

## Supplementary Material

# Mycobacterial and Human Ferrous Nitrobindins: Spectroscopic and Reactivity Properties

Giovanna De Simone <sup>1,†</sup>, Alessandra di Masi <sup>1,†</sup>, Alessandra Pesce <sup>2</sup>, Martino Bolognesi <sup>3,4</sup>, Chiara Ciaccio <sup>5</sup>, Lorenzo Tognaccini <sup>6</sup>, Giulietta Smulevich <sup>6</sup>, Stefania Abbruzzetti <sup>7</sup>, Cristiano Viappiani <sup>7</sup>, Stefano Bruno <sup>8</sup>, Sara Della Monaca <sup>9</sup>, Donatella Pietraforte <sup>9</sup>, Paola Fattibene <sup>9</sup>, Massimo Coletta <sup>5,\*</sup> and Paolo Ascenzi <sup>10,\*</sup>

- 1 Dipartimento di Scienze, Università degli Studi Roma Tre, 00146, Roma, Italy; giovanna.desimone@uniroma3.it (G.D.S.); alessandra.dimasi@uniroma3.it (A.d.M.)
- 2 Dipartimento di Fisica, Università di Genova, 16146, Genova, Italy; pesce@fisica.unige.it
- 3 Dipartimento di Bioscienze, Università di Milano, 20133, Milano, Italy; martino.bolognesi@unimi.it
- 4 Centro di Ricerche Pediatriche “R.E. Invernizzi”, Università di Milano, 20133, Milano, Italy
- 5 Dipartimento di Scienze Cliniche e Medicina Traslazionale, Università di Roma “Tor Vergata”, 00133, Roma, Italy; chiara.ciaccio@uniroma2.it
- 6 Dipartimento di Chimica “Ugo Schiff”, Università di Firenze, 50019, Sesto Fiorentino (FI), Italy; lorenzo.tognaccini@unifi.it (L.T.); giulietta.smulevich@unifi.it (G.S.)
- 7 Dipartimento di Scienze Matematiche, Fisiche e Informatiche, Università di Parma, 43124, Parma, Italy; stefania.abbruzzetti@unipr.it (S.A.); cristiano.viappiani@unipr.it (C.V.)
- 8 Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco, Università di Parma, 43124, Parma, Italy; stefano.bruno@unipr.it
- 9 Servizio Grandi Strumentazioni e Core Facilities, Istituto Superiore di Sanità, 00161, Rome, Italy; sara.dellamonaca@iss.it (S.D.M.); paola.fattibene@iss.it (D.P.); donatella.pietraforte@iss.it (P.F.)
- 10 Laboratorio Interdipartimentale di Microscopia Elettronica, Università Roma Tre, 00146, Roma, Italy

\*Correspondence: [coletta@seneca.uniroma2.it](mailto:coletta@seneca.uniroma2.it) (M.C.); [ascenzi@uniroma3.it](mailto:ascenzi@uniroma3.it) (P.A.); Tel.: +39-06-72596365 (M.C.); +39-06-57336363 (P.A.); Fax: +39-06-72596353 (M.C.); +39-06-57336321 (P.A.).

† authors contributed equally to this work.

**Table S1.** Effect of the CO and NO concentration on values of  $k_{\text{obs}}(\text{CO})$  and  $k_{\text{obs}}(\text{NO})$ , respectively, for *Mt*-Nb(II) and *Hs*-Nb(II) carbonylation and nitrosylation.

<i>Mt</i> -Nb(II) <sup>a</sup>		<i>Hs</i> -Nb(II) <sup>a</sup>	
[CO] (M)	$k_{\text{obs}}(\text{CO})$ (s <sup>-1</sup> )	[CO] (M)	$k_{\text{obs}}(\text{CO})$ (s <sup>-1</sup> )
$2.0 \times 10^{-5}$	$4.1 \pm 0.4$ <sup>b</sup>	$3.0 \times 10^{-5}$	$6.4 \pm 0.8$ <sup>b</sup>
$2.3 \times 10^{-5}$	$4.5 \pm 0.5$ <sup>b</sup>	$4.5 \times 10^{-5}$	$8.3 \pm 0.9$ <sup>b</sup>
$3.7 \times 10^{-5}$	$5.7 \pm 0.6$ <sup>b</sup>	$7.0 \times 10^{-5}$	$10.8 \pm 1.4$ <sup>b</sup>
$5.5 \times 10^{-5}$	$6.7 \pm 0.8$ <sup>b</sup>	$10.5 \times 10^{-5}$	$14.4 \pm 1.6$ <sup>b</sup>
$10.0 \times 10^{-5}$	$8.3 \pm 0.8$ <sup>b</sup>	$21.0 \times 10^{-5}$	$23.6 \pm 2.9$ <sup>b</sup>
$15.0 \times 10^{-5}$	$11.4 \pm 1.4$ <sup>b</sup>		
<i>Mt</i> -Nb(II) <sup>c</sup>		<i>Hs</i> -Nb(II) <sup>c</sup>	
[NO] (M)	$k_{\text{obs}}(\text{NO})$ (s <sup>-1</sup> )	[NO] (M)	$k_{\text{obs}}(\text{NO})$ (s <sup>-1</sup> )
$1.5 \times 10^{-5}$	$27.9 \pm 3.1$ <sup>d</sup>	$1.5 \times 10^{-5}$	$11.1 \pm 1.3$ <sup>d</sup>
$2.5 \times 10^{-5}$	$39.2 \pm 4.6$ <sup>d</sup>	$2.5 \times 10^{-5}$	$26.2 \pm 2.5$ <sup>d</sup>
$4.0 \times 10^{-5}$	$71.6 \pm 6.8$ <sup>d</sup>	$4.0 \times 10^{-5}$	$33.9 \pm 3.6$ <sup>d</sup>
$5.0 \times 10^{-5}$	$88.5 \pm 9.3$ <sup>d</sup>	$5.0 \times 10^{-5}$	$47.8 \pm 5.4$ <sup>d</sup>
$8.0 \times 10^{-5}$	$132.7 \pm 14.1$ <sup>d</sup>	$8.0 \times 10^{-5}$	$72.2 \pm 7.1$ <sup>d</sup>
$10.0 \times 10^{-5}$	$168.9 \pm 18.6$ <sup>d</sup>	$10.0 \times 10^{-5}$	$94.8 \pm 10.1$ <sup>d</sup>

<sup>a</sup> pH 7.0 and 25.0 °C.

<sup>b</sup> [Nb(II)] =  $4.0 \times 10^{-6}$  M.

<sup>c</sup> pH 7.0 and 22.0 °C.

<sup>d</sup> [Nb(II)] =  $3.2 \times 10^{-6}$  M.