**Supplementary Material for Manuscript**

**Crystal structure from laboratory X-ray powder diffraction data, DFT-D calculations, and Hirshfeld surface analysis** **of (*S*)-Dapoxetine Hydrochloride**

Analio J. Dugarte-Dugarte1, Robert A. Toro2, Jacco van de Streek3, José Antonio Henao2,

Graciela Díaz de Delgado1, José Miguel Delgado1.

1*Laboratorio de Cristalografía-LNDRX, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de los Andes, Mérida 5101, Venezuela*.

*2Grupo de Investigación en Química Estructural (GIQUE), Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.*

3*Avant-garde Materials Simulation, Alte Str. 2, D-79249 Merzhausen, Germany*

A picture containing table

Description automatically generated

Figure S1. ATR-IR of Dapoxetine Hydrochloride.



Figure S2. Superposition of the pattern reported by Selvakumar (2018) with the powder recorded in the present study.

Table S1. Atomic coordinates and isotropic displacement parameters for all atoms in the structure of Dapoxetine Hydrochloride.

Atom x y z U(eq) [Ang^2]

---- --- --- --- -----------

Cl1 0.1388(12) 1.1363(7) 0.26468(13) 0.089(3)

O1 0.4450(12) 0.6946(8) 0.1171(2) 0.081(5)

N1 0.4293(9) 0.9201(5) 0.24229(17) 0.076(3)

C1 0.4541(9) 0.8813(5) 0.19095(19) 0.076(3)

C2 0.2650(8) 0.8051(5) 0.17172(19) 0.076(3)

C3 0.2751(9) 0.7784(5) 0.1206(2) 0.076(3)

C4 0.4794(10) 0.6444(7) 0.07285(19) 0.076(3)

C5 0.3597(11) 0.6656(7) 0.03149(18) 0.076(3)

C6 0.4077(10) 0.6039(7) -0.01248(18) 0.076(3)

C7 0.5792(10) 0.5226(7) -0.01611(18) 0.076(3)

C8 0.7092(8) 0.5047(5) 0.02394(10) 0.076(3)

C9 0.8844(6) 0.4269(5) 0.01984(9) 0.076(3)

C10 1.0119(5) 0.4043(5) 0.05885(8) 0.076(3)

C11 0.9657(9) 0.4585(6) 0.10393(10) 0.076(3)

C12 0.7935(7) 0.5365(5) 0.10966(11) 0.076(3)

C13 0.6618(5) 0.5604(3) 0.06952(8) 0.076(3)

C14 0.6337(9) 0.9596(5) 0.26203(17) 0.076(3)

C15 0.3417(8) 0.8225(5) 0.27181(17) 0.076(3)

C16 0.4971(10) 0.9940(6) 0.1584(2) 0.076(3)

C17 0.3445(10) 1.0901(6) 0.1531(2) 0.076(3)

C18 0.3845(10) 1.1918(6) 0.1261(2) 0.076(3)

C19 0.5680(9) 1.1971(6) 0.1015(2) 0.076(3)

C20 0.7181(10) 1.1039(6) 0.1052(2) 0.076(3)

C21 0.6847(10) 1.0026(6) 0.1323(2) 0.076(3)

H1 0.5734(16) 0.8281(10) 0.1919(4) 0.091(3)

H1N 0.3372(18) 0.9891(10) 0.2449(5) 0.091(3)

H2A 0.251(2) 0.7268(9) 0.1875(4) 0.091(3)

H2B 0.1376(16) 0.8486(11) 0.1774(4) 0.091(3)

H3A 0.302(2) 0.8509(9) 0.1020(4) 0.091(3)

H3B 0.1475(16) 0.7396(11) 0.1108(4) 0.091(3)

H5 0.2386(16) 0.7174(11) 0.0325(4) 0.091(3)

H6 0.3187(19) 0.6190(13) -0.0391(4) 0.091(3)

H7 0.618(2) 0.4840(14) -0.0455(3) 0.091(3)

H9 0.915(2) 0.3896(14) -0.0103(3) 0.091(3)

H10 1.1303(19) 0.3495(14) 0.0548(4) 0.091(3)

H11 1.0538(18) 0.4431(13) 0.1310(3) 0.091(3)

H12 0.763(2) 0.5715(12) 0.1401(3) 0.091(3)

H14A 0.7286(17) 0.8914(10) 0.2599(4) 0.091(3)

H14B 0.611(2) 0.9828(12) 0.2944(3) 0.091(3)

