

Supporting Information

Matrix-isolation and computational study of the HKrCCH...HCCH complex

Knut Willmann,^a Thomas Vent-Schmidt,^a Markku Räsänen,^b Sebastian Riedel,^c and Leonid Khriachtchev^{*b}

^a *Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Albertstr. 21, 79104 Freiburg, Germany*

^b *Department of Chemistry, University of Helsinki, P. O. Box 55, FI-00014 Helsinki, Finland.*

E-mail: leonid.khriachtchev@helsinki.fi

^c *Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin, Fabeckstrasse 34/36, 14195 Berlin, Germany*

Figure S1: Natural bond orbitals of HKrCCH plotted at the 0.05 a.u. isosurface.

LUMO+1	
LUMO	
HOMO	
HOMO-1	
HOMO-2	
HOMO-3	
HOMO-4	
HOMO-5	
HOMO-6	

