

Supplementary Material for: Valence-, Dipole- and Quadropole-Bound Electronically Excited States of Closed-Shell Anions Formed by Deprotonation of Cyano- and Ethynyl-Disubstituted Polycyclic Aromatic Hydrocarbons

Marie E. Strauss¹, Taylor J. Santaloci², and Ryan C. Fortenberry^{2,*}

¹ Department of Chemistry, Physics, and Engineering, Biola University, La Mirada, CA, United States

² Department of Chemistry & Biochemistry, University of Mississippi, University, Mississippi 38677-1848 U.S.A.; r410@olemiss.edu

* Correspondence: r410@olemiss.edu; Tel.: +1-662-915-1687

Version January 22, 2022 submitted to Chemistry

Cyanoethynyl- and Diethynylnaphthalene Data

Table S1. Relative energies, dipole moment, and quadropole moment of Cyanonethynaphthalene

1-Cyanoethynlnaph.	Anion Rel. E. (eV)	Radical Rel. E. (eV)	Dipole (D)	Quad ¹ (D-Å)
0	1.175	0.979	4.37	13.14
1	1.084	0.888	3.70	16.47
2	1.392	1.196	5.40	14.51
3	1.428	1.232	4.92	10.88
4	1.374	1.178	4.05	11.90
5	1.261	1.065	3.71	16.10
6	0.200	0.000	9.98	10.88
7	0.978	3.072	5.16	10.20
8	0.968	0.772	3.76	11.75
9	1.294	3.011	5.42	11.22
10	1.317	1.121	4.85	8.77
11	1.307	1.111	3.97	12.30
12	1.170	0.974	3.74	14.00
13	0.190	3.521	7.97	17.84
14	0.986	0.790	5.13	12.09
15	1.076	3.029	4.30	10.11
16	1.322	3.003	5.27	11.18
17	1.396	2.973	4.82	8.40
18	1.395	2.968	4.01	11.51
19	1.359	1.162	3.68	13.92
20	0.000	3.449	3.40	24.93
21	1.392	3.252	5.39	8.92
22	1.416	3.235	4.65	6.18
23	1.312	3.214	3.98	8.27
24	1.551	3.234	5.02	9.48

25	1.495	3.216	4.12	9.64
26	1.368	1.172	3.92	11.21
27	0.695	3.731	10.70	12.49
28	1.022	0.826	5.28	11.69
29	2.278	0.904	5.66	18.58
30	1.024	0.828	3.88	13.75
31	1.199	1.003	5.60	12.74
32	1.249	1.053	4.41	13.16
33	1.124	2.973	3.92	13.71
34	0.246	3.530	9.68	10.18
35	0.988	0.792	4.95	10.15
36	2.260	0.902	5.26	17.94
38	1.225	1.029	5.27	13.29
39	1.263	1.067	4.82	10.98
40	1.072	0.874	3.57	12.11
41	0.224	0.025	6.58	30.76
42	1.064	3.018	4.84	9.44
43	1.192	2.986	4.11	9.10
44	1.200	2.986	3.46	13.77
45	1.210	3.008	5.17	13.21
46	1.265	2.975	4.73	10.27
47	1.231	3.004	3.82	11.47
48	0.152	3.412	2.62	32.89

2-Cyanoethynyl-naph.

0	1.029	0.128	5.83	14.10
1	1.006	0.089	4.94	12.16
2	1.313	0.085	5.37	13.09
3	1.313	0.064	4.45	15.86
4	4.677	0.064	8.02	8.33
5	1.171	0.075	4.80	11.85
6	0.062	0.586	9.80	8.64
7	0.878	0.113	5.77	14.30
8	0.984	0.110	5.07	12.63
9	1.103	0.073	5.66	12.13
10	1.193	0.069	4.67	13.28
11	1.187	0.063	4.21	12.46
12	1.113	0.071	4.90	14.61
13	0.204	0.644	11.14	12.01
14	0.786	0.093	5.73	16.08
15	0.924	0.132	5.90	15.01
16	1.068	0.039	5.54	13.72
17	1.203	0.028	4.55	14.36
18	1.205	0.018	4.13	18.48
19	1.244	0.047	4.78	17.83
20	0.041	0.521	7.20	12.74
21	0.997	0.077	5.83	13.03
22	1.016	0.072	5.90	14.02
23	0.981	0.019	4.92	12.11
24	1.073	0.047	4.70	15.13
25	1.056	0.009	4.14	14.54

26	0.974	0.019	4.75	12.59
27	0.057	0.479	9.62	7.09
28	0.793	0.058	5.39	16.62
29	0.930	0.060	5.53	15.43
30	0.936	0.011	4.52	13.59
31	0.925	0.048	5.22	12.71
32	1.043	0.037	3.76	15.97
33	0.979	0.003	4.40	13.71
34	0.077	0.542	5.83	33.79
35	0.796	0.050	5.24	11.66
36	0.945	0.055	5.42	13.96
38	0.959	0.000	5.13	10.77
39	1.061	0.036	4.07	12.10
40	0.937	0.039	4.23	13.21
41	0.000	0.536	3.09	37.43
42	0.834	0.068	5.39	12.85
43	1.035	0.066	5.69	15.57
44	1.130	0.032	4.79	13.89
45	0.946	0.021	5.29	11.39
46	1.069	0.015	4.34	13.91
47	1.042	0.036	3.89	14.90
48	0.047	0.463	5.94	31.52

¹The largest quadrupole component is reported.

Table S2. Electronic excited states and electron binding energies of the cyanoethynynaphthalene derivatives

1-Cyanoethynynaph.	Excited States				eBE (eV)
	1 ¹ A''	2 ¹ A''	2 ¹ A'	3 ¹ A'	
0	2.561	2.563	2.546	2.560	2.560
1	2.641	2.643	2.630	2.641	2.638
2	2.333	2.336	2.307	2.333	2.332
3	2.288	2.260	2.260	2.288	2.287
4	2.351	2.353	2.332	2.350	2.349
5	2.444	2.446	2.429	2.444	2.441
6	3.448	3.743	3.778	3.780	3.777
7	2.814	2.816	2.805	2.814	2.814
8	2.809	2.811	2.801	2.808	2.807
9	2.382	2.384	2.359	2.382	2.381
10	2.388	2.390	2.364	2.387	2.387
11	2.368	2.370	2.355	2.367	2.366
12	2.527	2.529	2.510	2.527	2.525
13	3.592	3.695	3.727	3.729	3.726
14	2.755	2.757	2.749	2.755	2.754
15	2.644	2.647	2.640	2.644	2.643
16	2.356	2.358	2.346	2.355	2.354
17	2.288	2.279	2.279	2.288	2.287
18	2.273	2.269	2.269	2.273	2.272
19	2.288	2.282	2.282	2.288	2.287
20	3.411	3.770	3.787	3.790	3.786