H14C 0.6874(19) 1.0289(10) 0.2449(4) 0.091(3)

H15A 0.342(2) 0.8535(12) 0.3036(3) 0.091(3)

H15B 0.2015(15) 0.8035(12) 0.2623(5) 0.091(3)

H15C 0.4297(18) 0.7514(10) 0.2695(5) 0.091(3)

H17 0.2167(17) 1.0884(11) 0.1708(4) 0.091(3)

H18 0.2822(17) 1.2562(10) 0.1238(5) 0.091(3)

H19 0.5946(19) 1.2658(10) 0.0817(4) 0.091(3)

H20 0.8451(16) 1.1104(11) 0.0877(4) 0.091(3)

H21 0.7878(17) 0.9385(10) 0.1339(5) 0.091(3)

=======================================================

The Temperature Factor has the Form of Exp(-T) Where

T = 8\*(Pi\*\*2)\*U\*(Sin(Theta)/Lambda)\*\*2 for Isotropic Atoms

Table S2. Bond distances and angles in Dapoxetine Hydrochloride.

O1 -C3 1.401(10) C20 -C21 1.340(9)

O1 -C4 1.374(8) C1 -H1 0.944(12)

N1 -C1 1.513(7) C2 -H2A 0.950(11)

N1 -C14 1.468(8) C2 -H2B 0.943(12)

N1 -C15 1.443(7) C3 -H3A 0.950(12)

C1 -C2 1.544(8) C3 -H3B 0.948(12)

C1 -C16 1.536(8) C5 -H5 0.945(13)

N1 -H1N 0.941(12) C6 -H6 0.951(13)

C2 -C3 1.470(8) C7 -H7 0.957(12)

C4 -C5 1.408(8) C9 -H9 0.958(11)

C4 -C13 1.463(7) C10 -H10 0.957(14)

C5 -C6 1.435(8) C11 -H11 0.959(11)

C6 -C7 1.392(10) C12 -H12 0.955(10)

C7 -C8 1.409(7) C14 -H14A 0.945(12)

C8 -C9 1.389(7) C14 -H14B 0.956(10)

C8 -C13 1.446(4) C14 -H14C 0.946(12)

C9 -C10 1.384(4) C15 -H15A 0.955(10)

C10 -C11 1.426(5) C15 -H15B 0.948(11)

C11 -C12 1.380(8) C15 -H15C 0.943(12)

C12 -C13 1.427(5) C17 -H17 0.950(13)

C16 -C21 1.398(9) C18 -H18 0.946(12)

C16 -C17 1.416(9) C19 -H19 0.936(13)

C17 -C18 1.349(9) C20 -H20 0.945(12)

C18 -C19 1.352(8) C21 -H21 0.946(12)

C19 -C20 1.378(9)

C3 -O1 -C4 115.7(6) C1 -C16 -C17 120.6(5)

C1 -N1 -C14 110.5(5) C1 -C16 -C21 121.0(5)

C1 -N1 -C15 113.2(4) C17 -C16 -C21 118.4(6)

C14 -N1 -C15 109.1(4) C16 -C17 -C18 121.0(6)

N1 -C1 -C2 113.6(5) C17 -C18 -C19 118.9(6)

N1 -C1 -C16 112.0(4) C18 -C19 -C20 121.4(6)

C2 -C1 -C16 109.9(4) C19 -C20 -C21 121.1(6)

C15 -N1 -H1N 106.4(9) C16 -C21 -C20 119.1(6)

C1 -N1 -H1N 110.7(10) N1 -C1 -H1 102.7(8)

C14 -N1 -H1N 106.9(9) C2 -C1 -H1 108.2(8)

C1 -C2 -C3 114.4(4) C16 -C1 -H1 110.2(8)

O1 -C3 -C2 103.1(5) C1 -C2 -H2A 111.8(9)

O1 -C4 -C5 127.1(7) C1 -C2 -H2B 110.0(8)

O1 -C4 -C13 114.9(5) C3 -C2 -H2A 107.0(8)

C5 -C4 -C13 118.0(5) C3 -C2 -H2B 107.4(8)

C4 -C5 -C6 121.8(6) H2A -C2 -H2B 105.9(11)

C5 -C6 -C7 120.9(5) O1 -C3 -H3A 110.1(9)

C6 -C7 -C8 118.7(5) O1 -C3 -H3B 110.7(9)

C7 -C8 -C9 118.7(4) C2 -C3 -H3A 113.0(8)

C7 -C8 -C13 122.3(5) C2 -C3 -H3B 109.5(8)

