Supplementary Material for Electronically Excited States of Potential Interstellar, Anionic Building Blocks for Astrobiological Nucleic Acids

1 SUPPLEMENTARY FIGURES AND TABLES

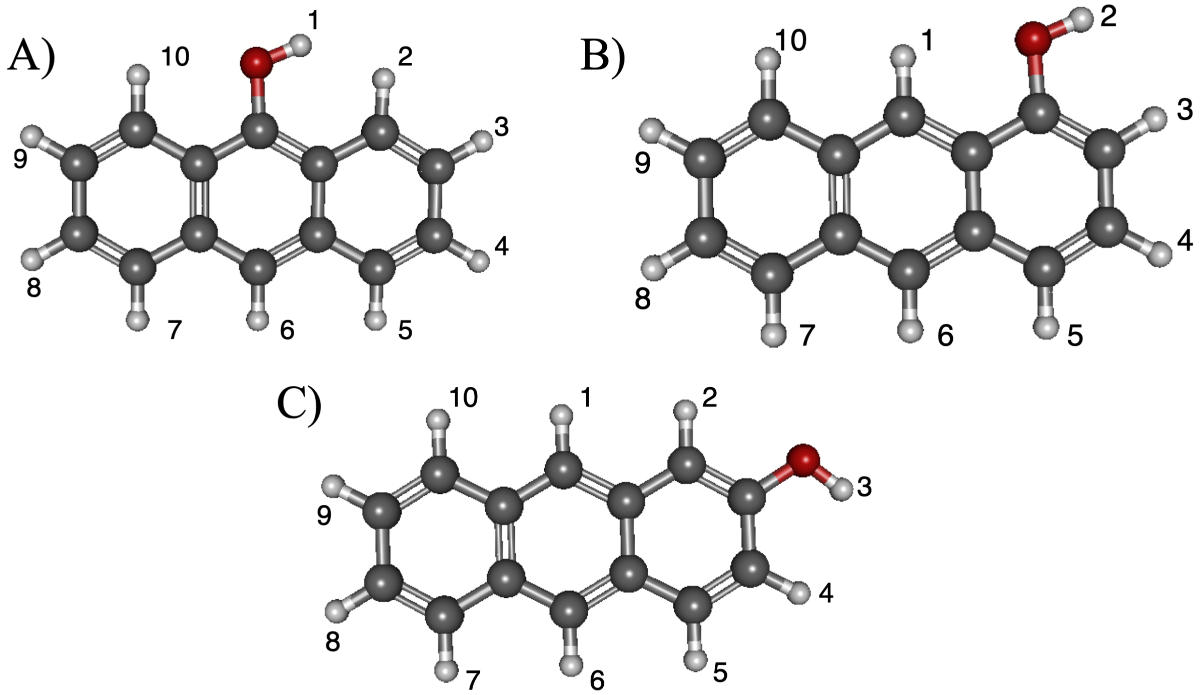

Figure S1. Optimized structures of the three hydroxyanthracene derivatives with numbered positions of deprotonation, **(A)** Position 1, **(B)** Position 2, **(C)** Position 3.

