

Supporting Information 1

Investigation of the Mutual Interactions of the Sodium Ion and Some 15-Crown-5 Ethers through an Experimentally Based QSPR Model and Quantum Mechanical Features

Mahmood Sanchooli*, Pouya Karimi, Fereshteh Shiri

Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zabol, Zabol, Iran

Corresponding author's e-mail: sanchooli@uoz.ac.ir

Table S1 The numerical values of 24 descriptors obtained for 65 isolated derivatives of 15C5, used in this work.

No.	LogKexp	Drms	Dtot	HOMO	LUMO	HLG	EN	HD	SOF	EPH	Qo1	QC15	QC14	Qo13	QC12	QC11	Qo10	QC9	QC8	Qo7	QC6	QC5	Qo4	QC3	QC2
1	3.27	0.000	0.00	-0.394	0.174	0.568	0.284	-0.110	-9.079	-0.367	-0.653	0.099	0.099	-0.653	0.099	0.099	-0.653	0.099	0.099	-0.653	0.099	0.099	-0.653	0.099	0.099
2	3.2	0.130	0.39	-0.391	0.171	0.562	0.281	-0.110	-9.110	-0.360	-0.675	0.196	0.114	-0.656	0.104	0.096	-0.652	0.098	0.092	-0.651	0.092	0.103	-0.655	0.107	0.096
3	3.2	0.133	0.40	-0.391	0.171	0.562	0.281	-0.110	-9.117	-0.360	-0.675	0.196	0.114	0.656	0.104	0.096	-0.652	0.098	0.092	-0.651	0.092	0.104	-0.655	0.107	0.096
4	3.18	0.135	0.40	-0.391	0.171	0.562	0.281	-0.110	-9.122	-0.360	-0.675	0.196	0.114	-0.656	0.104	0.096	-0.652	0.098	0.092	-0.651	0.092	0.104	-0.655	0.107	0.096
5	3.1	0.555	1.67	-0.397	0.168	0.565	0.283	-0.115	-8.712	-0.348	-0.672	0.161	0.099	-0.674	0.092	0.095	0.651	0.092	0.096	-0.651	0.092	0.104	-0.654	0.103	0.103
6	3.03	0.532	1.59	-0.388	0.174	0.562	0.281	-0.107	-9.355	-0.370	-0.677	0.161	0.132	-0.649	0.101	0.092	-0.652	0.094	0.096	-0.652	0.093	0.103	-0.655	0.103	0.091
7	3.12	0.449	1.35	-0.368	0.170	0.538	0.269	-0.099	-10.13	-0.366	-0.659	0.178	0.096	-0.657	0.094	0.105	-0.654	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.097
8	2.95	4.380	13.14	-0.207	0.159	0.366	0.183	-0.024	-42.22	-0.706	-0.703	0.216	0.148	-0.663	0.110	0.094	-0.657	0.095	0.099	-0.657	0.089	0.109	-0.662	0.104	0.107
9	3.18	0.472	1.42	-0.390	0.175	0.565	0.283	-0.108	-9.285	-0.371	-0.665	0.162	0.109	-0.657	0.102	0.093	-0.652	0.093	0.097	-0.652	0.090	0.107	-0.657	0.096	0.089
10	3.3	0.051	0.15	-0.324	0.143	0.468	0.234	-0.091	-11.03	-0.302	-0.684	0.232	0.115	-0.650	0.092	0.105	-0.654	0.103	0.090	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.106	0.097
11	2.97	0.374	1.12	-0.324	0.146	0.469	0.235	-0.089	-11.27	-0.309	-0.661	0.169	0.109	-0.658	0.105	0.094	-0.652	0.098	0.093	-0.651	0.092	0.104	-0.655	0.106	0.093
