

Support information

Design, synthesis and Antibacterial Evaluation of a novel class of Tetrahydrobenzothiophene Derivatives

Lin Lai^a, Jinhua Yang^a, Wanling Sun^a, Xiaoyan Su^a, Jun Chen^a, Xinan Chen^b,
Shuchen Pei^{*a}

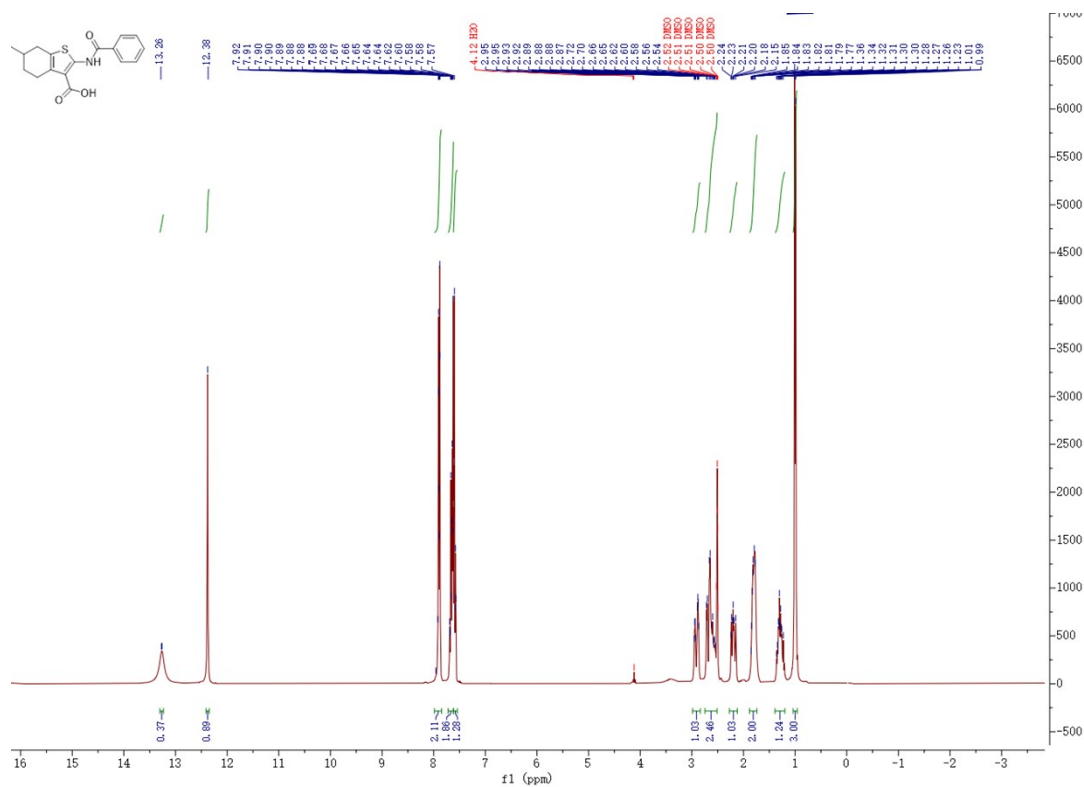
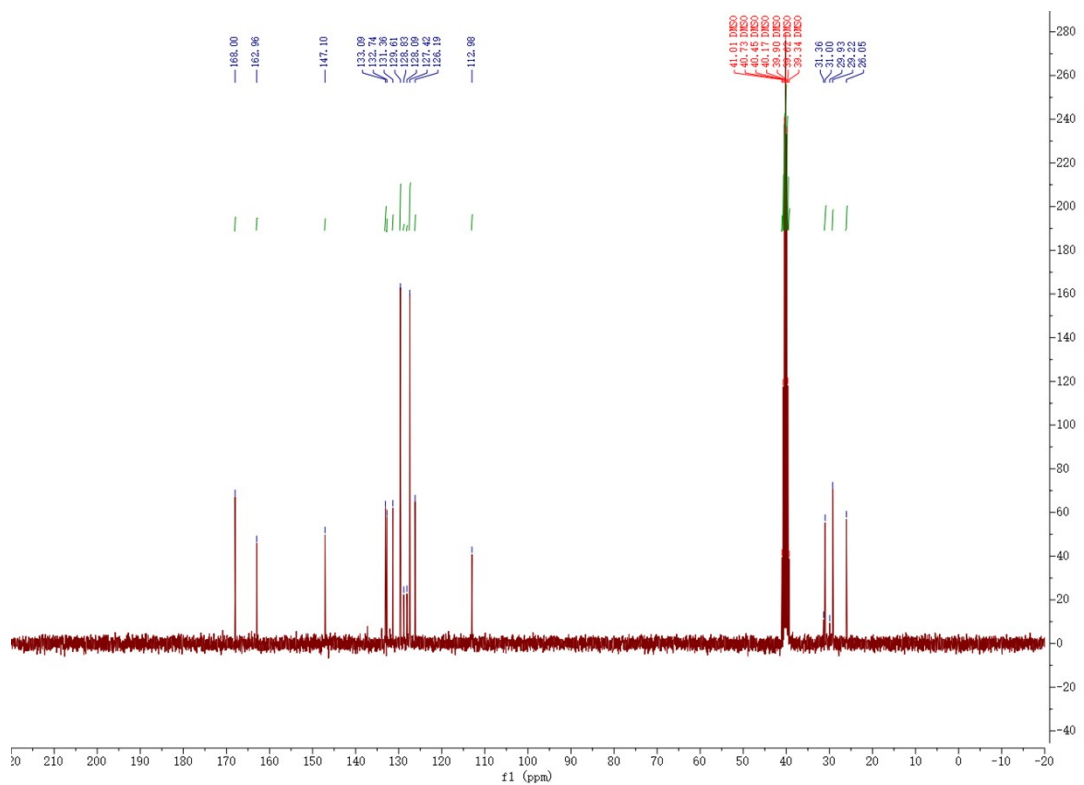
*^aKey Laboratory of Industrial Fermentation Microorganism, Chongqing University of
Science and Technology, Chongqing, 401331, China*

*^b German Institute of Engineering, Chongqing College of Mobile Communtion,
Chongqing, 401520, China*

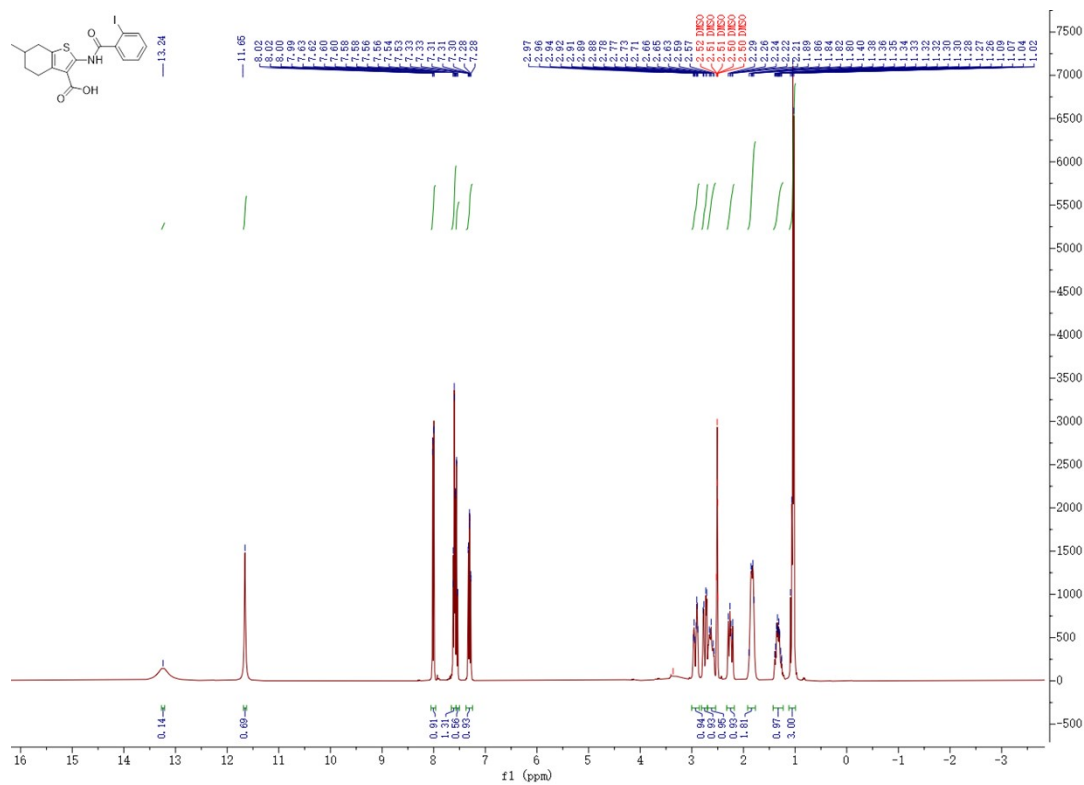
**e-mail: peishuchen928@163.com*

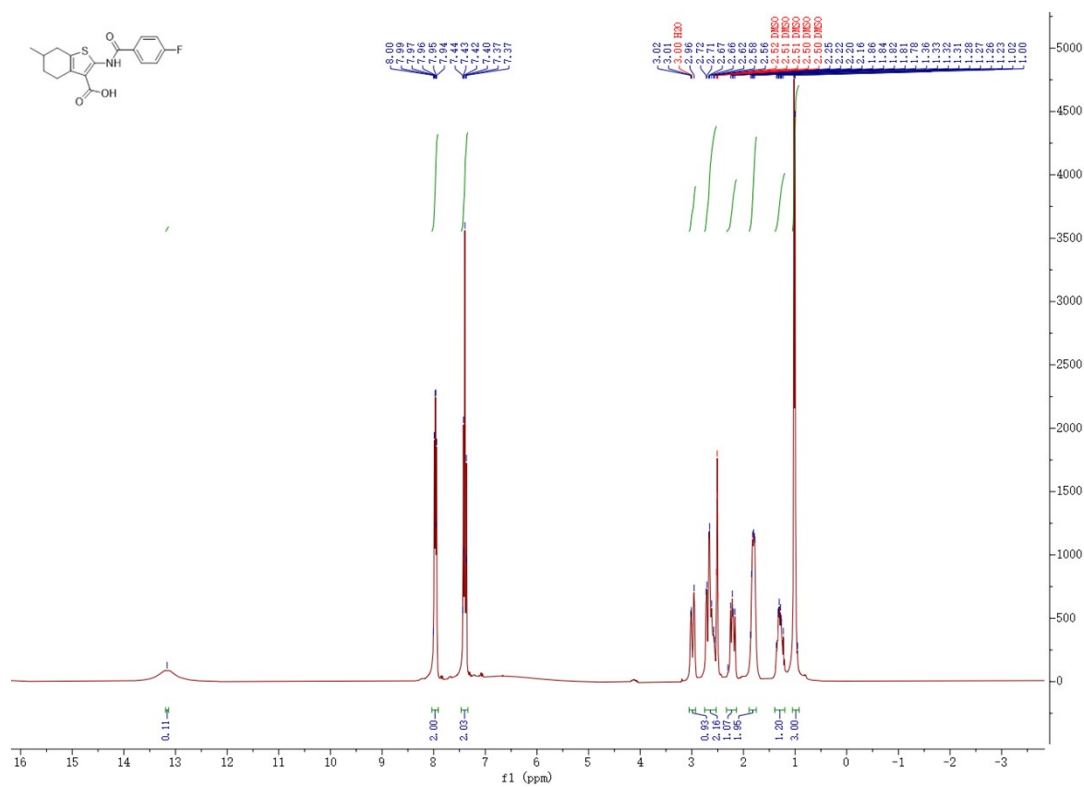
The compound characterization, ¹H and ¹³C NMR spectra of new compounds

