

Table S2. Experimental and calculated frequencies (cm⁻¹) and intensities (km mol⁻¹) for T1, T2a and T2b in xenon and argon matrices^a

Calculated		Xe (15K)		Xe (30K)		Ar (13K)		Species	Approximate Description
ν	I	ν	I	ν	I	ν	I		
3451	128	3461 , 3450	w	3461 , 3450	w	3483	m	T2a	ν NH
3451	121	3451, 3449	w	n.o.		3483	m	T2b	ν NH
3446	124	3444, 3440	m	3444, 3440	m	3474	w	T1	ν NH
3111	7	3171	vw	3171	vw	n.o.		T2a	ν CH(R')
3110	10	n.o.		3166, 3164, 3162	vw	3162	vw	T1	ν CH(R')
3109	6	3162	vw	n.o.		n.o.		T2b	ν CH(R')
3086	1	n.o.		n.o.		n.o.		T1	ν CH(R)
3080	1	n.o.		n.o.		n.o.		T2b	ν CH(R)
3080	1	n.o.		n.o.		n.o.		T2a	ν CH(R)
		1612, 1608	w	1612, 1608	w	1613	m	T1	
1590	216	1596 , 1593	vs	1596 , 1593	vs	1598	vs	T1	ν N1'-C5 + ν N=C(R) + δ NCN(R) + δ N1'C5N4
						1591	vw	T2a	
1571	229	1584 , 1582, 1578, 1575	m	1584 , 1582, 1578, 1575	s	1585	s	T2a	ν N=C(R) + ν N1'-C5 + δ NCN(R) + δ CNN(R) + δ CNC(R)
						1579, 1578	vw	T2a	
1545	275	1555 , 1552	w	n.o.		1558 , 1556	w	T2b	ν N1'-C5 + ν N=C(R) + δ NNC(R) + δ NCN(R) + δ CNC(R)
1525	45	1530 , 1529, 1526	w	1530 , 1529, 1526	vw	1536, 1531 , 1530	vw	T1	ν N-C(R) + ν N=C(R) + δ NCN(R) + δ N1'C5N4
1521	18	1521	vw	-		1523	vw	T2b	ν N=C(R) + δ NH + ν N-C(R) + ν N1'-C5 + δ NCN(R) + δ N1'C5N1
1510	37	1504 , 1503	vw	1504 , 1503	vw	1506	vw	T2a	ν N=C(R) + ν N1'-C5 + δ NH
		1494	vw	1493	vw	1493	vw	T2a	
1470	2	n.o.		n.o.		n.o.		T2b	ν N=C(R') + δ CH(R') + δ NCN(R')
1467	22	1458 , 1457, 1455	vw	1458 , 1457, 1455	vw	1458	vw	T1	ν N=C(R') + δ CH(R') + δ NCN(R')
1465	22	1454	vw	1454	vw	1455	vw	T2a	ν N=C(R') + δ CH(R') + δ NCN(R')
1451	24	1443	w	1444, 1443	vw	1449, 1447 , 1446	vw	T2a	ν N-C(R) + δ NH + δ CH(R) + δ NCN(R)