12	3.25	0.346	1.04	-0.291	0.157	0.447	0.224	-0.067	-14.90	-0.373	-0.658	0.180	0.090	-0.656	0.094	0.105	-0.654	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.098
13	2.89	0.735	2.20	-0.293	0.157	0.450	0.225	-0.069	-14.61	-0.370	-0.659	0.181	0.094	-0.656	0.092	0.105	-0.654	0.104	0.089	-0.900	0.103	-0.654	0.105	0.096	-0.659
14	3	0.726	2.18	-0.287	0.142	0.429	0.214	-0.073	-13.77	-0.316	-0.659	0.180	0.095	-0.656	0.093	0.105	-0.654	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.096
15	3.04	0.739	2.22	-0.301	0.151	0.452	0.226	-0.075	-13.39	-0.342	-0.659	0.177	0.096	-0.657	0.094	0.105	-0.654	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.097
16	2.83	0.978	2.93	-0.314	0.146	0.460	0.230	-0.084	-11.95	-0.316	-0.679	0.161	0.132	-0.646	0.102	0.092	-0.652	0.095	0.096	-0.652	0.093	0.103	-0.654	0.104	0.091
17	2.72	0.694	2.08	-0.306	0.144	0.450	0.225	-0.081	-12.45	-0.314	-0.679	0.161	0.132	-0.646	0.102	0.092	-0.652	0.095	0.096	-0.652	0.093	0.103	-0.654	0.104	0.091
18	3.07	0.750	2.25	-0.290	0.157	0.447	0.224	-0.066	-15.12	-0.378	-0.658	0.180	0.090	-0.657	0.092	0.105	-0.652	0.094	0.095	-0.652	0.092	0.103	-0.654	0.105	0.096
19	3.04	0.350	1.05	-0.292	0.155	0.447	0.224	-0.068	-14.66	-0.366	-0.658	0.181	0.090	-0.657	0.093	0.105	0.654	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.097
20	3.03	0.629	1.89	-0.323	0.140	0.463	0.232	-0.092	-10.91	-0.293	-0.682	0.180	0.010	-0.652	0.093	0.109	-0.653	0.100	0.091	-0.651	0.090	0.099	-0.653	0.106	0.098
21	3.02	0.267	0.80	-0.296	0.152	0.448	0.224	-0.072	-13.95	-0.350	-0.666	0.185	0.092	-0.655	0.096	0.097	-0.651	0.093	0.103	-0.654	0.105	0.088	-0.653	0.089	0.110
22	3.14	0.162	0.49	-0.391	0.171	0.562	0.281	-0.110	-9.129	-0.360	-0.678	0.159	0.132	-0.649	0.105	0.093	-0.652	0.094	0.096	-0.651	0.093	0.103	-0.654	0.105	0.092
23	3	0.649	1.95	-0.392	0.170	0.562	0.281	-0.111	-9.022	-0.357	-0.678	0.160	0.131	-0.651	0.104	0.093	-0.651	0.093	0.096	-0.665	0.093	0.103	-0.654	0.105	0.092
24	2.97	0.203	0.61	-0.391	0.171	0.562	0.281	-0.110	-9.105	-0.359	-0.650	0.131	0.159	-0.678	0.092	0.105	-0.654	0.103	0.093	-0.651	0.096	0.094	-0.652	0.093	0.104
25	3.05	0.131	0.39	-0.392	0.170	0.562	0.281	-0.111	-8.984	-0.355	-0.659	0.165	0.109	-0.658	0.105	0.095	-0.652	0.098	0.093	-0.651	0.092	0.104	-0.655	0.106	0.094

