

**Table S1** Total r.m.s. values for cDDPd vibrational modes *without using scaling factors* ( $\lambda = 1$ ) for the different basis sets at the non-metal atoms and LANL2DZ at the Pd-atom. The *FineGrid* option was used in the case of the DFT. The lowest r.m.s. values for each theory level are shaded.

Theory Level	HF	MP2	B3LYP	mPW1PW
	r.m.s. <sup>(b)</sup>	r.m.s. <sup>(b)</sup>	r.m.s. <sup>(b)</sup>	r.m.s. <sup>(b)</sup>
6-31G	9,8%	7,1%	5,5%	5,5%
6-31+G	9,9%	7,1%	5,9%	5,7%
6-31++G	9,8%	7,0%	7,9%	5,6%
6-31G*	10,4%	8,1%	7,1%	6,8%
6-31G**	9,9%	8,4%	7,4%	6,9%
6-31+G*	10,7%	8,1%	7,7%	7,2%
6-31++G*	10,7%	8,0%	7,6%	7,1%
6-31+G**	10,2%	8,2%	7,7%	7,3%
6-31++G**	10,2%	8,1%	8,9%	7,3%
6-31+G(2df)	10,1%	6,0%	7,9%	7,6%
6-31+G(2df,p)	10,0%	6,6%	8,1%	7,5%
6-31+G(2df,2p)	10,1%	6,9%	8,1%	7,8%
6-31+G(2df,2pd)	10,1%	6,7%	8,1%	7,5%
cc-pVDZ		8,5%	8,0%	7,3%
AUG-cc-pVDZ		6,4%	8,0%	6,8%
6-311G	10,3%	7,1%	5,8%	5,6%
6-311+G	9,9%	6,6%	6,1%	5,8%
6-311++G	9,8%	6,5%	6,1%	5,8%
6-311G*	10,7%	8,8%	7,6%	7,2%
6-311G**	10,1%	8,7%	8,1%	7,4%
6-311+G*	10,8%	8,2%	7,7%	7,3%
6-311++G*	10,9%	8,0%	7,8%	7,3%
6-311+G**	10,2%	7,8%	8,3%	7,5%
6-311++G**	10,2%	7,7%	8,2%	7,5%
6-311+G(2df)	10,4%	6,7%	8,4%	7,8%
6-311+G(2df,p)	10,2%	7,0%	8,3%	7,7%
6-311+G(2df,2p)	10,4%	7,4%	9,9%	7,8%
6-311+G(2df,2pd)	11,1%	7,6%	8,3%	7,8%
6-311+G(3df,3pd)	9,8%	7,8%	7,7%	7,4%
cc-pVTZ		8,5%	8,3%	7,8%
AUG-cc-pVTZ		6,4%	7,9%	7,7%
<b>MP2(full)/AUG-cc-pVTZ</b>		7,0%		

$$^{(a)}\text{r.m.s.} = \left( \frac{\sum_{i=1}^n \Delta_i}{n} \right)^{1/2}$$

**Table S2** *One average scaling factor* for all cDDPd's vibrational modes and r.m.s. values obtained using the different basis sets at the non-metal atoms and LANL2DZ at the Pd-atom. The *FineGrid* option was used in the case of the DFT. The lowest r.m.s. values for each theory level are shaded.

