

Supplementary Information

Matthew T. O. Okenyi^a, Laura E. Ratcliff^{*a}, and Aron Walsh^{a,b}

December 22, 2020

m	Frequency (THz)	Irreducible representation [?]	Space group after perturbation of $Pbcm$ -optimized CRCA along mode
0	-37.87	Γ_2^-	$Pca2_1$
1	-34.59	Γ_4^+	$P2_1/c$
2	-33.84	Γ_1^-	$P2_12_12$
3	-33.51	Γ_4^-	$Pmc2_1$
4	-30.61	Γ_2^-	$Pca2_1$
5	-21.73	Γ_2^+	$P2_1/m$
6	-8.33	Γ_3^-	$Pma2$
7	0.00	Γ_1^+	$Pbcm$
8	0.00	Γ_1^+	$Pbcm$
9	0.00	Γ_1^+	$Pbcm$
10	1.90	Γ_1^-	$P2_12_12$
11	1.91	Γ_2^-	$Pca2_1$
12	2.23	Γ_1^+	$Pbcm$
13	2.73	Γ_4^-	$Pmc2_1$
14	2.82	Γ_2^+	$P2_1/m$
15	3.41	Γ_2^-	$Pca2_1$
16	3.52	Γ_3^-	$Pma2$
17	3.67	Γ_4^+	$P2_1/c$
18	3.91	Γ_1^-	$P2_12_12$
19	3.94	Γ_4^-	$Pmc2_1$
20	3.99	Γ_2^+	$P2_1/m$
21	4.02	Γ_4^+	$P2_1/c$
22	4.09	Γ_3^+	$P2/c$
23	4.19	Γ_3^-	$Pma2$
24	4.43	Γ_1^+	$Pbcm$
25	4.48	Γ_4^-	$Pmc2_1$
26	4.66	Γ_4^+	$P2_1/c$
27	4.70	Γ_2^+	$P2_1/m$
28	4.89	Γ_3^+	$P2/c$
29	5.13	Γ_3^-	$Pma2$
30	5.33	Γ_1^+	$Pbcm$

31	5.50	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
32	5.62	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
33	5.70	Γ_2^+	<i>P2₁/m</i>
34	5.87	Γ_2^-	<i>Pca2₁</i>
35	6.05	Γ_3^+	<i>P2/c</i>
36	6.87	Γ_4^+	<i>P2₁/c</i>
37	7.54	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
38	7.73	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
39	7.85	Γ_3^-	<i>Pma2</i>
40	7.86	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
41	8.04	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
42	8.91	Γ_2^-	<i>Pca2₁</i>
43	9.41	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
44	9.57	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
45	9.68	Γ_3^+	<i>P2/c</i>
46	10.56	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
47	10.59	Γ_4^+	<i>P2₁/c</i>
48	11.24	Γ_3^-	<i>Pma2</i>
49	11.45	Γ_2^-	<i>Pca2₁</i>
50	11.64	Γ_2^+	<i>P2₁/m</i>
51	12.57	Γ_3^+	<i>P2/c</i>
52	12.59	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
53	14.95	Γ_2^-	<i>Pca2₁</i>
54	14.97	Γ_4^+	<i>P2₁/c</i>
55	15.03	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
56	15.11	Γ_3^+	<i>P2/c</i>
57	15.21	Γ_4^+	<i>P2₁/c</i>
58	15.26	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
59	15.26	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
60	15.27	Γ_3^-	<i>Pma2</i>
61	15.41	Γ_2^+	<i>P2₁/m</i>
62	15.54	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
63	15.66	Γ_2^+	<i>P2₁/m</i>
64	15.67	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
65	15.82	Γ_3^+	<i>P2/c</i>
66	15.84	Γ_3^-	<i>Pma2</i>
67	16.05	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
68	16.06	Γ_2^-	<i>Pca2₁</i>
69	16.42	Γ_3^-	<i>Pma2</i>
70	17.02	Γ_2^+	<i>P2₁/m</i>
71	17.88	Γ_4^-	<i>Pmc2₁</i>
72	18.30	Γ_1^+	<i>Pbcm</i>
73	18.71	Γ_4^+	<i>P2₁/c</i>
74	18.91	Γ_1^-	<i>P2₁2₁2</i>
75	20.20	Γ_3^-	<i>Pma2</i>