Compound 3a

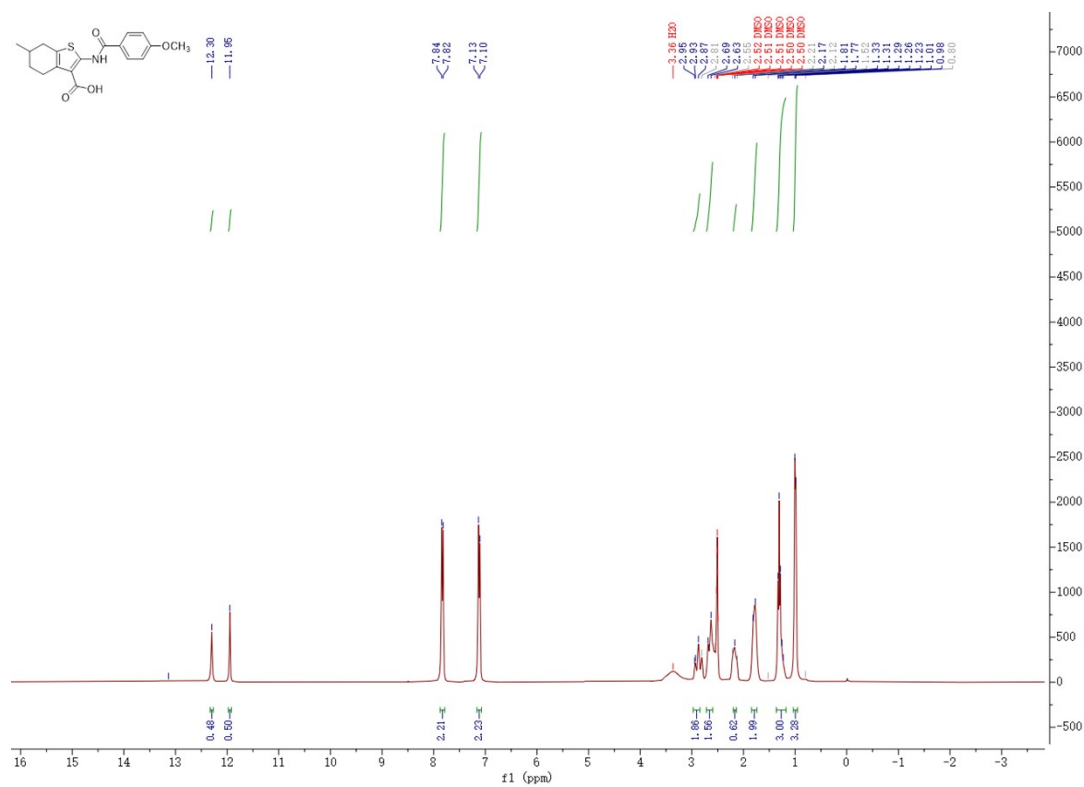
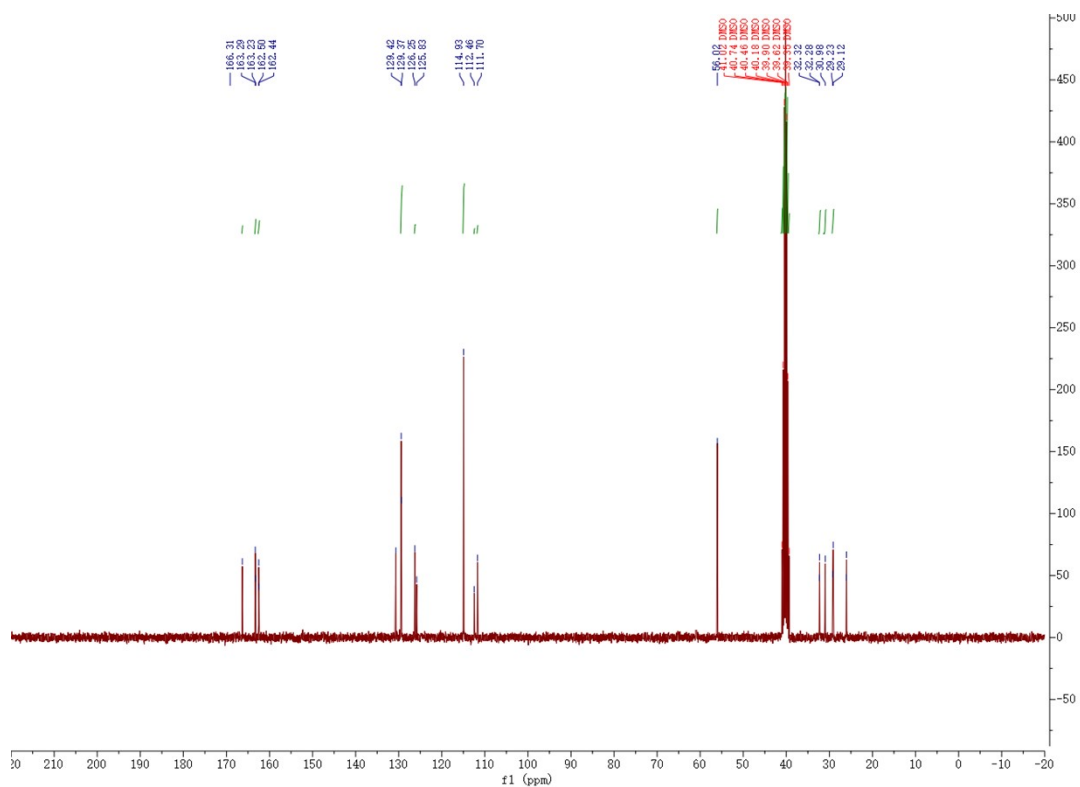


13C NMR spectrum of compound 10a in CDCl₃. The x-axis represents the chemical shift in ppm (f1) from -20 to 230. The y-axis represents intensity from -20 to 140. The spectrum shows several sharp peaks in the aromatic region (110-145 ppm) and aliphatic region (25-40 ppm). A large solvent peak for CDCl₃ is visible at 77.0 ppm. Labeled peaks with their chemical shifts are: 167.62, 165.47, 146.07, 140.59, 140.41, 132.80, 131.46, 130.85, 129.00, 126.89, 113.38, 93.87, 56.51, 40.83, 40.60, 40.56, 40.28, 39.98, 39.44, 32.29, 30.98, and 26.11 ppm.

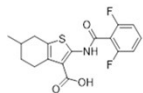
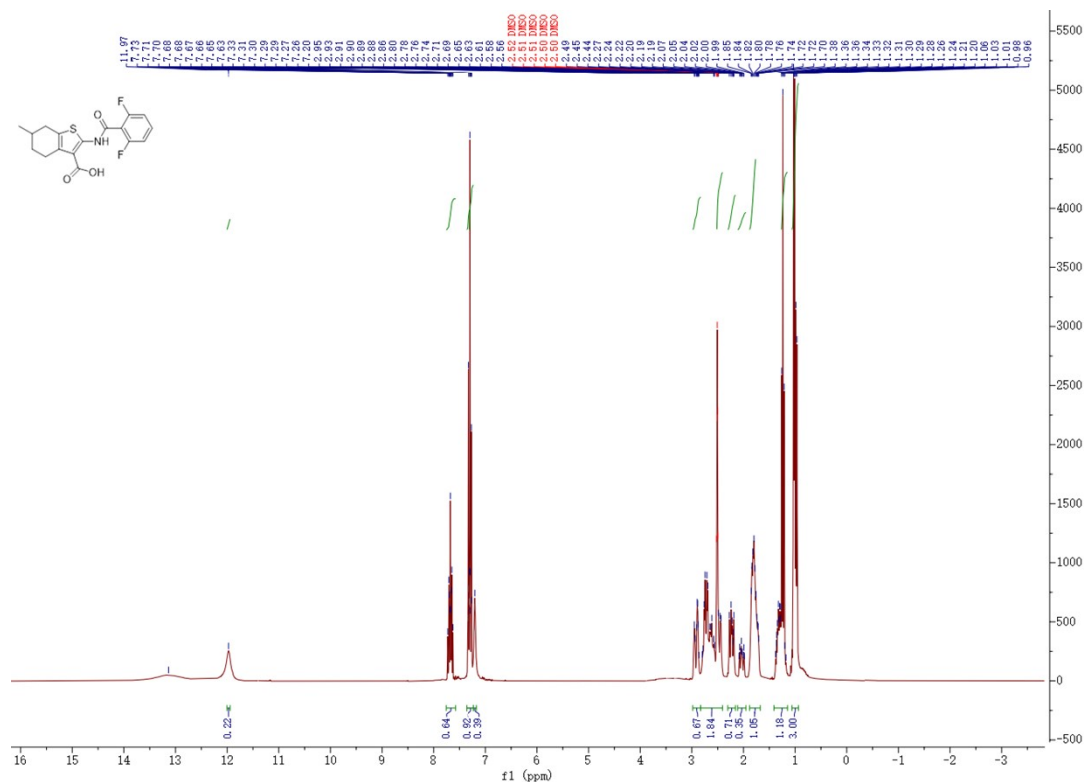
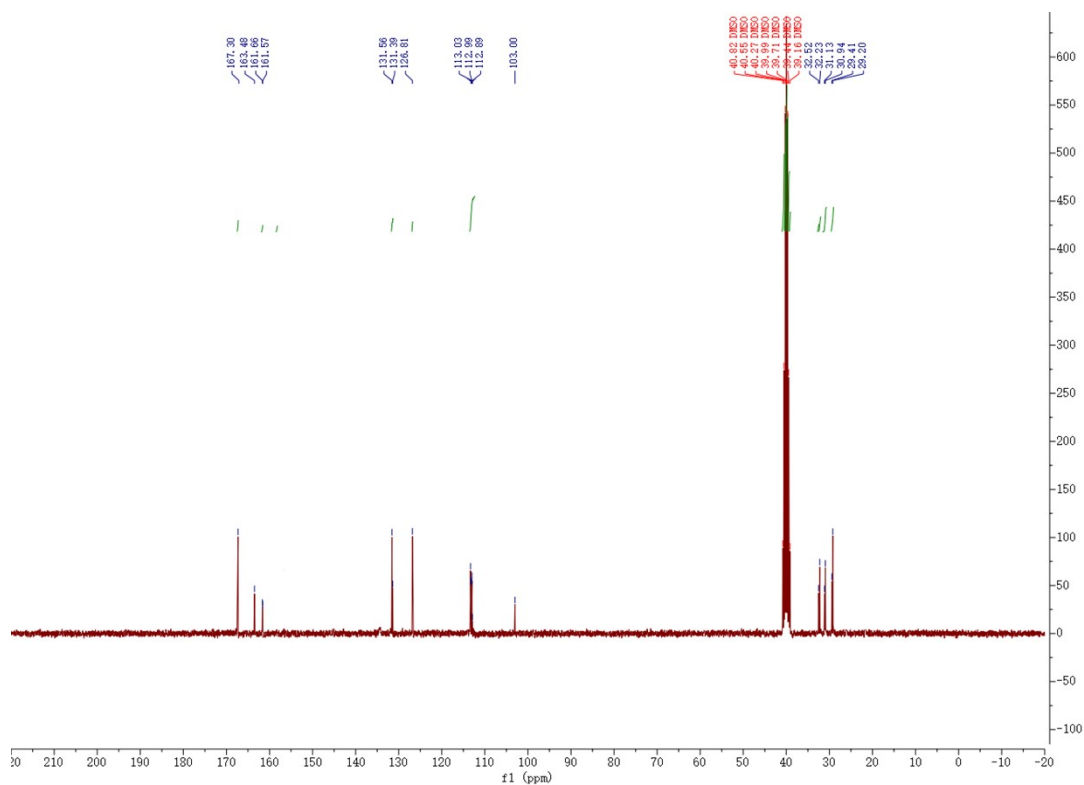