Theory Level	HF		MP2		B3LYP		mPW1PW	
	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>
6-31G	0,90	7,3%	0,93	6,4%	0,96	5,9%	0,93	5,3%
6-31+G	0,91	7,9%	0,94	6,3%	0,96	6,5%	0,94	5,4%
6-31++G	0,91	7,7%	0,94	6,2%	1,00	7,9%	0,94	5,4%
6-31G*	0,93	9,1%	0,95	7,4%	0,98	7,1%	0,95	6,5%
6-31G**	0,94	8,8%	0,96	8,2%	0,99	7,5%	0,96	7,0%
6-31+G*	0,93	9,6%	0,95	7,3%	0,98	7,6%	0,96	7,0%
6-31++G*	0,93	9,5%	0,95	7,1%	0,98	7,6%	0,96	6,9%
6-31+G**	0,95	9,2%	0,96	8,1%	0,99	7,6%	0,97	7,3%
6-31++G**	0,95	9,2%	0,96	7,9%	1,01	8,9%	0,97	7,3%
6-31+G(2df)	0,95	9,0%	0,95	6,5%	1,00	7,9%	0,97	7,4%
6-31+G(2df,p)	0,95	8,9%	0,95	6,9%	1,00	8,1%	0,98	7,5%
6-31+G(2df,2p)	0,95	9,1%	0,95	7,4%	1,00	8,1%	0,98	7,7%
6-31+G(2df,2pd)	0,95	9,0%	0,95	7,5%	1,00	8,1%	0,98	7,5%
cc-pVDZ			0,98	8,5%	1,00	8,0%	0,98	7,5%
AUG-cc-pVDZ			0,95	7,7%	1,01	8,0%	0,97	7,5%
6-311G	0,95	9,3%	0,94	6,4%	0,96	6,5%	0,94	5,5%
6-311+G	0,91	7,9%	0,93	5,9%	0,97	6,7%	0,94	5,6%
6-311++G	0,91	7,6%	0,93	5,9%	0,97	6,6%	0,94	5,6%
6-311G*	0,93	9,6%	0,95	8,1%	0,98	7,6%	0,95	6,9%
6-311G**	0,95	9,2%	0,98	8,9%	1,00	8,1%	0,98	7,4%
6-311+G*	0,93	9,6%	0,94	7,3%	0,98	7,7%	0,95	7,1%
6-311++G*	0,93	9,6%	0,94	7,2%	0,98	7,8%	0,95	7,1%
6-311+G**	0,95	9,2%	0,97	8,3%	1,00	8,3%	0,98	7,5%
6-311++G**	0,95	9,2%	0,97	8,4%	1,00	8,2%	0,98	7,5%
6-311+G(2df)	0,95	9,4%	0,95	6,8%	1,00	8,4%	0,98	7,7%
6-311+G(2df,p)	0,95	9,3%	0,96	7,2%	1,00	8,3%	0,98	7,7%
6-311+G(2df,2p)	0,95	9,1%	0,96	7,6%	1,04	9,2%	0,98	7,7%
6-311+G(2df,2pd)	0,94	9,4%	0,96	8,0%	1,00	8,3%	0,98	7,7%
6-311+G(3df,3pd)	0,94	8,4%	0,96	8,6%	1,00	7,7%	0,97	7,5%
cc-pVTZ			0,98	8,5%	1,00	8,3%	0,98	7,7%
AUG-cc-pVTZ			0,95	7,7%	0,99	7,8%	0,97	7,7%
MP2(full)/AUG-cc-pVTZ			0,93	7,5%				

$$^{(a)} \lambda = \left( \frac{\sum_{i=1}^n (v_i / \omega_i)}{n} \right)^{1/2} \quad ^{(b)} \text{r.m.s.} = \left( \frac{\sum_{i=1}^n \Delta_i}{n} \right)^{1/2}; \quad \Delta_i = \sqrt{(v_i - \lambda \cdot \omega_i)^2} / v_i^{1/2}$$

**Table S3** *One-factor* scaling (above 400 cm<sup>-1</sup>) for cDDPd vibrational modes and r.m.s. values obtained using the different basis sets at the non-metal atoms and LANL2DZ at the Pd-atom. The *FineGrid* option was used in the case of the DFT. The lowest r.m.s. values for each theory level are shaded.