C9 -C8 -C13 119.0(3) H3A -C3 -H3B 110.3(12)

C8 -C9 -C10 120.2(3) C4 -C5 -H5 120.3(9)

C9 -C10 -C11 121.2(4) C6 -C5 -H5 117.8(9)

C10 -C11 -C12 120.7(4) C5 -C6 -H6 118.6(10)

C11 -C12 -C13 118.4(3) C7 -C6 -H6 120.5(9)

C4 -C13 -C8 118.2(3) C6 -C7 -H7 122.1(9)

C4 -C13 -C12 121.2(3) C8 -C7 -H7 119.0(10)

C8 -C13 -C12 120.6(3) C8 -C9 -H9 118.9(8)

C10 -C9 -H9 121.0(9) N1 -C15 -H15C 108.3(9)

C9 -C10 -H10 117.9(7) H15A -C15 -H15B 110.0(12)

C11 -C10 -H10 121.0(8) H15A -C15 -H15C 110.0(12)

C10 -C11 -H11 121.4(9) H15B -C15 -H15C 111.1(12)

C12 -C11 -H11 117.9(8) C16 -C17 -H17 120.7(9)

C11 -C12 -H12 120.0(8) C18 -C17 -H17 118.1(9)

C13 -C12 -H12 121.6(8) C17 -C18 -H18 119.7(10)

N1 -C14 -H14A 108.3(8) C19 -C18 -H18 121.4(10)

N1 -C14 -H14B 107.7(9) C18 -C19 -H19 119.5(9)

N1 -C14 -H14C 110.3(9) C20 -C19 -H19 119.1(9)

H14A -C14 -H14B 110.8(11) C19 -C20 -H20 119.5(9)

H14A -C14 -H14C 110.0(11) C21 -C20 -H20 119.4(9)

H14B -C14 -H14C 109.8(11) C16 -C21 -H21 120.8(10)

N1 -C15 -H15A 106.9(9) C20 -C21 -H21 120.1(10)

N1 -C15 -H15B 110.5(9)

Table S3. Torsion angles in Dapoxetine Hydrochloride.

C4 -O1 -C3 -C2 174.4(6)

C3 -O1 -C4 -C5 -1.8(12)

C3 -O1 -C4 -C13 178.0(6)

C14 -N1 -C1 -C2 164.0(4)

C14 -N1 -C1 -C16 -70.8(6)

C15 -N1 -C1 -C2 41.4(6)

C15 -N1 -C1 -C16 166.6(5)

N1 -C1 -C2 -C3 173.6(5)

C16 -C1 -C2 -C3 47.3(6)

N1 -C1 -C16 -C17 -63.3(7)

N1 -C1 -C16 -C21 118.5(6)

C2 -C1 -C16 -C17 63.9(7)

C2 -C1 -C16 -C21 -114.3(6)

C1 -C2 -C3 -O1 68.5(6)

O1 -C4 -C5 -C6 -177.8(7)

C13 -C4 -C5 -C6 2.4(10)

O1 -C4 -C13 -C8 -179.5(6)

O1 -C4 -C13 -C12 -1.3(8)

C5 -C4 -C13 -C8 0.4(8)

C5 -C4 -C13 -C12 178.6(5)

C4 -C5 -C6 -C7 -1.7(11)

C5 -C6 -C7 -C8 -1.9(10)

C6 -C7 -C8 -C9 -177.9(6)

C6 -C7 -C8 -C13 4.7(9)

C7 -C8 -C9 -C10 -178.1(5)

C13 -C8 -C9 -C10 -0.5(7)

C7 -C8 -C13 -C4 -3.9(7)

C7 -C8 -C13 -C12 177.8(5)

C9 -C8 -C13 -C4 178.6(5)

C9 -C8 -C13 -C12 0.4(6)

C8 -C9 -C10 -C11 0.8(7)

C9 -C10 -C11 -C12 -0.9(8)

C10 -C11 -C12 -C13 0.7(8)

C11 -C12 -C13 -C4 -178.6(5)

C11 -C12 -C13 -C8 -0.4(7)

C1 -C16 -C17 -C18 177.3(5)

C21 -C16 -C17 -C18 -4.5(9)

C1 -C16 -C21 -C20 -178.4(5)

C17 -C16 -C21 -C20 3.3(9)

C16 -C17 -C18 -C19 4.3(9)

C17 -C18 -C19 -C20 -3.0(9)

C18 -C19 -C20 -C21 2.0(9)

C19 -C20 -C21 -C16 -2.2(9)