[illegible]

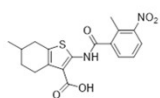
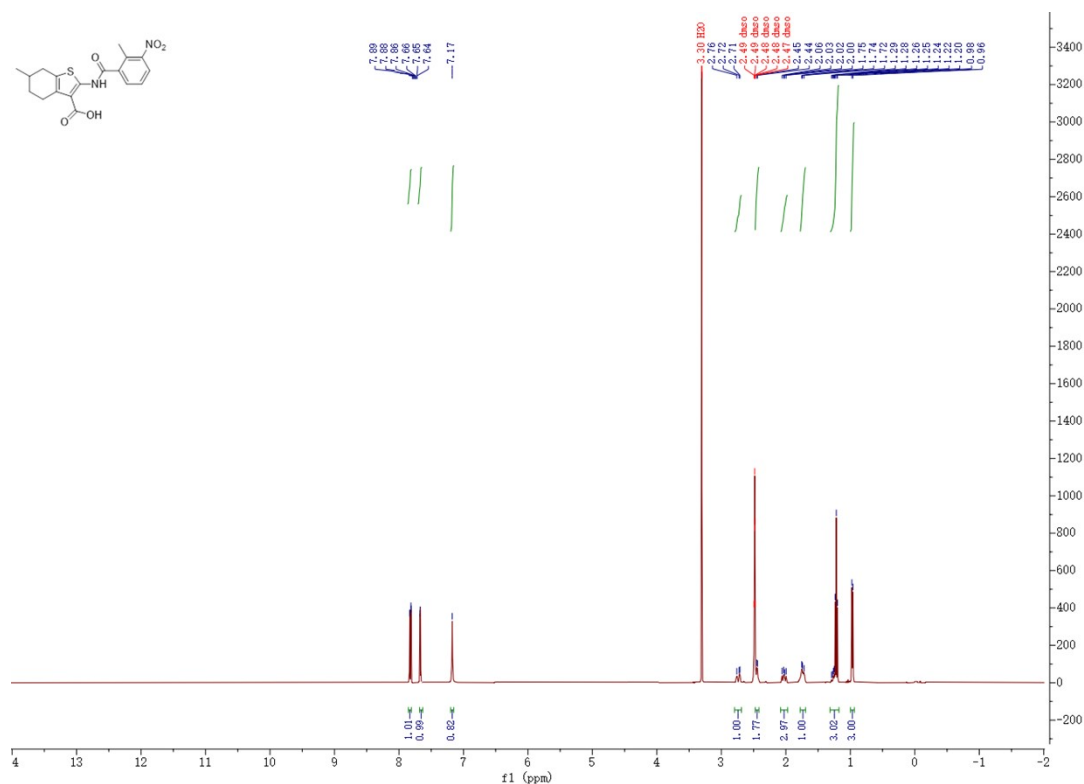
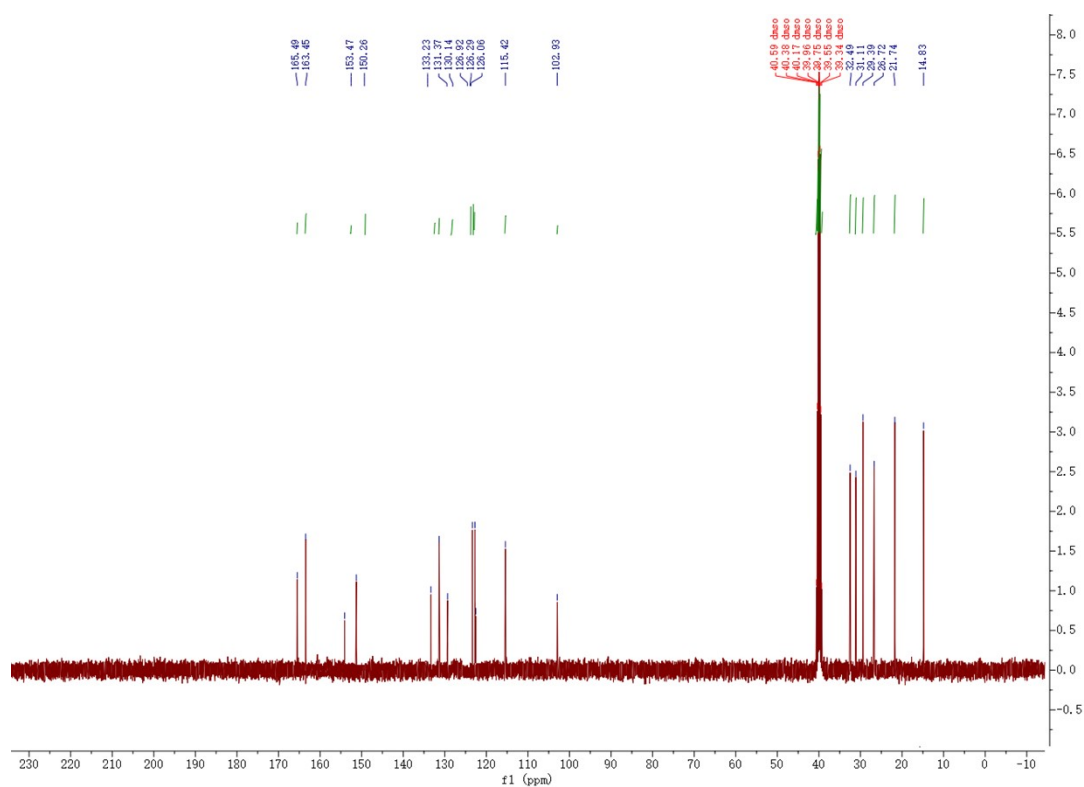
Compound 3d



