

Análisis estructural y electrónico de los principales conformémeros del complejo Mg(II)Crisina

Juan José MARTÍNEZ MEDINA, María de los Angeles JELLUSSICH & Nora Beatriz OKULIK

Material Suplementario

Figura S1. Estructura química del flavonoide crisina.

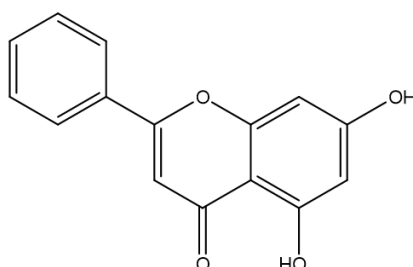


Figura S2. Modelos empleados en la búsqueda conformacional. Los modelos pentacoordinados (acetato monodentado) involucran geometrías piramidales de base cuadrada y bipiramidales de base triangular, mientras que los modelos hexacoordinados (acetato bidentado) involucran geometrías octaédricas. En los dos primeros modelos, A, B y C representan las posiciones alternativas del acetato (monodentado) y las dos moléculas de agua. En el tercer modelo, el acetato bidentado puede coordinar a través de las posiciones AC, BC, AD, BD o AB, y las dos posiciones restantes son ocupadas por las moléculas de agua.

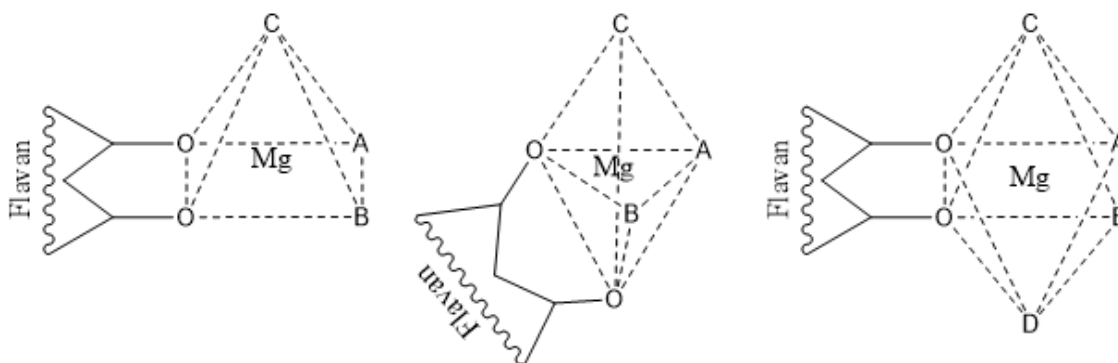


Figura S3. Principales conformémeros de la Familia 1.

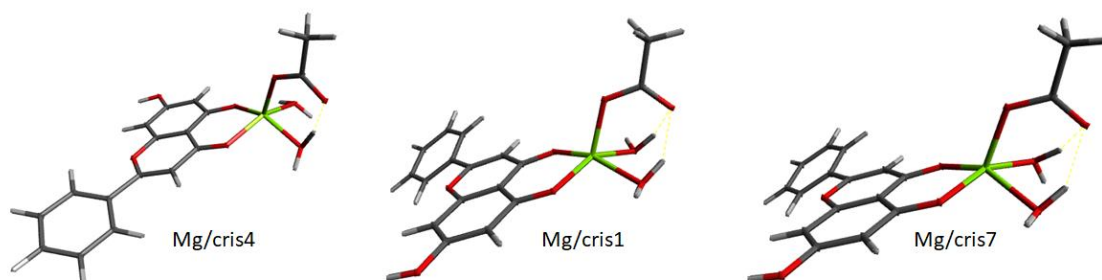


Figura S4. Principales conforméros de la Familia 2.

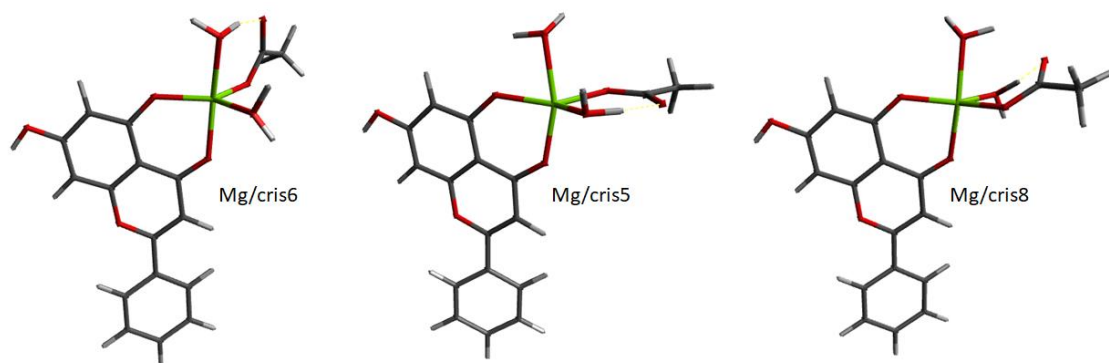


Figura S5. Principales conforméros de la Familia 3.

