

**Electronic supporting information for  
Dopant induced modulation in the structure and electronic properties  
of Au<sub>10</sub> cluster**

Lovepreet Singh Sidhu,<sup>a</sup> Antarip Halder,<sup>a</sup> and Sandhya Rai <sup>\*,b</sup>

<sup>a</sup>Center for Computational Natural Sciences and Bioinformatics, International Institute of Information Technology Hyderabad, Gachibowli, Hyderabad, 500032, Telangana, India.

<sup>b</sup>Theoretical Science Unit, Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, Jakkur, Bengaluru, 560064, Karnataka, India

---

**(1) Numeric values of different structural and electronic properties of the doped Au<sub>9</sub>X clusters:**

**(i) RMSD with pure Au<sub>10</sub> cluster (in Å)**

(a) Alkali dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	0.07	0.10	0.26	1.26
Site B	0.07	0.10	1.70	1.69
Site C	0.06	0.16	0.38	0.63
Site D	0.058	1.28	1.26	1.38

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	0.38	0.09	0.12	0.41
Site B	1.03	0.09	0.07	0.09
Site C	0.37	0.09	0.17	0.21
Site D	0.62	0.04	0.33	0.41

**(ii) Binding Energy (in eV)**BE of Au<sub>10</sub> = -1.659**(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	-1.692	-1.654	-1.657	-1.667
Site B	-1.713	-1.675	-1.711	-1.700
Site C	-1.691	-1.646	-1.645	-1.637
Site D	-1.715	-1.695	-1.712	-1.685

**(b) Alkaline earth dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	-1.724	-1.610	-1.652	-1.702
Site B	-1.807	-1.598	-1.645	-1.703
Site C	-1.775	-1.648	-1.692	-1.734
Site D	-1.835	-1.692	-1.740	-1.796

**(iii) Interaction Energy (in eV)**IE of Au<sub>10</sub> = -2.382**(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	-2.715	-2.329	-2.362	-2.464
Site B	-2.920	-2.543	-2.915	-2.799
Site C	-2.717	-2.250	-2.247	-2.160
Site D	-2.942	-2.749	-2.911	-2.646

**(b) Alkaline earth dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	-3.032	-1.891	-2.313	-2.818
Site B	-3.866	-1.770	-2.248	-2.825
Site C	-3.545	-2.276	-2.710	-3.136
Site D	-4.143	-2.713	-3.195	-3.759

**(iv) Au-X bond length (in Å)**

Average Au-Au bond length = 2.758

**(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	2.577	2.846	3.208	3.327
Site B	2.598	2.883	3.226	3.372
Site C	2.649	2.940	3.310	3.474
Site D	2.579	2.945	3.236	3.513

**(b) Alkaline earth dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	2.130	2.582	2.908	2.931
Site B	2.173	2.679	2.918	2.956
Site C	2.215	2.609	2.929	3.011
Site D	2.255	2.689	2.957	3.065

**(v) Ionic Character of the Au-X bond (difference of partial atomic charges, obtained from Natural Population Analysis, between Au and X). All values are in a.u.****(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	0.958	1.007	1.253	0.980
Site B	0.689	1.092	0.872	0.905
Site C	0.707	0.717	1.205	0.977
Site D	0.676	0.942	0.871	1.161

**(b) Alkaline earth dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	0.847	0.879	1.289	1.642
Site B	0.972	0.870	1.165	1.780

Site C	0.860	1.205	1.768	1.941
Site D	0.869	1.361	1.836	1.938

**(vi) HOMO-LUMO gap (in eV)**

E(HOMO) - E(LUMO) of Au<sub>10</sub> = -2.56331237

(a) Alkali dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	-2.125	-2.093	-1.971	-1.905
Site B	-2.280	-2.239	-2.231	-2.144
Site C	-2.354	-2.324	-2.199	-2.272
Site D	-2.419	-2.650	-2.250	-2.117

