	15332	
Independent reflections	4686 [R(int) = 0.0564]	
Completeness to theta = 25.000°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.856	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	4686 / 0 / 255	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.015	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0575, wR2 = 0.1175	
R indices (all data)	R1 = 0.1205, wR2 = 0.1393	
Largest diff. peak and hole	0.16 and -0.16 e.Å <sup>-3</sup>	

**Table S3. Crystal data and structure refinement for (S, S)-(6)**

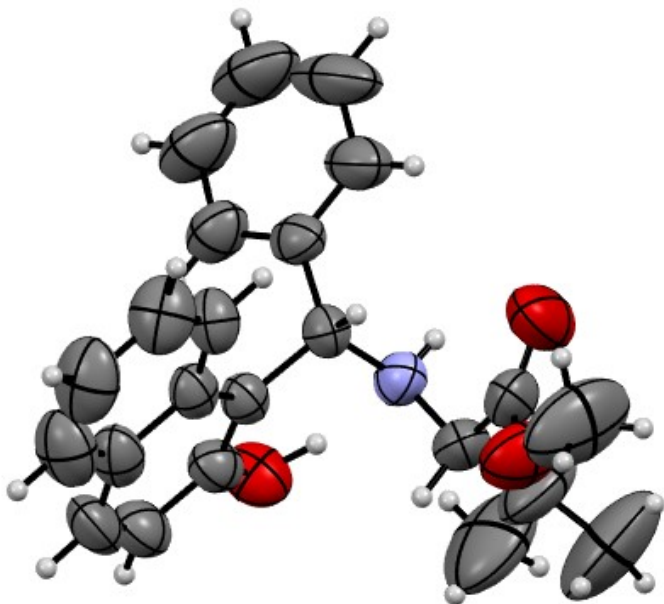
Empirical formula	C <sub>23</sub> H <sub>24</sub> FNO <sub>3</sub>	
Formula weight	381.43	
Solvent of crystallization	Ethanol	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Orthorhombic	
Space group	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>	
Unit cell dimensions	a = 9.0522(5) Å	α = 90°.
	b = 13.5590(7) Å	β = 90°.
	c = 16.6684(9) Å	γ = 90°.
Volume	2045.86(19) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Z'	1	
Density (calculated)	1.238 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.088 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	808	
Crystal size	0.42 x 0.29 x 0.22 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	1.936 to 28.748°.	
Index ranges	-11 ≤ h ≤ 11, -17 ≤ k ≤ 17, -21 ≤ l ≤ 21	
Reflections collected	16466	
Independent reflections	4789 [R(int) = 0.0222]	
Completeness to theta = 25.000°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.919	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	4789 / 0 / 262	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.030	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0403, wR2 = 0.0943	
R indices (all data)	R1 = 0.0538, wR2 = 0.1007	
Absolute structure parameter	0.1(3)	
Largest diff. peak and hole	0.13 and -0.15 e.Å <sup>-3</sup>	

**Table S4. Crystal data and structure refinement for (S, S)-(7)**

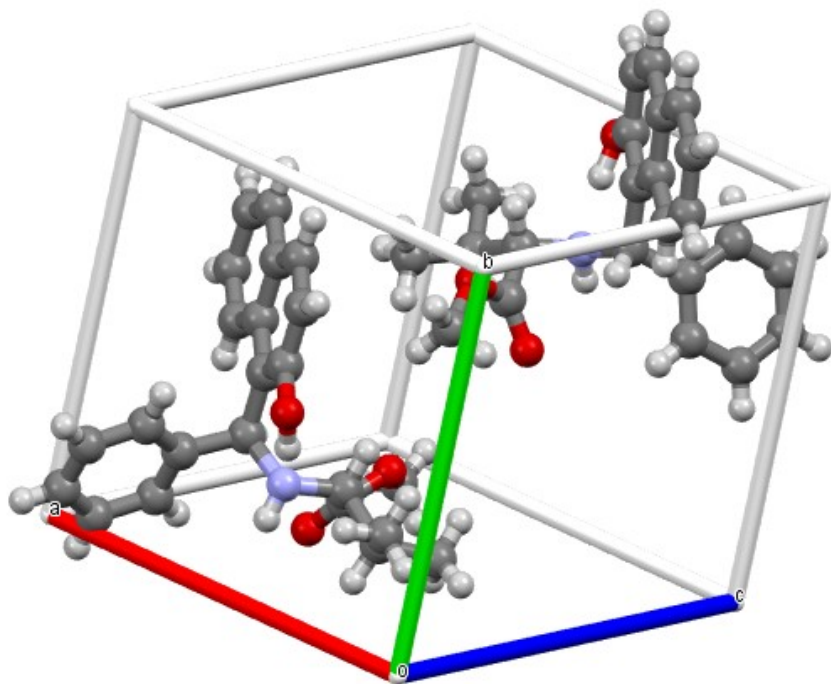
Empirical formula	C <sub>23</sub> H <sub>24</sub> ClNO <sub>3</sub>	
Formula weight	397.88	
Solvent of crystallization	Ethanol	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P 2 <sub>1</sub>	
Unit cell dimensions	a = 9.5094(5) Å	α = 90°.
	b = 18.3294(9) Å	β = 96.750(1)°.
	c = 12.3185(6) Å	γ = 90°.
Volume	2132.25(19) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Z'	2	
Density (calculated)	1.239 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.202 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	840	
Crystal size	0.42 x 0.33 x 0.20 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	1.665 to 28.749°.	
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 12, -23 ≤ k ≤ 23, -16 ≤ l ≤ 16	
Reflections collected	17187	
Independent reflections	9787 [R(int) = 0.0155]	
Completeness to theta = 25.000°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.903	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	9787 / 13 / 523	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.013	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0447, wR2 = 0.1055	
R indices (all data)	R1 = 0.0630, wR2 = 0.1155	
Absolute structure parameter	0.047(19)	
Largest diff. peak and hole	0.19 and -0.15 e.Å <sup>-3</sup>	

**Table S5. Crystal data and structure refinement for (*S,S*) + (*R,R*)-(7)**

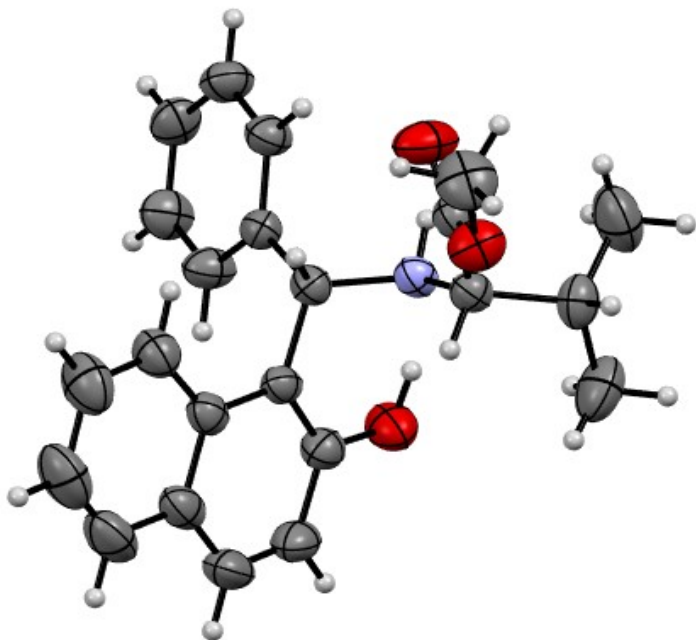
Empirical formula	C <sub>23</sub> H <sub>24</sub> ClNO <sub>3</sub>	
Formula weight	397.88	
Solvent of crystallization	Ethanol	
Temperature	296(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P 2 <sub>1</sub> /n	
Unit cell dimensions	a = 13.0861(7) Å	α = 90°.
	b = 9.8938(5) Å	β = 94.928(1)°.
	c = 16.1156(8) Å	γ = 90°.
Volume	2078.79(18) Å <sup>3</sup>	
Z	4	
Z'	1	
Density (calculated)	1.271 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.207 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	840	
Crystal size	0.66 x 0.44 x 0.22 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	1.926 to 28.747°.	
Index ranges	-17 ≤ h ≤ 17, -13 ≤ k ≤ 13, -21 ≤ l ≤ 21	
Reflections collected	16222	
Independent reflections	5033 [R(int) = 0.0260]	
Completeness to theta = 25.000°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.846	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	5033 / 0 / 262	
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.028	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0491, wR2 = 0.1303	
R indices (all data)	R1 = 0.0716, wR2 = 0.1450	
Largest diff. peak and hole	0.24 and -0.25 e.Å <sup>-3</sup>	