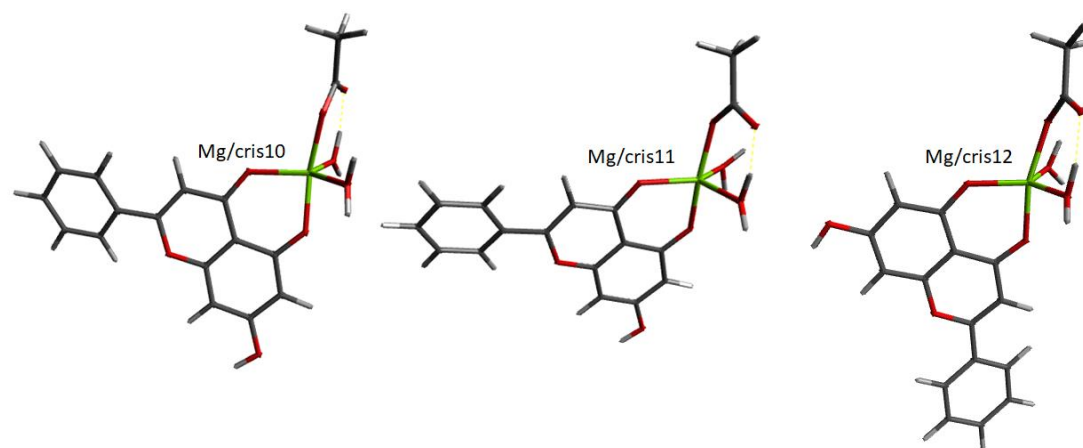


Figura S6. Interacciones débiles reveladas por el método RDG para el conformero Mg/cris10.

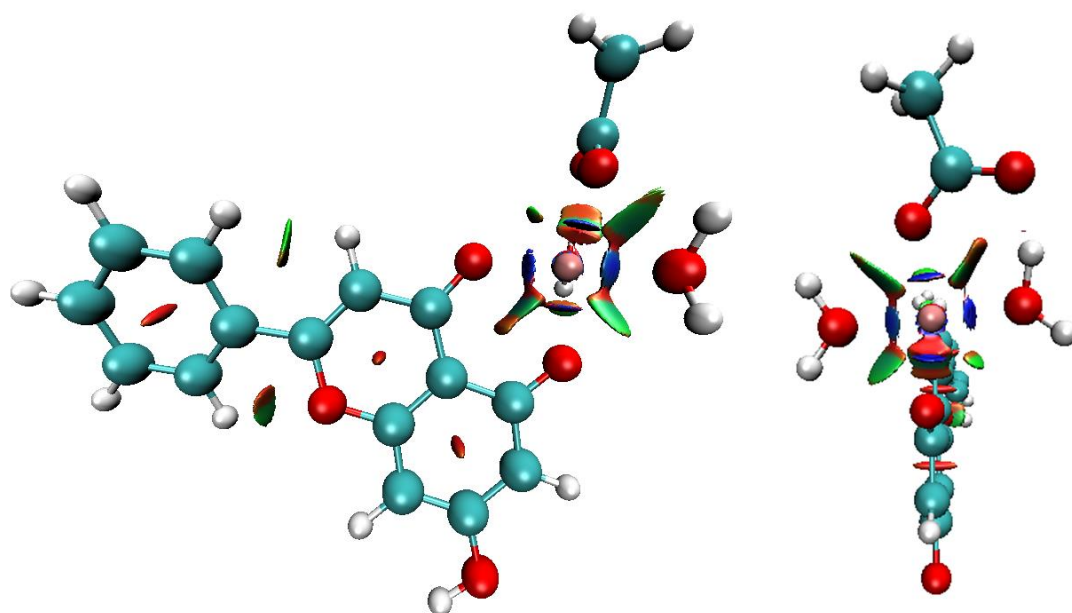


Figura S7. Contribución porcentual de los átomos al orbital HOMO del conformero Mg/cris10 calculados a partir de la función de onda extraída de la optimización al nivel B3LYP/6-311++G**.