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	-2.403	-2.547	-2.357	-2.269
Site B	-2.449	-2.607	-2.444	-2.522
Site C	-2.215	-2.408	-2.278	-2.291
Site D	-2.117	-2.313	-2.199	-2.215

**(vii) Vertical Ionization Potential (in eV)**

VIP of Au<sub>10</sub> = 7.401

(a) Alkali dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	6.769	6.622	6.308	6.264
Site B	6.849	6.680	6.637	6.507
Site C	7.171	7.050	6.791	6.616
Site D	7.412	7.195	6.668	6.505

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	6.317	6.037	5.718	5.672

Site B	6.302	5.798	5.432	5.430
Site C	6.489	6.252	6.007	5.971
Site D	6.545	6.225	6.175	6.149

**(viii) Vertical Electron Affinity (in eV)**

VEA of Au<sub>10</sub> = 2.560

(a) Alkali dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	2.377	2.287	2.126	2.093
Site B	2.291	2.184	2.111	2.078
Site C	2.539	2.467	2.367	2.112
Site D	2.665	2.207	2.122	2.144

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	2.695	2.448	2.181	2.031
Site B	2.330	2.459	2.331	1.997
Site C	2.532	2.534	2.375	2.266
Site D	2.100	2.437	2.132	2.150

**(ix) Polarizability (in Bohr<sup>3</sup>)**

Polarizability of Au<sub>10</sub> = 438.221

(a) Alkali dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	432.839	446.076	459.817	437.636
Site B	433.913	449.179	410.754	417.617
Site C	428.706	442.823	454.212	452.132
Site D	427.617	390.746	410.826	426.573

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
---------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Site A	434.375	479.8	550.650	511.257
Site B	430.333	497.751	545.178	525.518
Site C	439.656	474.567	518.658	516.231
Site D	418.733	438.373	452.172	452.376

**(x) Dipole moment (in Debye)**

Dipole moment of Au<sub>10</sub> = 0.000812

**(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	4.568248	6.601558	10.44581	8.894163
Site B	5.440708	7.606711	5.985647	7.426224
Site C	2.991256	4.423665	7.844653	9.598922
Site D	0.923237	3.141660	6.039460	8.521225

**(b) Alkaline earth dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	1.153075	3.845194	8.896901	11.01458
Site B	1.965584	4.342130	10.681590	12.096826
Site C	1.566928	2.504142	6.179085	8.011196
Site D	1.397144	0.123153	3.510218	4.849611

**(xi) Coordination number (CN) of the dopant atom**

CN for Au<sub>10</sub> cluster for atoms at site (A), (B), (C) and (D) are 3, 3, 4 and 6 respectively.

Cases where the coordination number has changed due to doping has been mentioned in **red** color.

**(a) Alkali dopants**

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Li	Au <sub>9</sub> Na	Au <sub>9</sub> K	Au <sub>9</sub> Rb
Site A	3	3	3	<b>6</b>
Site B	3	3	<b>7</b>	<b>7</b>
Site C	4	4	4	4
Site D	6	<b>7</b>	<b>7</b>	<b>5</b>

(b) Alkaline earth dopants

CLUSTER	Au <sub>9</sub> Be	Au <sub>9</sub> Mg	Au <sub>9</sub> Ca	Au <sub>9</sub> Sr
Site A	3	3	3	3
Site B	4	3	3	3
Site C	4	4	4	4
Site D	6	6	6	6

## (2) Optimized coordinates

### Pure Au<sub>10</sub> cluster

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.411	-3.406	-2.673	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.229	-1.262	-3.273	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.345	-1.222	-1.026	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.299	0.930	-1.616	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.991	-3.327	-0.404	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.198	3.194	2.319	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.368	3.123	0.040	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.850	1.057	2.911	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.918	-1.136	1.255	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.274	1.016	0.665	1.00	0.00	Au