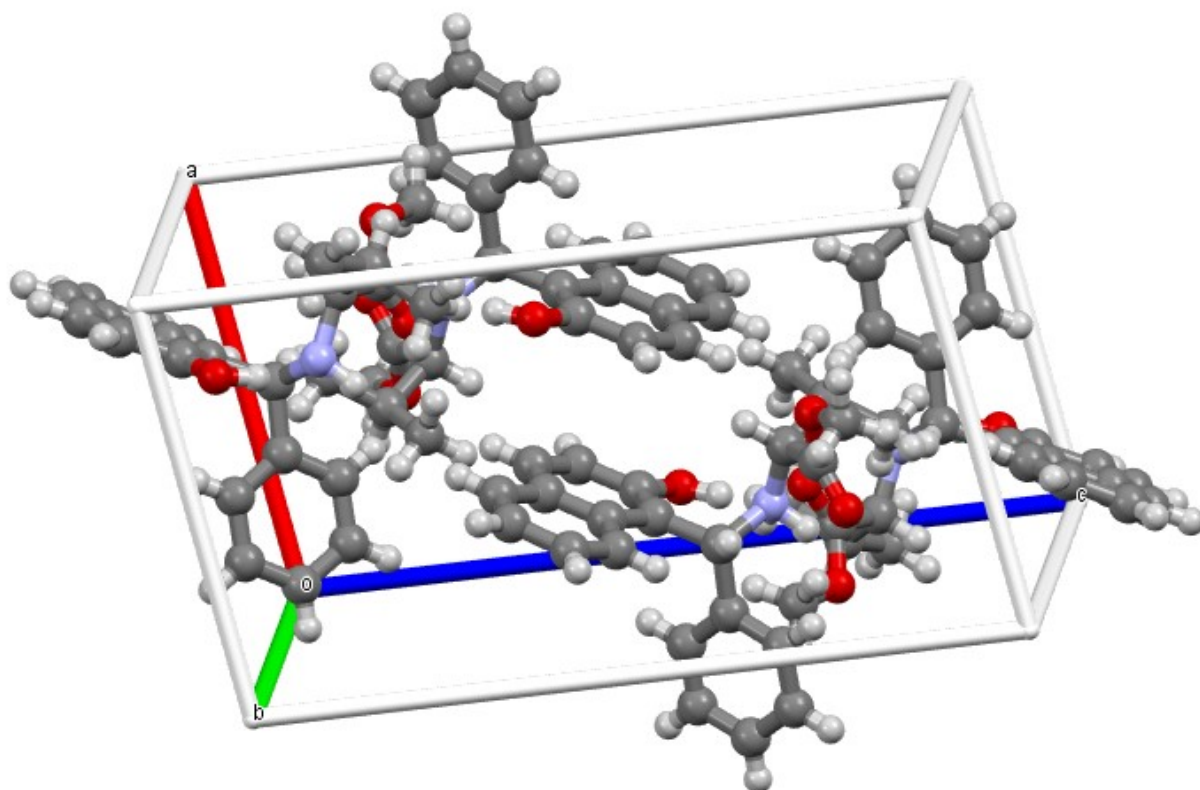
**Figure S1.** ORTEP plot (50% probability level) of (*S,S*)-aminobenzyl-naphthol-5



