New Journal of Chemistry
Manuscript ID: NJ-ART-04-2019-002207.R1

Supporting Information

Substituent effects on the stability, physicochemical properties and chemical reactivity of nitroimidazole derivatives with potential antiparasitic effect: A computational study

Linda Campos-Fernández[a,d,e], Carolina Barrientos-Salcedo[b], Edtson E. Herrera Valencia[c], Rocío Ortiz-Muñiz[d] and Catalina Soriano-Correa[a,*]

Table S1A. Geometric parameters obtained for 2-nitroimidazoles and 5-nitromidazoles at the M06-2X/6-311+G(d,p) level of theory.

Param. Geom.	BNZ[a] X-ray	BNZ	M-1	M-2	M-3	M-4	M-5	M-6	M-7	M-8	M-9	DMZ[b] X-ray
N_1-C_2	1.362	1.360	1.349	1.360	1.341	1.349	1.372	1.354	1.347	1.345	1.350	1.335
C_2-N_3	1.314	1.310	1.307	1.309	1.328	1.323	1.308	1.317	1.326	1.336	1.338	1.330
N_3-C_4	1.362	1.358	1.362	1.358	1.357	1.358	1.369	1.363	1.355	1.354	1.349	1.353
N_1-C_5	1.358	1.361	1.357	1.360	1.367	1.381	1.385	1.390	1.380	1.370	1.380	1.381
C_2-N_6	1.434	1.432	1.432	1.432	-	-	-	-	-	-	-	-
C_5-N_6	--	-	-	-	1.410	1.414	1.423	1.415	1.413	1.404	1.406	1.410
N_6-O_7	1.232	1.215	1.214	1.215	1.221	1.221	1.217	1.218	1.220	1.223	1.225	1.225
N_1-R	1.463	1.455	1.015	1.456	1.015	1.459	1.424	1.382	1.458	1.015	1.465	-
$N_1C_2N_3$	-	113.84	113.87	113.79	112.31	113.04	112.34	112.14	113.05	111.22	112.00	112.1
$N_1C_5C_4$	106.76	106.61	105.81	106.63	107.26	107.26	107.18	106.40	107.35	106.99	107.41	107.6
$C_2N_1C_5$	104.99	104.99	105.92	105.01	105.84	104.90	104.86	105.67	104.87	106.52	105.32	104.9
C_2N_1R	130.67	129.85	126.41	129.93	127.58	124.49	124.76	122.73	125.25	127.07	126.00	125.0
C_5N_1R	124.17	124.51	127.67	124.55	126.58	130.32	126.86	130.28	129.73	126.41	128.65	130.0
$O_7N_6O_8$	124.07	124.21	124.65	124.21	124.12	123.90	124.75	124.39	123.96	123.82	123.34	123.0
$C_2N_3C_4C_5$	0.00	-0.11	0.00	0.04	-0.01	-0.28	0.75	0.40	0.10	0.07	0.16	-
$N_3C_4C_5N_1$	-0.46	-0.73	-0.00	-0.82	-0.04	-0.40	-2.15	-1.60	0.26	0.10	0.04	-
$C_4N_3C_2N_1$	0.48	0.96	0.00	0.78	0.06	0.90	0.99	1.02	-0.44	-0.23	-0.31	-
$RN_1C_2N_3$	-176.13	-172.31	180.00	-173.15	179.93	-175.44	-162.25	-170.10	176.49	-179.81	178.39	-
$RN_1C_5C_4$	176.45	172.75	-180.00	173.63	-179.95	174.73	162.02	169.00	176.14	179.87	-178.21	-
$O_8N_6C_2N_1$	-5.0	0.99	0.00	1.54	-	-	-	-	-	-	-	-
$O_8N_6C_5N_1$	-	-	-	-	179.92	-0.90	-12.45	-9.99	176.07	0.74	-172.94	-

Values of the bond lengths are given in angstroms (Å); dihedral angles are given in degrees (^{o}). a) X-ray parameters were taken from Refs: a) [60]; b) [61].

Table S1B. Geometric parameters obtained for 5-nitromidazoles at the M06-2X/6-311+G(d,p) level of theory.