### Pure Au<sub>9</sub> cluster

HETATM	1 AU	LIG	1	-2.880	2.052	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	-0.153	2.049	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	2.510	2.233	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	-4.258	-0.390	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.522	-0.324	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	1.478	-0.251	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	-2.765	-2.761	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-0.041	-2.627	0.000	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	2.628	-2.683	0.000	1.00	0.00	Au

+++++

### Doped Au<sub>9</sub>Li cluster for doping at site A

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.355	-3.327	-2.761	1.00	0.00	Au
HETATM	2 LI	LIG	1	1.187	-1.309	-3.196	1.00	0.00	Li
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.320	-1.217	-1.081	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.265	0.882	-1.630	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.970	-3.260	-0.352	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.190	3.163	2.276	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.386	3.138	0.052	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.863	1.066	2.934	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.941	-1.149	1.294	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.288	0.983	0.662	1.00	0.00	Au

### Doped Au<sub>9</sub>Li cluster for doping at site B

HHETATM	1 LI	LIG	1	-0.397	-3.339	-2.607	1.00	0.00	Li
HETATM	2 AU	LIG	1	1.182	-1.371	-3.287	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.346	-1.257	-1.054	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.266	0.904	-1.589	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.942	-3.374	-0.501	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.207	3.285	2.374	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.343	3.112	0.062	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.827	1.074	2.891	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.886	-1.117	1.219	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.275	1.052	0.689	1.00	0.00	Au



**Doped Au<sub>9</sub>Li cluster for doping at site C**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.451	-3.389	-2.614	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.228	-1.230	-3.253	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.301	-1.159	-1.043	1.00	0.00	Au
HETATM	4	LI	LIG	1	1.273	0.903	-1.579	1.00	0.00	Li
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.007	-3.355	-0.401	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.238	3.134	2.321	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.365	3.094	0.016	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.860	1.061	2.943	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.866	-1.103	1.208	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.232	1.013	0.600	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Li cluster for doping at site D**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.421	-3.304	-2.610	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.215	-1.265	-3.247	1.00	0.00	Au
HETATM	3	LI	LIG	1	-0.336	-1.257	-1.043	1.00	0.00	Li
HETATM	4	AU	LIG	1	1.257	0.874	-1.595	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.968	-3.306	-0.410	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.206	3.226	2.332	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.348	3.084	0.039	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.830	1.044	2.875	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.876	-1.134	1.196	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.273	1.006	0.660	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Na cluster for doping at site A**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.421	-3.406	-2.671	1.00	0.00	Au
HETATM	2	NA	LIG	1	1.347	-1.336	-3.503	1.00	0.00	Na
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.308	-1.219	-1.072	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	1.266	0.906	-1.588	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.999	-3.245	-0.325	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.214	3.174	2.314	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.360	3.157	0.090	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.875	1.072	2.961	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.949	-1.128	1.306	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.297	0.992	0.686	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Na cluster for doping at site B**

HETATM	1	NA	LIG	1	-0.441	-3.596	-2.846	1.00	0.00	Na
HETATM	2	AU	LIG	1	1.229	-1.283	-3.265	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.340	-1.263	-1.050	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	1.271	0.928	-1.561	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.974	-3.336	-0.414	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.209	3.302	2.383	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.344	3.140	0.082	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.822	1.100	2.916	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.878	-1.091	1.246	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.270	1.066	0.706	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Na cluster for doping at site C**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.526	-3.457	-2.571	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.195	-1.439	-3.329	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.279	-1.162	-1.065	1.00	0.00	Au
HETATM	4	NA	LIG	1	1.497	1.062	-1.803	1.00	0.00	Na
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.047	-3.353	-0.358	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.312	3.114	2.402	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.324	3.238	0.183	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.891	1.014	2.963	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.837	-1.084	1.184	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.212	1.037	0.592	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Na cluster for doping at site D**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.697	-1.683	-1.721	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.071	-1.400	-3.706	1.00	0.00	Au
HETATM	3	NA	LIG	1	0.809	-0.462	0.872	1.00	0.00	Na
HETATM	4	AU	LIG	1	0.787	0.722	-2.067	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.250	-3.545	-0.593	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	1.009	2.037	2.794	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.150	2.364	0.074	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.407	0.826	2.324	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-2.225	-1.142	0.624	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-1.337	1.251	-0.404	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>K cluster for doping at site A**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.461	-3.459	-2.578	1.00	0.00	Au
HETATM	2	K	LIG	1	1.575	-1.383	-3.932	1.00	0.00	K
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.317	-1.227	-1.037	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	1.265	0.898	-1.518	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.040	-3.228	-0.255	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.239	3.195	2.344	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.354	3.166	0.142	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.911	1.107	2.991	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.993	-1.110	1.354	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.323	0.995	0.727	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>K cluster for doping at site B**