**Figure S2.** Packing plot of (*S,S*)-aminobenzyl-naphthol-5

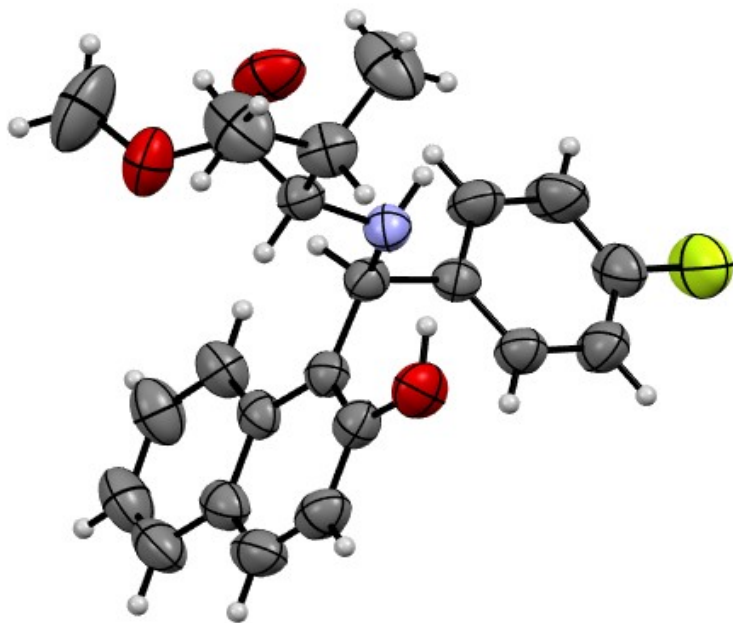


**Figure S3.** ORTEP plot (50% probability level) of (*S,S*) + (*R,R*)-aminobenzyl-naphthol **5**

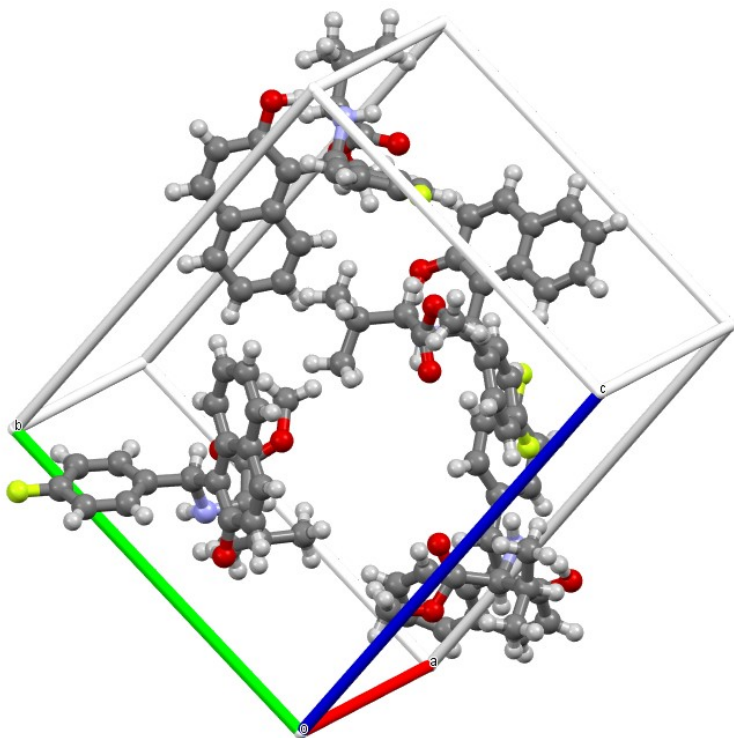


**Figure S4.** Packing plot of (*S,S*) + (*R,R*)-aminobenzyl-naphthol-**5**

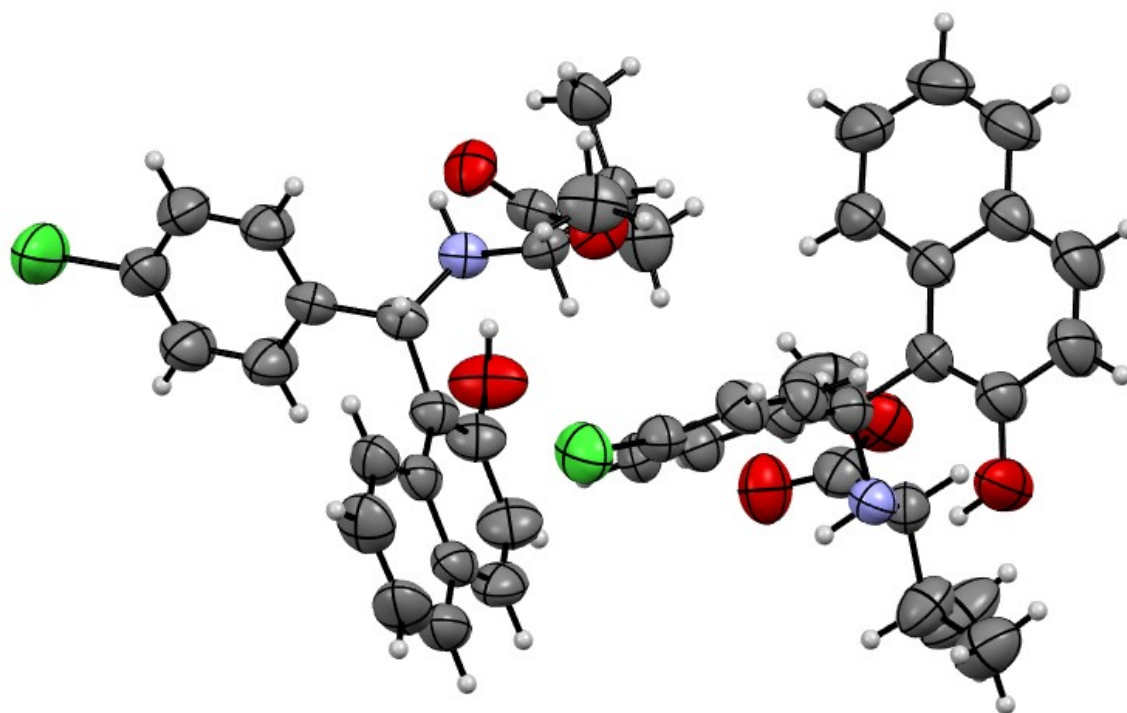




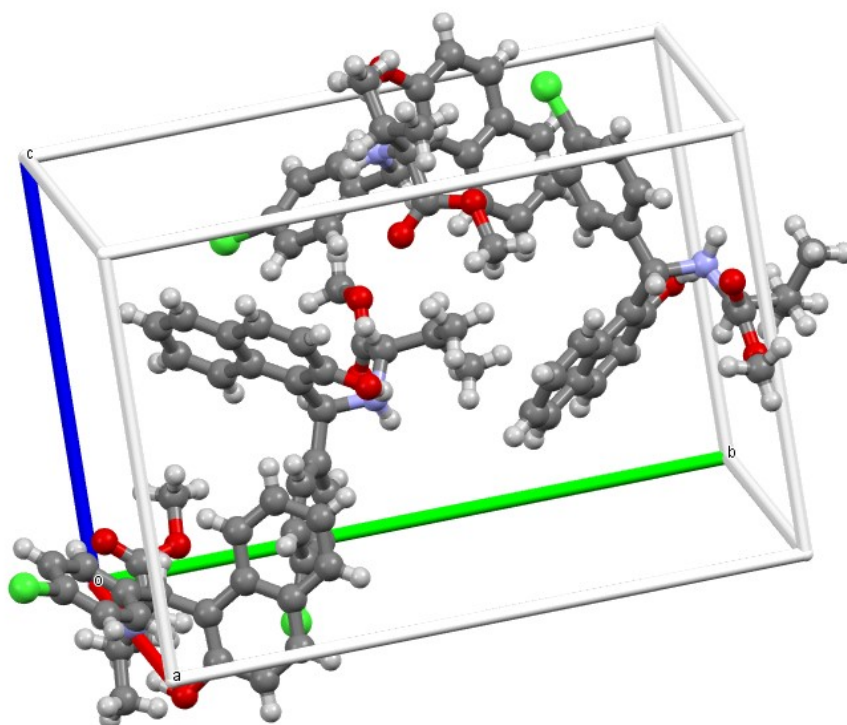
**Figure S5.** ORTEP plot (50% probability level) of (*S,S*)-aminobenzyl-naphthol **6**



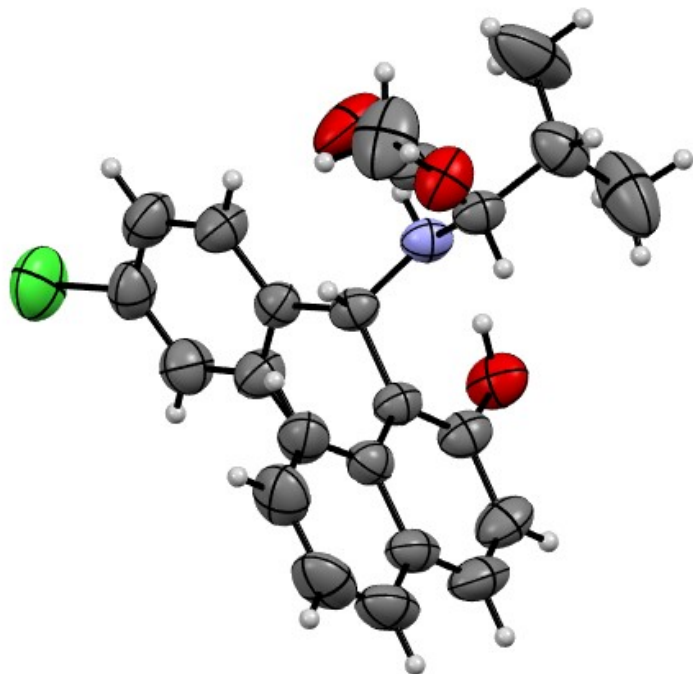
**Figure S6.** Packing plot of (*S,S*)-aminobenzyl-naphthol **6**



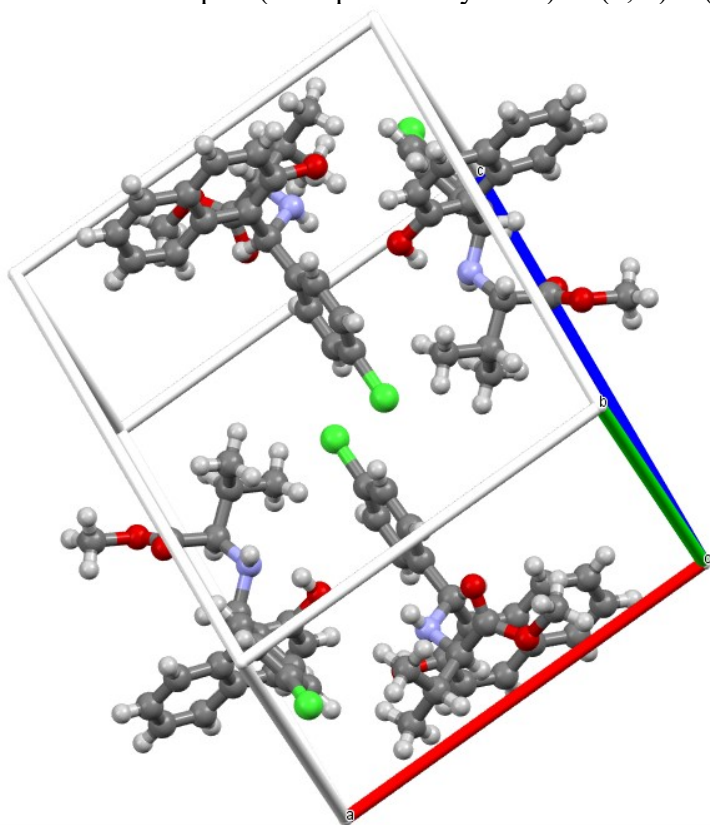
**Figure S7.** ORTEP plot (50% probability level) of (*S,S*) aminobenzyl-naphthol 7