21	2.570	2.572	2.557	2.570	2.569
22	2.492	2.495	2.471	2.492	2.487
23	2.651	2.653	2.630	2.651	2.645
24	2.403	2.405	2.386	2.402	2.402
25	2.399	2.401	2.382	2.399	2.397
26	2.587	2.590	2.565	2.587	2.581
27	3.329	3.403	3.405	3.407	3.405
28	2.719	2.721	2.683	2.718	2.718
29	1.820	3.389	2.692	3.481	3.480
30	2.682	2.684	2.662	2.682	2.680
31	2.523	2.525	2.502	2.523	2.522
32	2.449	2.451	2.426	2.448	2.447
33	2.508	2.511	2.496	2.508	2.504
34	3.480	3.485	3.497	3.625	3.624
35	2.760	2.762	2.738	2.760	2.759
36	1.830	3.418	2.715	3.488	3.487
38	2.400	2.402	2.392	2.399	2.399
39	2.443	2.445	2.432	2.442	2.442
40	2.642	2.644	2.638	2.642	2.641
41	3.583	3.655	3.655	3.657	3.654
42	2.684	2.686	2.676	2.683	2.682
43	2.463	2.465	2.461	2.462	2.462
44	2.491	2.493	2.485	2.490	2.488
45	2.497	2.499	2.494	2.497	2.496
46	2.390	2.392	2.385	2.389	2.389
47	2.487	2.489	2.484	2.486	2.485
48	3.545	3.619	3.647	3.649	3.647

2-Cyanoethynyl-naph.

0	2.635	2.637	2.627	2.634	2.634
1	2.629	2.631	2.621	2.628	2.628
2	2.289	2.272	2.272	2.288	2.287
3	2.294	2.278	2.278	2.294	2.293
4	2.286	2.286	2.272	2.272	2.286
5	2.437	2.439	2.418	2.436	2.436
6	3.572	3.633	3.761	3.762	3.760
7	2.773	2.775	2.757	2.773	2.772
8	2.653	2.656	2.647	2.653	2.652
9	2.527	2.529	2.491	2.526	2.526
10	2.431	2.433	2.390	2.430	2.429
11	2.445	2.447	2.409	2.444	2.443
12	2.507	2.509	2.461	2.506	2.504
13	3.565	3.664	3.668	3.670	3.667
14	2.914	2.916	2.905	2.914	2.914
15	2.777	2.779	2.771	2.776	2.776
16	2.538	2.540	2.519	2.537	2.537
17	2.379	2.381	2.363	2.378	2.378
18	2.401	2.403	2.386	2.400	2.400
19	2.308	2.288	2.288	2.307	2.305
20	3.597	3.660	3.730	3.732	3.730
21	2.628	2.630	2.619	2.627	2.627

22	2.612	2.614	2.605	2.612	2.611
23	2.556	2.559	2.550	2.556	2.555
24	2.533	2.535	2.517	2.532	2.532
25	2.507	2.509	2.489	2.507	2.504
26	2.612	2.614	2.583	2.612	2.611
27	3.479	3.540	3.178	3.178	3.652
28	2.852	2.855	2.843	2.852	2.852
29	2.704	2.706	2.696	2.703	2.703
30	2.587	2.589	2.584	2.587	2.586
31	2.698	2.700	2.678	2.697	2.697
32	2.574	2.576	2.559	2.574	2.566
33	2.528	2.530	2.516	2.527	2.526
34	3.590	3.696	3.600	3.697	3.696
35	2.830	2.832	2.829	2.830	2.829
36	2.673	2.675	2.672	2.672	2.671
38	2.570	2.572	2.557	2.569	2.568
39	2.521	2.523	2.510	2.521	2.519
40	2.653	2.655	2.644	2.653	2.652
41	3.509	3.677	3.737	3.739	3.735
42	2.811	2.813	2.806	2.810	2.810
43	2.590	2.592	2.588	2.589	2.588
44	2.386	2.388	2.383	2.386	2.385
45	2.672	2.674	2.650	2.672	2.671
46	2.476	2.479	2.463	2.476	2.475
47	2.589	2.591	2.565	2.588	2.587
48	3.592	3.642	3.669	3.672	3.669

Figure S1. The dicyanobenzene open shell radical's dipole moment vectors, (A) p-CNCN, (B) m-CNCN (C) o-CNCN

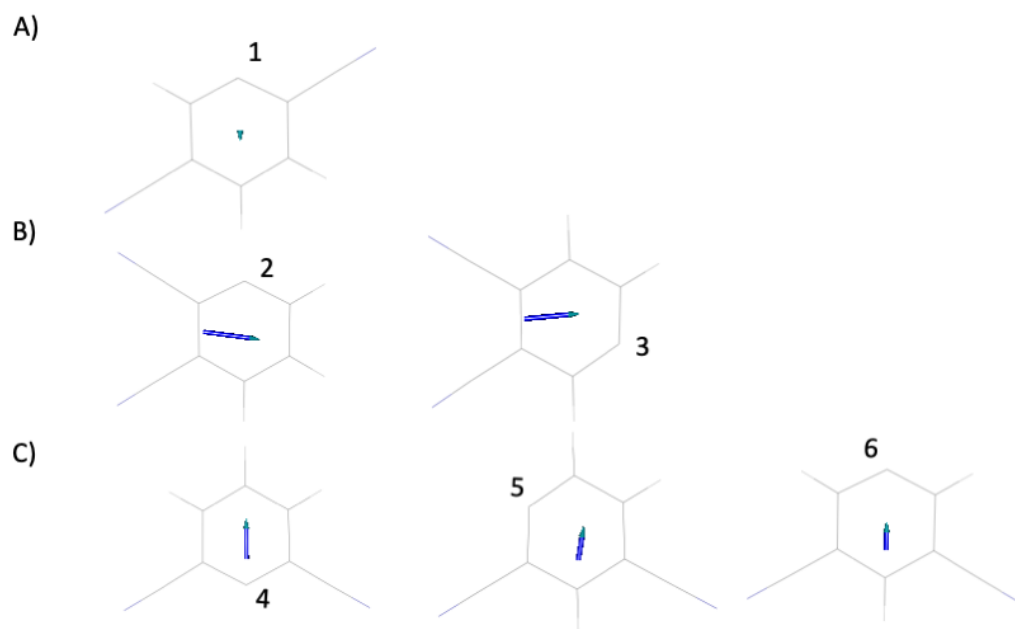


Figure S2. The cyanoethynylbenzene open shell radical's dipole moment vectors, (A) p-CNC₂H, (B) m-CNC₂H (C) -CNC₂H