HETATM	1	K	LIG	1	1.163	-1.174	0.878	1.00	0.00	K
HETATM	2	AU	LIG	1	0.894	-0.904	-3.935	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.927	-1.385	-2.055	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	0.720	0.907	-1.926	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.734	-3.151	-1.220	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	0.837	1.719	2.837	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.655	2.347	0.253	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.557	0.314	2.697	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-2.313	-1.000	0.375	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.827	1.296	0.294	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>K cluster for doping at site C**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.632	-3.512	-2.467	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.098	-1.640	-3.430	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.254	-1.129	-1.108	1.00	0.00	Au
HETATM	4	K	LIG	1	1.955	1.257	-2.077	1.00	0.00	K
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.141	-3.383	-0.274	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.416	3.033	2.485	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.210	3.409	0.330	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.946	0.924	3.042	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.776	-1.059	1.147	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.188	1.068	0.550	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>K cluster for doping at site D**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.801	-1.746	-1.689	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	0.966	-1.622	-3.683	1.00	0.00	Au
HETATM	3	K	LIG	1	1.305	-0.713	1.129	1.00	0.00	K
HETATM	4	AU	LIG	1	0.716	0.585	-2.133	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.464	-3.504	-0.568	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	0.634	2.464	2.367	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.373	2.541	-0.305	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.594	0.821	2.519	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-2.245	-1.091	0.638	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.980	1.234	-0.078	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Rb cluster for doping at site A**

HETATM	1	AU	LIG	1	-1.100	-2.907	-3.324	1.00	0.00	Au
HETATM	2	RB	LIG	1	1.895	-1.627	-0.573	1.00	0.00	Rb
HETATM	3	AU	LIG	1	-1.163	-0.843	-1.622	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	-0.276	1.606	-2.246	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.351	-3.440	-0.603	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	0.456	2.841	2.216	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	0.711	3.473	-0.412	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-0.593	0.455	3.072	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.171	-1.595	1.299	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.497	1.004	0.392	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Rb cluster for doping at site B**

HETATM	1	RB	LIG	1	1.338	-1.531	0.699	1.00	0.00	Rb
HETATM	2	AU	LIG	1	0.292	-0.854	-4.083	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-1.250	-1.134	-1.924	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	0.668	0.913	-2.057	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-3.067	-2.890	-1.067	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	1.249	1.627	2.716	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.856	2.218	0.068	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.215	0.344	2.837	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-2.344	-0.919	0.655	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.618	1.194	0.352	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Rb cluster for doping at site C**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.365	-3.439	-2.534	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.707	-1.663	-2.877	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.031	-1.306	-0.837	1.00	0.00	Au
HETATM	4 RB	LIG	1	0.230	1.662	-2.623	1.00	0.00	Rb
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.154	-3.270	-0.521	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.248	3.095	2.377	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.743	2.917	0.484	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-2.036	1.128	2.845	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.938	-1.027	1.099	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	0.001	0.873	0.785	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Rb cluster for doping at site D**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.790	-1.796	-1.775	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	0.908	-1.120	-3.685	1.00	0.00	Au
HETATM	3 RB	LIG	1	1.215	-1.372	1.226	1.00	0.00	Rb
HETATM	4 AU	LIG	1	0.568	0.627	-1.646	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.311	-3.883	-1.096	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.760	2.742	3.111	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.868	2.940	-1.119	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.699	0.459	1.932	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-2.223	-1.713	0.566	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	0.133	2.085	0.683	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Be cluster for doping at site A**