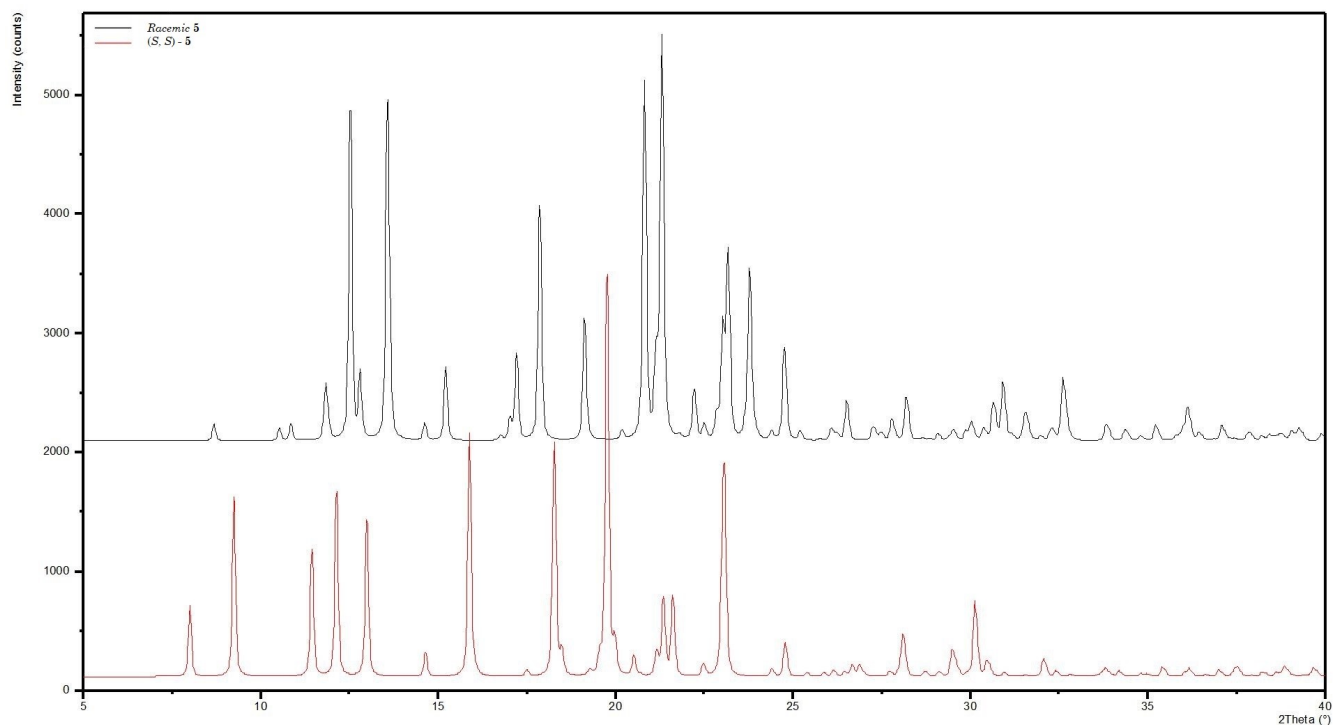
**Figure S8.** Packing plot of (*S,S*) aminobenzyl-naphthol 7



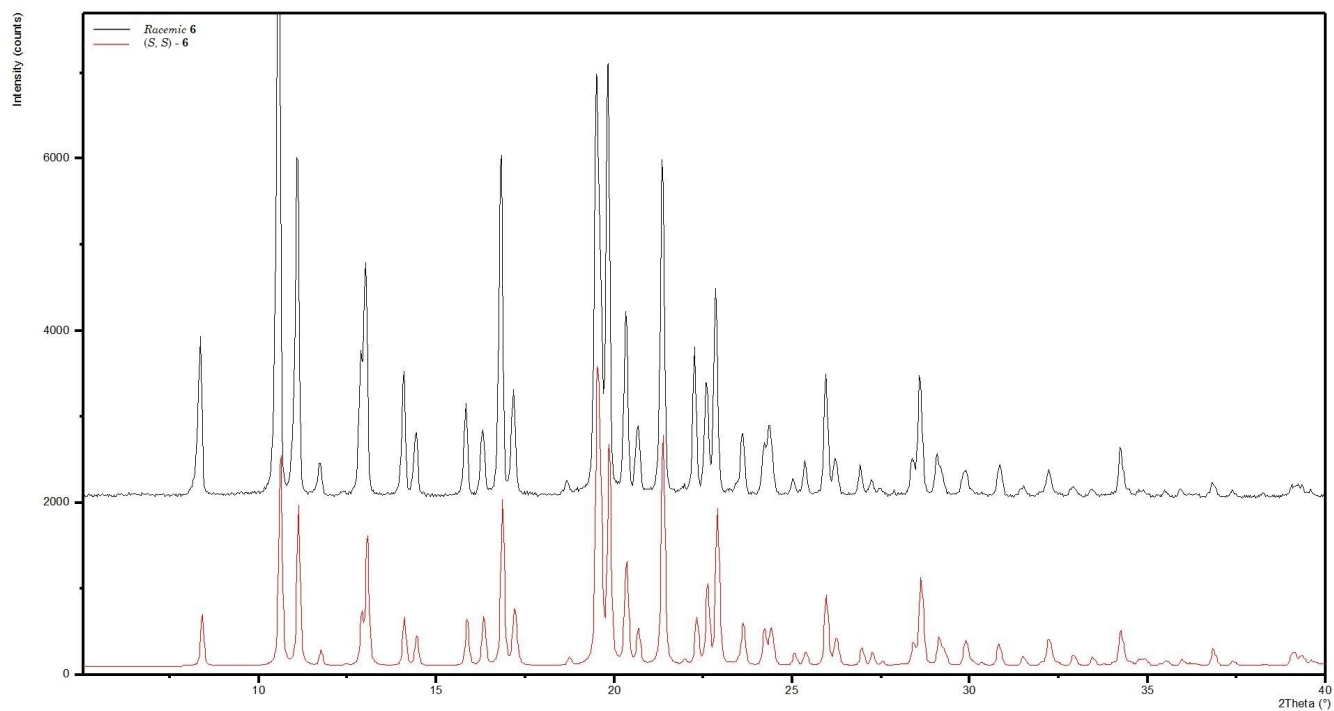
**Figure S9.** ORTEP plot (50% probability level) of (*S,S*) + (*R,R*)-aminobenzyl naphthol 7