Table S1 continued

No.	LogKexp	DRMS	DTOT	HOMO	LUMO	HLG	EN	HD	SOF	EPH	Q01	QC15	QC14	QC13	QC12	QC11	QC10	QC9	QC8	QC7	QC6	QC5	QC4	QC3	QC2
26	3.09	0.1860	0.559	-0.392	0.173	0.565	0.283	-0.109	-9.151	-0.365	-0.664	0.162	0.109	-0.657	0.102	0.093	-0.652	0.093	0.096	-0.652	0.091	0.106	-0.657	0.097	0.088
27	3.22	0.2320	0.696	-0.389	0.173	0.562	0.281	-0.108	-9.250	-0.365	-0.677	0.159	0.132	-0.648	0.102	0.092	-0.652	0.094	0.096	-0.652	0.093	0.103	-0.655	0.104	0.091
28	3.13	0.4410	1.324	-0.393	0.171	0.564	0.282	-0.111	-9.004	-0.358	-0.665	0.185	0.094	-0.658	0.091	0.105	-0.654	0.104	0.092	-0.651	0.096	-0.094	-0.652	0.093	0.110
29	3.23	0.1710	0.514	-0.393	0.171	0.563	0.282	-0.111	-9.018	-0.358	-0.666	0.184	0.098	-0.656	0.096	0.097	-0.652	0.093	0.103	-0.654	0.105	0.089	-0.653	0.090	0.110
30	3.04	0.1800	0.539	-0.393	0.171	0.563	0.282	-0.111	-9.009	-0.357	-0.666	0.184	0.099	-0.656	0.096	0.097	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.105	0.089	-0.653	0.090	0.110
31	3.09	0.1720	0.515	-0.390	0.172	0.562	0.281	-0.109	-9.200	-0.363	-0.677	0.159	0.132	-0.648	0.102	0.092	-0.652	0.094	0.096	-0.652	0.093	0.103	-0.654	0.104	0.091
32	2.79	0.4070	1.220	-0.361	0.173	0.534	0.267	-0.094	-10.65	-0.379	-0.664	0.200	0.110	-0.657	0.108	0.092	-0.652	0.095	0.096	-0.652	0.092	0.107	-0.657	0.102	0.091
33	2.82	0.3820	1.146	-0.361	0.172	0.533	0.266	-0.094	-10.61	-0.376	-0.680	0.184	0.103	-0.657	0.095	0.105	-0.655	0.104	0.089	-0.652	0.090	0.103	-0.654	0.106	0.100
34	2.91	0.4650	1.394	-0.281	0.153	0.434	0.217	-0.064	-15.61	-0.368	-0.686	0.181	0.108	-0.654	0.096	0.097	-0.651	0.093	0.103	-0.653	0.105	0.088	0.653	0.090	0.110
35	2.92	0.2410	0.723	-0.366	0.173	0.539	0.269	-0.097	-10.35	-0.375	-0.676	0.183	0.110	-0.667	0.097	0.094	-0.652	0.093	0.096	-0.652	0.091	0.104	-0.655	0.104	0.093
36	2.86	0.5770	1.730	-0.381	0.168	0.549	0.274	-0.107	-9.350	-0.352	-0.702	0.279	0.128	-0.647	0.090	0.090	-0.650	0.092	0.103	-0.653	0.105	0.088	-0.652	0.100	0.100
37	3.88	0.3430	1.030	-0.387	0.186	0.573	0.286	-0.100	-9.963	-0.408	-0.694	0.236	0.155	-0.663	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.102	-0.655	0.101	0.093	-0.654	0.105	0.079
38	3.88	0.9580	2.874	-0.386	0.187	0.572	0.286	-0.100	-10.05	-0.411	-0.694	0.236	0.155	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.101	-0.654	0.101	0.092	-0.654	0.105	0.079
39	3.73	0.3580	1.073	-0.386	0.186	0.572	0.286	-0.100	-9.992	-0.409	-0.694	0.236	0.155	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.102	-0.654	0.101	0.092	-0.654	0.105	0.079
40	3.87	0.1930	0.580	-0.391	0.174	0.565	0.283	-0.109	-9.188	-0.367	-0.686	0.264	0.111	-0.663	0.088	0.089	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.091	-0.653	0.098	0.107
41	3.89	0.5160	1.549	-0.392	0.173	0.565	0.283	-0.109	-9.161	-0.366	-0.686	0.264	0.111	-0.663	0.088	0.089	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.091	-0.653	0.098	0.107
42	3.87	0.1920	0.576	-0.392	0.173	0.565	0.283	-0.109	-9.154	-0.365	-0.686	0.264	0.111	-0.663	0.088	0.089	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.091	-0.653	0.098	0.107
43	3.48	0.8640	2.591	-0.391	0.174	0.565	0.282	-0.109	-9.203	-0.367	-0.685	0.264	0.111	-0.663	0.089	0.089	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.092	-0.653	0.098	0.107
44	3.57	0.8450	2.536	-0.384	0.191	0.575	0.287	-0.097	-10.36	-0.428	-0.695	0.237	0.155	-0.664	0.085	0.073	-0.653	0.095	0.100	-0.655	0.102	0.091	-0.655	0.106	0.078
45	3.54	0.8470	2.540	-0.384	0.191	0.575	0.287	-0.097	-10.37	-0.428	-0.695	0.237	0.155	-0.664	0.085	0.073	-0.653	0.095	0.100	-0.655	0.106	0.091	-0.655	0.106	0.078
46	3.75	0.5110	1.533	-0.386	0.187	0.573	0.286	-0.099	-10.06	-0.413	-0.694	0.236	0.155	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.101	-0.655	0.101	0.092	-0.654	0.105	0.079
47	3.88	0.6590	1.978	-0.389	0.177	0.566	0.283	-0.106	-9.448	-0.379	-0.690	0.254	0.089	-0.663	0.103	0.107	-0.656	0.101	0.091	-0.652	0.090	0.101	-0.658	0.113	0.111
48	3.42	0.8400	2.521	-0.384	0.191	0.575	0.287	-0.096	-10.37	-0.428	-0.695	0.237	0.155	-0.664	0.085	0.073	-0.653	0.095	0.100	-0.655	0.102	0.091	-0.655	0.106	0.078
49	3.75	0.5140	1.543	-0.386	0.187	0.573	0.286	-0.099	-10.07	-0.413	-0.694	0.236	0.155	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.101	-0.655	0.101	0.092	-0.654	0.105	0.079
50	3.89	0.2080	0.624	-0.392	0.173	0.565	0.283	-0.109	-9.159	-0.366	-0.657	0.109	0.162	-0.664	0.088	0.010	-0.657	0.106	0.091	-0.652	0.096	0.093	-0.652	0.093	0.102

