Supporting Information

Reaction and Characterization of Thioamide Dianions Derived from *N*-Benzyl Thioamides

Toshiaki Murai,* Hideo Aso, Yoshiharu Tatematsu, Yoshiaki Itoh, Hisayuki Niwa and Shinzi Kato

Department of Chemistry, Faculty of Engineering, Gifu University,

Yanagido Gifu 501-1193 Japan

¹³C NMR Data of New Compounds

	Page		Page
¹³ C NMR Data of 3c	S2	¹³ C NMR Data of 3d	S3
¹³ C NMR Data of 19	S4	¹³ C NMR Data of 20	S5
¹³ C NMR Data of 22	S6	¹³ C NMR Data of 23	S7
¹³ C NMR Data of 24	S8	¹³ C NMR Data of 29	S9
¹³ C NMR Data of 30	S10	¹³ C NMR Data of 31	S11
¹³ C NMR Data of 32	S12	¹³ C NMR Data of 34	S13
¹³ C NMR Data of 36	S14	¹³ C NMR Data of 37	S15

19-APR-2000 10:07:06.03

EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMPD : 65536
TIMES : 1000
SCANS : 168
DUMMY : 2
FREQ : 31948.88 Hz
FILT : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRPWP : 46.0 usec
IRATN : 511
IRNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 23120.72 Hz
XS : -458.49 Hz
REFVL : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 23
LKPHS : 71.72 deg
LKSIG : 684
CTEMP : 23.6 c
CSPED : 12 Hz
FIELD : -15445

20-JUN-2000 18:25:28.02

OFIL : ALPHA
SFIL : GDAT

COMNT : HA 235 after column 4-6 13C
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 55536
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 504
DUMMY : 2
ACQTM : 2.0513 sec
PD : 1.5817 sec
RGAIN : 23
PWI : 4.10 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRRPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRBNS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 25.2 c
CSPED : 12 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.49 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 23120.72 Hz
XS : -457.52 Hz
operator

24-JAN-2000 09:40:30.53

OFIL : ALPHA
SFIL : GDAT

COMNT : HA 137 after HPLC 13C

EXMOD : SINGL

IRMOD : BCM

POINT : 55536

FREQ : 31948.88 Hz

SCANS : 123

DUMMY : 2

ACQTM : 2.0513 sec

PD : 1.5817 sec

RGAIN : 23

PW1 : 4.10 usec

OBNUC : 13C

OBFRQ : 100.40 MHz

OBSET : 135500.00 Hz

IRNUC : 1H

IRFRQ : 399.65 MHz

IRSET : 134500.00 Hz

IRATN : 511

IRPW : 46.0 usec

IRBP1 : 26

IRBP2 : 6

IRBNS : 0

ADBIT : 16

CTEMP : 21.0 C

CSPED : 10 Hz

SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.49 Hz

BF : 2.00 Hz

T1 : 0.00 %

T2 : 0.00 %

T3 : 90.00 %

T4 : 100.00 %

REFVL : 77.05 ppm

XE : 23120.72 Hz

XS : -447.28 Hz

operator

26-DEC-2001 15:08:22.62

EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 5.00 usec
 POINT : 16384
 SAMP0 : 16384
 TIMES : 1000
 SCANS : 50
 DUMMY : 2
 FREQ0 : 27100.27 Hz
 FILTR : 13550 Hz
 ACQTM : 0.6046 sec
 DEADT : 19.64 usec
 DELAY : 14.76 usec
 PD : 1.4760 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 50.0 usec
 IRATN : 511
 IRANS : 0
 IRBP1 : 30
 IRBP2 : 5
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23118.93 Hz
 XS : -459.00 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 OFILE : ALPHA
 MENUF : A13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 220
 LGAIN : 23
 LKPHS : 42.19 deg
 LKSIG : 1763
 CTEMP : 21.6 C
 CSPED : 12 Hz
 FIELD : -2588