Theory Level	HF		MP2		B3LYP		mPW1PW	
	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>
6-31G	0,91	5,7%	0,97	6,3%	0,98	5,3%	0,97	4,9%
6-31+G	0,91	6,1%	0,97	6,4%	0,98	5,7%	0,97	5,3%
6-31++G	0,91	5,9%	0,97	6,3%	0,98	7,8%	0,97	5,2%
6-31G*	0,93	8,2%	0,99	7,8%	1,00	7,2%	0,99	6,6%
6-31G**	0,94	8,1%	1,00	8,4%	1,02	7,6%	1,01	7,0%
6-31+G*	0,93	8,6%	0,99	7,8%	1,01	7,8%	0,99	7,1%
6-31++G*	0,93	8,5%	0,99	7,7%	1,01	7,7%	0,99	7,0%
6-31+G**	0,95	8,7%	1,00	8,2%	1,01	9,0%	1,01	7,4%
6-31++G**	0,95	8,8%	1,00	8,1%	1,02	8,1%	1,01	7,3%
6-31+G(2df)	0,96	8,7%	1,00	6,0%	1,02	8,2%	1,02	7,7%
6-31+G(2df,p)	0,96	8,6%	1,00	6,5%	1,03	8,4%	1,02	7,7%
6-31+G(2df,2p)	0,96	8,8%	1,01	7,1%	1,03	8,4%	1,02	8,1%
6-31+G(2df,2pd)	0,96	8,8%	1,01	6,9%	1,04	8,3%	1,02	7,8%
cc-pVDZ			1,03	8,9%	1,03	8,4%	1,03	7,5%
AUG-cc-pVDZ			1,03	6,7%	1,04	7,9%	1,03	7,1%
6-311G	0,95	8,8%	0,98	6,5%	0,98	5,6%	0,97	5,3%
6-311+G	0,91	6,1%	0,97	5,8%	0,99	6,0%	0,97	5,5%
6-311++G	0,91	6,1%	0,97	5,8%	0,99	6,0%	0,97	5,6%
6-311G*	0,93	8,3%	0,99	8,6%	1,00	7,6%	0,99	6,9%
6-311G**	0,96	8,7%	1,04	9,5%	1,03	8,4%	1,02	7,5%
6-311+G*	0,93	8,5%	0,97	7,4%	1,00	7,8%	0,99	7,1%
6-311++G*	0,93	8,5%	0,98	7,4%	1,00	7,9%	0,99	7,1%
6-311+G**	0,95	8,7%	1,01	8,0%	1,03	8,6%	1,02	7,6%
6-311++G**	0,95	8,8%	1,02	8,0%	1,03	8,5%	1,02	7,7%
6-311+G(2df)	0,96	9,0%	0,99	6,5%	1,03	8,7%	1,03	8,1%
6-311+G(2df,p)	0,96	9,0%	1,01	7,0%	1,03	8,6%	1,02	8,0%
6-311+G(2df,2p)	0,96	9,0%	1,01	7,5%	1,09	9,8%	1,02	8,1%
6-311+G(2df,2pd)	0,96	9,8%	1,03	7,8%	1,04	8,7%	1,03	8,1%
6-311+G(3df,3pd)	0,96	8,7%	1,05	8,3%	1,04	8,0%	1,03	7,6%
cc-pVTZ			1,03	8,9%	1,04	8,7%	1,03	8,1%
AUG-cc-pVTZ			1,03	6,7%	1,03	8,2%	1,02	7,9%
MP2(full)/AUG-cc-pVTZ			1,01	7,5%				

$$^{(a)} \lambda = \left( \frac{\sum_{i=1}^n (v_i / \omega_i)}{n} \right)^{1/2} \quad ^{(b)} \text{r.m.s.} = \left( \frac{\sum_{i=1}^n \Delta_i}{n} \right)^{1/2}; \quad \Delta_i = \sqrt{(v_i - \lambda \cdot \omega_i)^2} / v_i^{1/2}$$

**Table S4** *Two-factor* scaling for cDDPd vibrational modes (above ( $\lambda_1$ ) and below ( $\lambda_2$ ) 400 cm<sup>-1</sup>) and r.m.s. values obtained using the different basis sets at the non-metal atoms and LANL2DZ at the Pd-atom. The *FineGrid* option was used in the case of the DFT. The lowest r.m.s. values for each theory level are shaded.