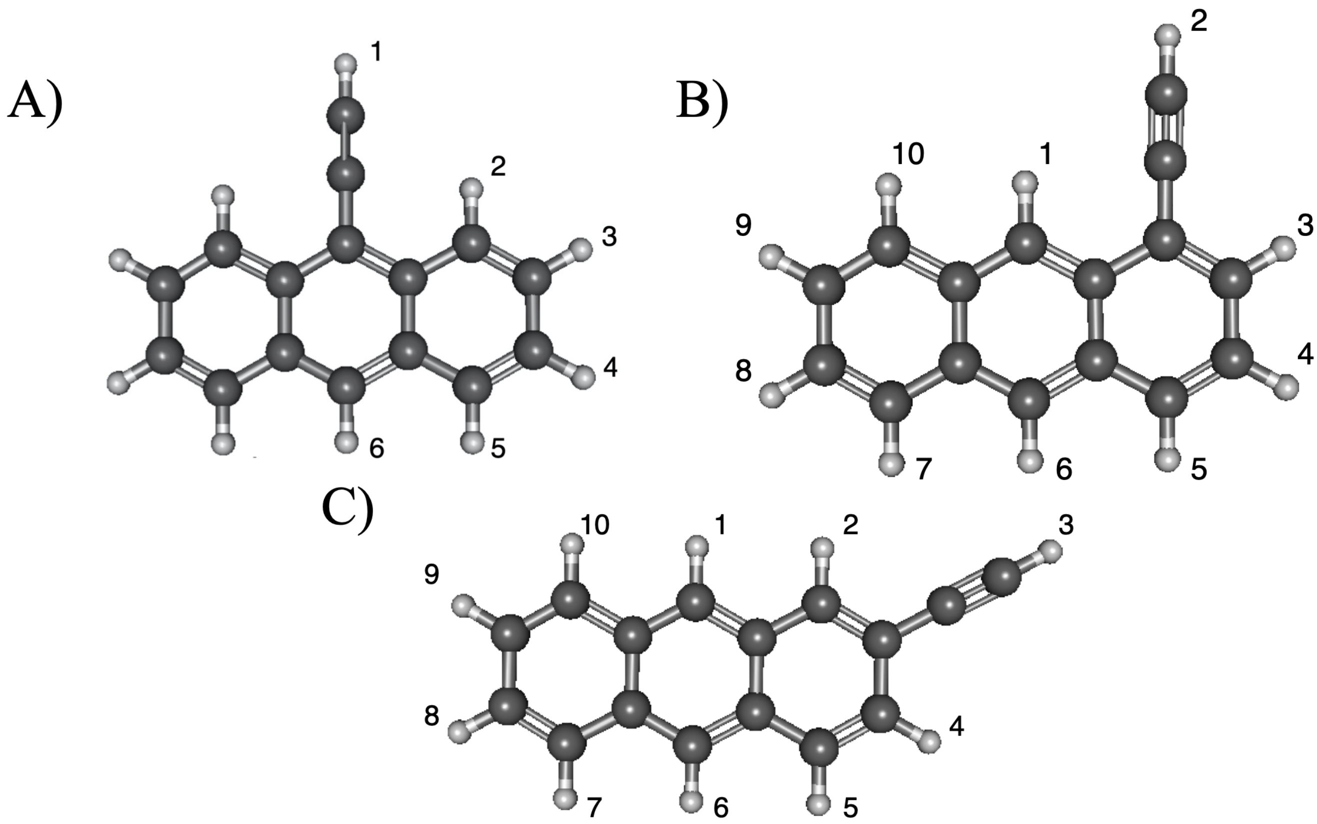

Figure S2. Optimized structures of the three ethynylanthracene derivatives with numbered positions of deprotonation, **(A)** Position 1, **(B)** Position 2, **(C)** Position 3.