1450	30	1441	vw	n.o.		n.o.		T2b	$vN-C(R) + \delta NH + \delta CH(R) + \delta NCN(R)$
1412	6	1413	vw	1413	vw	1419, 1416, 1414	vw	T1	$vN-C(R) + vN=C(R) + \delta NH$
1383	24	1382	vw	n.o.		1382	vw	T2b	$vN=C(R) + vN-C(R')$
1379	1	1375	vw	1375	vw	1376	vw	T1	$vN-C(R') + vN=C(R) + \delta NH + \delta CH(R') + \delta NCN(R')$
		1371	vw		vw			T2a	
		1368	vw	1368	vw			T2a	
1361	26	1364	vw	1364	vw	1363	vw	T2a	$vN-C(R',R) + \delta CH(R') + \delta NCN(R') + vN=N(R')$
		1357	vw		vw			T2b	
1341	14	1359 , 1358	vw	1359 , 1358	vw	1358	w	T2a	$vN=C(R) + vN-C(R') + \delta NNC(R) + \delta NCN(R) + \delta CNC(R)$
						1351	vw	T2a	
						1342	vw	T1	
						1317	vw	T2a	
1317	19	1315, 1309	vw	n.o.		1309	vw	T2b	$vN=N(R') + vN-C(R) + \delta CH(R') + \delta NCN(R',R) + vN=C(R) + \delta CNN(R) + \delta CNC(R)$
		1298	vw					T2b	
1303	14	1284	vw	1284	vw	1284	vw	T1	$vN=N(R')$
1296	38	1276	vw	n.o.		1277, 1274	vw	T2b	$vN=N(R') + \delta CH(R) + \delta NCN(R) + vN=C(R)$
1292	39	1274	vw	1274	vw	1271	w	T2a	$vN=N(R') + \delta CH(R) + \delta NCN(R) + vN=C(R) + vN-C(R)$
1281	44	1268 , 1267	w	1269, 1266	vw	1270 , 1265	w	T1	$\delta CH(R) + \delta NCN(R) + vN-C(R) + vN=C(R)$
				1248	vw			T2a	
1261	39	1245, 1244	vw	1245, 1244	vw	1243	vw	T2a	$vN=N(R') + \delta CH(R) + \delta NCN(R)$
1254	16	1243	vw	n.o.		1240	vw	T2b	$vN=N(R') + \delta CH(R',R) + \delta NCN(R',R) + vN-C(R')$
1243	5	1236	vw	1236	vw	1234	vw	T1	$\delta NH + \delta CH(R') + \delta NCN(R') + vN-C(R)$
						1214	vw	T2a	
1194	16	1195 , 1192	vw	1195 , 1192	vw	1196, 1194	vw	T1	$vN-C(R) + \delta NNC(R') + \delta NCN(R') + \delta NNN(R') + \delta CH(R')$
1180	14	1189	vw	n.o.		1189	vw	T2b	$vN-C(R',R) + vN-N(R,R')$
		1184	vw	1183	vw			T2b	
		1179	vw	1179	vw	1180	vw	T2a	

1178	8	1177	vw	1177	vw	1177	vw	T2a	$\delta\text{CH}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \nu\text{N}=\text{C}(\text{R}')$
1161	12	1166, 1163	vw	1166, 1163	vw	1166 , 1164	vw	T1	$\delta\text{CH}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R}') + \nu\text{N}=\text{C}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}')$
1154	9	n.o.		n.o.		1152	vw	T2b	$\delta\text{CH}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R}') + \delta\text{NNC}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}')$
1147	15	1152, 1148	vw	1152, 1148	vw	1134	vw	T2a	$\nu\text{N}-\text{C}(\text{R},\text{R}') + \delta\text{NH} + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R})$
1126	8	1131 , 1128	vw	1131	vw	1128	vw	T1	$\delta\text{NNC}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R})$
		1125	vw	1125	vw			T2a	
				1115	vw			T1	
1106	12	1102	vw	n.o.		1105	vw	T2b	$\delta\text{NNC}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R})$
1105	10	1101 ,1098	vw	1101 , 1098	vw	1102	vw	T2a	$\delta\text{NNC}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R}')$
						1096, 1095	vw	T1	
1087	36	1080	vs	n.o.		1081	s	T2b	$\nu\text{N}-\text{N}(\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R})$
1084	10	1094	vw	1094	vw	n.o.	vw	T2a	$\nu\text{N}-\text{N}(\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{C}(\text{R})$
1081	27	1080	vs	1080	s	1081	s	T1	$\delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNCN}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R}')$
1073	29	1072	vw	n.o.		1081, 1073 , 1071	vw	T2b	$\delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNCN}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}',\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}')$
1072	42	1080, 1074, 1071 , 1070	vw	1080, 1074, 1071, 1070	vw	1069	vw	T2a	$\delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNCN}(\text{R}') + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R}')$
1069	50	1067, 1065	w	1067, 1065	w	1061	vw	T1	$\nu\text{N}-\text{N}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNCN}(\text{R}')$
		1053	vw	1052	vw			T2a	
						1007	vw	T1	
1001	33	1005 , 1004	vw	1005 , 1004, 1003	vw	1002	vw	T1	$\nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{NNC}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{N1}'\text{C5N4}$
991	45	997	w	997	w	997, 996	w	T2a	$\delta\text{NNC}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
991	46	997	w	n.o.		997, 996	w	T2b	$\delta\text{CNCN}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
983	31	979	vw	n.o.		980	vw	T2b	$\delta\text{CNCN}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
980	34	979	vw	980, 978	vw	979	vw	T2a	$\delta\text{NNC}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}) + \nu\text{N}-\text{N}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
980	67	976	vs	976	vs	976	m	T1	$\delta\text{CNCN}(\text{R},\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R},\text{R}') + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
963	4	960	vw	961	vw	960	vw	T2a	$\delta\text{NCN}(\text{R},\text{R}') + \delta\text{CNCN}(\text{R},\text{R}') + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CH}(\text{R})$
963	2	960	vw	n.o.		n.o.		T2b	$\delta\text{NNC}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{N1}'\text{C5N1}$