Param. Geom.	M-10	M-11	M-12	M-13	M-14	M-15	M-16	M-17	M-18	M-19	M-20	M-21	M-22
N_1-C_2	1.354	1.353	1.353	1.364	1.353	1.355	1.364	1.368	1.371	1.356	1.355	1.362	1.354
C_2-N_3	1.333	1.334	1.334	1.325	1.335	1.335	1.323	1.324	1.321	1.327	1.334	1.325	1.333
N_3-C_4	1.352	1.352	1.352	1.360	1.350	1.351	1.360	1.359	1.361	1.358	1.351	1.359	1.352
N_1-C_5	1.382	1.382	1.383	1.384	1.383	1.384	1.392	1.385	1.386	1.390	1.383	1.391	1.382
C_5-N_6	1.408	1.407	1.407	1.414	1.408	1.409	1.410	1.413	1.414	1.410	1.409	1.410	1.408
N_6-O_7	1.223	1.223	1.224	1.223	1.225	1.224	1.219	1.219	1.218	1.220	1.224	1.219	1.222
N_1-R	1.451	1.452	1.454	1.457	1.467	1.465	1.379	1.439	1.431	1.368	1.468	1.384	1.450
$N_1C_2N_3$	111.75	111.85	111.86	111.96	112.00	112.03	110.64	111.05	110.94	110.78	112.07	110.73	111.73
$N_1C_5C_4$	107.18	107.23	107.23	107.39	107.26	107.30	106.09	106.78	106.71	105.96	107.34	106.17	107.15
$C_2N_1C_5$	105.52	105.50	105.42	105.11	105.30	105.19	106.48	105.87	105.91	106.71	105.16	106.45	105.52
C_2N_1R	126.00	125.71	125.75	122.94	124.97	124.65	123.58	123.80	124.06	124.97	124.83	123.65	126.04
C_5N_1R	128.23	128.31	128.38	128.81	129.40	128.50	129.37	129.84	129.28	128.32	128.60	129.21	128.18
$O_7N_6O_8$	123.57	123.48	123.46	123.72	123.34	123.44	124.07	124.37	124.49	123.73	123.44	123.99	123.58
$C_2N_3C_4C_5$	0.03	0.08	-0.03	0.06	-0.05	0.11	0.23	-1.06	1.13	-0.18	0.05	0.17	0.03
$N_3C_4C_5N_1$	0.77	1.02	1.03	1.44	0.68	1.11	-1.20	1.75	-1.94	0.03	1.05	-1.26	-1.02
$C_4N_3C_2N_1$	-0.86	-1.21	-1.03	-1.59	-0.62	-1.35	0.88	-0.07	0.17	0.28	-1.19	1.04	1.03
$RN_1C_2N_3$	175.87	174.04	174.48	164.00	174.97	168.35	-173.68	173.87	-172.22	179.39	169.16	-173.06	-176.13
$RN_1C_5C_4$	-175.63	-173.63	-174.16	-162.36	-174.59	-167.47	173.12	-173.86	172.19	-179.50	-168.40	172.42	175.91
$O_8N_6C_5N_1$	-3.43	-3.22	-3.21	14.33	-1.93	1.95	-4.77	3.71	-2.53	1.69	1.96	-7.63	4.69

Values of the bond lengths are given in angstroms (Å); dihedral angles are given in degrees (^{0}). a) X-ray parameters were taken from Refs: a) [60]; b) [61].

Table S2. Condensed Fukui functions values for 2-nitroimidazoles and 5-nitroimidazoles at the M06-2X/6–311++G(2df,2p)// M06-2X/6–311+G(d,p) levels.[a]

Mol.	f^-				f^+				f^0			
	C5	N3	C4	C2	N3	N6	O7	O8	C5	C4	O7	O8
M-5	0.188	0.088	0.151	0.143	0.041	0.158	0.229	0.220	0.108	0.125	0.162	0.145
M-1	0.203	0.072	0.202	0.134	0.074	0.168	0.246	0.237	0.136	0.127	0.158	0.153
BNZ	0.001	0.001	0.001	0.001	0.073	0.164	0.245	0.212	0.034	0.048	0.123	0.106
M-2	0.191	0.070	0.198	0.129	0.073	0.164	0.244	0.206	0.130	0.126	0.159	0.133
M-6	0.019	0.054	0.094	0.087	0.045	0.155	0.227	0.204	0.055	0.094	0.136	0.123
M-18	0.173	0.090	0.135	0.107	0.044	0.156	0.229	0.205	0.101	0.119	0.163	0.137
M-16	0.168	0.090	0.135	0.107	0.046	0.159	0.233	0.209	0.097	0.118	0.166	0.139
M-17	0.172	0.089	0.135	0.107	0.044	0.157	0.229	0.209	0.100	0.119	0.163	0.139
M-21	0.163	0.087	0.136	0.107	0.045	0.159	0.234	0.200	0.094	0.118	0.165	0.133
M-7	0.000	0.001	0.001	0.001	0.048	0.163	0.235	0.210	0.013	0.048	0.118	0.105
M-19	0.169	0.088	0.135	0.107	0.047	0.159	0.232	0.184	0.098	0.118	0.166	0.124
M-4	0.181	0.088	0.148	0.145	0.047	0.164	0.233	0.218	0.103	0.123	0.166	0.145
M-3	0.183	0.091	0.151	0.156	0.047	0.165	0.235	0.231	0.107	0.124	0.167	0.154
M-13	0.164	0.091	0.139	0.108	0.044	0.160	0.233	0.220	0.094	0.118	0.163	0.146
M-10	0.165	0.087	0.136	0.110	0.049	0.160	0.231	0.206	0.096	0.118	0.165	0.139
M-22	0.161	0.085	0.136	0.109	0.048	0.160	0.230	0.205	0.094	0.118	0.164	0.138
M-11	0.163	0.086	0.136	0.110	0.049	0.160	0.230	0.207	0.095	0.118	0.164	0.139
M-8	0.175	0.093	0.134	0.114	0.049	0.162	0.230	0.227	0.103	0.118	0.165	0.153
M-20	0.003	0.008	0.008	0.002	0.047	0.161	0.229	0.209	0.013	0.054	0.118	0.107
M-12	0.162	0.086	0.135	0.110	0.049	0.160	0.230	0.206	0.094	0.118	0.164	0.139
M-15	0.167	0.086	0.134	0.109	0.048	0.160	0.228	0.209	0.095	0.117	0.165	0.141
M-14	0.167	0.084	0.135	0.112	0.048	0.162	0.229	0.210	0.096	0.118	0.164	0.142
M-9	0.162	0.085	0.137	0.112	0.049	0.162	0.230	0.217	0.095	0.118	0.163	0.146

Note: The values were order according to the highest value to the lowest value of the proton affinities (PA).