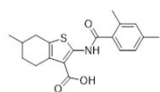
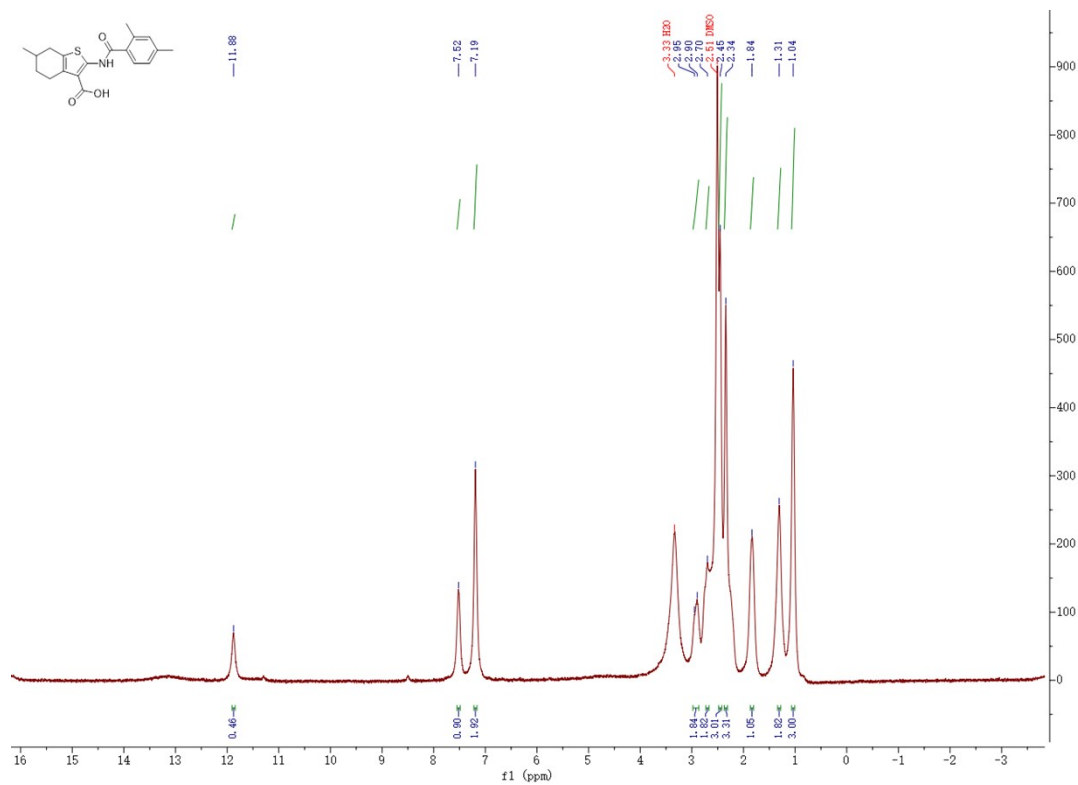
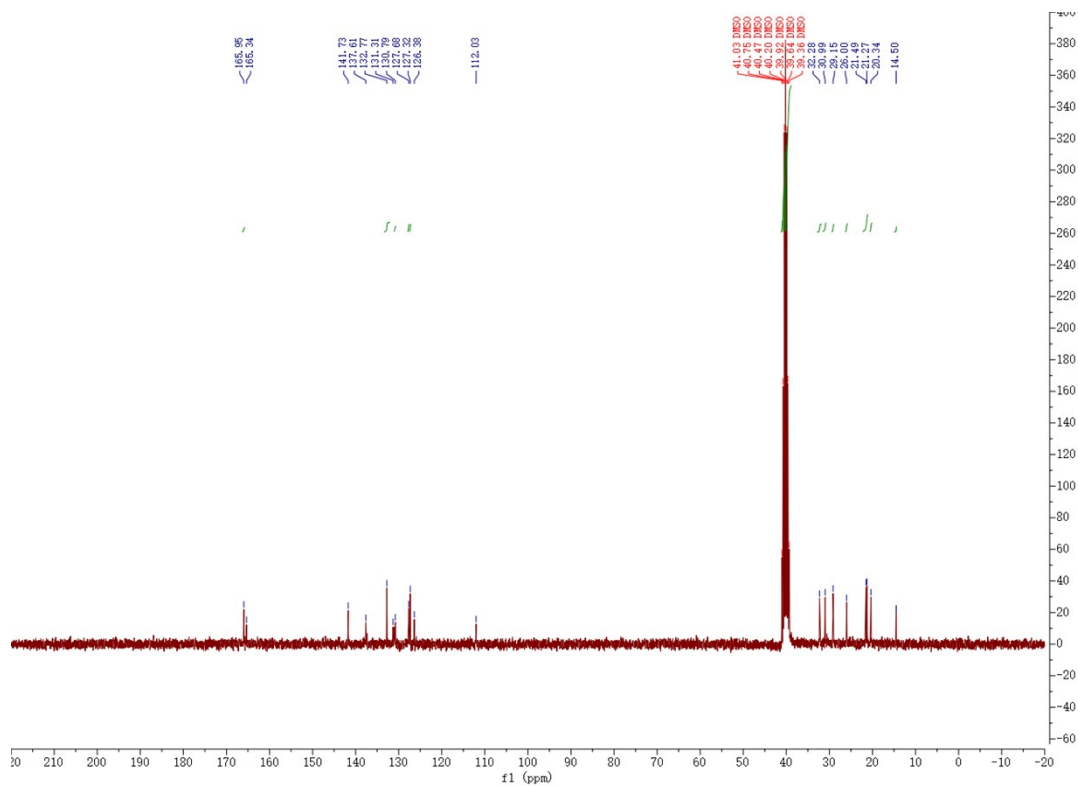
Compound 3e

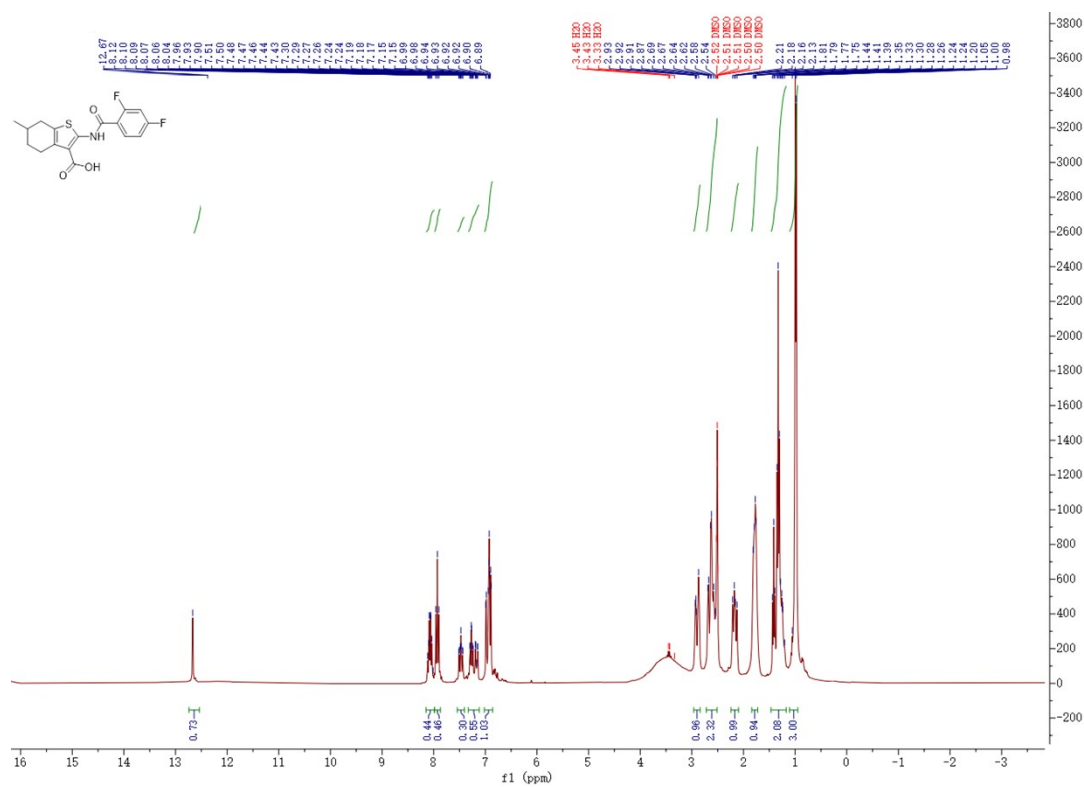


Compound 3f



Compound 3g

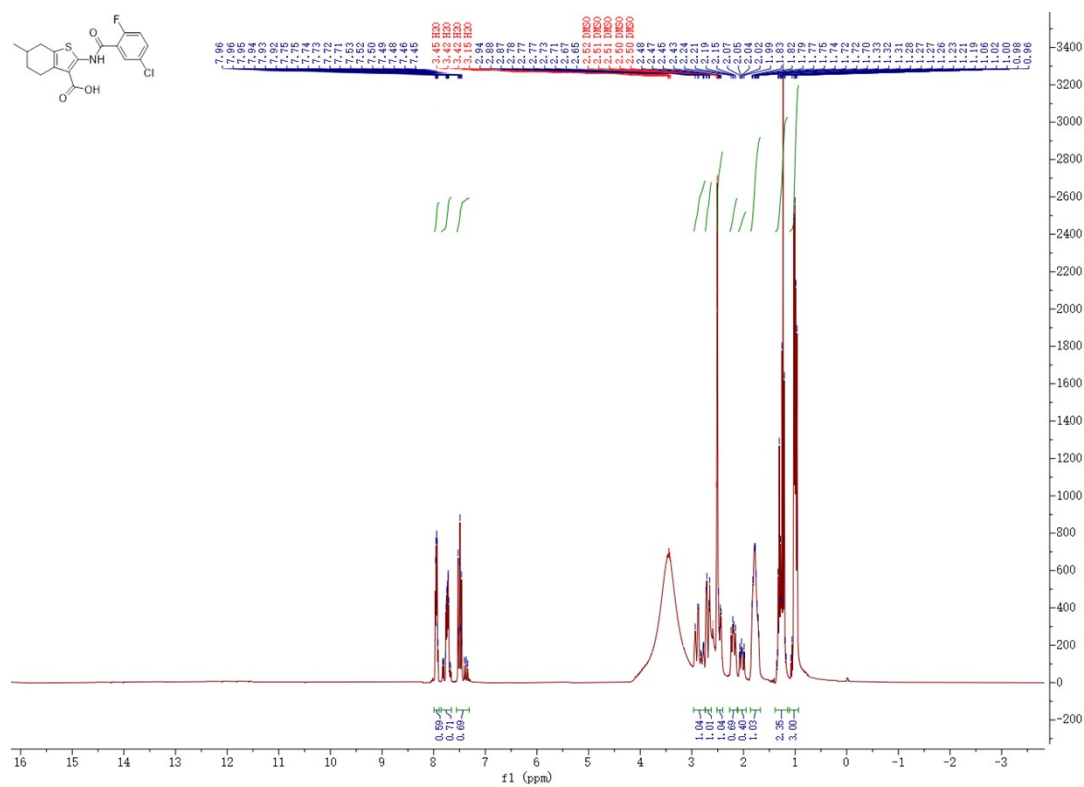


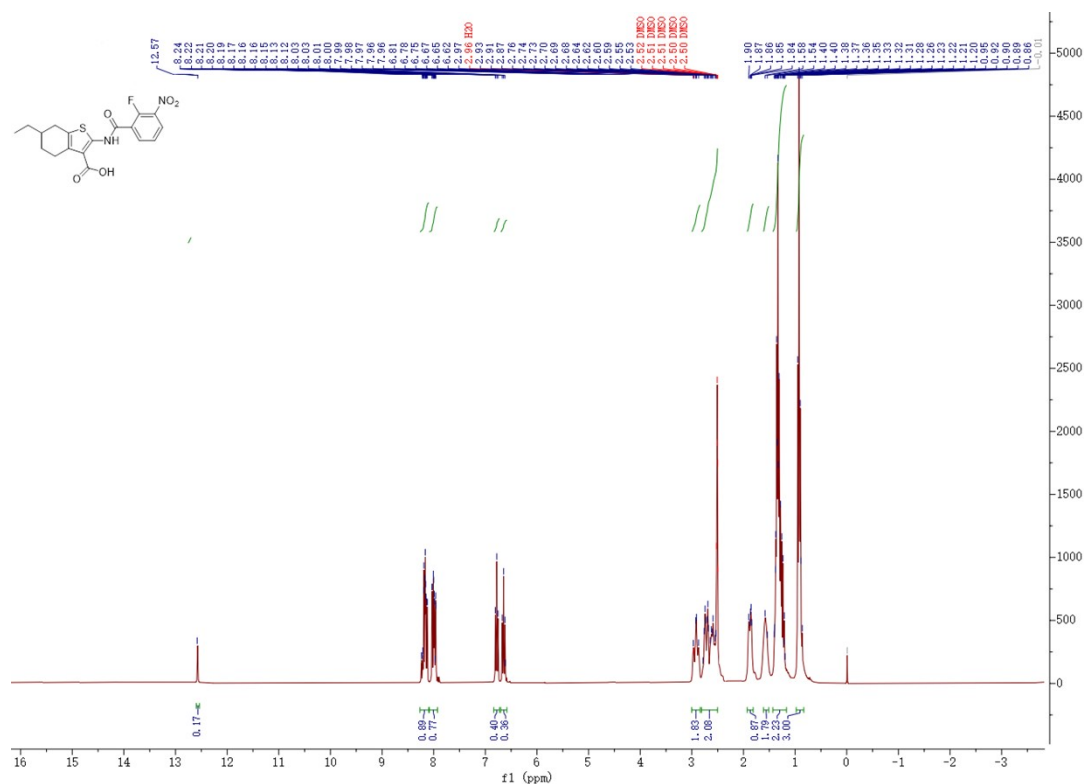


¹³C NMR spectrum (400 MHz, DMSO-d₆) of compound 10. The x-axis represents the chemical shift in ppm, ranging from -20 to 230. The y-axis represents intensity. The spectrum shows several peaks in the aromatic region (110-160 ppm) and aliphatic region (20-40 ppm). A large solvent peak for DMSO-d₆ is visible at approximately 40 ppm. Labeled peaks are indicated by blue and green lines with corresponding chemical shift values.