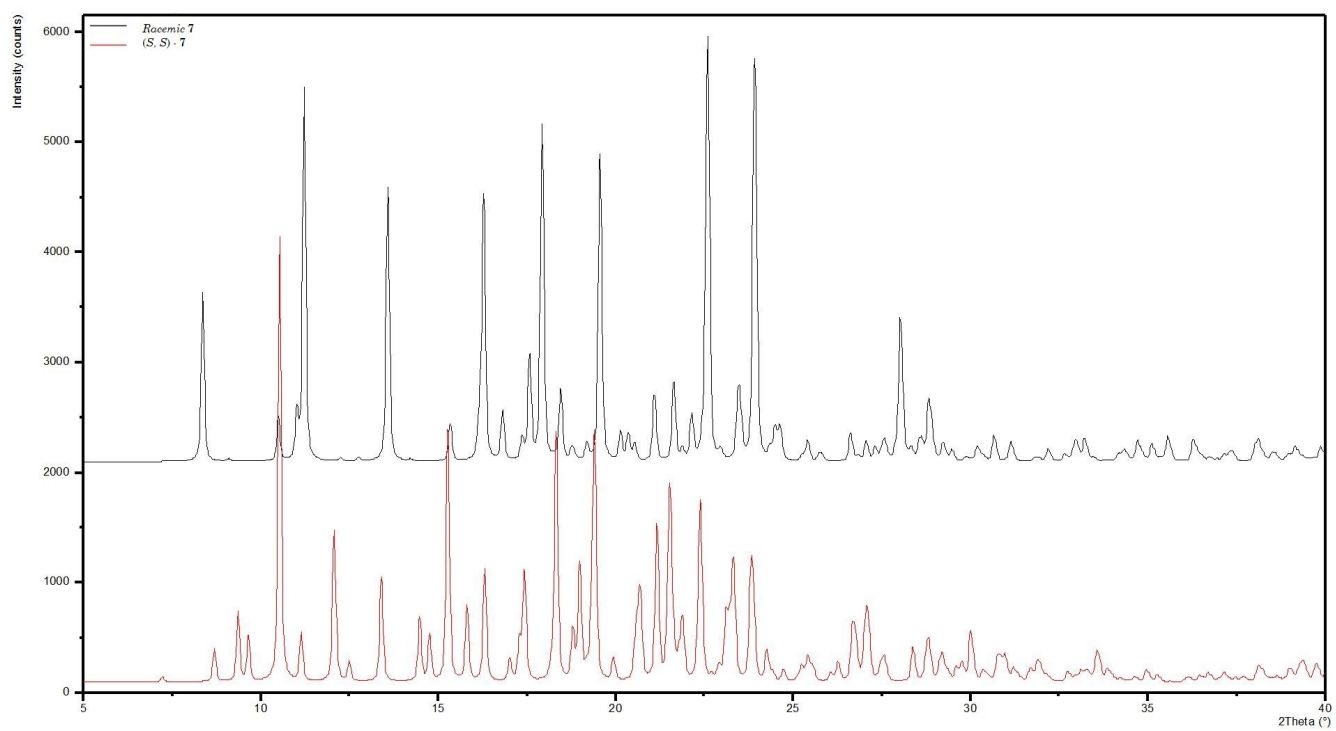
**Figure S10.** Packing plot of (*S,S*) + (*R,R*)-aminobenzyl naphthol 7



**Figure S11.** Comparison between the X-Ray Powder Diffraction (XRPD) of *racemic-5* and *(S,S)-5*.



**Figure S12.** Comparison between the X-Ray Powder Diffraction (XRPD) of *racemic-6* and *(S,S)-6*.



**Figure S13.** Comparison between the X-Ray Powder Diffraction (XRPD) of *racemic-7* and *(S,S)-7*.

N	Symop	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot					
				1,057	0,74	0,871	0,618						
2	-x, y+1/2, -z	7,49	B3LYP/6-31G(d,p)	-7,8	-8,2446	-3	-2,22	-44,1	-38,4111	21,2	13,1016	-35,7	-35,7741
2	-x, y+1/2, -z	8,67	B3LYP/6-31G(d,p)	-3,9	-4,1223	-1,9	-1,406	-31,1	-27,0881	13,8	8,5284	-24,1	-24,1
2	-x, y+1/2, -z	9,95	B3LYP/6-31G(d,p)	-6,1	-6,4477	-0,9	-0,666	-25	-21,775	16,2	10,0116	-19	-19
2	-x, y+1/2, -z	9,54	B3LYP/6-31G(d,p)	-6	-6,342	-0,6	-0,444	-21,6	-18,8136	15	9,27	-16,3	-16,3
2	x, y, z	9,71	B3LYP/6-31G(d,p)	-2,5	-2,6425	-1	-0,74	-15,2	-13,2392	6,4	3,9552	-12,7	-12,7
2	x, y, z	9,64	B3LYP/6-31G(d,p)	-1,2	-1,2684	-0,6	-0,444	-15,3	-13,3263	5,3	3,2754	-11,8	-11,8
2	x, y, z	11,14	B3LYP/6-31G(d,p)	-1,3	-1,3741	-0,4	-0,296	-5,2	-4,5292	0,8	0,4944	-5,7	-5,7
2	x, y, z	13,68	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-2,1	-1,8291	0	0	-1,8	-1,8
2	-x, y+1/2, -z	14,11	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,4	-0,4228	0	0	-0,6	-0,5226	0	0	-0,9	-0,9
2	x, y, z	14,78	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,4	-0,4228	0	0	-0,4	-0,3484	0	0	-0,8	-0,8
2	x, y, z	13,68	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,1057	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,5	-0,5
2	x, y, z	15,62	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,1057	0	0	-0,4	-0,3484	0	0	-0,4	-0,4
2	-x, y+1/2, -z	15,66	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	-0,3	-0,3
2	-x, y+1/2, -z	15,64	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,3	-0,3
2	-x, y+1/2, -z	16,24	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,3	-0,3
2	x, y, z	13,78	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,4	-0,3484	0	0	-0,3	-0,3
2	x, y, z	14,78	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,3	-0,3
2	-x, y+1/2, -z	16,72	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,2	-0,2114	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,3	-0,3
2	-x, y+1/2, -z	16,96	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,2	-0,2
1	-x, y+1/2, -z	17,11	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,05285	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,2	-0,1
2	x, y, z	16,86	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,1	-0,1
2	x, y, z	16,86	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	-0,1	-0,1
1	-x, y+1/2, -z	16,89	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,05285	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0	0
2	-x, y+1/2, -z	18,19	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	0	0
					-31,71	-6,216		-142,844		48,6366	-132,1334	-132,074	

Figure S14. Crystal Explorer 17 estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S)-5