76	20.29	Γ_3^+	$P2/c$
77	20.34	Γ_2^+	$P2_1/m$
78	21.25	Γ_1^+	$Pbcm$
79	22.41	Γ_4^+	$P2_1/c$
80	22.42	Γ_1^-	$P2_12_12$
81	22.42	Γ_2^-	$Pca2_1$
82	22.43	Γ_3^+	$P2/c$
83	22.99	Γ_4^-	$Pmc2_1$
84	23.00	Γ_3^-	$Pma2$
85	23.01	Γ_2^+	$P2_1/m$
86	23.02	Γ_1^+	$Pbcm$
87	25.23	Γ_1^-	$P2_12_12$
88	25.32	Γ_2^-	$Pca2_1$
89	25.92	Γ_3^+	$P2/c$
90	26.05	Γ_4^+	$P2_1/c$
91	30.07	Γ_4^-	$Pmc2_1$
92	31.43	Γ_1^-	$P2_12_12$
93	31.50	Γ_2^-	$Pca2_1$
94	31.77	Γ_3^+	$P2/c$
95	31.77	Γ_4^+	$P2_1/c$
96	32.01	Γ_3^-	$Pma2$
97	32.45	Γ_2^+	$P2_1/m$
98	32.65	Γ_1^+	$Pbcm$
99	32.75	Γ_4^-	$Pmc2_1$
100	34.15	Γ_2^-	$Pca2_1$
101	34.37	Γ_1^-	$P2_12_12$
102	34.67	Γ_4^+	$P2_1/c$
103	34.88	Γ_3^+	$P2/c$
104	36.08	Γ_4^-	$Pmc2_1$
105	36.31	Γ_3^-	$Pma2$
106	36.58	Γ_2^-	$Pca2_1$
107	36.67	Γ_2^+	$P2_1/m$
108	36.75	Γ_1^-	$P2_12_12$
109	36.75	Γ_4^-	$Pmc2_1$
110	36.77	Γ_1^+	$Pbcm$
111	36.82	Γ_3^-	$Pma2$
112	39.68	Γ_2^-	$Pca2_1$
113	39.73	Γ_4^+	$P2_1/c$
114	40.22	Γ_4^-	$Pmc2_1$
115	40.24	Γ_2^+	$P2_1/m$
116	41.89	Γ_1^+	$Pbcm$
117	42.79	Γ_3^-	$Pma2$
118	43.14	Γ_3^+	$P2/c$
119	43.23	Γ_1^-	$P2_12_12$
120	43.54	Γ_4^+	$P2_1/c$

121	43.86	Γ_4^-	$Pmc2_1$
122	43.93	Γ_2^-	$Pca2_1$
123	43.94	Γ_1^-	$P2_12_12$
124	44.14	Γ_1^+	$Pbcm$
125	44.67	Γ_3^-	$Pma2$
126	44.91	Γ_2^+	$P2_1/m$
127	44.92	Γ_2^-	$Pca2_1$
128	45.01	Γ_3^+	$P2/c$
129	45.21	Γ_1^-	$P2_12_12$
130	45.26	Γ_3^-	$Pma2$
131	45.51	Γ_3^+	$P2/c$
132	45.70	Γ_4^-	$Pmc2_1$
133	45.94	Γ_4^+	$P2_1/c$
134	46.07	Γ_1^-	$P2_12_12$
135	46.41	Γ_2^-	$Pca2_1$
136	47.16	Γ_2^+	$P2_1/m$
137	47.35	Γ_1^+	$Pbcm$
138	47.78	Γ_4^-	$Pmc2_1$
139	47.83	Γ_3^-	$Pma2$
140	48.82	Γ_4^-	$Pmc2_1$
141	48.83	Γ_2^+	$P2_1/m$
142	48.94	Γ_1^+	$Pbcm$
143	49.09	Γ_3^-	$Pma2$

Table 1: The frequencies and space group symmetry properties of the normal modes of $Pbcm$ -optimized CRCA.

^a Department of Materials, Imperial College London, London SW7 2AZ, United Kingdom

^b Department of Materials Science and Engineering, Yonsei University, Seoul 03722, Korea

* laura.ratcliff08@imperial.ac.uk