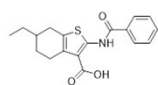
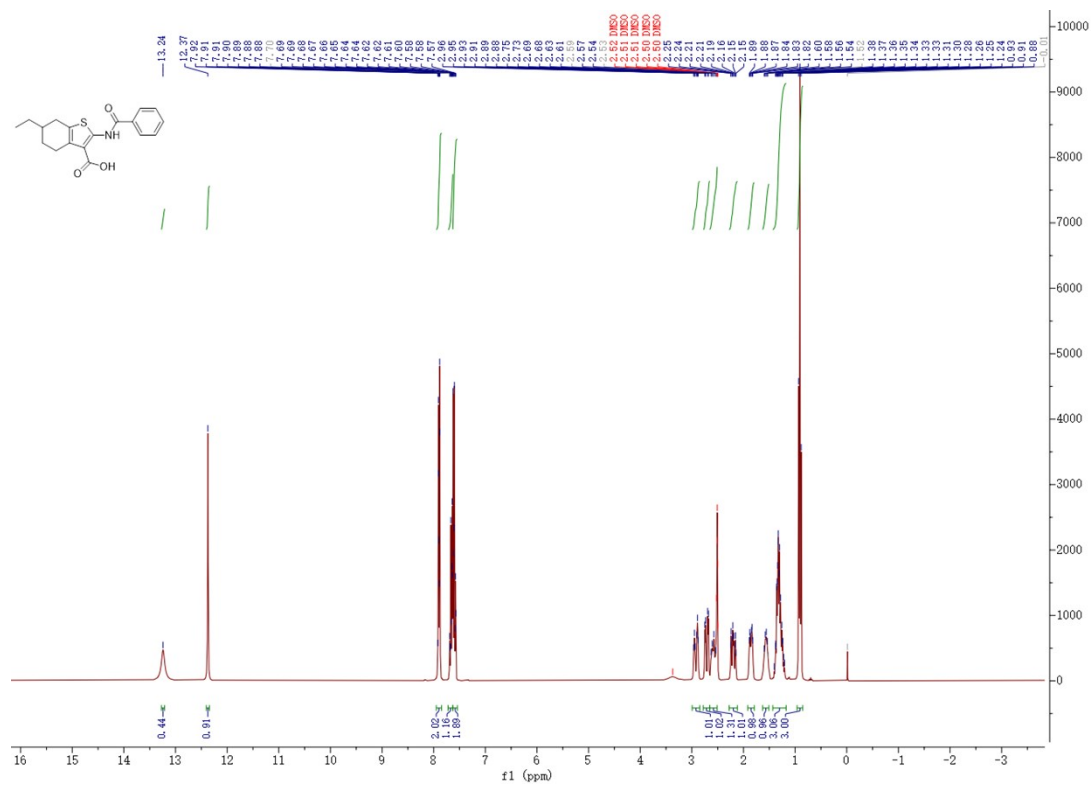
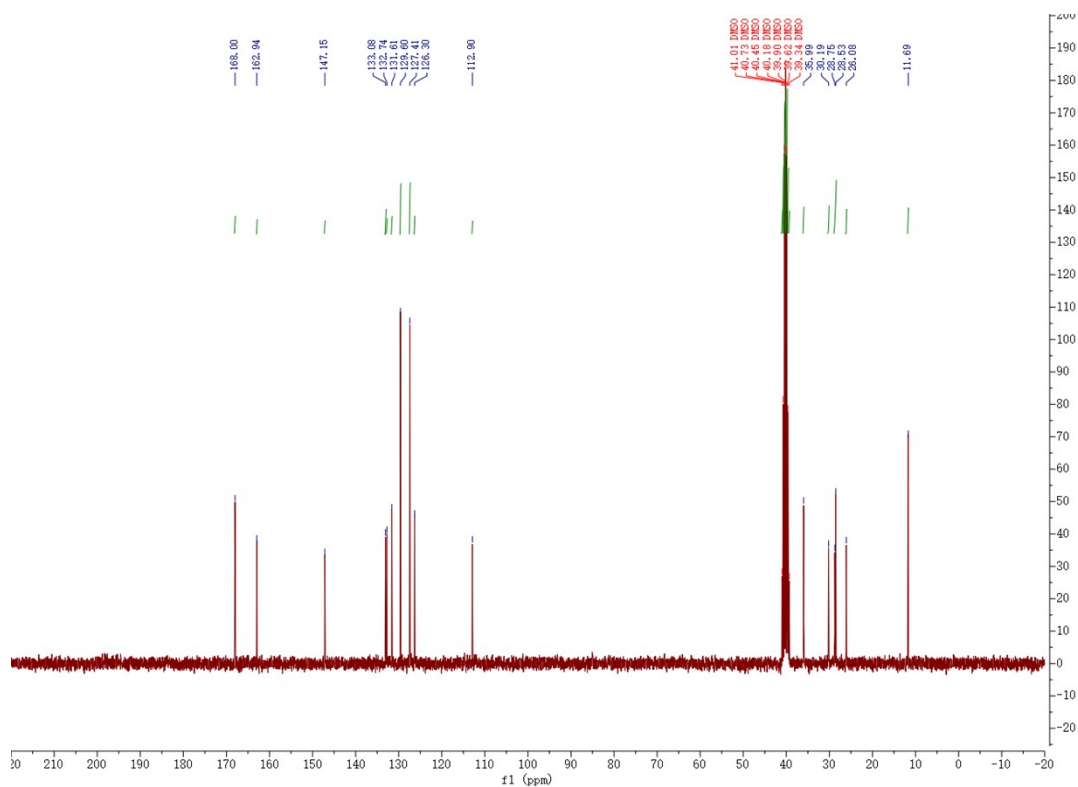
Chemical shift values (ppm) for labeled peaks:

- 163.46, 160.66, 158.51, 157.36
- 131.13, 130.97, 128.77, 128.73, 127.36, 126.96
- 119.54
- 102.97
- 40.78 (DMSO), 40.74 (DMSO), 40.70 (DMSO), 40.34 (DMSO), 40.22 (DMSO), 39.66 (DMSO), 39.47 (DMSO), 39.43 (DMSO), 39.39 (DMSO), 39.35 (DMSO), 39.31 (DMSO), 39.27 (DMSO), 39.23 (DMSO), 39.19 (DMSO), 39.15 (DMSO), 39.11 (DMSO), 39.07 (DMSO), 39.03 (DMSO), 38.99 (DMSO), 38.95 (DMSO), 38.91 (DMSO), 38.87 (DMSO), 38.83 (DMSO), 38.79 (DMSO), 38.75 (DMSO), 38.71 (DMSO), 38.67 (DMSO), 38.63 (DMSO), 38.59 (DMSO), 38.55 (DMSO), 38.51 (DMSO), 38.47 (DMSO), 38.43 (DMSO), 38.39 (DMSO), 38.35 (DMSO), 38.31 (DMSO), 38.27 (DMSO), 38.23 (DMSO), 38.19 (DMSO), 38.15 (DMSO), 38.11 (DMSO), 38.07 (DMSO), 38.03 (DMSO), 38.00 (DMSO), 37.96 (DMSO), 37.92 (DMSO), 37.88 (DMSO), 37.84 (DMSO), 37.80 (DMSO), 37.76 (DMSO), 37.72 (DMSO), 37.68 (DMSO), 37.64 (DMSO), 37.60 (DMSO), 37.56 (DMSO), 37.52 (DMSO), 37.48 (DMSO), 37.44 (DMSO), 37.40 (DMSO), 37.36 (DMSO), 37.32 (DMSO), 37.28 (DMSO), 37.24 (DMSO), 37.20 (DMSO), 37.16 (DMSO), 37.12 (DMSO), 37.08 (DMSO), 37.04 (DMSO), 37.00 (DMSO), 36.96 (DMSO), 36.92 (DMSO), 36.88 (DMSO), 36.84 (DMSO), 36.80 (DMSO), 36.76 (DMSO), 36.72 (DMSO), 36.68 (DMSO), 36.64 (DMSO), 36.60 (DMSO), 36.56 (DMSO), 36.52 (DMSO), 36.48 (DMSO), 36.44 (DMSO), 36.40 (DMSO), 36.36 (DMSO), 36.32 (DMSO), 36.28 (DMSO), 36.24 (DMSO), 36.20 (DMSO), 36.16 (DMSO), 36.12 (DMSO), 36.08 (DMSO), 36.04 (DMSO), 36.00 (DMSO), 35.96 (DMSO), 35.92 (DMSO), 35.88 (DMSO), 35.84 (DMSO), 35.80 (DMSO), 35.76 (DMSO), 35.72 (DMSO), 35.68 (DMSO), 35.64 (DMSO), 35.60 (DMSO), 35.56 (DMSO), 35.52 (DMSO), 35.48 (DMSO), 35.44 (DMSO), 35.40 (DMSO), 35.36 (DMSO), 35.32 (DMSO), 35.28 (DMSO), 35.24 (DMSO), 35.20 (DMSO), 35.16 (DMSO), 35.12 (DMSO), 35.08 (DMSO), 35.04 (DMSO), 35.00 (DMSO), 34.96 (DMSO), 34.92 (DMSO), 34.88 (DMSO), 34.84 (DMSO), 34.80 (DMSO), 34.76 (DMSO), 34.72 (DMSO), 34.68 (DMSO), 34.64 (DMSO), 34.60 (DMSO), 34.56 (DMSO), 34.52 (DMSO), 34.48 (DMSO), 34.44 (DMSO), 34.40 (DMSO), 34.36 (DMSO), 34.32 (DMSO), 34.28 (DMSO), 34.24 (DMSO), 34.20 (DMSO), 34.16 (DMSO), 34.12 (DMSO), 34.08 (DMSO), 34.04 (DMSO), 34.00 (DMSO), 33.96 (DMSO), 33.92 (DMSO), 33.88 (DMSO), 33.84 (DMSO), 33.80 (DMSO), 33.76 (DMSO), 33.72 (DMSO), 33.68 (DMSO), 33.64 (DMSO), 33.60 (DMSO), 33.56 (DMSO), 33.52 (DMSO), 33.48 (DMSO), 33.44 (DMSO), 33.40 (DMSO), 33.36 (DMSO), 33.32 (DMSO), 33.28 (DMSO), 33.24 (DMSO), 33.20 (DMSO), 33.16 (DMSO), 33.12 (DMSO), 33.08 (DMSO), 33.04 (DMSO), 33.00 (DMSO), 32.96 (DMSO), 32.92 (DMSO), 32.88 (DMSO), 32.84 (DMSO), 32.80 (DMSO), 32.76 (DMSO), 32.72 (DMSO), 32.68 (DMSO), 32.64 (DMSO), 32.60 (DMSO), 32.56 (DMSO), 32.52 (DMSO), 32.48 (DMSO), 32.44 (DMSO), 32.40 (DMSO), 32.36 (DMSO), 32.32 (DMSO), 32.28 (DMSO), 32.24 (DMSO), 32.20 (DMSO), 32.16 (DMSO), 32.12 (DMSO), 32.08 (DMSO), 32.04 (DMSO), 32.00 (DMSO), 31.96 (DMSO), 31.92 (DMSO), 31.88 (DMSO), 31.84 (DMSO), 31.80 (DMSO), 31.76 (DMSO), 31.72 (DMSO), 31.68 (DMSO), 31.64 (DMSO), 31.60 (DMSO), 31.56 (DMSO), 31.52 (DMSO), 31.48 (DMSO), 31.44 (DMSO), 31.40 (DMSO), 31.36 (DMSO), 31.32 (DMSO), 31.28 (DMSO), 31.24 (DMSO), 31.20 (DMSO), 31.16 (DMSO), 31.12 (DMSO), 31.08 (DMSO), 31.04 (DMSO), 31.00 (DMSO), 30.96 (DMSO), 30.92 (DMSO), 30.88 (DMSO), 30.84 (DMSO), 30.80 (DMSO), 30.76 (DMSO), 30.72 (DMSO), 30.68 (DMSO), 30.64 (DMSO), 30.60 (DMSO), 30.56 (DMSO), 30.52 (DMSO), 30.48 (DMSO), 30.44 (DMSO), 30.40 (DMSO), 30.36 (DMSO), 30.32 (DMSO), 30.28 (DMSO), 30.24 (DMSO), 30.20 (DMSO), 30.16 (DMSO), 30.12 (DMSO), 30.08 (DMSO), 30.04 (DMSO), 30.00 (DMSO), 29.96 (DMSO), 29.92 (DMSO), 29.88 (DMSO), 29.84 (DMSO), 29.80 (DMSO), 29.76 (DMSO), 29.72 (DMSO), 29.68 (DMSO), 29.64 (DMSO), 29.60 (DMSO), 29.56 (DMSO), 29.52 (DMSO), 29.48 (DMSO), 29.44 (DMSO), 29.40 (DMSO), 29.36 (DMSO), 29.32 (DMSO), 29.28 (DMSO), 29.24 (DMSO), 29.20 (DMSO), 29.16 (DMSO), 29.12 (DMSO), 29.08 (DMSO), 29.04 (DMSO), 29.00 (DMSO), 28.96 (DMSO), 28.92 (DMSO), 28.88 (DMSO), 28.84 (DMSO), 28.80 (DMSO), 28.76 (DMSO), 28.72 (DMSO), 28.68 (DMSO), 28.64 (DMSO), 28.60 (DMSO), 28.56 (DMSO), 28.52 (DMSO), 28.48 (DMSO), 28.44 (DMSO), 28.40 (DMSO), 28.36 (DMSO), 28.32 (DMSO), 28.28 (DMSO), 28.24 (DMSO), 28.20 (DMSO), 28.16 (DMSO), 28.12 (DMSO), 28.08 (DMSO), 28.04 (DMSO), 28.00 (DMSO), 27.96 (DMSO), 27.92 (DMSO), 27.88 (DMSO), 27.84 (DMSO), 27.80 (DMSO), 27.76 (DMSO), 27.72 (DMSO), 27.68 (DMSO), 27.64 (DMSO), 27.60 (DMSO), 27.56 (DMSO), 27.52 (DMSO), 27.48 (DMSO), 27.44 (DMSO), 27.40 (DMSO), 27.36 (DMSO), 27.32 (DMSO), 27.28 (DMSO), 27.24 (DMSO), 27.20 (DMSO), 27.16 (DMSO), 27.12 (DMSO), 27.08 (DMSO), 27.04 (DMSO), 27.00 (DMSO), 26.96 (DMSO), 26.92 (DMSO), 26.88 (DMSO), 26.84 (DMSO), 26.80 (DMSO), 26.76 (DMSO), 26.72 (DMSO), 26.68 (DMSO), 26.64 (DMSO), 26.60 (DMSO), 26.56 (DMSO), 26.52 (DMSO), 26.48 (DMSO), 26.44 (DMSO), 26.40 (DMSO), 26.36 (DMSO), 26.32 (DMSO), 26.28 (DMSO), 26.24 (DMSO), 26.



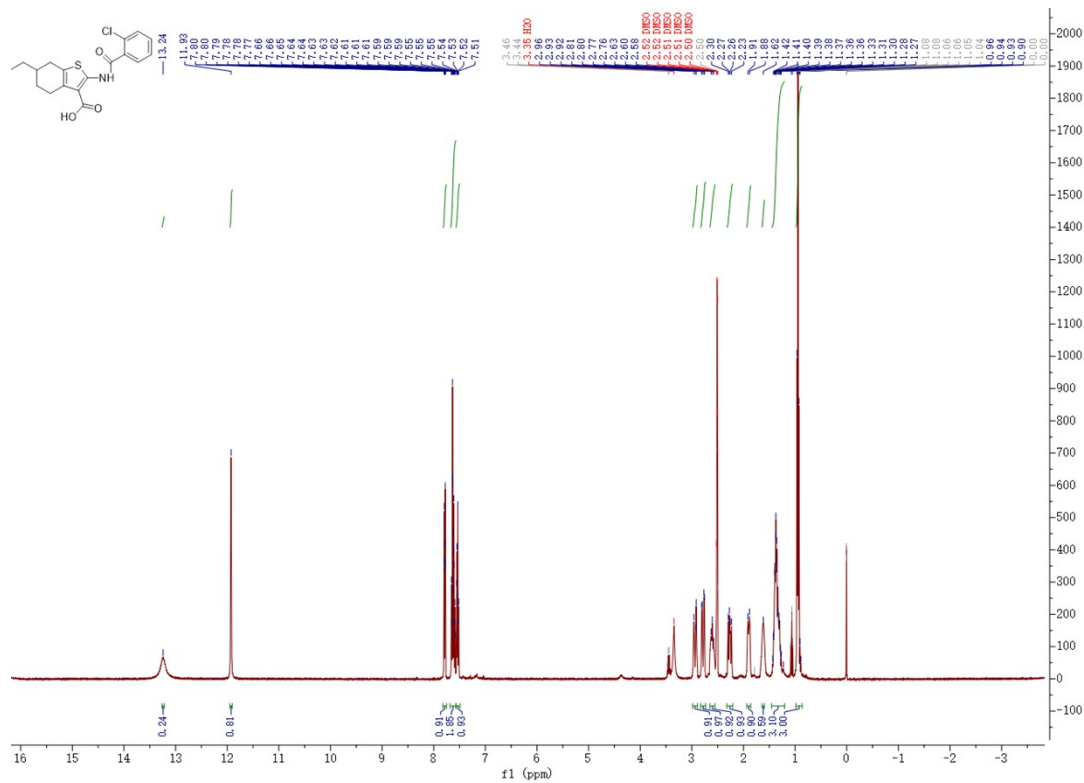
[illegible]

Compound 3k

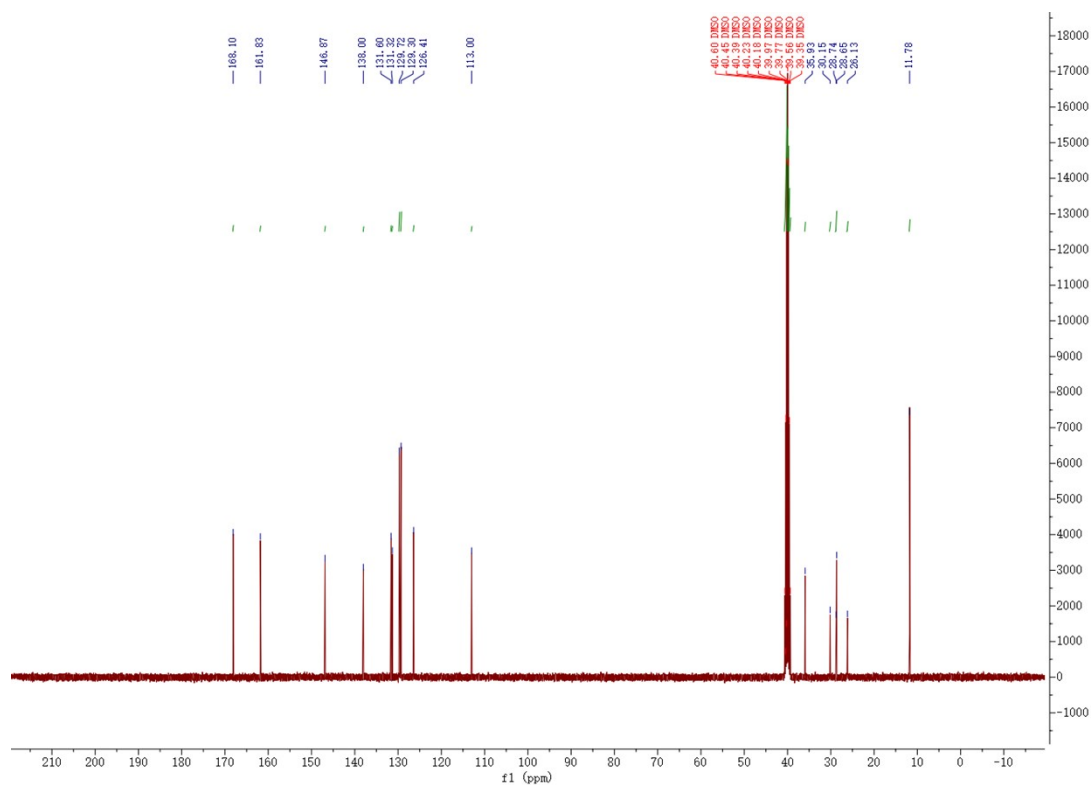


13C NMR spectrum of compound 10. The x-axis represents the chemical shift in ppm (f1), ranging from 210 to -10. The y-axis represents the intensity, ranging from -1000 to 18000. The spectrum shows several peaks in the aromatic region (110-145 ppm), a large solvent peak at 40 ppm, and aliphatic peaks between 20-40 ppm. A list of peak values is provided on the right side of the plot.