N	Symp	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot	Verifica				
				1,057	0,74	0,871	0,618						
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	8,85	B3LYP/6-31G(d,p)	-8,5	-8,985	-1,7	-1,26	-42,4	-36,93	21,6	13,3488	-33,8	-33,8241
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	8	B3LYP/6-31G(d,p)	-5,9	-6,236	-2,1	-1,55	-38,1	-33,185	17,4	10,7532	-30,3	-30,2222
1	-x, -y, -z	8,68	B3LYP/6-31G(d,p)	-1,8	-0,951	-1,9	-0,7	-38,3	-16,68	19,1	5,9019	-24,8	-12,43205
2	x, y, z	9,12	B3LYP/6-31G(d,p)	-5	-5,285	-0,9	-0,67	-30,9	-26,914	18,5	11,433	-21,5	-21,4319
1	-x, -y, -z	8,89	B3LYP/6-31G(d,p)	-3,5	-1,85	-1,6	-0,59	-23,7	-10,321	12	3,708	-18,1	-9,0551
1	-x, -y, -z	8,62	B3LYP/6-31G(d,p)	-4,5	-2,378	-0,9	-0,33	-23,9	-10,408	13,8	4,2642	-17,6	-8,8555
1	-x, -y, -z	8,83	B3LYP/6-31G(d,p)	-3,8	-2,008	-2,5	-0,93	-16,1	-7,0116	7,9	2,4411	-15	-7,50375
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	9,94	B3LYP/6-31G(d,p)	-1,7	-1,797	-0,5	-0,37	-18,1	-15,765	6,9	4,2642	-13,6	-13,6678
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	11,3	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,8	-0,846	-2	-1,48	-4,2	-3,6582	0,7	0,4326	-5,6	-5,5512
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	13,53	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,106	0	0	-1,2	-1,0452	0	0	-1,2	-1,1509
1	-x, -y, -z	14,5	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-1,1	-0,4791	0	0	-1,1	-0,5319
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	12,91	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,106	0	0	-0,9	-0,7839	0	0	-0,9	-0,8896
2	x, y, z	13,05	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,6	-0,5226	0	0	-0,5	-0,5226
1	-x, -y, -z	15,6	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,5	-0,22705
1	-x, -y, -z	14,37	B3LYP/6-31G(d,p)	0,5	0,2643	-0,1	-0,04	-1	-0,4355	0	0	-0,4	-0,20825
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	14,97	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,4	-0,4355
1	-x, -y, -z	15,47	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-0,3	-0,1307	0	0	-0,3	-0,1835
2	x, y, z	17,69	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,2	-0,211	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	-0,3	-0,2985
1	-x, -y, -z	15,82	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,3	-0,13995
1	-x, -y, -z	15,7	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,2	-0,13995
2	x, y, z	15,92	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,2	-0,1742
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	15,89	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,2	-0,1742
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	16,96	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,2	-0,1742
1	-x, -y, -z	15,7	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,053	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,2	-0,13995
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	16,29	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,1	-0,1742
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	16,89	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,1	-0,1742
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	15,65	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	-0,1	-0,1556
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	15,64	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,1	-0,0685
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	16,52	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	-0,1	-0,0871
2	x, y, z	16,46	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,1	-0,0685
2	x, y, z	15,92	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	0	-0,0685
1	-x, -y, -z	18,25	B3LYP/6-31G(d,p)	0,3	0,1586	0	0	-0,1	-0,0436	0	0	0,2	0,115
					-30,23		-7,92		-167,01		56,547		-148,6155
											-148,615		

Figure S15. Crystal Explorer 17 estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S) + (R, R)-5

N	Symop	Electron Density	R	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot					
				1,057	0,74	0,871	0,618						
2	-x, y+1/2, -z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	6,81	-18	-19,026	-2,7	-1,998	-53,8	-46,8598	31,8	19,6524	-48,2	
2	x, y, z	B3LYP/6-31G(d)	9,05	-7,7	-8,1389	-1,9	-1,406	-31,7	-27,6107	15,1	9,3318	-27,9	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	9,48	-5,7	-6,0249	-1,4	-1,036	-24,2	-21,0782	14,1	8,7138	-19,4	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	10,02	-2	-2,114	-0,7	-0,518	-17,1	-14,8941	6,9	4,2642	-13,3	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	10,37	-3,3	-3,4881	-0,7	-0,518	-15,7	-13,6747	6,6	4,0788	-13,7	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	10,69	0,6	0,6342	-0,4	-0,296	-10,8	-9,4068	3,9	2,4102	-6,6	
2	-x, y+1/2, -z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	10,85	-0,8	-0,8456	-0,3	-0,222	-7,6	-6,6196	2,7	1,6686	-6	
2	-x, y+1/2, -z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	11,79	0,1	0,1057	-0,3	-0,222	-7	-6,097	3,8	2,3484	-3,9	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	12,93	0	0	0	0	-1	-0,871	0	0	-0,9	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	13,19	-0,1	-0,1057	0	0	-0,9	-0,7839	0	0	-0,9	
2	x, y, z	B3LYP/6-31G(d)	13,56	0,3	0,3171	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,1	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	14,63	-0,4	-0,4228	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,8	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	14,99	-0,2	-0,2114	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,4	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	15,59	0,1	0,1057	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	-0,2	
2	x, y, z	B3LYP/6-31G(d)	16,3	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,3	
2	x, y, z	B3LYP/6-31G(d)	16,3	0	0	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	-0,1	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	16,48	-0,2	-0,2114	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,4	
2	-x+1/2, -y, z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	16,58	0,2	0,2114	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	0	
2	x, y, z	B3LYP/6-31G(d)	16,67	0	0	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,2	
2	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	16,68	0	0	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	0	
1	-x, y+1/2, -z+1/2	B3LYP/6-31G(d)	18,19	-0,1	-0,05285	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,1	
1	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	18,2	-0,1	-0,05285	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,2	
1	x+1/2, -y+1/2, -z	B3LYP/6-31G(d)	18,38	0	0	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,1	-143,5
					-39,3204			-6,216		-150,2911		52,4682	-143,359

Figure S16. *Crystal Explorer 17* estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S)-6



N	Symop	R	Electron Density	E_ele		E_pol		E_dis		E_rep		E_tot	
				1,057		0,74		0,871		0,618			
1	-	7,07	B3LYP/6-31G(d,p)	-10,7	-5,655	-2,3	-0,851	-66,2	-28,8301	39,8	12,2982	-46,1	-23,05
2	x, y, z	14,65	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,4	-0,4
2	x, y, z	9,51	B3LYP/6-31G(d,p)	-5,4	-5,7078	-1,3	-0,962	-24,4	-21,2524	8,6	5,3148	-22,6	-22,6
1	-	11,4	B3LYP/6-31G(d,p)	-2,7	-1,427	-0,4	-0,148	-7,7	-3,35335	8,8	2,7192	-4,4	-2,2
1	-	12,5	B3LYP/6-31G(d,p)	0,8	0,4228	-0,1	-0,037	-1	-0,4355	0	0	-0,1	-0,05
2	-x, y+1/2, -z	14,04	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,6	-0,6342	-0,1	-0,074	-1,5	-1,3065	0	0	-1,9	-1,9
2	-x, y+1/2, -z	11,51	B3LYP/6-31G(d,p)	-2,6	-2,7482	-0,4	-0,296	-10	-8,71	6,5	4,017	-7,7	-7,7
1	-	14,06	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,9	-0,4757	-0,1	-0,037	-4	-1,742	2,2	0,6798	-3,2	-1,6
2	x, y, z	12,32	B3LYP/6-31G(d,p)	0,4	0,4228	0	0	-0,9	-0,7839	0	0	-0,4	-0,4
1	-	8,6	B3LYP/6-31G(d,p)	-3,5	-1,8498	-1	-0,37	-28,4	-12,3682	15,6	4,8204	-19,5	-9,75
1	-	12,74	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,2	-0,1057	0	0	-1,8	-0,7839	0	0	-1,8	-0,9
1	-	6,98	B3LYP/6-31G(d,p)	-16,2	-8,5617	-3,5	-1,295	-58	-25,259	33,7	10,4133	-49,4	-24,7
2	-x, y+1/2, -z	13,93	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,4	-0,4228	0	0	-0,5	-0,4355	0	0	-0,9	-0,9
2	-x, y+1/2, -z	10,08	B3LYP/6-31G(d,p)	-1,2	-1,2684	-0,2	-0,148	-8,9	-7,7519	0,8	0,4944	-8,7	-8,7
1	-	7,77	B3LYP/6-31G(d,p)	-11	-5,8135	-2,4	-0,888	-50,5	-21,99275	28,3	8,7447	-39,9	-19,95
1	-	12,28	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,9	-0,4757	-0,5	-0,185	-4,1	-1,78555	0,6	0,1854	-4,5	-2,25
1	-	11	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,7	-0,37	-0,3	-0,111	-14,3	-6,22765	5,7	1,7613	-9,9	-4,95
1	-	11,05	B3LYP/6-31G(d,p)	-3,4	-1,7969	-0,8	-0,296	-9,4	-4,0937	4,1	1,2669	-10	-5
0	x, y, z	14,65	B3LYP/6-31G(d,p)	0,3	0	0	0	-0,4	-0	0	0	0	0
0	x, y, z	9,51	B3LYP/6-31G(d,p)	-6,9	-0	-2,5	-0	-13,1	-0	9,5	0	-14,6	-0
1	-	16,19	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,2	-0,1057	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,6	-0,3
0	-x, y+1/2, -z	11,36	B3LYP/6-31G(d,p)	-4,3	-0	-0,6	-0	-18,4	-0	11,7	0	-13,7	-0
0	x, y, z	12,32	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,3	-0	-0,2	-0	-8	-0	4,7	0	-4,5	-0
0	-x, y+1/2, -z	13,95	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0	0	0	-0,8	-0	0	0	-0,8	-0
0	-x, y+1/2, -z	10,24	B3LYP/6-31G(d,p)	-2	-0	-0,6	-0	-18	-0	6,7	0	-14	-0
1	-	13,57	B3LYP/6-31G(d,p)	0,4	0,2114	0	0	-0,7	-0,30485	0	0	-0,2	-0,1
1	-	19,81	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,3	-0,1586	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,4	-0,2
1	-	16,39	B3LYP/6-31G(d,p)	0	0	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,1	-0,05
2	x, y, z	16,42	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,1057	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	-0,2	-0,2
1	-	18,5	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,0529	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,2	-0,1
1	-	17,01	B3LYP/6-31G(d,p)	0,2	0,1057	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	0,1	0,05
1	-	16,16	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,2	-0,1057	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,4	-0,2
1	-x, y+1/2, -z	17,69	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,1	-0,0529	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,2	-0,1
1	-	15,64	B3LYP/6-31G(d,p)	0,3	0,15855	0	0	-0,3	-0,13065	0	0	0	0
2	-x, y+1/2, -z	15,87	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,1057	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	-0,2	-0,2
1	-	15,08	B3LYP/6-31G(d,p)	-0,5	-0,2643	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,9	-0,45
1	-	16,14	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,05285	0	0	-0,3	-0,13065	0	0	-0,2	-0,1
1	-	19,4	B3LYP/6-31G(d,p)	0,1	0,05285	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0,1	0,05
				-36,625		-5,698		-149,2023		52,7154		-138,81	-138,9