HETATM	1 AU	LIG	1	0.157	-2.999	-3.161	1.00	0.00	Au
HETATM	2 BE	LIG	1	0.965	-1.058	-2.740	1.00	0.00	Be
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.470	-1.397	-0.990	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.299	0.785	-1.726	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.217	-3.335	-0.086	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.129	3.059	2.103	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.451	3.076	-0.099	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.863	1.087	2.950	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-2.005	-1.128	1.382	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.278	0.878	0.564	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Be cluster for doping at site B**

HETATM	1 BE	LIG	1	-0.885	-2.566	-1.192	1.00	0.00	Be
HETATM	2 AU	LIG	1	0.100	-3.021	-3.076	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	0.343	-0.694	-1.648	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.695	1.723	-1.851	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.253	-3.743	0.018	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.316	3.076	2.278	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.298	3.560	0.172	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.693	0.701	2.572	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.363	-1.214	0.588	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.015	1.146	0.336	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Be cluster for doping at site C**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.326	-3.239	-2.665	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.398	-0.633	-2.998	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.364	-1.185	-0.970	1.00	0.00	Au
HETATM	4	BE	LIG	1	0.937	0.695	-1.286	1.00	0.00	Be
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.978	-3.343	-0.434	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.127	3.136	2.161	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.502	2.682	-0.487	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.842	1.086	2.916	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.992	-1.181	1.314	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.297	0.951	0.647	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Be cluster for doping at site D**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.766	-2.779	-1.693	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.053	-1.332	-3.078	1.00	0.00	Au
HETATM	3	BE	LIG	1	0.049	-0.699	-1.161	1.00	0.00	Be
HETATM	4	AU	LIG	1	1.512	1.072	-1.799	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.585	-3.763	0.068	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.278	3.002	2.277	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.383	3.169	0.064	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.787	0.669	2.534	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.547	-1.326	0.577	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.124	0.955	0.409	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Mg cluster for doping at site A**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.325	-3.289	-2.728	1.00	0.00	Au
HETATM	2	MG	LIG	1	1.207	-1.183	-3.191	1.00	0.00	Mg
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.364	-1.221	-0.994	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	1.325	0.901	-1.672	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.034	-3.322	-0.314	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.180	3.116	2.233	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.407	3.129	-0.001	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.881	1.038	2.927	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.973	-1.160	1.314	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.273	0.959	0.624	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Mg cluster for doping at site B**

HETATM	1	MG	LIG	1	-0.395	-3.482	-2.710	1.00	0.00	Mg
HETATM	2	AU	LIG	1	1.164	-1.377	-3.270	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.356	-1.232	-1.045	1.00	0.00	Au
HETATM	4	AU	LIG	1	1.264	0.926	-1.582	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.929	-3.360	-0.517	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.197	3.324	2.412	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.352	3.113	0.068	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.820	1.074	2.902	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.896	-1.099	1.232	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.278	1.082	0.708	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Mg cluster for doping at site C**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.411	-3.338	-2.611	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.290	-1.098	-3.253	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.337	-1.181	-0.994	1.00	0.00	Au
HETATM	4 MG	LIG	1	1.265	0.906	-1.583	1.00	0.00	Mg
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.016	-3.342	-0.373	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.206	3.118	2.267	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.439	3.047	-0.101	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.888	1.039	2.926	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.956	-1.158	1.286	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.268	0.973	0.635	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Mg cluster for doping at site D**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.420	-3.382	-2.666	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.219	-1.230	-3.248	1.00	0.00	Au
HETATM	3 MG	LIG	1	-0.345	-1.242	-1.041	1.00	0.00	Mg
HETATM	4 AU	LIG	1	1.295	0.896	-1.627	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.985	-3.290	-0.386	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.210	3.260	2.353	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.339	3.079	0.070	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.808	1.064	2.870	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.908	-1.160	1.231	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.267	0.973	0.642	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Ca cluster for doping at site A**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.417	-3.394	-2.646	1.00	0.00	Au
HETATM	2 CA	LIG	1	1.403	-1.247	-3.519	1.00	0.00	Ca
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.338	-1.209	-1.010	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.323	0.957	-1.624	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.062	-3.277	-0.276	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.209	3.109	2.259	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.386	3.175	0.051	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.902	1.034	2.974	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.987	-1.137	1.340	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.287	0.956	0.649	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Ca cluster for doping at site B**