Chemical Shift (ppm)
167.53
162.62
145.89
133.81
133.24
131.73
130.8
130.69
130.55
128.33
126.79
113.43
40.60 (MSO)
40.39 (MSO)
40.19 (MSO)
39.99 (MSO)
39.87 (MSO)
39.76 (MSO)
39.55 (MSO)
35.93
35.17
28.58
26.10
11.81

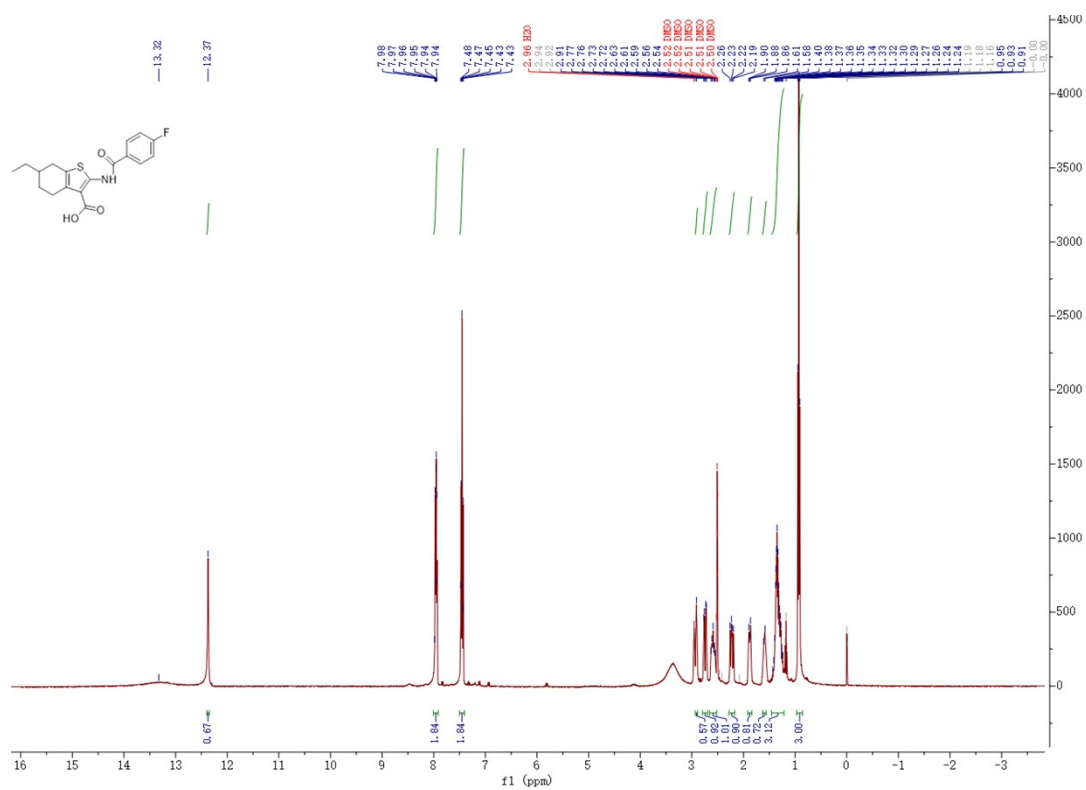


Compound 3m

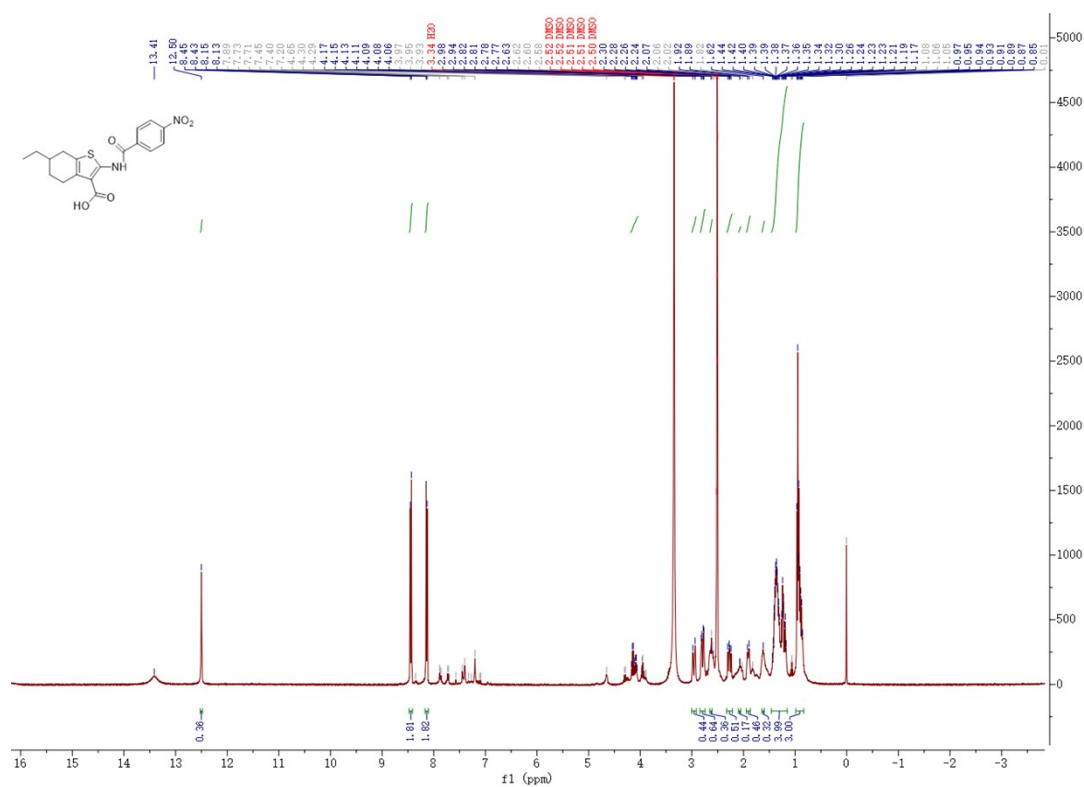
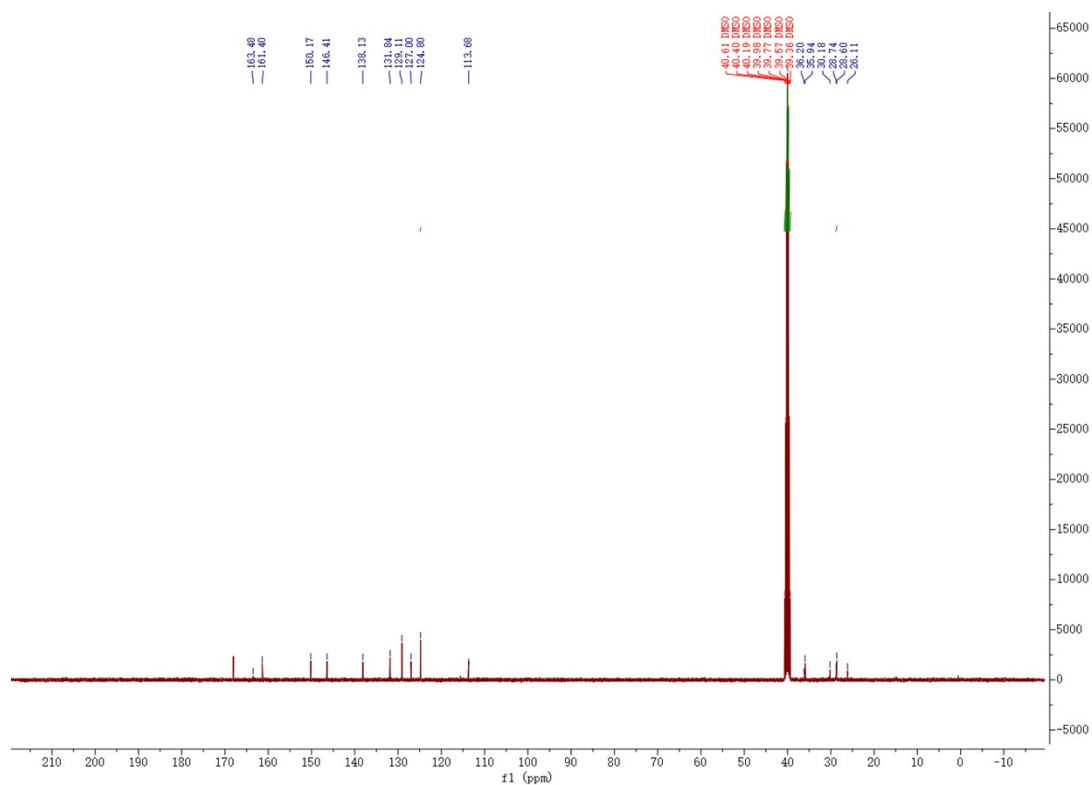


¹³C NMR spectrum of compound 10a in CDCl₃. The x-axis represents the chemical shift in ppm, ranging from -10 to 210. The y-axis represents the intensity. The spectrum shows several peaks: a triplet for the CDCl₃ solvent at approximately 77 ppm, a cluster of peaks between 110 and 140 ppm, and a cluster of peaks between 160 and 175 ppm. Specific peaks are labeled with their chemical shift values in ppm.

