

The Closed-Shell d^{10} - d^{10} Mechanochromic in $[\text{AuPh}(\text{CNPh})]_n$ Complex. Quantum Chemistry Electronic and Optical Properties

Fernando Mendizabal^{1*}, María Luisa Ceron^{*2}, Dina Lara¹, and Sebastián Miranda-Rojas^{*3,4}

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile.

²Facultad de Ingeniería, Universidad Finis Terrae, Av. Pedro de Valdivia 1509, Providencia, Santiago, Chile

³Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Avenida República 275, Santiago, Chile. E-mail:sebastian.miranda@unab.cl

⁴Universidad Andrés Bello, Centro de Química Teórica & Computacional (CQT&C), Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Ciencias Químicas, Avenida República 275, 8370146, Santiago de Chile, Chile E-mail:sebastian.miranda@unab.cl

*Correspondence: hagua@uchile.cl (F.M.), lceron@uft.cl (M.L.C), sebastian.miranda@unab.cl (S.M-R.)

Figures

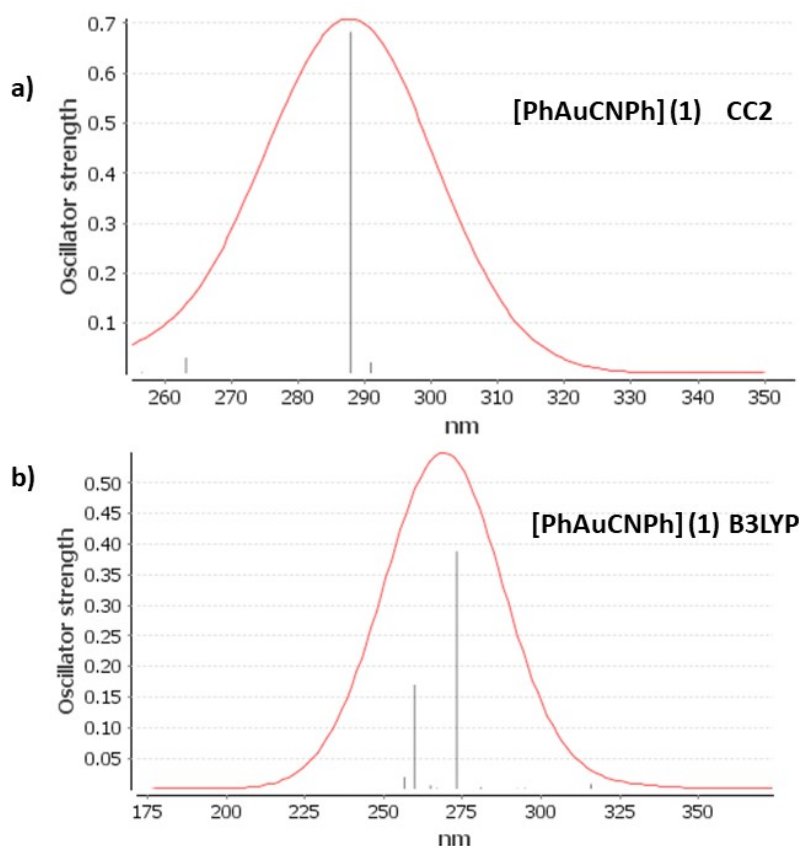
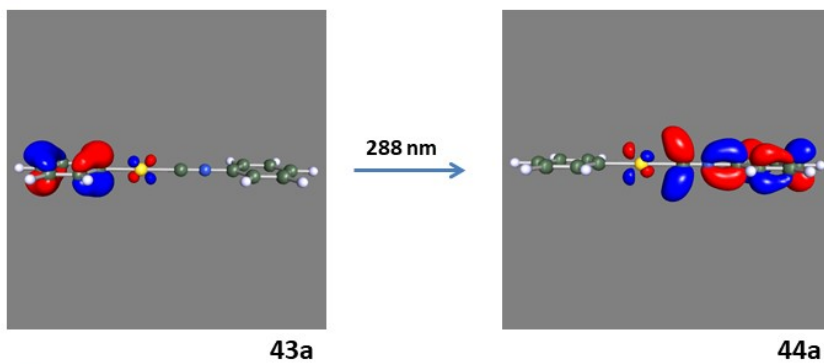


Figure 1S. Electronic spectra at the CC2 and B3LYP levels calculated for [PhAuCNPh] model 1.

CC2



B3LYP

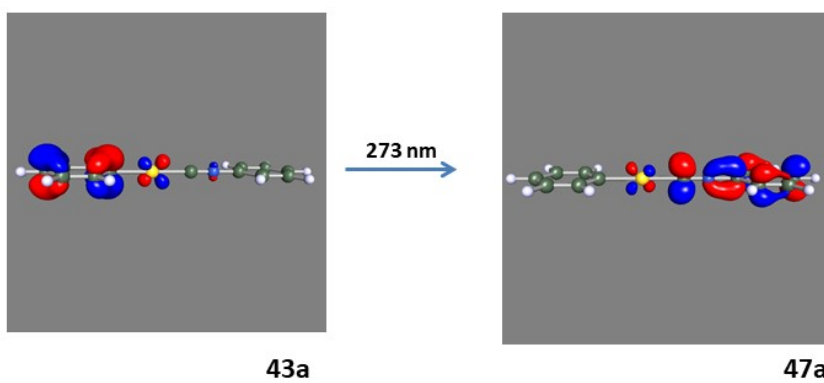


Figure 2S. Most important active molecular orbitals in the electronic transition of the [AuPh(CNPh)] (1) at the CC2 and B3LYP levels.