HETATM	1 CA	LIG	1	-0.420	-3.555	-2.793	1.00	0.00	Ca
HETATM	2 AU	LIG	1	1.277	-1.240	-3.319	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.343	-1.196	-1.004	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.306	0.970	-1.593	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.035	-3.362	-0.367	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.199	3.222	2.337	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.391	3.140	0.020	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.869	1.043	2.936	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.925	-1.103	1.291	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.273	1.048	0.691	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Ca cluster for doping at site C**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.521	-3.424	-2.545	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.243	-1.381	-3.380	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.305	-1.168	-1.028	1.00	0.00	Au
HETATM	4 CA	LIG	1	1.552	1.098	-1.849	1.00	0.00	Ca
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.057	-3.351	-0.316	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.313	3.082	2.374	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.383	3.261	0.119	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.922	0.985	2.958	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.909	-1.137	1.257	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.239	1.003	0.609	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Ca cluster for doping at site D**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.269	-3.529	-2.612	1.00	0.00	Au
HETATM	2 AU	LIG	1	1.356	-1.295	-3.208	1.00	0.00	Au
HETATM	3 CA	LIG	1	-1.059	-0.884	-1.549	1.00	0.00	Ca
HETATM	4 AU	LIG	1	1.370	0.900	-1.615	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-1.820	-3.431	-0.251	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.126	3.284	2.465	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.276	3.103	0.059	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.763	1.065	2.880	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.813	-1.238	1.346	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.242	0.994	0.684	1.00	0.00	Au

+++++

**Doped Au<sub>9</sub>Sr cluster for doping at site A**

HETATM	1 AU	LIG	1	-0.426	-3.413	-2.670	1.00	0.00	Au
HETATM	2 SR	LIG	1	1.417	-1.254	-3.537	1.00	0.00	Sr
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.335	-1.205	-1.016	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.319	0.963	-1.621	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.042	-3.254	-0.273	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.206	3.107	2.251	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.389	3.175	0.047	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.913	1.036	2.989	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.995	-1.139	1.369	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.298	0.953	0.659	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Sr cluster for doping at site B**

HETATM	1 SR	LIG	1	-0.422	-3.600	-2.827	1.00	0.00	Sr
HETATM	2 AU	LIG	1	1.279	-1.238	-3.343	1.00	0.00	Au
HETATM	3 AU	LIG	1	-0.345	-1.213	-1.019	1.00	0.00	Au
HETATM	4 AU	LIG	1	1.292	0.961	-1.576	1.00	0.00	Au
HETATM	5 AU	LIG	1	-2.039	-3.386	-0.360	1.00	0.00	Au
HETATM	6 AU	LIG	1	-0.199	3.267	2.369	1.00	0.00	Au
HETATM	7 AU	LIG	1	1.384	3.133	0.051	1.00	0.00	Au
HETATM	8 AU	LIG	1	-1.858	1.068	2.923	1.00	0.00	Au
HETATM	9 AU	LIG	1	-1.908	-1.091	1.276	1.00	0.00	Au
HETATM	10 AU	LIG	1	-0.273	1.067	0.703	1.00	0.00	Au