5-FEB-2002 22:20:55.98

EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 103
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRANS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 24125.95 Hz
 XS : -946.97 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 220
 LGAIN : 21
 LKPHS : 42.19 deg
 LKSIG : 686
 CTEMP : 21.4 C
 CSPED : 13 Hz
 FIELD : -2293

16-DEC-2001 20:33:03.62

DFILE : ALPHA
SFILE : GOAT

COMNT : YTO88 13C Rf=
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 65536
FREQU : 31948.88 Hz
SCANS : 113
DUMMY : 2
ACQTM : 2.0513 sec
PD : 1.5817 sec
RGAIN : 23

PW1 : 4.10 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRAPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRBNS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 21.8 C
CSPED : 12 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.49 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 24125.95 Hz
XS : -955.26 Hz

operator

16-DEC-2001 20:10:20.66

OFIL : ALPHA
SFIL : GDAI

COMNT : YT087 13C
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 65536
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 115
DUMMY : 2
ACQTM : 2.0513 sec
PD : 1.5817 sec
RGAIN : 23
PW1 : 4.10 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRAPW : 46.0 usec
IRBP1 : 25
IRBP2 : 6
IRBNS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 22.0 C
CSPED : 14 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.49 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.00 ppm
XE : 24125.46 Hz
XS : -955.01 Hz
operator

13-DEC-2000 19:45:34.08

EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMP0 : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 142
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEADT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23120.72 Hz
 XS : -455.08 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 29
 LKPHS : 45.00 deg
 LKSIG : 2248
 CTMP : 21.3 C
 CSPED : 13 Hz
 FIELD : -15378

21-SEP-1999 09:20:54.93
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 142
 DUMMY : 2
 FREQ : 31948.88 Hz
 FILT : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0613 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRANS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23120.72 Hz
 XS : -441.43 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : THSAT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 23
 LKPHS : 11.25 deg
 LKSIG : 30
 CTEMP : 23.4 C
 CSPED : 19 Hz
 FIELD : -15419

17-FEB-2000 21:11:56.74

EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 100
 DUMMY : 2
 FREQ : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEADT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 AD8IT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23120.72 Hz
 XS : -449.23 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFLE : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 23
 LKPHS : 71.72 deg
 LKSIG : 821
 CTEMP : 21.3 C
 CSPED : 13 Hz
 FIELD : -15448

17-MAY-2000 14:12:09.70

EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 93
 DUMMY : 2
 FREQ0 : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEATH : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 AOBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 0.10 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23120.72 Hz
 XS : -446.79 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFILE : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 24
 LKPHS : 71.72 deg
 LKSIG : 710
 CTMP : 23.0 c
 CSPE0 : 5 Hz
 FIELD : -15440

5-JUL-2000 20:54:46.83

EXMOO : SINGL
 IRMOO : BCM
 DBNUC : 13C
 DBFRQ : 100.40 MHz
 DBSET : 135500.00 Hz
 PH1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 285
 DUMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRPMP : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23120.23 Hz
 X5 : -387.56 Hz
 REFVL : 67.40 ppm
 DFILE : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHWFL : TH5AT
 LKSET : 61360.1 Hz
 LKLEV : 140
 LGAIN : 29
 LKPHS : 46.41 deg
 LKSIG : 687
 CTEMP : 26.3 c
 CSPED : 14 Hz
 FIELD : -15422

13-APR-2000 20:11:23.98

EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PWI : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMPQ : 65536
TIMES : 1000
SCANS : 154
DUMMY : 2
FREQ : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRPNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 23120.23 Hz
XS : -390.00 Hz
REFVL : 67.40 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : THSAT
LKSET : 61360.1 Hz
LKLEV : 140
LGAIN : 31
LKPHS : 71.72 deg
LKSIG : 594
CTEMP : 23.6 c
CSPED : 13 Hz
FIELD : -15408