Figure S17. Crystal Explorer 17 estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S)-7 (left molecule)



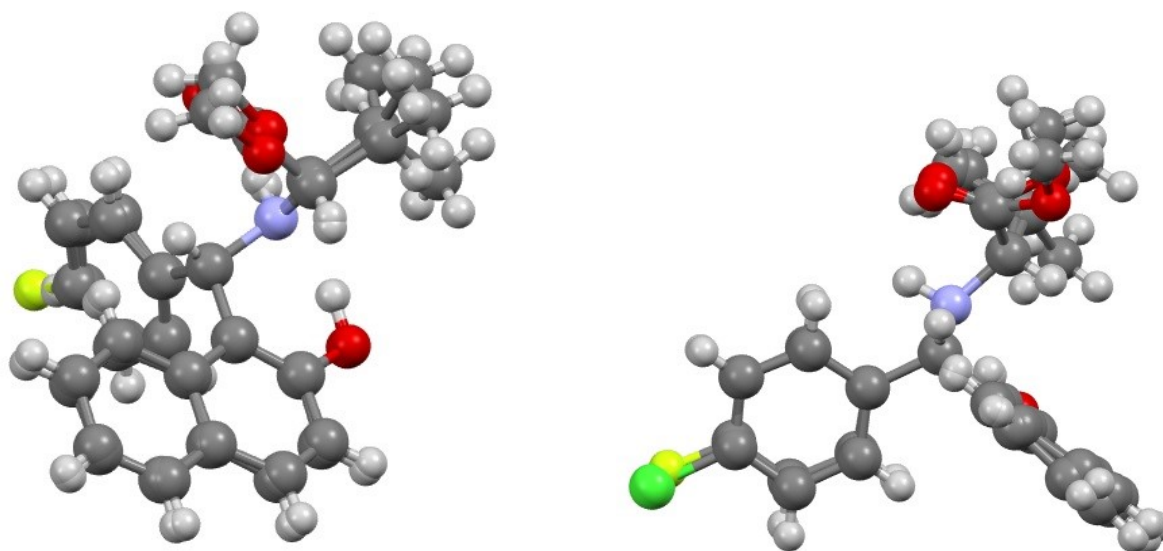
N	Symop	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot					
				1,057	0,74	0,871	0,618						
1	-	6,98	B3LYP/6-31G(d)	-16,2	-8,562	-3,5	-1,295	-58	-25,259	33,7	10,4133	-49,4	-24,7
1	-	7,07	B3LYP/6-31G(d)	-10,7	-5,655	-2,3	-0,851	-66,2	-28,8301	39,8	12,2982	-46,1	-23,05
1	-	7,77	B3LYP/6-31G(d)	-11	-5,814	-2,4	-0,888	-50,5	-21,9928	28,3	8,7447	-39,9	-19,95
0	x, y, z	9,51	B3LYP/6-31G(d)	-5,4	-0	-1,3	-0	-24,4	-0	8,6	0	-22,6	-0
1	-	8,6	B3LYP/6-31G(d)	-3,5	-1,85	-1	-0,37	-28,4	-12,3682	15,6	4,8204	-19,5	-9,75
2	x, y, z	9,51	B3LYP/6-31G(d)	-6,9	-7,293	-2,5	-1,85	-13,1	-11,4101	9,5	5,871	-14,6	-14,6
2	-x, y+1/2, -z	10,24	B3LYP/6-31G(d)	-2	-2,114	-0,6	-0,444	-18	-15,678	6,7	4,1406	-14	-14
2	-x, y+1/2, -z	11,36	B3LYP/6-31G(d)	-4,3	-4,545	-0,6	-0,444	-18,4	-16,0264	11,7	7,2306	-13,7	-13,7
1	-	11,05	B3LYP/6-31G(d)	-3,4	-1,797	-0,8	-0,296	-9,4	-4,0937	4,1	1,2669	-10	-5
1	-	11	B3LYP/6-31G(d)	-0,7	-0,37	-0,3	-0,111	-14,3	-6,22765	5,7	1,7613	-9,9	-4,95
0	-x, y+1/2, -z	10,08	B3LYP/6-31G(d)	-1,2	-0	-0,2	-0	-8,9	-0	0,8	0	-8,7	-0
0	-x, y+1/2, -z	11,51	B3LYP/6-31G(d)	-2,6	-0	-0,4	-0	-10	-0	6,5	0	-7,7	-0
1	-	12,28	B3LYP/6-31G(d)	-0,9	-0,476	-0,5	-0,185	-4,1	-1,78555	0,6	0,1854	-4,5	-2,25
2	x, y, z	12,32	B3LYP/6-31G(d)	-0,3	-0,317	-0,2	-0,148	-8	-6,968	4,7	2,9046	-4,5	-4,5
1	-	11,4	B3LYP/6-31G(d)	-2,7	-1,427	-0,4	-0,148	-7,7	-3,35335	8,8	2,7192	-4,4	-2,2
1	-	14,06	B3LYP/6-31G(d)	-0,9	-0,476	-0,1	-0,037	-4	-1,742	2,2	0,6798	-3,2	-1,6
0	-x, y+1/2, -z	14,04	B3LYP/6-31G(d)	-0,6	-0	-0,1	-0	-1,5	-0	0	0	-1,9	-0
1	-	12,74	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,106	0	0	-1,8	-0,7839	0	0	-1,8	-0,9
2	-x, y+1/2, -z	13,83	B3LYP/6-31G(d)	-0,5	-0,529	0	0	-0,6	-0,5226	0	0	-1	-1
0	-x, y+1/2, -z	13,93	B3LYP/6-31G(d)	-0,4	-0	0	0	-0,5	-0	0	0	-0,9	-0
1	-	15,08	B3LYP/6-31G(d)	-0,5	-0,264	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,9	-0,45
2	-x, y+1/2, -z	13,95	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0,106	0	0	-0,8	-0,6968	0	0	-0,8	-0,8
2	x, y, z	16,42	B3LYP/6-31G(d)	-0,5	-0,529	0	0	-0,3	-0,2613	0	0	-0,7	-0,7
1	-	16,19	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,106	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,6	-0,3
0	x, y, z	14,65	B3LYP/6-31G(d)	0	0	0	0	-0,5	-0	0	0	-0,4	-0
0	x, y, z	12,32	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0	0	0	-0,9	-0	0	0	-0,4	-0
0	-	19,81	B3LYP/6-31G(d)	-0,3	-0	0	0	-0,1	-0	0	0	-0,4	-0
0	-	16,16	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0	0	0	-0,2	-0	0	0	-0,4	-0
1	-	16,91	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,106	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,4	-0,2
1	-	17,41	B3LYP/6-31G(d)	-0,3	-0,159	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,4	-0,2
1	-	13,57	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0,2114	0	0	-0,7	-0,30485	0	0	-0,2	-0,1
0	x, y, z	16,42	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0	0	0	-0,1	-0	0	0	-0,2	-0
0	-	18,5	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0	0	0	-0,1	-0	0	0	-0,2	-0
0	-x, y+1/2, -z	17,69	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0	0	0	-0,1	-0	0	0	-0,2	-0
0	-x, y+1/2, -z	15,87	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0	0	0	-0,3	-0	0	0	-0,2	-0
1	-	16,14	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0,0529	0	0	-0,3	-0,13065	0	0	-0,2	-0,1
1	-x, y+1/2, -z	17,85	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0,053	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,2	-0,1
1	-x, y+1/2, -z	16,17	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0,053	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,2	-0,1
1	-	12,5	B3LYP/6-31G(d)	0,8	0,4228	-0,1	-0,037	-1	-0,4355	0	0	-0,1	-0,05
0	-	16,39	B3LYP/6-31G(d)	0	0	0	0	-0,1	-0	0	0	-0,1	-0
2	x, y, z	14,65	B3LYP/6-31G(d)	0,3	0,3171	0	0	-0,4	-0,3484	0	0	0	0
1	-	15,64	B3LYP/6-31G(d)	0,3	0,1586	0	0	-0,3	-0,13065	0	0	0	0
1	-	17,01	B3LYP/6-31G(d)	0,2	0,1057	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	0,1	0,05
0	-	19,4	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0	0	0	-0,1	-0	0	0	0,1	0
1	-x, y+1/2, -z	18,27	B3LYP/6-31G(d)	0,2	0,1057	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0,1	0,05
					-41,33		-7,104		-160,133		63,036	-145,5301	-145,15