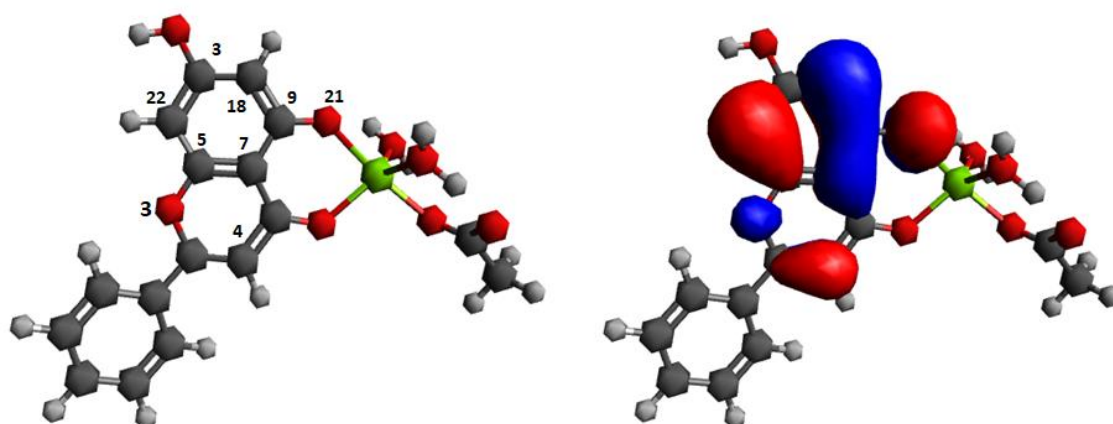


Figura S8. Contribución porcentual de los átomos al orbital LUMO del conformero Mg/cris10 calculados a partir de la función de onda extraída de la optimización al nivel B3LYP/6-311++G**.

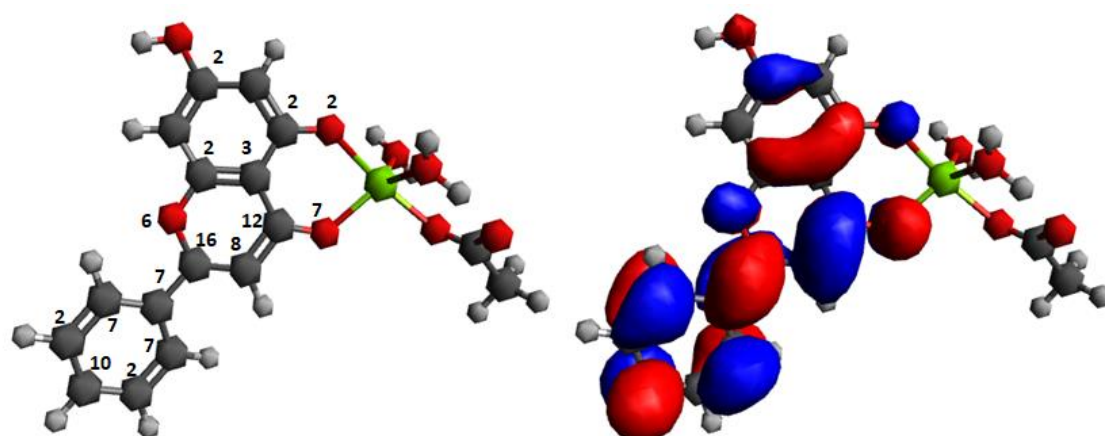


Tabla S1. Principales conformeros de Mg/cris calculados al nivel B3LYP/6-311++G**. Diferencia energética en relación al conformero más estable (ΔE , Kcal/mol). Distribución de Maxwell-Boltzmann (%).

Conformero	ΔE	Boltzmann
Mg/cris10	0,00	9,95
Mg/cris4	0,01	9,97
Mg/cris6	0,03	11,22
Mg/cris3	0,03	10,92
Mg/cris9	0,05	12,11
Mg/cris11	0,19	12,19

Tabla S2. Principales conformeros de las Familias 2 y 3 con disminución de la estabilidad (Familia 2= Mg/cris6 > Mg/cris5 > Mg/cris8 y Familia 3= Mg/cris10 > Mg/cris11 > Mg/cris12) y aumento de la distorsión de la bipirámide de base triangular. Los ángulos O-Mg-O de la base trigonal se alejan de 120° y el ángulo O-Mg-O entre los oxígenos en posición axial se aleja de 180°.

Confórmero	O-Mg-O ecuatorial	O-Mg-O axial
Mg/cris6	125 – 109 - 126	163
Mg/cris5	130 – 95 - 133	162
Mg/cris8	138 – 94 - 127	171
Mg/cris10	121 – 123 - 116	165
Mg/cris11	116 – 116 - 128	166
Mg/cris12	118 – 127 - 115	161

Tabla S3. Brecha (GAP) entre los orbitales moleculares de frontera HOMO-LUMO.

Confórmero	GAP (eV)
Mg/cris5	3,66
Mg/cris4	3,57
Mg/cris3	3,56
Mg/cris11	3,53
Mg/cris8	3,51
Mg/cris7	3,49
Mg/cris6	3,49
Mg/cris10	3,49
Mg/cris1	3,49
Mg/cris2	3,49
Mg/cris9	3,48
Mg/cris12	3,42