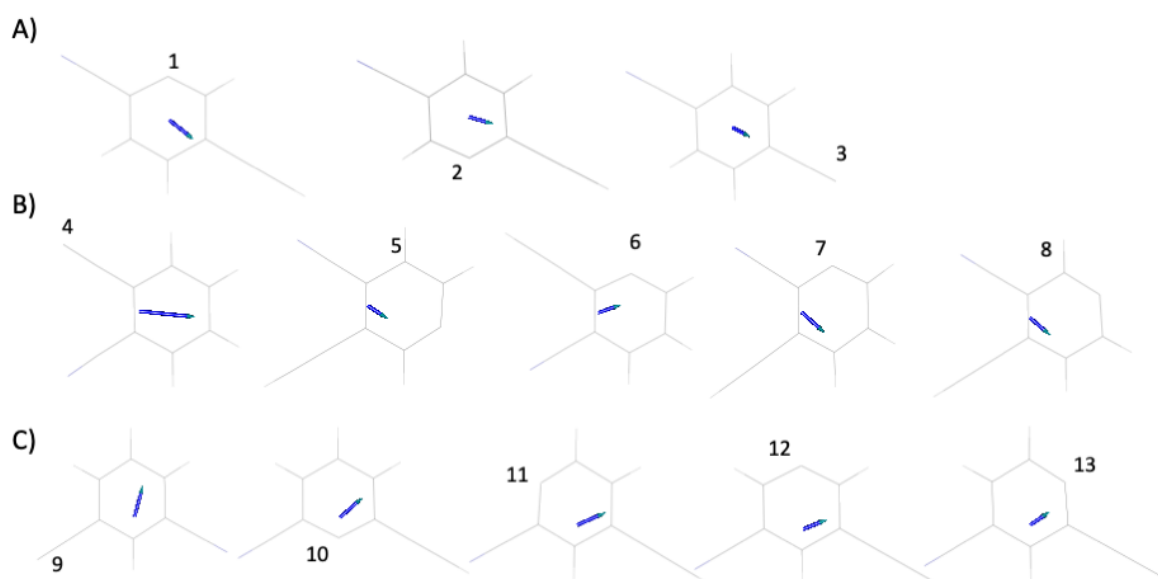


Figure S3. The diethynylbenzene open shell radical's dipole moment vectors, (A) p-C₂HC₂H, (B) m-C₂HC₂H, (C) o-C₂HC₂H

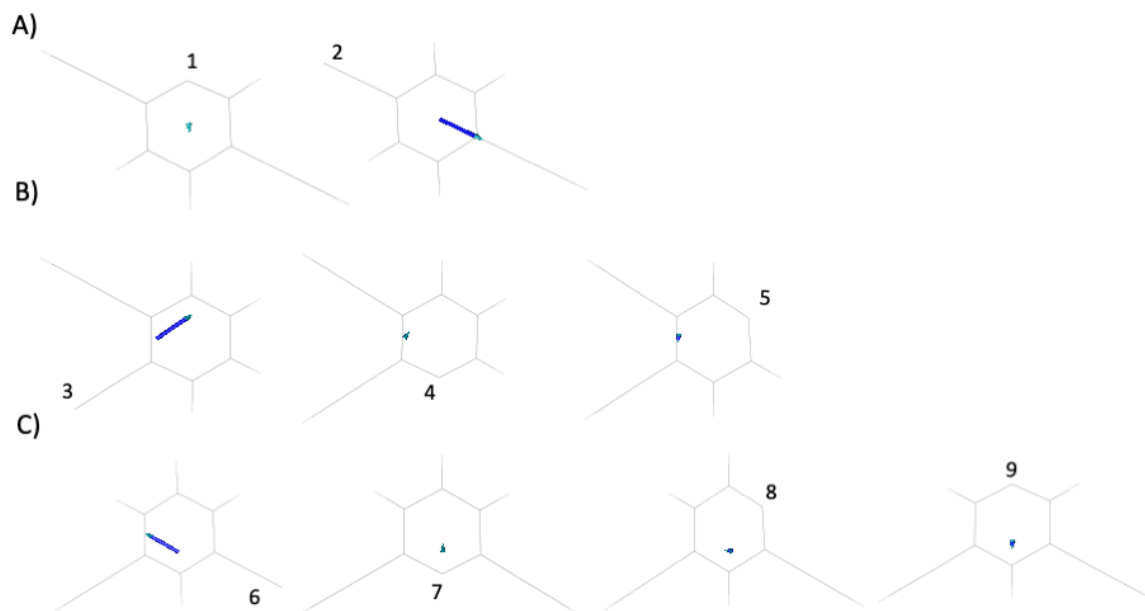


Table S3. Relative energies, dipole moment, and quadropole moment of cyanonethynaphthalene

1-Diethynlnaph.	Anion Rel. E. (eV)	Radical Rel. E. (eV)	Dipole (D)	Quad ¹ (D-Å)
0	0.135	0.428	7.05	19.13
1	1.207	0.088	1.59	10.90
2	1.118	0.055	0.82	11.07
3	1.413	0.064	1.47	11.67
4	1.380	0.040	0.98	10.38
5	1.327	0.047	0.33	9.95
6	1.243	0.053	0.68	10.84
7	0.175	0.505	8.07	17.96
8	0.094	0.426	7.35	16.70
9	1.111	0.095	1.89	10.46
10	1.007	0.065	1.25	10.62
11	1.332	0.029	1.31	10.82
12	1.285	0.006	0.66	9.70
13	1.274	0.011	0.24	9.47
14	1.164	0.019	1.04	10.48
15	0.131	0.490	14.82	54.94
16	0.000	0.353	8.00	16.74
17	1.110	0.047	1.30	10.51
19	1.358	0.021	0.83	10.86
20	1.366	0.000	0.76	10.00
23	0.000	0.354	8.00	16.74
24	0.577	0.673	7.44	15.18
25	1.564	0.327	1.51	10.39
26	1.500	0.310	1.02	10.30

27	1.409	0.312	0.12	10.75
32	0.092	0.390	7.49	17.99
33	1.149	0.035	1.26	10.00
34	1.132	0.004	0.49	9.65
35	1.063	0.013	0.46	10.30
36	1.233	0.055	1.78	11.05
37	1.213	0.041	1.54	9.95
38	1.115	0.006	0.55	10.37
39	0.150	0.467	8.31	17.72
40	0.077	0.393	12.86	40.47
41	1.123	0.034	0.80	9.53
42	1.140	0.003	0.46	9.41
43	1.049	0.009	0.84	10.18
44	1.268	0.012	1.28	10.60
45	1.239	0.036	1.65	9.86
46	1.068	0.042	0.90	10.07
47	0.143	0.481	8.02	19.95
48	0.102	0.397	7.22	16.55
49	1.210	0.044	1.00	9.95
50	1.244	0.012	1.05	10.09
51	1.259	0.034	0.91	10.75
52	1.259	0.034	0.91	10.75
2-Diethynylnaph.				
8	0.190	0.553	8.11	18.53
9	1.057	0.108	1.52	11.12
11	1.148	0.078	1.40	10.91
12	1.222	0.068	9.21	30.00
32	0.054	0.481	15.67	46.03
33	0.981	0.048	5.61	13.73
35	1.026	0.005	6.02	11.78
37	1.084	0.044	7.65	30.12
40	0.000	0.448	8.39	20.89
41	0.981	0.039	6.01	14.05
42	1.096	0.036	7.64	27.64
43	1.017	0.000	5.55	11.42

¹The largest quadrupole component is reported.