Nível de teoria	HF			MP2			B3LYP			mPW1PW		
	$\lambda_1^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda_1^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>
6-31G	0,91	1,04	<b>5,8%</b>	0,97	1,02	<b>6,3%</b>	0,98	1,06	<b>5,2%</b>	0,97	1,01	<b>4,9%</b>
6-31+G	0,91	1,06	<b>6,2%</b>	0,97	1,02	<b>6,3%</b>	0,98	1,08	<b>5,6%</b>	0,97	1,02	<b>5,2%</b>
6-31++G	0,91	1,05	<b>6,1%</b>	0,97	1,02	<b>6,2%</b>	0,98	1,18	<b>7,6%</b>	0,97	1,02	<b>5,2%</b>
6-31G*	0,93	1,07	<b>8,5%</b>	0,99	1,03	<b>8,0%</b>	1,00	1,09	<b>7,1%</b>	0,99	1,04	<b>6,7%</b>
6-31G**	0,94	1,08	<b>8,5%</b>	1,00	1,04	<b>8,7%</b>	1,02	1,09	<b>7,3%</b>	1,01	1,05	<b>7,0%</b>
6-31+G*	0,93	1,08	<b>9,0%</b>	0,99	1,03	<b>7,8%</b>	1,01	1,10	<b>7,5%</b>	0,99	1,05	<b>7,1%</b>
6-31++G*	0,93	1,08	<b>8,9%</b>	0,99	1,03	<b>7,7%</b>	1,01	1,09	<b>7,4%</b>	0,99	1,05	<b>7,1%</b>
6-31+G**	0,95	1,09	<b>9,3%</b>	1,00	1,04	<b>8,2%</b>	1,01	1,10	<b>8,5%</b>	1,01	1,06	<b>7,4%</b>
6-31++G**	0,95	1,09	<b>9,3%</b>	1,00	1,04	<b>8,1%</b>	1,02	1,15	<b>8,1%</b>	1,01	1,06	<b>7,4%</b>
6-31+G(2df)	0,96	1,09	<b>9,3%</b>	1,00	1,01	<b>6,0%</b>	1,02	1,11	<b>8,1%</b>	1,02	1,05	<b>7,8%</b>
6-31+G(2df,p)	0,96	1,09	<b>9,0%</b>	1,00	1,02	<b>6,5%</b>	1,03	1,11	<b>8,3%</b>	1,02	1,05	<b>7,8%</b>
6-31+G(2df,2p)	0,96	1,09	<b>9,4%</b>	1,01	1,01	<b>7,0%</b>	1,03	1,11	<b>8,3%</b>	1,02	1,05	<b>8,2%</b>
6-31+G(2df,2pd)	0,96	1,09	<b>9,3%</b>	1,01	0,99	<b>7,0%</b>	1,04	1,11	<b>8,2%</b>	1,02	1,05	<b>7,8%</b>
cc-pVDZ				1,03	1,06	<b>9,1%</b>	1,03	1,10	<b>8,1%</b>	1,03	1,06	<b>7,5%</b>
AUG-cc-pVDZ				1,03	0,98	<b>6,8%</b>	1,04	1,11	<b>7,8%</b>	1,03	1,03	<b>7,1%</b>
6-311G	0,95	1,09	<b>9,3%</b>	0,98	1,03	<b>6,7%</b>	0,98	1,07	<b>5,5%</b>	0,97	1,02	<b>5,2%</b>
6-311+G	0,91	1,06	<b>6,2%</b>	0,97	1,02	<b>5,7%</b>	0,99	1,08	<b>5,9%</b>	0,97	1,03	<b>5,5%</b>
6-311++G	0,91	1,05	<b>6,4%</b>	0,97	1,01	<b>5,8%</b>	0,99	1,08	<b>5,9%</b>	0,97	1,02	<b>5,5%</b>
6-311G*	0,93	1,08	<b>8,8%</b>	0,99	1,05	<b>8,9%</b>	1,00	1,10	<b>7,3%</b>	0,99	1,05	<b>7,0%</b>
6-311G**	0,96	1,09	<b>9,2%</b>	1,04	1,06	<b>9,7%</b>	1,03	1,11	<b>8,0%</b>	1,02	1,06	<b>7,6%</b>
6-311+G*	0,93	1,08	<b>9,0%</b>	0,97	1,03	<b>7,3%</b>	1,00	1,10	<b>7,5%</b>	0,99	1,05	<b>7,2%</b>
6-311++G*	0,93	1,08	<b>9,0%</b>	0,98	1,03	<b>7,4%</b>	1,00	1,10	<b>7,7%</b>	0,99	1,04	<b>7,2%</b>
6-311+G**	0,95	1,09	<b>9,3%</b>	1,01	1,05	<b>7,8%</b>	1,03	1,12	<b>8,1%</b>	1,02	1,06	<b>7,7%</b>
6-311++G**	0,95	1,09	<b>9,3%</b>	1,02	1,04	<b>7,9%</b>	1,03	1,12	<b>8,1%</b>	1,02	1,06	<b>7,7%</b>
6-311+G(2df)	0,96	1,10	<b>9,6%</b>	0,99	1,03	<b>6,5%</b>	1,03	1,11	<b>8,6%</b>	1,03	1,05	<b>8,2%</b>
6-311+G(2df,p)	0,96	1,10	<b>9,7%</b>	1,01	1,03	<b>7,0%</b>	1,03	1,11	<b>8,5%</b>	1,02	1,06	<b>8,1%</b>
6-311+G(2df,2p)	0,96	1,08	<b>9,6%</b>	1,01	1,02	<b>7,4%</b>	1,09	1,11	<b>9,7%</b>	1,02	1,05	<b>8,2%</b>
6-311+G(2df,2pd)	0,96	1,06	<b>10,2%</b>	1,03	1,00	<b>7,8%</b>	1,04	1,10	<b>8,6%</b>	1,03	1,05	<b>8,2%</b>
6-311+G(3df,3pd)	0,96	1,06	<b>9,2%</b>	1,05	0,98	<b>8,3%</b>	1,04	1,08	<b>8,1%</b>	1,03	1,03	<b>7,7%</b>
cc-pVTZ				1,03	1,06	<b>9,1%</b>	1,04	1,11	<b>8,6%</b>	1,03	1,05	<b>8,1%</b>
AUG-cc-pVTZ				1,03	0,98	<b>6,8%</b>	1,03	1,09	<b>8,3%</b>	1,02	1,03	<b>7,9%</b>
MP2(full)/AUG-cc-pVTZ				1,01	0,94	<b>7,5%</b>						