962	3	956	vw	956	vw	955	vw	T1	$\delta\text{NNC}(\text{R}) + \delta\text{NCN}(\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R}) + \delta\text{CH}(\text{R}) + \delta\text{N1}'\text{C5N4}$
950	5	935	vw	935	vw	938	vw	T1	$\nu\text{N-N}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNN}(\text{R}')$
943	8	934	vw	934	vw	937	vw	T2a	$\nu\text{N-N}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}') + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNN}(\text{R}')$
941	9	931	vw	n.o.		934	vw	T2b	$\nu\text{N-N}(\text{R}') + \delta\text{NCN}(\text{R}',\text{R}) + \delta\text{NNN}(\text{R}') + \delta\text{CNN}(\text{R}',\text{R}) + \delta\text{CNC}(\text{R})$
891	14	884, 881	vw	884, 881	vw	885, 884	vw	T1	$\gamma\text{CH}(\text{R})$
867	14	864	vw	864	vw	866	vw	T2a	$\gamma\text{CH}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}')$
866	12	861, 858	vw	861	vw	866	vw	T1	$\gamma\text{CH}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}')$
863	15	861	vw	n.o.		862	vw	T2b	$\gamma\text{CH}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}')$
854	14	860	vw	n.o.		859	vw	T2b	$\gamma\text{CH}(\text{R}) + \tau\text{CNCN}(\text{R}) + \tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
850	14	n.o.		858	vw	858	vw	T2a	$\gamma\text{CH}(\text{R}) + \tau\text{NCNN}(\text{R}) + \tau\text{NCNC}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
751	14	738	vw	n.o.		741	vw	T2b	$\tau\text{CNNC}(\text{R}) + \tau\text{NCNN}(\text{R}) + \tau\text{CNCN}(\text{R}) + \gamma\text{N1N4N1}'\text{C5}$
749	14	737	w	737	w	740	vw	T2a	$\tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R}) + \tau\text{NCNC}(\text{R}) + \gamma\text{N1}'\text{N4N1C5}$
722	1	716, 714	vw	716, 715	vw	717	vw	T1	$\tau\text{CNNC}(\text{R}) + \tau\text{NCNN}(\text{R}) + \tau\text{CNCN}(\text{R}) + \gamma\text{N4N1N1}'\text{C5}$
717	1	n.o.		n.o.		n.o.		T2b	$\tau\text{NNCN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}')$
717	2	711	vw	711	vw	712	vw	T2a	$\tau\text{NNCN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}')$
		688	vw					T1	
716	0	n.o.		n.o.		n.o.		T1	$\tau\text{NNCN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \tau\text{NNNN}(\text{R}')$
680	43	673, 672, 671, 670	w	673, 672	m	672	m	T1	$\tau\text{CNCN}(\text{R}) + \tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
659	6	659	vw	n.o.		659	vw	T2b	$\tau\text{CNCN}(\text{R}) + \tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
659	10	657	vw	657	vw	658	vw	T2a	$\tau\text{NCNN}(\text{R}) + \tau\text{NCNC}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
656	5	650	vw	n.o.		649	vw	T2b	$\tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \gamma\text{C5N2}'\text{C5}'\text{N1}'$
655	2	650	vw	650	vw	648	vw	T2a	$\tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \gamma\text{C5C5}'\text{N2}'\text{N1}'$
653	12	645	w	645	w	646, 645	vw	T1	$\tau\text{NNNN}(\text{R}') + \tau\text{NCNN}(\text{R}') + \tau\text{NNNC}(\text{R}') + \gamma\text{C5N2}'\text{C5}'\text{N1}'$
545	59	556, 555	m	556, 555	s	553, 551, 549	w	T1	$\gamma\text{NH} + \tau\text{CNCN}(\text{R}) + \tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
532	82	555	m	555	s	562	w	T2a	$\gamma\text{NH} + \tau\text{NCNN}(\text{R}) + \tau\text{NCNC}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$
521	84	550, 547	w	n.o.		560	vw	T2b	$\gamma\text{NH} + \tau\text{CNCN}(\text{R}) + \tau\text{NNCN}(\text{R}) + \tau\text{CNNC}(\text{R})$

^a Abbreviations: ν – bond stretching, δ – bending, deformation in plane, γ – out-of-plane bending, τ – torsion.