Table S4. Electronic excited states and electron binding energies of the cyanoethynylnaphthalene derivatives

1-Diethynylnaph.	Excited States				eBE (eV)
	1 ¹ A''	2 ¹ A''	2 ¹ A'	3 ¹ A'	
0	3.282	3.336	3.336	3.338	3.336
1	2.208	2.207	2.207	2.208	2.207
2	2.279	2.279	2.279	2.280	2.279
3	1.964	1.966	1.964	1.964	1.965
4	2.006	2.008	2.005	2.006	2.006
5	2.083	2.085	2.082	2.083	2.083
6	2.143	2.145	2.142	2.143	2.143
7	3.321	3.357	3.358	3.360	3.357

8	3.363	3.396	3.397	3.399	3.396
9	2.344	2.346	2.343	2.344	2.344
10	2.449	2.452	2.449	2.450	2.450
11	2.005	2.007	2.004	2.005	2.005
12	2.094	2.096	2.093	2.094	2.094
13	2.088	2.090	2.087	2.088	2.088
14	2.216	2.215	2.215	2.216	2.217
15	3.378	3.417	3.417	3.419	3.417
16	3.344	3.380	3.381	3.383	3.380
17	2.285	2.284	2.284	2.286	2.285
19	1.977	1.979	1.976	1.977	1.977
20	1.991	1.994	1.991	1.993	1.992
24	3.054	3.124	3.125	3.125	3.124
25	2.042	2.045	2.042	2.043	2.043
26	2.139	2.141	2.138	2.140	2.138
27	2.292	2.291	2.291	2.292	2.293
32	3.278	3.355	3.356	3.358	3.356
33	2.248	2.247	2.247	2.248	2.248
34	2.211	2.210	2.210	2.211	2.211
35	2.316	2.318	2.315	2.316	2.316
36	2.153	2.155	2.152	2.153	2.153
37	2.174	2.176	2.174	2.175	2.175
38	2.196	2.198	2.195	2.197	2.529
39	3.283	3.345	3.346	3.348	3.345
55	3.349	3.387	3.387	3.389	3.387
41	2.291	2.290	2.290	2.291	2.291
42	2.189	2.191	2.189	2.191	2.189
43	2.354	2.356	2.353	2.354	2.354
44	2.023	2.025	2.022	2.023	2.022
45	2.150	2.152	2.149	2.150	2.150
46	2.337	2.339	2.336	2.337	2.337
47	3.349	3.387	3.388	3.390	3.387
48	3.323	3.356	3.357	3.359	3.356
49	2.208	2.208	2.208	2.209	2.209
50	2.098	2.100	2.098	2.099	2.098
51	2.121	2.123	2.121	2.122	2.121
52	2.121	2.124	2.121	2.122	2.121
2-Diethynylnaph.					
8	3.307	3.340	3.341	3.343	3.340
9	2.308	2.310	2.307	2.308	2.308
11	2.213	2.211	2.211	2.213	2.214
12	2.151	2.153	2.150	2.151	2.150
32	3.397	3.422	3.423	3.424	3.422
33	2.382	2.384	2.381	2.382	2.381
35	2.226	2.225	2.225	2.226	2.225
37	2.269	2.268	2.268	2.270	2.268
40	3.384	3.421	3.422	3.424	3.421
41	2.356	2.358	2.355	2.356	2.355
42	2.233	2.233	2.233	2.234	2.233
43	2.248	2.247	2.247	2.248	2.247

Figure S4. The optimized structure of cyanoethynynaphthalene with numbered positions of deprotonation., (A) 1-cyanoethynynaphthalene, (B) 2-cyanoethynynaphthalene

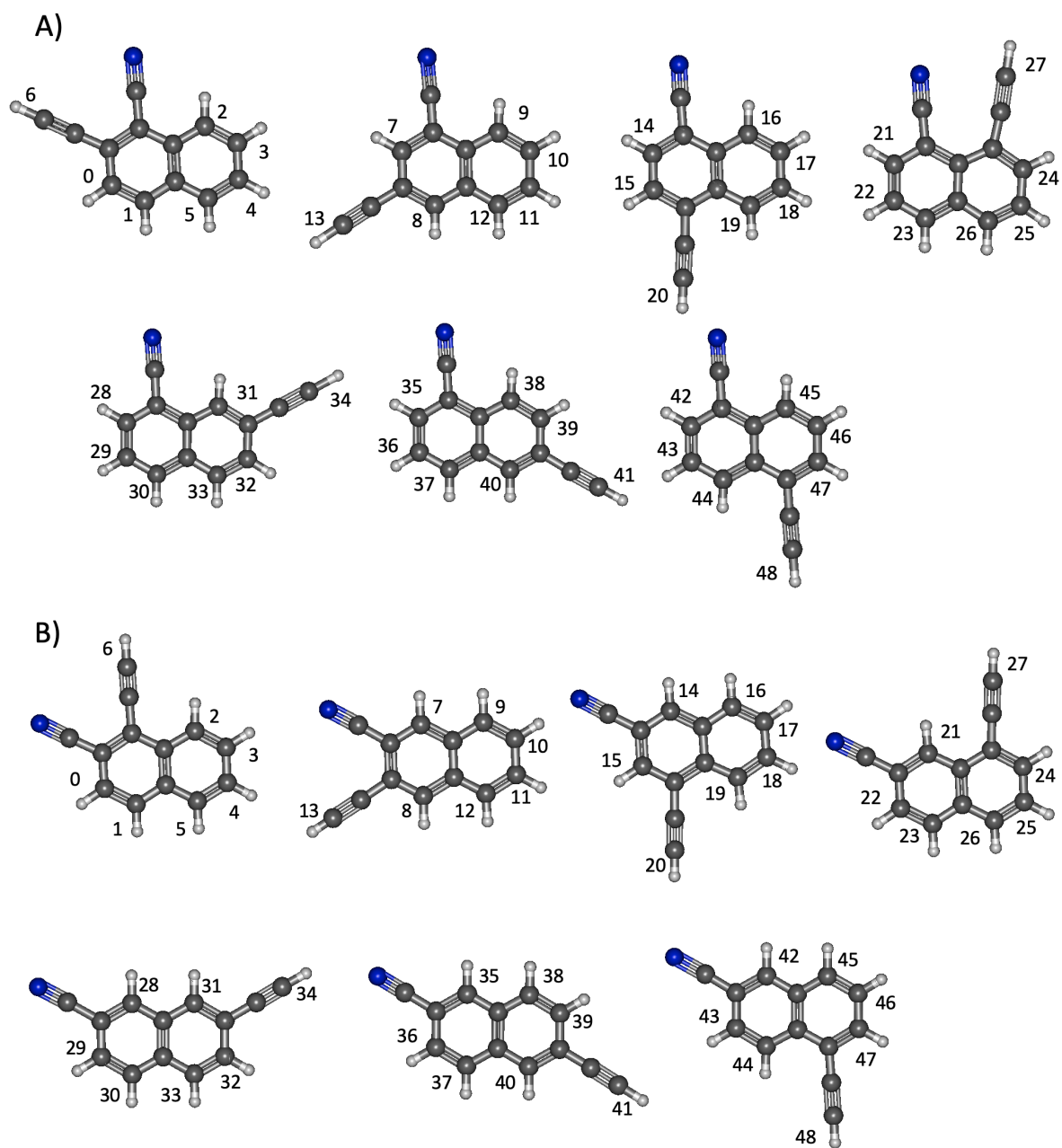


Figure S5. The optimized structure of diethylnaphthalene with numbered positions of deprotonation(A) 1-diethylnaphthalene, (B) 2-diethylnaphthalene.