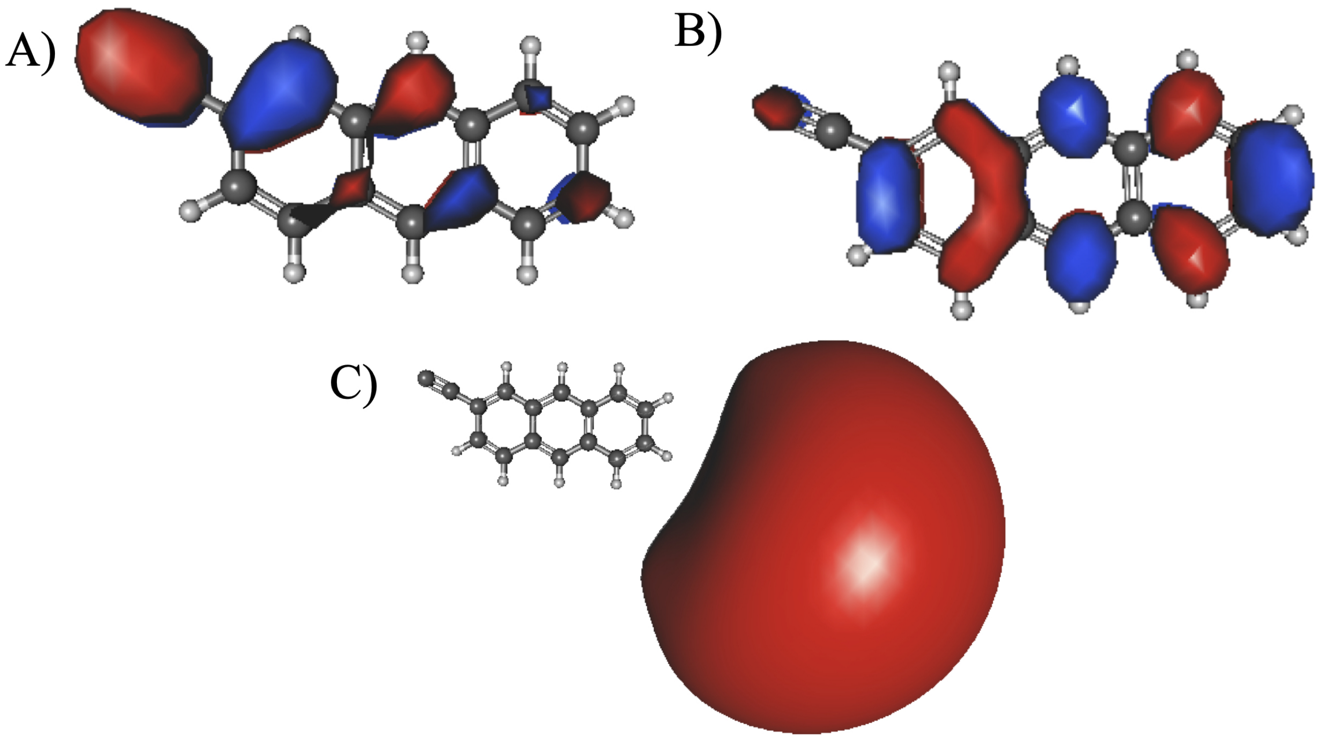

Figure S3. The electronic characteristics of 3-ethynylanthracene anion 3, **(A)** HOMO, **(B)** Dipole-bound LUMO, **(C)** Valence LUMO

Ethynylbenz.	Oscillator Strengths	
	2 ^{1}A$'$/2 ^{1}A$_1$	1 ^{1}A$''$/1 ^{1}B$_1$
1	$> 1 \times 10^{-06}$	1×10^{-03}
2	4×10^{-06}	3×10^{-08}
3	5×10^{-06}	2×10^{-07}
4	3×10^{-06}	2×10^{-06}

Phenol	Oscillator Strengths	
	2 ^{1}A$'$/2 ^{1}A$_1$	1 ^{1}A$''$/1 ^{1}B$_1$
1	$> 1 \times 10^{-06}$	2×10^{-04}
2	1×10^{-06}	2×10^{-07}
3	1×10^{-06}	6×10^{-07}
4	4×10^{-06}	3×10^{-04}
5	1×10^{-05}	2×10^{-07}
6	3×10^{-05}	2×10^{-08}

1-hydroxynaph.	Oscillator Strengths	
	2 ^{1}A$'$/2 ^{1}A$_1$	1 ^{1}A$''$/1 ^{1}B$_1$
1	6×10^{-08}	1×10^{-04}
2	$> 1 \times 10^{-06}$	6×10^{-07}
2R	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$
3	2×10^{-05}	3×10^{-06}
4	$> 1 \times 10^{-06}$	2×10^{-07}
5	3×10^{-04}	2×10^{-08}
6	3×10^{-04}	$> 1 \times 10^{-06}$
7	3×10^{-04}	$> 1 \times 10^{-06}$
8	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$
8R	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$

2-hydroxynaph.	Oscillator Strengths	
	2 ^{1}A$'$/2 ^{1}A$_1$	1 ^{1}A$''$/1 ^{1}B$_1$
1	3×10^{-07}	1×10^{-06}
1R	3×10^{-05}	4×10^{-07}
2	1×10^{-07}	2×10^{-04}
3	$> 1 \times 10^{-06}$	2×10^{-07}
3R	3×10^{-05}	1×10^{-06}
4	6×10^{-05}	1×10^{-08}
5	5×10^{-05}	8×10^{-08}
6	1×10^{-04}	2×10^{-06}
7	3×10^{-08}	2×10^{-06}
8	$> 1 \times 10^{-06}$	1×10^{-07}

1-ethynylnaph.	Oscillator Strengths	
	2 ^{1}A$'$/2 ^{1}A$_1$	1 ^{1}A$''$/1 ^{1}B$_1$
1	2×10^{-07}	7×10^{-04}
2	6×10^{-05}	7×10^{-07}
3	5×10^{-05}	3×10^{-07}
4	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$
5	7×10^{-05}	$> 1 \times 10^{-06}$
6	1×10^{-04}	3×10^{-07}
7	1×10^{-04}	6×10^{-07}
8	2×10^{-05}	$0 \times 10^{+00}$