$$^{(a)} \lambda = \left( \sum_{i=1}^n (v_i / \omega_i) \right) / n \quad ^{(b)} \text{r.m.s.} = \left( \sum_{i=1}^n \Delta_i \right) / n; \quad \Delta_i = \sqrt{(v_i - \lambda \cdot \omega_i)^2} / v_i \cdot ^{12}$$

**Table S5** *Two-factor* scaling for cDDPd vibrational modes ( $\lambda_1$  for all vibrational modes except for vPd-N and  $\delta$ N-Pd-Cl ( $\lambda_2$ ) ones) and r.m.s. values obtained using the different basis sets at the non-metal atoms and LANL2DZ at the Pd-atom. The *FineGrid* option was used in the case of the DFT. The lowest r.m.s. values for each theory level are shaded.

Nível de teoria	HF			MP2			B3LYP			mPW1PW		
	$\lambda_1^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda_1^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>	$\lambda^{(a)}$	$\lambda_2^{(a)}$	r.m.s. <sup>(b)</sup>
6-31G	0,92	1,14	<b>6,9%</b>	0,96	1,12	<b>7,1%</b>	0,98	1,14	<b>5,9%</b>	0,96	1,08	<b>5,5%</b>
6-31+G	0,92	1,16	<b>7,5%</b>	0,97	1,13	<b>7,1%</b>	0,99	1,17	<b>6,5%</b>	0,97	1,11	<b>6,0%</b>
6-31++G	0,92	1,16	<b>7,3%</b>	0,97	1,12	<b>7,0%</b>	1,03	1,17	<b>8,2%</b>	0,97	1,10	<b>6,0%</b>
6-31G*	0,95	1,13	<b>9,5%</b>	0,98	1,16	<b>8,9%</b>	1,00	1,19	<b>7,9%</b>	0,98	1,14	<b>7,4%</b>
6-31G**	0,96	1,14	<b>9,5%</b>	0,99	1,17	<b>9,7%</b>	1,01	1,21	<b>8,2%</b>	0,99	1,15	<b>7,8%</b>
6-31+G*	0,94	1,22	<b>10,7%</b>	0,98	1,16	<b>8,4%</b>	1,01	1,22	<b>8,4%</b>	0,99	1,16	<b>7,9%</b>
6-31++G*	0,94	1,22	<b>10,6%</b>	0,98	1,14	<b>8,3%</b>	1,02	1,13	<b>7,8%</b>	0,99	1,15	<b>7,8%</b>
6-31+G**	0,96	1,25	<b>11,0%</b>	0,99	1,17	<b>9,1%</b>	1,02	1,15	<b>8,6%</b>	1,00	1,17	<b>8,3%</b>
6-31++G**	0,96	1,24	<b>11,0%</b>	0,99	1,16	<b>8,9%</b>	1,04	1,24	<b>9,0%</b>	1,00	1,17	<b>8,2%</b>
6-31+G(2df)	0,96	1,24	<b>11,1%</b>	0,98	1,11	<b>6,4%</b>	1,02	1,23	<b>9,0%</b>	1,00	1,17	<b>8,6%</b>
6-31+G(2df,p)	0,96	1,23	<b>10,7%</b>	0,98	1,12	<b>7,0%</b>	1,02	1,24	<b>9,2%</b>	1,01	1,17	<b>8,5%</b>
6-31+G(2df,2p)	0,96	1,24	<b>11,1%</b>	0,99	1,11	<b>7,4%</b>	1,03	1,24	<b>9,3%</b>	1,01	1,17	<b>8,9%</b>
6-31+G(2df,2pd)	0,96	1,23	<b>11,0%</b>	0,99	1,08	<b>7,1%</b>	1,03	1,24	<b>9,4%</b>	1,01	1,16	<b>8,6%</b>
cc-pVDZ				1,01	1,20	<b>10,1%</b>	1,03	1,23	<b>9,1%</b>	1,01	1,17	<b>8,4%</b>