Figure S18. Crystal Explorer 17 estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S)-7 (right molecule)

N	Symop	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot					
				1,057	0,74	0,871	0,618						
1	-x, -y, -z	7,51	B3LYP/6-31G(d)	-21,6	-11,4156	-4	-1,48	-90	-39,195	52,6	16,2534	-71,6	-35,8
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	7,62	B3LYP/6-31G(d)	-11,4	-12,0498	-3,1	-2,294	-42	-36,582	22,7	14,0286	-36,9	-36,9
1	-x, -y, -z	8,85	B3LYP/6-31G(d)	-2,3	-1,21555	-1,1	-0,407	-36,2	-15,7651	20,6	6,3654	-22,1	-11,05
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	8,86	B3LYP/6-31G(d)	-5,8	-6,1306	-0,8	-0,592	-25,7	-22,3847	13,9	8,5902	-20,6	-20,6
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	10,61	B3LYP/6-31G(d)	-5	-5,285	-1,1	-0,814	-16	-13,936	8,7	5,3766	-14,6	-14,6
2	x, y, z	9,89	B3LYP/6-31G(d)	-4,4	-4,6508	-1,1	-0,814	-15,8	-13,7618	9	5,562	-13,7	-13,7
1	-x, -y, -z	11,41	B3LYP/6-31G(d)	-2,5	-1,32125	-0,8	-0,296	-12,8	-5,5744	9,6	2,9664	-8,5	-4,25
1	-x, -y, -z	12,34	B3LYP/6-31G(d)	-4	-2,114	-0,4	-0,148	-7,5	-3,26625	5,2	1,6068	-7,8	-3,9
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	11,43	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0,1057	-0,3	-0,222	-6,5	-5,6615	0,9	0,5562	-5,4	-5,4
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	11,69	B3LYP/6-31G(d)	0	0	-0,1	-0,074	-3,3	-2,8743	0,2	0,1236	-2,8	-2,8
1	-x, -y, -z	13,35	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,1057	0	0	-1,2	-0,5226	0	0	-1,3	-0,65
2	x, y, z	16,12	B3LYP/6-31G(d)	-0,7	-0,7399	0	0	-0,4	-0,3484	0	0	-1,1	-1,1
1	-x, -y, -z	15,01	B3LYP/6-31G(d)	-0,6	-0,3171	0	0	-0,5	-0,21775	0	0	-1	-0,5
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	12,44	B3LYP/6-31G(d)	0,3	0,3171	0	0	-1,3	-1,1323	0	0	-0,9	-0,9
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	16,56	B3LYP/6-31G(d)	-0,3	-0,3171	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,5	-0,5
1	-x, -y, -z	14,15	B3LYP/6-31G(d)	-0,1	-0,05285	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,5	-0,25
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	15,93	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,2114	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	-0,5	-0,5
1	-x, -y, -z	17,3	B3LYP/6-31G(d)	-0,2	-0,1057	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,4	-0,2
2	x, y, z	13,09	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0,4228	0	0	-0,7	-0,6097	0	0	-0,2	-0,2
1	-x, -y, -z	15,17	B3LYP/6-31G(d)	0,3	0,15855	0	0	-0,4	-0,1742	0	0	-0,1	-0,05
1	-x, -y, -z	18,76	B3LYP/6-31G(d)	0	0	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	-0,1	-0,05
1	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	17,72	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0,05285	0	0	-0,2	-0,0871	0	0	-0,1	-0,05
2	x, y, z	16,41	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0,1057	0	0	-0,1	-0,0871	0	0	0	0
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	16,86	B3LYP/6-31G(d)	0,1	0,1057	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	0	0
1	-x, -y, -z	17,43	B3LYP/6-31G(d)	0,2	0,1057	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0,1	0,05
2	x, y, z	16,41	B3LYP/6-31G(d)	0,3	0,3171	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	0,1	0,1
1	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	17,39	B3LYP/6-31G(d)	0,2	0,1057	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0,1	0,05
1	-x, -y, -z	14,53	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0,2114	0	0	-0,3	-0,13065	0	0	0,2	0,1
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	17,27	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0,4228	0	0	-0,2	-0,1742	0	0	0,3	0,3
1	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	17,93	B3LYP/6-31G(d)	0,4	0,2114	0	0	-0,1	-0,04355	0	0	0,3	0,15
					-43,6013		-7,141		-163,61735		61,4292	-152,9304	-153,2

Figure S19. Crystal Explorer 17 estimate of lattice energies (kJ/mol) for (S, S) + (R, R)-7





**Figure S20.** Molecular overlay of crystal structures of (*S,S*)-**5** with (*S,S*)-**6** (left). Molecular overlay of crystal structures of (*S,S*)-**6** with (*S,S*)-**7** (right).