2-ethynylnaph.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1\mathrm{A}'/2\,^1\mathrm{A}_1$	$1\,^1\mathrm{A}''/1\,^1\mathrm{B}_1$
1	$> 1 \times 10^{-06}$	1×10^{-07}
2	2×10^{-05}	3×10^{-05}
3	2×10^{-05}	4×10^{-07}
4	6×10^{-06}	3×10^{-08}
5	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$
6	3×10^{-04}	2×10^{-07}
7	3×10^{-04}	7×10^{-08}
8	8×10^{-05}	1×10^{-07}

1-hydroxyanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1\mathrm{A}'/2\,^1\mathrm{A}_1$	$1\,^1\mathrm{A}''/1\,^1\mathrm{B}_1$
1	$> 1 \times 10^{-06}$	1×10^{-04}
2	1×10^{-07}	$0 \times 10^{+00}$
3	1×10^{-03}	2×10^{-07}
4	1×10^{-03}	7×10^{-07}
5	5×10^{-04}	3×10^{-07}
6	5×10^{-05}	1×10^{-05}
7	$> 1 \times 10^{-06}$	$> 1 \times 10^{-06}$
8	9×10^{-05}	4×10^{-06}
9	1×10^{-04}	4×10^{-06}
10	3×10^{-05}	6×10^{-07}

2-hydroxyanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1\mathrm{A}'/2\,^1\mathrm{A}_1$	$1\,^1\mathrm{A}''/1\,^1\mathrm{B}_1$
1	4×10^{-06}	2×10^{-07}
2	4×10^{-08}	8×10^{-05}
3	9×10^{-04}	9×10^{-05}
4	6×10^{-04}	8×10^{-08}
5	1×10^{-03}	1×10^{-08}
6	6×10^{-05}	6×10^{-07}
7	4×10^{-05}	3×10^{-07}
8	1×10^{-04}	3×10^{-07}
9	1×10^{-04}	3×10^{-06}
10	3×10^{-05}	$> 1 \times 10^{-06}$

3-hydroxyanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1\mathrm{A}'/2\,^1\mathrm{A}_1$	$1\,^1\mathrm{A}''/1\,^1\mathrm{B}_1$
1	1×10^{-05}	3×10^{-07}
2	6×10^{-05}	3×10^{-07}
3	9×10^{-08}	2×10^{-05}
4	7×10^{-04}	9×10^{-06}
5	2×10^{-04}	6×10^{-08}
6	8×10^{-05}	4×10^{-08}
7	2×10^{-04}	2×10^{-07}
8	3×10^{-04}	1×10^{-07}
9	3×10^{-04}	2×10^{-07}
10	5×10^{-05}	2×10^{-07}

1-ethynylanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1A'/2\,^1A_1$	$1\,^1A''/1\,^1B_1$
1	$> 1 \times 10^{-06}$	2×10^{-04}
2	$> 1 \times 10^{-06}$	3×10^{-08}
3	5×10^{-04}	8×10^{-08}
4	3×10^{-04}	2×10^{-06}
5	4×10^{-05}	$> 1 \times 10^{-6}$
6	1×10^{-04}	2×10^{-03}

2-ethynylanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1A'/2\,^1A_1$	$1\,^1A''/1\,^1B_1$
1	3×10^{-07}	2×10^{-03}
2	2×10^{-01}	6×10^{-04}
3	3×10^{-04}	2×10^{-03}
4	2×10^{-04}	9×10^{-04}
5	1×10^{-04}	1×10^{-03}
6	1×10^{-04}	1×10^{-03}
7	3×10^{-04}	5×10^{-04}
8	4×10^{-04}	1×10^{-06}
9	6×10^{-04}	$> 1 \times 10^{-06}$
10	8×10^{-05}	$> 1 \times 10^{-06}$

3-ethynylanthra.	Oscillator Strengths	
	$2\,^1A'/2\,^1A_1$	$1\,^1A''/1\,^1B_1$
1	3×10^{-07}	2×10^{-03}
2	2×10^{-01}	6×10^{-04}
3	3×10^{-04}	2×10^{-03}
4	2×10^{-04}	9×10^{-04}
5	1×10^{-04}	1×10^{-03}
6	1×10^{-04}	1×10^{-03}
7	3×10^{-04}	5×10^{-04}
8	4×10^{-04}	1×10^{-06}
9	6×10^{-04}	$> 1 \times 10^{-06}$
10	8×10^{-05}	$> 1 \times 10^{-06}$