



Volume 79 (2023)

Supporting information for article:

Synthesis and crystal structures of two 1*H*-benzo[*d*]imidazole derivatives: Hirshfeld surface analyses and DFT and anticorrosion studies

Nadir Ghichi, Amel Djedouani, Douniazed Hannachid, Ali Benboudiaf, Hocine Me-razig, Louiza Ouksel, Abdelkader Hellal and Helen Stoeckli-Evans

Table S1. Fukui functions, dual descriptor and local philicity index of **I**

(I)	f_k	f_k^+	$\Delta f(r)$	ω^-	ω^+	$\Delta\omega$
1 O	0.0585	0.0191	-0.0394	0.0021	0.0007	-0.0014
2 N	0.0088	0.0223	0.0134	0.0003	0.0008	0.0005
3 N	0.0605	0.0521	-0.0084	0.0022	0.0019	-0.0003
4 C	0.0512	-0.0010	-0.0502	0.0018	0.0000	-0.0019
5 C	-0.0048	0.0318	0.0270	-0.0002	0.0011	0.0013
6 C	0.0799	0.0475	-0.0324	0.0028	0.0017	-0.0012
7 C	0.0288	0.0165	-0.0123	0.0010	0.0006	-0.0004
8 C	0.0215	0.0460	0.0245	0.0008	0.0016	0.0009
9 C	0.0270	-0.0125	-0.0145	0.0010	-0.0004	-0.0014
10 C	-0.0121	0.0047	-0.0074	-0.0004	0.0002	0.0006
11 C	0.1059	0.1090	0.0031	0.0038	0.0039	0.0001
12 C	0.0414	0.0774	0.0360	0.0015	0.0028	0.0013
13 C	0.0498	0.0041	-0.0458	0.0018	0.0001	-0.0016
14 C	0.0893	0.1322	0.0429	0.0032	0.0047	0.0015
15 C	0.0544	0.0726	0.0183	0.0019	0.0026	0.0007
16 C	0.0422	0.0448	0.0026	0.0015	0.0016	0.0001
17 C	0.0367	0.0458	0.0091	0.0013	0.0016	0.0003
18 C	0.0516	0.0659	0.0143	0.0018	0.0023	0.0005
19 C	-0.0239	-0.0328	0.0089	-0.0009	-0.0012	-0.0003
20 C	-0.0142	-0.0021	-0.0121	-0.0005	-0.0001	0.0004
21 C	-0.0144	0.0015	-0.0129	-0.0005	0.0001	0.0006
22 H	0.0119	0.0112	-0.0007	0.0004	0.0004	0.0000
23 H	0.0205	0.0153	-0.0052	0.0007	0.0005	-0.0002
24 H	0.0206	0.0184	-0.0021	0.0007	0.0007	-0.0001
25 H	0.0219	0.0184	-0.0034	0.0008	0.0007	-0.0001
26 H	0.0184	0.0156	-0.0027	0.0007	0.0006	-0.0001
27 H	0.0220	0.0244	0.0025	0.0008	0.0009	0.0001
28 H	0.0254	0.0267	0.0013	0.0009	0.0009	0.0000
29 H	0.0156	0.0195	0.0039	0.0006	0.0007	0.0001
30 H	0.0237	0.0255	0.0018	0.0008	0.0009	0.0001
31 H	0.0221	0.0242	0.0020	0.0008	0.0009	0.0001
32 H	0.0067	0.0136	0.0068	0.0002	0.0005	0.0002
33 H	0.0232	0.0200	-0.0032	0.0008	0.0007	-0.0001
34 H	0.0149	0.0111	-0.0037	0.0005	0.0004	-0.0001
35 H	0.0151	0.0111	-0.0039	0.0005	0.0004	-0.0001