Table S1 continued

No.	LogKexp	DRMS	DTOT	HOMO	LUMO	HLG	EN	HD	SOF	EPH	Qo1	QC15	QC14	Qo13	QC12	QC11	Qo10	QC9	QC8	Qo7	QC6	QC5	Qo4	QC3	QC2
51	3.58	1.8323	5.497	-0.349	0.114	0.463	0.231	-0.117	-8.538	-0.229	-0.700	0.240	0.129	-0.663	0.093	0.097	-0.655	0.094	0.106	-0.656	0.100	0.088	-0.654	0.100	0.114
52	3.79	0.4110	1.234	-0.290	0.158	0.447	0.224	-0.066	-15.16	-0.379	-0.691	0.278	0.104	-0.667	0.090	0.088	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.092	-0.655	0.097	0.105
53	2.74	0.9160	2.748	-0.386	0.158	0.544	0.272	-0.114	-8.757	-0.324	-0.705	0.283	0.143	-0.659	0.077	0.081	-0.652	0.092	0.097	-0.653	0.099	0.088	-0.652	0.104	0.084
54	3.9	1.2973	3.892	-0.380	0.200	0.580	0.290	-0.090	-11.13	-0.467	-0.708	0.248	0.159	-0.666	0.085	0.071	-0.666	0.096	0.091	-0.657	0.104	0.083	-0.656	0.106	0.079
55	3.91	0.8490	2.548	-0.385	0.187	0.572	0.286	-0.099	-10.08	-0.413	-0.700	0.234	0.159	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.102	-0.654	0.102	0.091	-0.654	0.105	0.080
56	3.71	0.4130	1.239	-0.386	0.186	0.572	0.286	-0.100	-10.04	-0.411	-0.699	0.234	0.159	-0.664	0.085	0.075	-0.652	0.094	0.102	-0.655	0.102	0.091	-0.654	0.105	0.080
57	3.56	1.5376	4.613	-0.372	0.205	0.577	0.288	-0.084	-11.97	-0.498	-0.698	0.256	0.133	-0.689	0.083	0.086	-0.677	0.090	0.082	-0.653	0.123	0.101	-0.665	0.086	0.106
58	3.39	0.5920	1.775	-0.389	0.175	0.564	0.282	-0.107	-9.338	-0.371	-0.693	0.275	0.105	-0.666	0.091	0.088	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.092	-0.654	0.097	0.105
59	3.62	0.2630	0.788	-0.390	0.174	0.564	0.282	-0.108	-9.255	-0.368	-0.693	0.275	0.105	-0.666	0.091	0.088	-0.650	0.092	0.103	-0.654	0.104	0.092	-0.654	0.097	0.105
60	3.75	0.7040	2.111	-0.389	0.182	0.571	0.286	-0.104	-9.658	-0.394	-0.701	0.261	0.101	-0.666	0.101	0.107	-0.655	0.098	0.091	-0.651	0.091	0.100	-0.657	0.109	0.117
61	2.79	0.8150	2.444	-0.385	0.160	0.545	0.272	-0.113	-8.864	-0.329	-0.693	0.298	0.118	-0.665	0.080	0.086	-0.649	0.088	0.100	-0.652	0.101	0.089	-0.651	0.095	0.099
62	3.82	0.3800	1.141	-0.389	0.182	0.571	0.285	-0.103	-9.665	-0.393	-0.701	0.261	0.101	-0.666	0.101	0.107	-0.655	0.098	0.091	-0.651	0.091	0.100	-0.657	0.109	0.117
63	3.86	0.7270	2.182	-0.389	0.182	0.571	0.285	-0.104	-9.660	-0.393	-0.701	0.261	0.101	-0.666	0.101	0.107	-0.655	0.098	0.091	-0.651	0.091	0.100	-0.657	0.109	0.117
64	3.75	0.3790	1.136	-0.389	0.182	0.571	0.285	-0.104	-9.640	-0.393	-0.701	0.261	0.101	-0.666	0.101	0.107	-0.655	0.098	0.091	-0.651	0.091	0.100	0.657	0.109	0.117
65	3.34	0.1900	0.570	-0.387	0.173	0.560	0.280	-0.107	-9.384	-0.368	0.671	0.125	0.184	-0.667	0.113	0.194	-0.667	0.112	0.201	-0.671	0.125	0.182	-0.667	0.106	0.204