S2: Effective potentials

iso-PrCN:

$V^{eff}(\theta_1, \theta_2)$ = +1263.729 −661.013 (cos3 θ_1 + cos3 θ_2) +72.178 cos3 θ_1 cos3 θ_2 −13.842 (cos6 θ_1 + cos6 θ_2) +9.033 (cos6 θ_1 cos3 θ_2 + cos3 θ_1 cos6 θ_2) +0.712 cos6 θ_1 cos6 θ_2 − 50.029 sin3 θ_1 sin3 θ_2 +8.744 (sin3 θ_1 − sin3 θ_2) +6.213 (cos3 θ_1 sin3 θ_2 − sin3 θ_1 cos3 θ_2) +0.393 (cos6 θ_1 sin3 θ_2 − sin3 θ_1 cos6 θ_2).

n-PrCN:

$V^{eff}(\theta, \alpha)$ = +1282.431 −70.958 cos1 α +79.853 cos2 α −690.348 cos3 α +11.932 cos4 α +4.334 cos5 α −6.244 cos6 α − 605.859 cos3 θ +8.554 cos3 θ cos1 α −0.877 cos3 θ cos2 α +55.204 cos3 θ cos3 α +8.261 cos3 θ cos4 α +3.629 cos3 θ cos5 α −1.010 cos3 θ cos6 α − 10.037 cos6 θ −2.323 cos6 θ cos1 α −4.599 cos6 θ cos2 α +6.345 cos6z cos3 α − 0.465 cos6z cos4 α −0.950 cos6z cos5 α −2.777 cos6 θ cos6 α −27.215 sin3 θ sin1 α + 7.573 sin3 θ sin2 α −44.128 sin3 θ sin3 α − 4.226 sin3 θ sin4 α +5.714 sin3 θ sin5 α