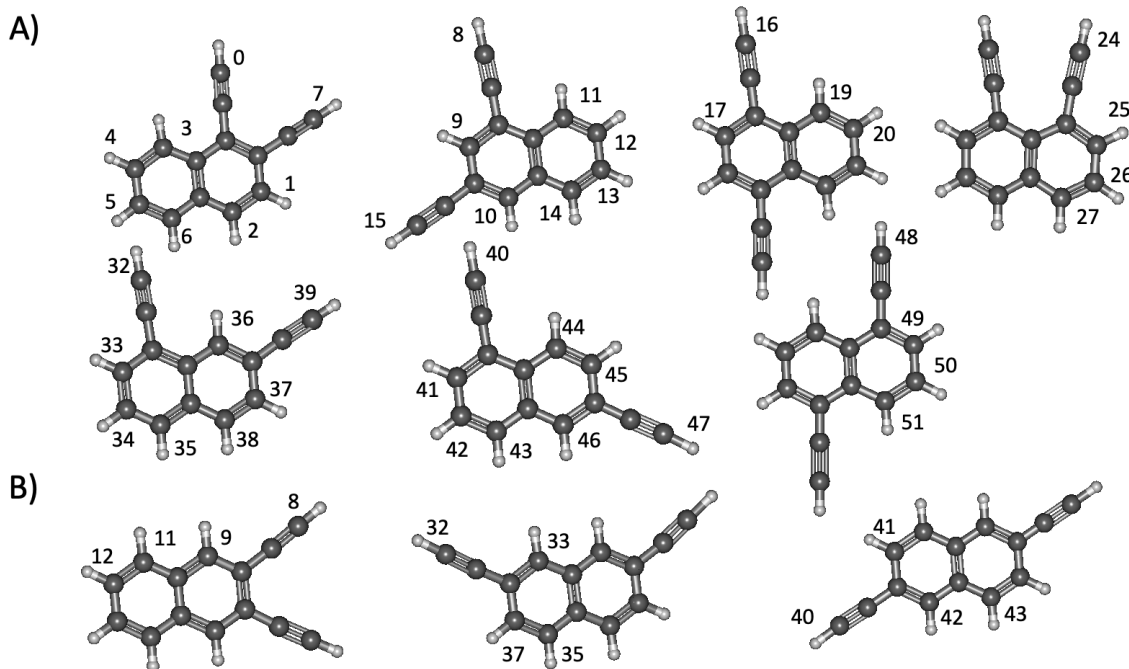


Table S5. Oscillator strengths of the examined molecules

Dicyanobenz.	1 $^1A''$	2 $^1A''$	2 $^1A'$	3 $^1A'$
p-CNCN-1	6.36×10^{-04}	$< 1 \times 10^{-06}$	6.81×10^{-04}	5.42×10^{-04}
o-CNCN-2	2.01×10^{-04}	6.80×10^{-06}	5.29×10^{-03}	9.66×10^{-05}
o-CNCN-3	1.61×10^{-03}	2.70×10^{-07}	1.18×10^{-02}	2.97×10^{-04}
m-CNCN-4	2.20×10^{-06}	3.81×10^{-05}	2.68×10^{-03}	2.68×10^{-03}
m-CNCN-5	2.97×10^{-03}	3.45×10^{-05}	7.48×10^{-03}	9.39×10^{-05}
m-CNCN-6	5.40×10^{-07}	1.48×10^{-04}	7.78×10^{-03}	2.36×10^{-04}
Cyanoethynylbenz.				
p-CNC2H-1	8.33×10^{-04}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.45×10^{-04}	2.44×10^{-05}
p-CNC2H-2	8.35×10^{-04}	5.00×10^{-07}	2.71×10^{-04}	5.69×10^{-05}
p-CNC2H-3	3.75×10^{-04}	3.98×10^{-06}	5.51×10^{-01}	7.61×10^{-03}
o-CNC2H-4	2.33×10^{-03}	5.18×10^{-05}	1.69×10^{-04}	1.49×10^{-01}
o-CNC2H-5	2.56×10^{-04}	9.00×10^{-08}	2.58×10^{-03}	9.84×10^{-05}
o-CNC2H-6	3.00×10^{-08}	6.16×10^{-05}	3.52×10^{-03}	2.63×10^{-04}
o-CNC2H-7	1.00×10^{-07}	4.69×10^{-05}	3.59×10^{-03}	1.38×10^{-04}
o-CNC2H-8	1.89×10^{-04}	3.75×10^{-06}	1.88×10^{-03}	1.75×10^{-05}
m-CNC2H-9	1.39×10^{-03}	4.13×10^{-06}	6.52×10^{-02}	4.70×10^{-05}
m-CNC2H-10	1.76×10^{-05}	1.20×10^{-06}	8.35×10^{-04}	5.86×10^{-06}
m-CNC2H-11	$< 1 \times 10^{-06}$	5.45×10^{-05}	1.98×10^{-03}	1.68×10^{-04}
m-CNC2H-12	2.66×10^{-05}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.03×10^{-03}	1.30×10^{-04}
m-CNC2H-13	1.76×10^{-06}	4.82×10^{-06}	1.73×10^{-03}	2.61×10^{-05}
Diethynylbenz.				
p-C2HC2H-1	4.00×10^{-08}	5.03×10^{-05}	1.75×10^{-06}	3.64×10^{-05}
p-C2HC2H-2	1.32×10^{-06}	1.59×10^{-05}	6.23×10^{-05}	1.81×10^{-03}