**Doped Au<sub>9</sub>Sr cluster for doping at site C**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.558	-3.430	-2.526	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.218	-1.439	-3.407	1.00	0.00	Au
HETATM	3	AU	LIG	1	-0.297	-1.149	-1.043	1.00	0.00	Au
HETATM	4	SR	LIG	1	1.637	1.140	-1.909	1.00	0.00	Sr
HETATM	5	AU	LIG	1	-2.061	-3.357	-0.293	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.346	3.064	2.388	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.386	3.288	0.187	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.941	0.972	2.962	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.902	-1.131	1.249	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.227	1.009	0.591	1.00	0.00	Au

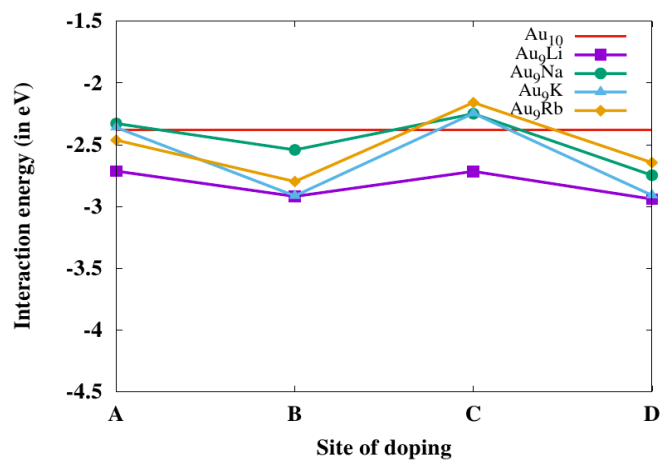
**Doped Au<sub>9</sub>Sr cluster for doping at site D**

HETATM	1	AU	LIG	1	-0.146	-3.580	-2.488	1.00	0.00	Au
HETATM	2	AU	LIG	1	1.556	-1.435	-2.983	1.00	0.00	Au
HETATM	3	SR	LIG	1	-1.155	-0.793	-1.705	1.00	0.00	Sr
HETATM	4	AU	LIG	1	1.531	0.787	-1.464	1.00	0.00	Au
HETATM	5	AU	LIG	1	-1.782	-3.412	-0.243	1.00	0.00	Au
HETATM	6	AU	LIG	1	-0.354	3.405	2.294	1.00	0.00	Au
HETATM	7	AU	LIG	1	1.285	3.080	0.063	1.00	0.00	Au
HETATM	8	AU	LIG	1	-1.962	1.167	2.712	1.00	0.00	Au
HETATM	9	AU	LIG	1	-1.850	-1.212	1.308	1.00	0.00	Au
HETATM	10	AU	LIG	1	-0.212	0.961	0.704	1.00	0.00	Au

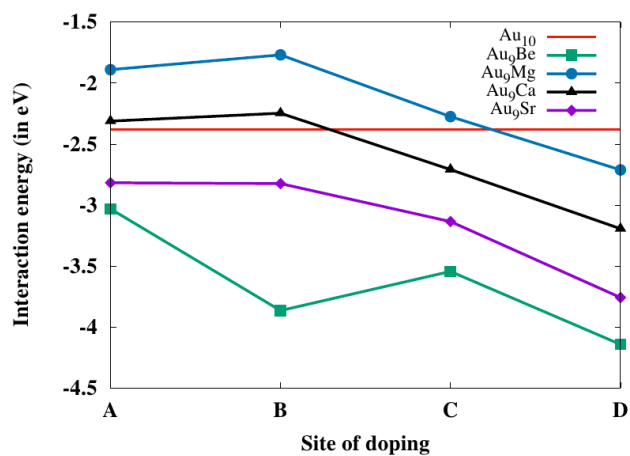
+++++



### (3) Variation in Interaction Energy (IE)



(a) Alkali dopants



(b) Alkaline earth dopants

**Figure S1:** Variation in the Interaction Energy (IE) of doped gold clusters ( $\text{Au}_9 \text{X}$ ) in eV with respect to the site of doping for (a) alkali atoms and (b) alkaline earth atoms as dopant.