Table S2. Fukui functions, dual descriptor and local philicity index of **II**

(II)		f_k	f_k^+	$\Delta f(r)$	ω^-	ω^+	$\Delta\omega$
1	O	0.0221	0.0114	-0.0107	0.0002	0.0001	-0.0001
2	O	0.0592	0.0145	-0.0446	0.0005	0.0001	-0.0003
3	N	0.0473	-0.0371	-0.0103	0.0004	-0.0003	-0.0007
4	N	0.0606	0.0232	-0.0374	0.0005	0.0002	-0.0003
5	C	-0.0695	0.1088	0.0393	-0.0005	0.0009	0.0014
6	C	0.0848	-0.0837	-0.0011	0.0007	-0.0007	-0.0013
7	C	0.0972	-0.0021	-0.0951	0.0008	0.0000	-0.0008
8	C	0.0748	-0.0327	-0.0422	0.0006	-0.0003	-0.0008
9	C	0.0644	-0.0164	-0.0480	0.0005	-0.0001	-0.0006
10	C	0.0491	-0.0412	-0.0080	0.0004	-0.0003	-0.0007
11	C	0.0633	-0.0686	0.0053	0.0005	-0.0005	-0.0010
12	C	-0.0911	0.1403	0.0492	-0.0007	0.0011	0.0018
13	C	0.0820	-0.0445	-0.0375	0.0006	-0.0003	-0.0010
14	C	-0.0053	-0.0015	-0.0038	0.0000	0.0000	0.0000
15	C	0.0663	0.0556	-0.0108	0.0005	0.0004	-0.0001
16	C	0.0737	0.0471	-0.0266	0.0006	0.0004	-0.0002
17	C	0.0469	-0.0074	-0.0395	0.0004	-0.0001	-0.0004
18	C	0.0667	0.0040	-0.0627	0.0005	0.0000	-0.0005
19	C	0.0400	0.0284	-0.0116	0.0003	0.0002	-0.0001
20	C	0.0685	-0.0528	-0.0157	0.0005	-0.0004	-0.0010
21	C	-0.0754	-0.0223	-0.0531	-0.0006	-0.0002	0.0004
22	C	0.0538	-0.0503	-0.0035	0.0004	-0.0004	-0.0008
23	C	-0.0300	-0.0049	-0.0250	-0.0002	0.0000	0.0002
24	C	0.1715	0.0160	-0.1555	0.0013	0.0001	-0.0012
25	C	0.0010	0.0971	0.0961	0.0000	0.0008	0.0008
26	C	0.0985	-0.0550	-0.0435	0.0008	-0.0004	-0.0012
27	C	0.0946	0.0612	-0.0333	0.0007	0.0005	-0.0003
28	C	0.0832	0.0221	-0.0611	0.0007	0.0002	-0.0005
29	C	0.1130	-0.0003	-0.1127	0.0009	0.0000	-0.0009
30	C	0.0720	-0.0077	-0.0643	0.0006	-0.0001	-0.0006
31	C	0.1037	0.0149	-0.0888	0.0008	0.0001	-0.0007
32	C	-0.0248	-0.0294	0.0047	-0.0002	-0.0002	0.0000
33	C	-0.0016	-0.0143	0.0127	0.0000	-0.0001	-0.0001
34	C	0.0520	-0.0515	-0.0005	0.0004	-0.0004	-0.0008
35	H	-0.0293	0.0399	0.0106	-0.0002	0.0003	0.0005
36	H	-0.0330	0.0499	0.0169	-0.0003	0.0004	0.0007
37	H	-0.0277	0.0486	0.0209	-0.0002	0.0004	0.0006
38	H	-0.0301	0.0468	0.0167	-0.0002	0.0004	0.0006
39	H	-0.0323	0.0273	-0.0050	-0.0003	0.0002	0.0005
40	H	-0.0145	0.0356	0.0211	-0.0001	0.0003	0.0004
41	H	-0.0461	0.0485	0.0024	-0.0004	0.0004	0.0007
42	H	-0.0329	0.0480	0.0151	-0.0003	0.0004	0.0006
43	H	-0.0364	0.0458	0.0094	-0.0003	0.0004	0.0006
44	H	-0.0314	0.0532	0.0218	-0.0002	0.0004	0.0007
45	H	-0.0358	0.0526	0.0168	-0.0003	0.0004	0.0007
46	H	-0.0442	0.0477	0.0035	-0.0003	0.0004	0.0007
47	H	-0.0119	0.0321	0.0203	-0.0001	0.0003	0.0003
48	H	-0.0162	0.0212	0.0050	-0.0001	0.0002	0.0003
49	H	-0.0153	0.0230	0.0077	-0.0001	0.0002	0.0003
50	H	-0.0207	0.0377	0.0170	-0.0002	0.0003	0.0005
51	H	-0.0215	0.0477	0.0262	-0.0002	0.0004	0.0005
52	H	-0.0334	0.0529	0.0195	-0.0003	0.0004	0.0007
53	H	-0.0273	0.0523	0.0250	-0.0002	0.0004	0.0006
54	H	-0.0256	0.0514	0.0258	-0.0002	0.0004	0.0006
55	H	-0.0492	0.0613	0.0122	-0.0004	0.0005	0.0009
56	H	-0.0026	0.0321	0.0296	0.0000	0.0003	0.0003
57	H	-0.0069	0.0220	0.0151	-0.0001	0.0002	0.0002
58	H	-0.0083	0.0201	0.0118	-0.0001	0.0002	0.0002

