

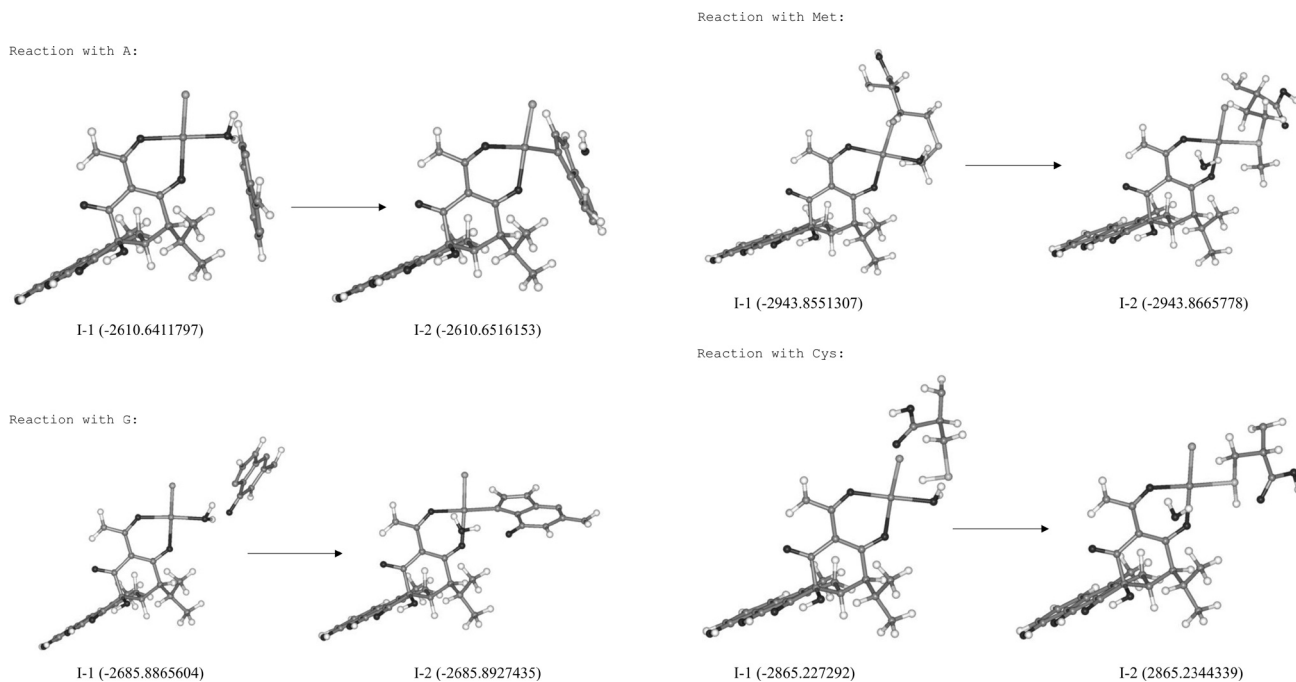
## Reactivity of 5a,6-Anhydrotetracycline Platinum(II) Complex with Biological Nucleophiles: A Theoretical Study

*Bruna L. Marcial,<sup>a</sup> Luiz Antônio S. Costa,<sup>b</sup> Wagner B. De Almeida<sup>c</sup> and Hélio F. Dos Santos<sup>\*,a</sup>*

<sup>a</sup>*Núcleo de Estudos em Química Computacional, Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330 Juiz de Fora-MG, Brazil*

<sup>b</sup>*Escola Preparatória de Cadetes do Ar, Departamento de Ensino da Aeronáutica, Comando da Aeronáutica, Rua Santos Dumont, 149, 36205-970 Barbacena-MG, Brazil*

<sup>c</sup>*Laboratório de Química Computacional e Modelagem Molecular, Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901 Belo Horizonte-MG, Brazil*



**Figure S1.** B3LYP/6-31G(d)/LanL2DZ optimized geometries for the intermediates (I-1 and I-2) involved in the reaction path for formation of [Pt(AHTC)Cl(Nu)]<sup>+</sup> complexes, where Nu stands by A, G, Met and Cys, respectively. Values of the total energy are given in parenthesis (in a.u.).