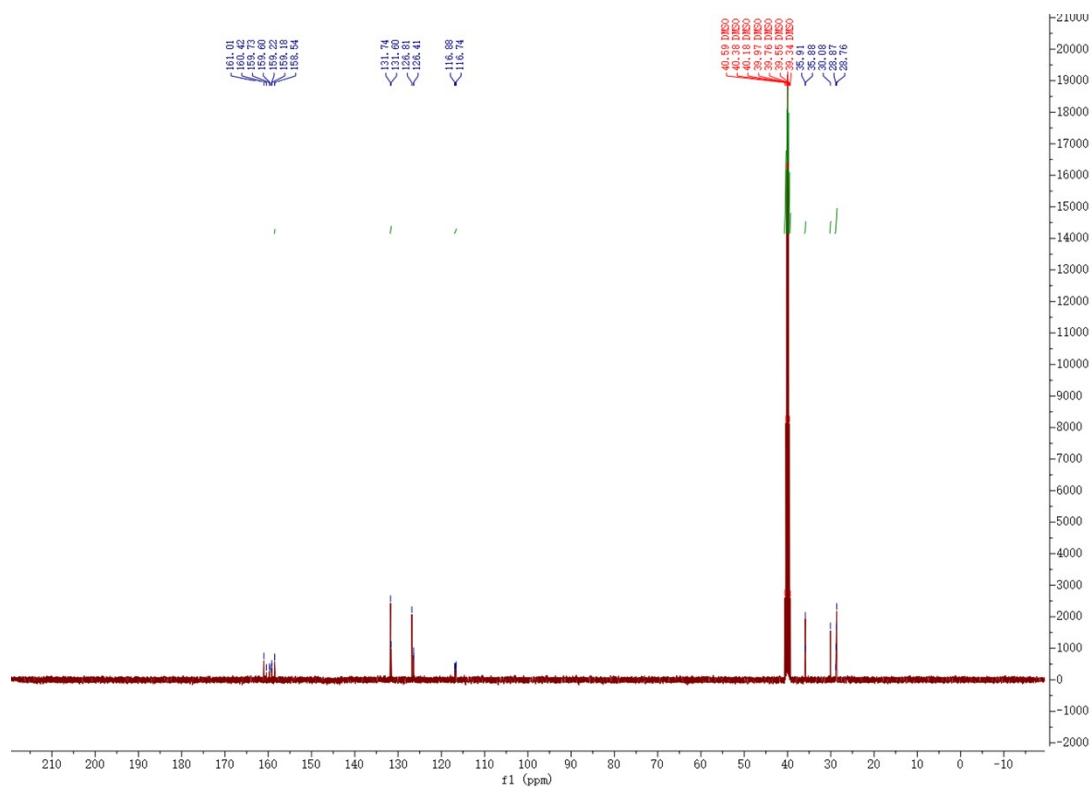
Chemical Shift (ppm)
168.12
166.34
163.04
161.07
131.59
130.20
129.17
128.28
116.04
116.62
112.93
40.59 (DMSO)
40.19 (DMSO)
39.79 (DMSO)
39.39 (DMSO)
38.99 (DMSO)
38.59 (DMSO)
38.19 (DMSO)
37.79 (DMSO)
37.39 (DMSO)
36.94
36.54
36.14
35.74
35.34
34.94
34.54
34.14
33.74
33.34
32.94
32.54
32.14
31.74
31.34
30.94
30.54
30.14
29.74
29.34
28.94
28.54
28.14
27.74
27.34
26.94
26.54
26.14
25.74
25.34
24.94
24.54
24.14
23.74
23.34
22.94
22.54
22.14
21.74
21.34
20.94
20.54
20.14
19.74
19.34
18.94
18.54
18.14
17.74
17.34
16.94
16.54
16.14
15.74
15.34
14.94
14.54
14.14
13.74
13.34
12.94
12.54
12.14
11.74
11.34
10.94
10.54
10.14
9.74
9.34
8.94
8.54
8.14
7.74
7.34
6.94
6.54
6.14
5.74
5.34
4.94
4.54
4.14
3.74
3.34
2.94
2.54
2.14
1.74
1.34
0.94
0.54
0.14
-0.24
-0.64
-1.04
-1.44
-1.84
-2.24
-2.64
-3.04
-3.44
-3.84
-4.24
-4.64
-5.04
-5.44
-5.84
-6.24
-6.64
-7.04
-7.44
-7.84
-8.24
-8.64
-9.04
-9.44
-9.84
-10.24
-10.64
-11.04
-11.44
-11.84
-12.24
-12.64
-13.04
-13.44
-13.84
-14.24
-14.64
-15.04
-15.44
-15.84
-16.24
-16.64
-17.04
-17.44
-17.84
-18.24
-18.64
-19.04
-19.44
-19.84
-20.24
-20.64
-21.04
-21.44
-21.84
-22.24
-22.64
-23.04
-23.44
-23.84
-24.24
-24.64
-25.04
-25.44
-25.84
-26.24
-26.64
-27.04
-27.44
-27.84
-28.24
-28.64
-29.04
-29.44
-29.84
-30.24
-30.64
-31.04
-31.44
-31.84
-32.24
-32.64
-33.04
-33.44
-33.84
-34.24
-34.64
-35.04
-35.44
-35.84
-36.24
-36.64
-37.04
-37.44
-37.84
-38.24
-38.64
-39.04
-39.44
-39.84
-40.24
-40.64
-41.04
-41.44
-41.84
-42.24
-42.64
-43.04
-43.44
-43.84
-44.24
-44.64
-45.04
-45.44
-45.84
-46.24
-46.64
-47.04
-47.44
-47.84
-48.24
-48.64
-49.04
-49.44
-49.84
-50.24
-50.64
-51.04
-51.44
-51.84
-52.24
-52.64
-53.04
-53.44
-53.84
-54.24
-54.64
-55.04
-55.44
-55.84
-56.24
-56.



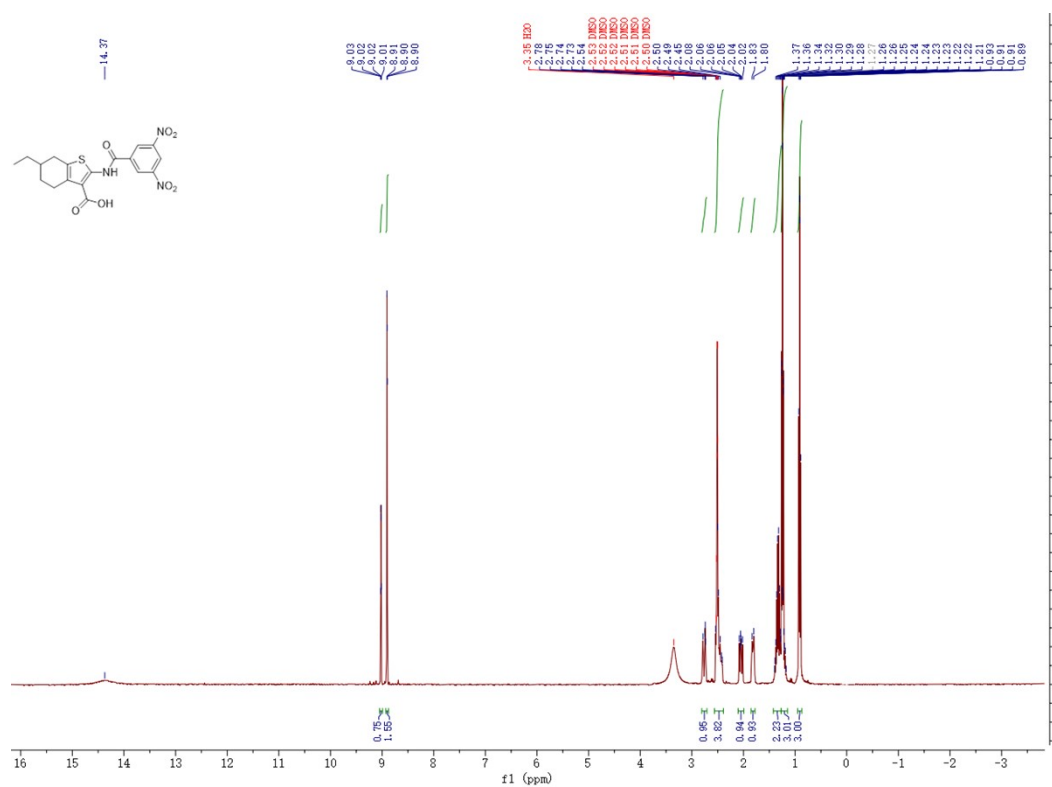
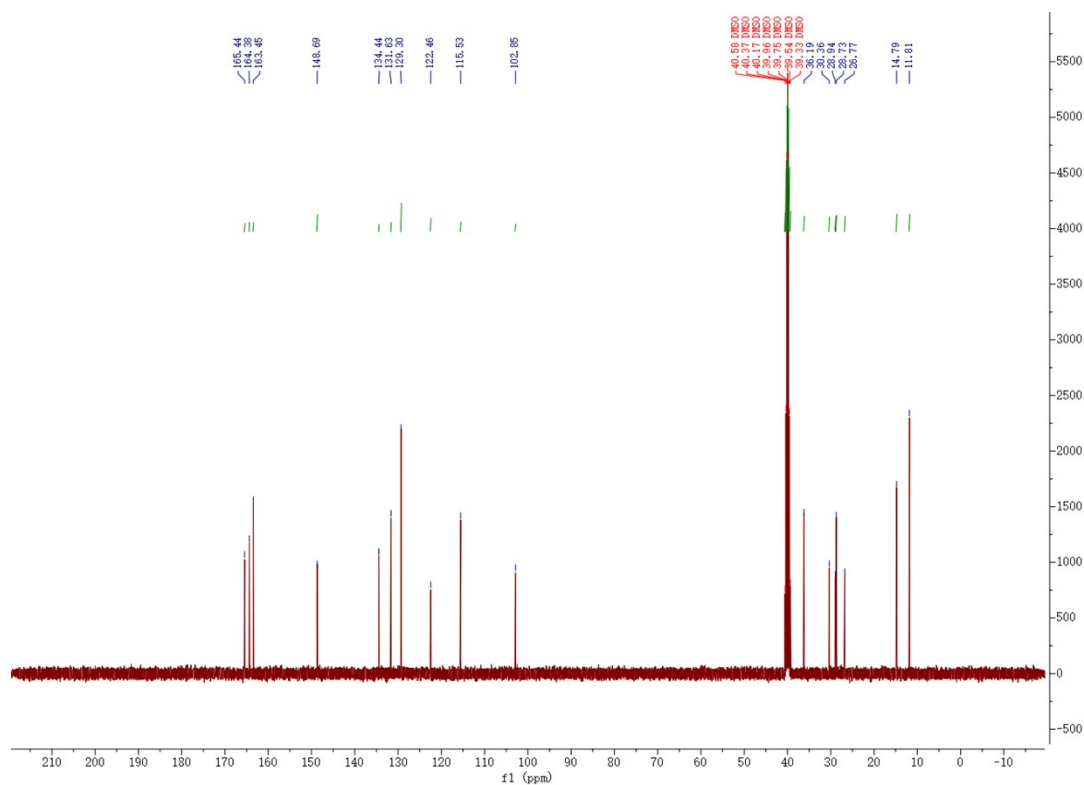
Compound 3o



Compound 3p



Compound 3q



Compound 3r