o-C2HC2H-3	1.85×10^{-03}	1.70×10^{-05}	6.10×10^{-07}	1.91×10^{-05}
o-C2HC2H-4	7.00×10^{-08}	2.67×10^{-05}	1.01×10^{-05}	1.12×10^{-04}
o-C2HC2H-5	4.60×10^{-07}	3.11×10^{-05}	4.15×10^{-06}	1.30×10^{-04}
m-C2HC2H-6	5.79×10^{-04}	5.95×10^{-06}	4.60×10^{-07}	1.34×10^{-05}
m-C2HC2H-7	9.00×10^{-08}	1.51×10^{-05}	6.30×10^{-07}	6.31×10^{-05}
m-C2HC2H-8	9.00×10^{-08}	1.14×10^{-05}	6.50×10^{-07}	1.10×10^{-04}
m-C2HC2H-9	2.80×10^{-07}	4.43×10^{-05}	2.10×10^{-07}	5.07×10^{-05}
1-Dicyanonaph.				
0	6.00×10^{-08}	1.20×10^{-07}	1.93×10^{-03}	3.75×10^{-06}
1	4.00×10^{-08}	1.00×10^{-07}	2.22×10^{-03}	4.14×10^{-05}
2	4.00×10^{-08}	1.50×10^{-07}	7.72×10^{-04}	4.01×10^{-06}
3	2.50×10^{-07}	4.70×10^{-07}	7.30×10^{-03}	1.85×10^{-04}
4	3.00×10^{-08}	5.00×10^{-08}	4.80×10^{-03}	1.08×10^{-04}
24	2.05×10^{-03}	5.40×10^{-07}	6.52×10^{-03}	1.47×10^{-04}
25	1.61×10^{-03}	1.70×10^{-07}	1.26×10^{-02}	3.26×10^{-04}
26	3.00×10^{-08}	2.00×10^{-08}	8.39×10^{-03}	1.09×10^{-04}
27	$0.00 \times 10^{+00}$	6.00×10^{-08}	4.72×10^{-04}	3.45×10^{-06}
28	1.00×10^{-08}	1.00×10^{-08}	2.60×10^{-03}	1.75×10^{-05}
29	3.00×10^{-08}	6.00×10^{-08}	2.94×10^{-03}	4.93×10^{-05}
30	1.00×10^{-07}	3.30×10^{-07}	6.62×10^{-03}	1.97×10^{-05}
31	$< 1 \times 10^{-06}$	1.00×10^{-08}	8.58×10^{-03}	6.49×10^{-05}
33	2.00×10^{-08}	3.20×10^{-07}	4.80×10^{-04}	4.30×10^{-07}
34	3.00×10^{-08}	6.00×10^{-08}	9.58×10^{-04}	2.40×10^{-07}
35	3.00×10^{-08}	4.50×10^{-07}	3.41×10^{-03}	3.41×10^{-03}
36	2.00×10^{-07}	1.45×10^{-06}	9.74×10^{-04}	6.43×10^{-04}
38	2.40×10^{-07}	1.73×10^{-06}	3.60×10^{-04}	7.80×10^{-06}
40	3.80×10^{-07}	2.56×10^{-06}	2.38×10^{-06}	5.26×10^{-04}
2-Dicyanonaph.				
7	1.00×10^{-08}	$0.00 \times 10^{+00}$	2.86×10^{-04}	2.86×10^{-04}
8	4.00×10^{-08}	8.00×10^{-08}	2.25×10^{-03}	2.36×10^{-05}
9	3.80×10^{-07}	1.02×10^{-06}	1.05×10^{-02}	1.91×10^{-04}
25	4.00×10^{-08}	9.00×10^{-08}	5.06×10^{-03}	1.17×10^{-05}
26	3.00×10^{-08}	2.00×10^{-08}	3.21×10^{-03}	2.38×10^{-05}
27	5.00×10^{-08}	4.70×10^{-07}	4.19×10^{-04}	4.19×10^{-04}
32	2.90×10^{-07}	2.44×10^{-06}	2.73×10^{-04}	2.42×10^{-06}
34	2.20×10^{-07}	1.67×10^{-06}	4.98×10^{-03}	5.94×10^{-06}
35	3.00×10^{-08}	6.20×10^{-07}	9.15×10^{-04}	9.15×10^{-04}
1-Cyanoethynyl naph.				
0	1.10×10^{-07}	9.60×10^{-07}	1.63×10^{-03}	1.84×10^{-05}
1	1.40×10^{-07}	1.54×10^{-06}	2.51×10^{-03}	6.45×10^{-05}
2	4.00×10^{-08}	4.00×10^{-08}	6.36×10^{-04}	1.30×10^{-07}
3	7.00×10^{-08}	3.05×10^{-03}	3.05×10^{-03}	1.19×10^{-05}
4	1.70×10^{-07}	1.39×10^{-06}	4.26×10^{-03}	6.98×10^{-05}
5	4.80×10^{-07}	3.76×10^{-06}	3.87×10^{-03}	1.05×10^{-04}
6	1.83×10^{-04}	6.19×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	3.00×10^{-08}
7	5.00×10^{-08}	1.50×10^{-07}	5.61×10^{-04}	1.00×10^{-08}
8	6.00×10^{-08}	6.10×10^{-07}	1.14×10^{-03}	1.42×10^{-05}
9	8.00×10^{-08}	1.70×10^{-07}	7.11×10^{-04}	3.30×10^{-07}
10	6.00×10^{-08}	1.10×10^{-07}	3.53×10^{-03}	1.89×10^{-05}
11	1.80×10^{-07}	1.44×10^{-06}	3.40×10^{-03}	8.49×10^{-05}

12	5.00×10^{-08}	5.90×10^{-07}	3.23×10^{-03}	3.39×10^{-05}
13	1.91×10^{-04}	1.34×10^{-05}	$< 1 \times 10^{-06}$	3.00×10^{-08}
14	2.00×10^{-08}	3.00×10^{-08}	2.43×10^{-04}	$< 1 \times 10^{-06}$
15	$< 1 \times 10^{-06}$	2.00×10^{-08}	3.76×10^{-04}	5.00×10^{-06}
16	1.40×10^{-07}	1.15×10^{-06}	5.30×10^{-04}	2.29×10^{-06}
17	2.30×10^{-07}	1.24×10^{-03}	1.24×10^{-03}	2.17×10^{-05}
18	3.00×10^{-08}	1.28×10^{-03}	1.28×10^{-03}	1.47×10^{-04}
19	1.50×10^{-07}	7.97×10^{-04}	7.97×10^{-04}	1.71×10^{-05}
20	6.43×10^{-05}	4.32×10^{-04}	1.00×10^{-08}	4.50×10^{-07}
21	7.00×10^{-08}	2.60×10^{-07}	1.07×10^{-03}	1.72×10^{-06}
22	2.60×10^{-07}	2.18×10^{-06}	3.75×10^{-03}	6.11×10^{-05}
23	8.00×10^{-08}	1.12×10^{-06}	5.58×10^{-03}	1.78×10^{-04}
24	2.00×10^{-08}	5.00×10^{-08}	1.46×10^{-03}	6.85×10^{-06}
25	1.00×10^{-07}	8.90×10^{-07}	3.61×10^{-03}	1.03×10^{-04}
26	1.10×10^{-07}	1.04×10^{-06}	5.66×10^{-03}	1.49×10^{-04}
27	6.68×10^{-04}	5.24×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	$< 1 \times 10^{-06}$
28	4.00×10^{-08}	6.00×10^{-08}	2.94×10^{-03}	4.94×10^{-06}
29	3.63×10^{-03}	6.61×10^{-05}	5.30×10^{-02}	1.00×10^{-08}
30	3.00×10^{-07}	2.55×10^{-06}	5.53×10^{-03}	7.13×10^{-05}
31	7.00×10^{-08}	1.40×10^{-07}	3.75×10^{-04}	1.67×10^{-06}
32	1.60×10^{-07}	1.32×10^{-06}	2.18×10^{-03}	1.93×10^{-05}
33	1.40×10^{-07}	1.73×10^{-06}	2.78×10^{-03}	8.34×10^{-05}
34	$< 1 \times 10^{-06}$	$< 1 \times 10^{-06}$	2.27×10^{-01}	1.80×10^{-07}
35	7.00×10^{-08}	1.70×10^{-07}	2.82×10^{-03}	3.36×10^{-06}
36	3.78×10^{-03}	1.78×10^{-03}	5.03×10^{-02}	1.00×10^{-08}
38	3.00×10^{-08}	2.00×10^{-08}	1.60×10^{-04}	7.70×10^{-07}
39	5.00×10^{-08}	9.00×10^{-08}	8.42×10^{-04}	3.30×10^{-07}
40	5.00×10^{-08}	1.20×10^{-07}	5.75×10^{-04}	1.52×10^{-05}
41	1.44×10^{-04}	2.00×10^{-08}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.60×10^{-07}
42	1.80×10^{-07}	1.31×10^{-06}	8.58×10^{-04}	7.09×10^{-06}
43	1.60×10^{-07}	6.10×10^{-07}	4.05×10^{-04}	2.91×10^{-05}
44	1.50×10^{-07}	1.30×10^{-06}	8.97×10^{-04}	2.25×10^{-05}
45	1.30×10^{-07}	4.30×10^{-07}	1.77×10^{-04}	9.00×10^{-08}
46	6.00×10^{-08}	1.40×10^{-07}	2.77×10^{-04}	1.00×10^{-08}
47	1.00×10^{-07}	8.40×10^{-07}	5.67×10^{-04}	3.90×10^{-05}
48	5.47×10^{-05}	1.88×10^{-03}	$0.00 \times 10^{+00}$	1.00×10^{-08}