AUG-cc-pVDZ				1,00	1,06	<b>7,2%</b>	1,03	1,23	<b>9,1%</b>	1,01	1,13	<b>7,8%</b>
6-311G	0,96	1,24	<b>11,0%</b>	0,97	1,14	<b>7,5%</b>	1,00	1,09	<b>5,7%</b>	0,97	1,10	<b>6,2%</b>
6-311+G	0,92	1,16	<b>7,5%</b>	0,96	1,12	<b>6,3%</b>	0,99	1,17	<b>6,8%</b>	0,97	1,11	<b>6,3%</b>
6-311++G	0,92	1,16	<b>7,7%</b>	0,96	1,11	<b>6,5%</b>	0,99	1,17	<b>6,7%</b>	0,97	1,11	<b>6,3%</b>
6-311G*	0,94	1,21	<b>10,3%</b>	0,98	1,18	<b>9,7%</b>	1,01	1,14	<b>7,9%</b>	0,98	1,14	<b>7,8%</b>
6-311G**	0,96	1,23	<b>10,6%</b>	1,02	1,19	<b>10,5%</b>	1,03	1,23	<b>9,0%</b>	1,01	1,17	<b>8,6%</b>
6-311+G*	0,94	1,22	<b>10,8%</b>	0,97	1,15	<b>7,9%</b>	1,00	1,21	<b>8,4%</b>	0,98	1,15	<b>7,9%</b>
6-311++G*	0,94	1,22	<b>10,8%</b>	0,97	1,14	<b>8,0%</b>	1,00	1,21	<b>8,5%</b>	0,98	1,15	<b>7,8%</b>
6-311+G**	0,96	1,25	<b>11,0%</b>	1,00	1,18	<b>8,8%</b>	1,03	1,25	<b>9,1%</b>	1,01	1,18	<b>8,5%</b>
6-311++G**	0,96	1,24	<b>11,0%</b>	1,00	1,17	<b>8,8%</b>	1,03	1,24	<b>9,0%</b>	1,01	1,17	<b>8,5%</b>
6-311+G(2df)	0,96	1,25	<b>11,6%</b>	0,98	1,14	<b>7,1%</b>	1,02	1,25	<b>9,6%</b>	1,01	1,16	<b>8,9%</b>
6-311+G(2df,p)	0,96	1,26	<b>11,6%</b>	0,99	1,15	<b>7,6%</b>	1,03	1,25	<b>9,6%</b>	1,01	1,18	<b>8,9%</b>
6-311+G(2df,2p)	0,96	1,24	<b>11,4%</b>	0,99	1,12	<b>7,9%</b>	1,07	1,24	<b>10,6%</b>	1,01	1,17	<b>8,9%</b>
6-311+G(2df,2pd)	0,95	1,23	<b>12,0%</b>	1,00	1,09	<b>8,1%</b>	1,03	1,23	<b>9,6%</b>	1,01	1,16	<b>8,9%</b>
6-311+G(3df,3pd)	0,96	1,19	<b>10,4%</b>	1,02	1,06	<b>8,6%</b>	1,03	1,19	<b>8,8%</b>	1,01	1,13	<b>8,3%</b>
cc-pVTZ				1,01	1,20	<b>10,1%</b>	1,03	1,23	<b>9,6%</b>	1,01	1,16	<b>8,9%</b>
AUG-cc-pVTZ				1,00	1,06	<b>7,2%</b>	1,02	1,21	<b>9,2%</b>	1,00	1,14	<b>8,5%</b>
MP2(full)/AUG-cc-pVTZ				0,98	1,00	<b>6,1%</b>						

$$(a) \quad \lambda = \left( \sum_{i=1}^n (v_i / \omega_i) \right) / n. \quad 12 \quad (b) \quad \text{r.m.s.} = \left( \sum_{i=1}^n \Delta_i \right) / n; \quad \Delta_i = \sqrt{(v_i - \lambda \cdot \omega_i)^2} / v_i. \quad 12$$

**Figure S1** Room-temperature FT-IR spectra of solid cDDPd in the 200-4000 and 3000-3600  $\text{cm}^{-1}$  spectral regions. Some regions are expanded in order to allow the visualization of spectral details.