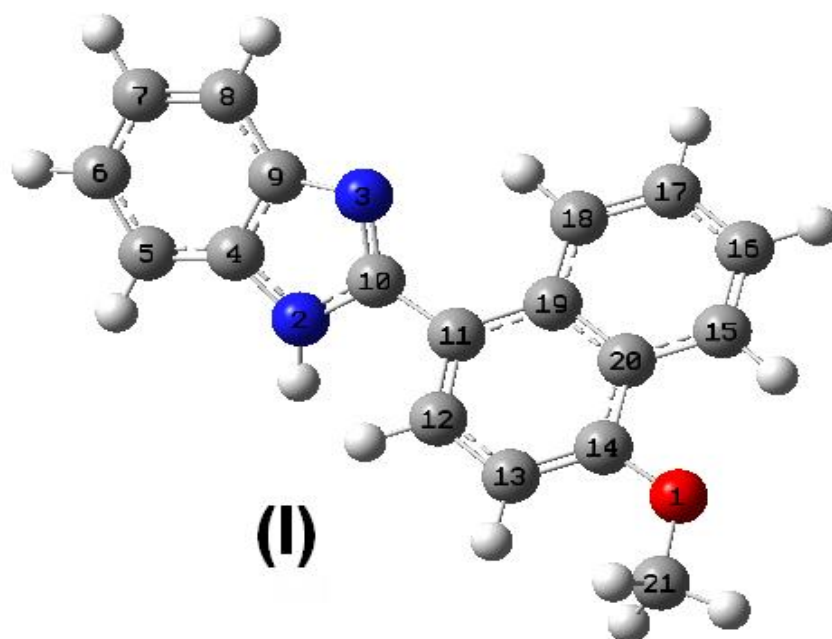


Figure S1. Optimized geometry of I.

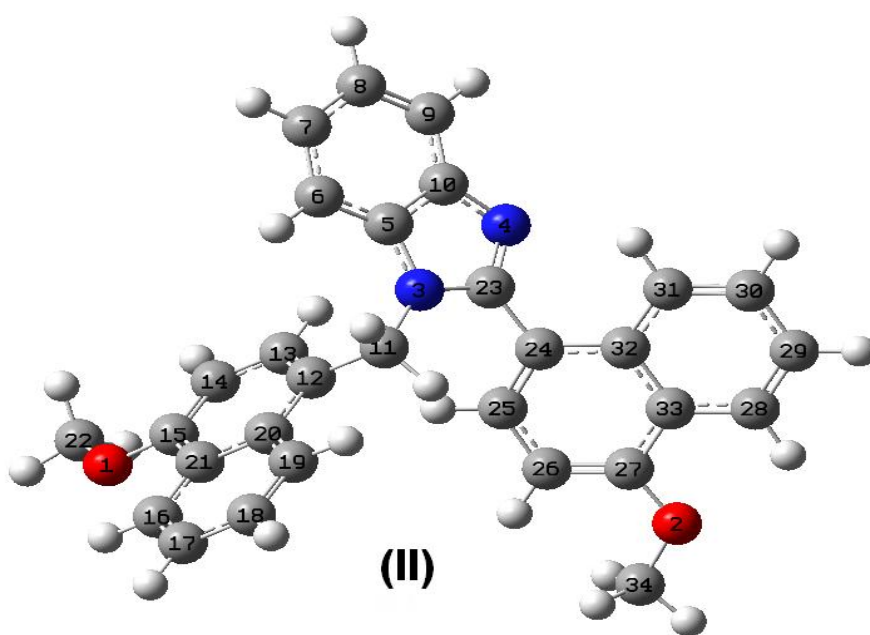


Figure S2. Optimized geometry of II.