2-Cyanoethynyl-naph.

0	9.00×10^{-08}	2.80×10^{-07}	4.04×10^{-04}	5.80×10^{-07}
1	1.20×10^{-07}	3.80×10^{-07}	7.15×10^{-04}	4.28×10^{-06}
2	3.50×10^{-07}	6.23×10^{-04}	6.23×10^{-04}	1.49×10^{-06}
3	1.00×10^{-08}	3.05×10^{-03}	3.05×10^{-03}	5.63×10^{-05}
4	4.00×10^{-08}	4.00×10^{-08}	-4.10×10^{-06}	9.20×10^{-07}
5	3.00×10^{-08}	4.00×10^{-08}	2.20×10^{-03}	2.80×10^{-05}
6	3.85×10^{-04}	1.44×10^{-03}	$< 1 \times 10^{-06}$	6.00×10^{-08}
7	3.00×10^{-08}	1.00×10^{-08}	1.42×10^{-04}	1.70×10^{-07}
8	2.00×10^{-08}	4.00×10^{-08}	1.73×10^{-04}	1.40×10^{-06}
9	8.00×10^{-08}	2.10×10^{-07}	1.41×10^{-03}	4.11×10^{-06}
10	1.90×10^{-07}	1.74×10^{-06}	7.28×10^{-03}	1.37×10^{-04}
11	8.00×10^{-08}	8.60×10^{-07}	8.16×10^{-03}	2.14×10^{-04}
12	$< 1 \times 10^{-06}$	1.40×10^{-07}	2.97×10^{-03}	2.99×10^{-05}

13	9.32×10^{-06}	1.22×10^{-06}	1.00×10^{-08}	3.60×10^{-07}
14	3.00×10^{-08}	5.00×10^{-08}	4.43×10^{-04}	2.10×10^{-07}
15	2.00×10^{-08}	2.10×10^{-07}	2.33×10^{-04}	9.00×10^{-07}
16	1.30×10^{-07}	4.30×10^{-07}	1.25×10^{-03}	6.98×10^{-06}
17	1.20×10^{-07}	3.80×10^{-07}	2.61×10^{-03}	4.71×10^{-05}
18	$< 1 \times 10^{-06}$	$< 1 \times 10^{-06}$	3.67×10^{-03}	8.85×10^{-05}
19	4.20×10^{-07}	1.27×10^{-03}	1.27×10^{-03}	9.31×10^{-06}
20	9.34×10^{-05}	8.01×10^{-04}	$< 1 \times 10^{-06}$	2.00×10^{-08}
21	3.00×10^{-08}	3.00×10^{-07}	1.78×10^{-04}	4.00×10^{-07}
22	1.60×10^{-07}	6.30×10^{-07}	5.90×10^{-04}	4.80×10^{-07}
23	1.10×10^{-07}	3.30×10^{-07}	7.30×10^{-04}	5.70×10^{-06}
24	9.00×10^{-08}	3.40×10^{-07}	2.08×10^{-03}	4.08×10^{-05}
25	4.00×10^{-08}	8.00×10^{-08}	3.95×10^{-03}	8.80×10^{-05}
26	2.00×10^{-08}	3.40×10^{-07}	4.98×10^{-03}	6.45×10^{-05}
27	8.94×10^{-04}	1.68×10^{-06}	2.10×10^{-01}	2.10×10^{-01}
28	2.00×10^{-08}	2.00×10^{-08}	1.78×10^{-04}	3.40×10^{-07}
29	7.00×10^{-08}	1.60×10^{-07}	1.26×10^{-03}	2.20×10^{-07}
30	1.00×10^{-08}	$< 1 \times 10^{-06}$	6.30×10^{-04}	8.88×10^{-06}
31	2.00×10^{-08}	$< 1 \times 10^{-06}$	2.39×10^{-04}	2.90×10^{-07}
32	1.10×10^{-07}	1.36×10^{-06}	3.10×10^{-03}	1.20×10^{-04}
33	6.00×10^{-08}	9.60×10^{-07}	1.27×10^{-03}	2.48×10^{-05}
34	1.40×10^{-05}	1.90×10^{-07}	4.22×10^{-02}	$< 1 \times 10^{-06}$
35	2.00×10^{-08}	2.00×10^{-08}	1.76×10^{-05}	1.50×10^{-07}
36	7.00×10^{-08}	1.80×10^{-07}	9.90×10^{-05}	1.90×10^{-07}
37	$< 1 \times 10^{-06}$	1.50×10^{-07}	7.26×10^{-05}	2.93×10^{-06}
38	$< 1 \times 10^{-06}$	2.20×10^{-07}	1.36×10^{-04}	3.00×10^{-07}
39	7.00×10^{-08}	7.40×10^{-07}	1.45×10^{-03}	2.61×10^{-05}
40	4.00×10^{-08}	4.90×10^{-07}	6.05×10^{-04}	6.81×10^{-06}
41	7.56×10^{-05}	1.17×10^{-03}	$< 1 \times 10^{-06}$	2.00×10^{-08}
42	8.00×10^{-08}	6.90×10^{-07}	3.61×10^{-04}	7.10×10^{-07}
43	1.30×10^{-07}	9.10×10^{-07}	1.92×10^{-04}	2.21×10^{-06}
44	$< 1 \times 10^{-06}$	6.00×10^{-08}	9.79×10^{-05}	2.10×10^{-07}
45	5.00×10^{-08}	6.00×10^{-08}	2.23×10^{-03}	8.92×10^{-06}
46	2.70×10^{-07}	2.09×10^{-06}	3.10×10^{-03}	1.22×10^{-04}
47	2.00×10^{-08}	3.70×10^{-07}	4.24×10^{-03}	6.03×10^{-05}
48	2.27×10^{-03}	1.10×10^{-05}	$< 1 \times 10^{-06}$	2.00×10^{-08}

1-Diethynylnaph.

0	1.25×10^{-03}	2.09×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	4.00×10^{-08}
1	1.00×10^{-07}	5.10×10^{-07}	5.10×10^{-07}	2.65×10^{-05}
2	2.20×10^{-07}	5.80×10^{-07}	5.80×10^{-07}	5.54×10^{-05}
3	3.00×10^{-07}	1.93×10^{-06}	1.88×10^{-05}	2.86×10^{-05}
4	4.00×10^{-07}	2.59×10^{-06}	2.74×10^{-05}	3.35×10^{-04}
5	2.20×10^{-07}	1.57×10^{-06}	2.22×10^{-05}	2.63×10^{-04}
6	4.80×10^{-07}	3.07×10^{-06}	2.14×10^{-05}	1.81×10^{-04}
7	9.80×10^{-05}	1.60×10^{-07}	$< 1 \times 10^{-06}$	6.00×10^{-08}
8	2.16×10^{-04}	1.70×10^{-07}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.00×10^{-08}
9	2.00×10^{-08}	1.80×10^{-07}	1.00×10^{-07}	1.98×10^{-06}
10	$< 1 \times 10^{-06}$	3.90×10^{-07}	5.20×10^{-07}	1.46×10^{-05}
11	3.30×10^{-07}	2.14×10^{-06}	8.98×10^{-06}	5.22×10^{-05}
12	3.70×10^{-07}	2.46×10^{-06}	3.14×10^{-05}	3.22×10^{-04}

13	4.00×10^{-07}	2.62×10^{-06}	1.27×10^{-05}	2.14×10^{-04}
14	5.00×10^{-07}	4.43×10^{-05}	4.43×10^{-05}	1.85×10^{-04}
15	8.82×10^{-05}	1.00×10^{-07}	1.00×10^{-08}	1.60×10^{-07}
16	1.83×10^{-04}	1.50×10^{-07}	1.00×10^{-08}	3.20×10^{-07}
17	1.90×10^{-07}	9.70×10^{-07}	9.70×10^{-07}	1.05×10^{-05}
19	5.00×10^{-07}	3.15×10^{-06}	9.30×10^{-07}	2.59×10^{-05}
20	5.40×10^{-07}	3.40×10^{-06}	3.50×10^{-07}	1.01×10^{-04}
24	3.98×10^{-04}	1.27×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	$< 1 \times 10^{-06}$
25	1.00×10^{-07}	7.30×10^{-07}	1.01×10^{-06}	9.29×10^{-05}
26	5.20×10^{-07}	3.24×10^{-06}	1.53×10^{-06}	1.42×10^{-04}
27	3.80×10^{-07}	1.45×10^{-05}	1.45×10^{-05}	2.16×10^{-04}
32	5.13×10^{-04}	2.11×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.70×10^{-07}
33	2.80×10^{-07}	8.03×10^{-05}	8.03×10^{-05}	2.77×10^{-04}
34	4.20×10^{-07}	1.70×10^{-05}	1.70×10^{-05}	2.32×10^{-04}
35	3.30×10^{-07}	2.13×10^{-06}	2.26×10^{-05}	2.28×10^{-04}
36	6.00×10^{-08}	4.90×10^{-07}	3.10×10^{-07}	6.00×10^{-08}
37	1.50×10^{-07}	1.08×10^{-06}	3.10×10^{-07}	5.67×10^{-05}
38	4.20×10^{-07}	2.74×10^{-06}	8.50×10^{-07}	6.59×10^{-05}
39	2.45×10^{-04}	2.90×10^{-07}	1.00×10^{-08}	5.60×10^{-07}
40	8.71×10^{-04}	5.10×10^{-07}	$< 1 \times 10^{-06}$	3.00×10^{-08}
41	1.60×10^{-07}	6.37×10^{-06}	6.37×10^{-06}	1.32×10^{-04}
42	4.00×10^{-07}	2.61×10^{-06}	9.00×10^{-07}	1.15×10^{-04}
43	3.30×10^{-07}	2.12×10^{-06}	1.02×10^{-06}	1.08×10^{-04}
44	3.10×10^{-07}	2.04×10^{-06}	1.33×10^{-06}	3.90×10^{-07}
45	1.30×10^{-07}	9.30×10^{-07}	4.80×10^{-07}	7.28×10^{-06}
46	7.00×10^{-08}	5.80×10^{-07}	1.30×10^{-07}	6.52×10^{-06}
47	2.52×10^{-05}	4.00×10^{-08}	1.00×10^{-08}	2.50×10^{-07}
48	1.17×10^{-03}	3.50×10^{-07}	$< 1 \times 10^{-06}$	2.00×10^{-08}
49	1.70×10^{-07}	7.00×10^{-07}	7.00×10^{-07}	3.28×10^{-05}
50	4.00×10^{-07}	2.61×10^{-06}	1.16×10^{-06}	3.89×10^{-05}
51	2.90×10^{-07}	1.88×10^{-06}	1.15×10^{-06}	1.46×10^{-05}
52	2.90×10^{-07}	1.88×10^{-06}	1.15×10^{-06}	1.46×10^{-05}
2-Diethynylnaph.				
8	8.14×10^{-06}	$< 1 \times 10^{-06}$	$< 1 \times 10^{-06}$	4.00×10^{-08}
9	1.00×10^{-08}	1.50×10^{-07}	3.00×10^{-07}	1.35×10^{-06}
11	3.20×10^{-07}	4.17×10^{-04}	4.17×10^{-04}	1.28×10^{-05}
12	1.00×10^{-08}	2.50×10^{-07}	1.38×10^{-05}	8.15×10^{-05}
32	1.13×10^{-06}	$0.00 \times 10^{+00}$	1.00×10^{-08}	1.80×10^{-07}
33	5.00×10^{-08}	1.00×10^{-07}	8.20×10^{-07}	3.20×10^{-07}
35	1.50×10^{-07}	2.40×10^{-06}	2.40×10^{-06}	1.08×10^{-05}
37	5.00×10^{-08}	2.62×10^{-06}	2.62×10^{-06}	2.60×10^{-05}
40	6.88×10^{-04}	7.60×10^{-07}	$< 1 \times 10^{-06}$	1.00×10^{-08}
41	7.00×10^{-08}	1.80×10^{-07}	8.50×10^{-07}	1.60×10^{-06}
42	7.00×10^{-08}	1.75×10^{-06}	1.75×10^{-06}	1.41×10^{-05}
43	1.80×10^{-07}	1.94×10^{-06}	1.94×10^{-06}	1.82×10^{-06}