

Electronic Supplementary Information for
"Insights on the coupling between vibronically
active molecular vibrations and lattice
phonons in molecular nanomagnets"

Aman Ullah, José J. Baldoví, Alejandro Gaita-Ariño,* and Eugenio Coronado

Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de Valencia, Paterna 46980, Spain

E-mail: gaita@uv.es

Supplementary Tables

Table S1: Frequencies (cm^{-1}), vibronic coupling (S_n (cm^{-1}) at CASSCF level for optimized geometry for each normal mode (n) and vibronic-phonon couplings $S(\mu_{n,xx})$, $S(\mu_{n,xy})$, $S(\mu_{n,xz})$.

Modes (n)	Frequencies (cm^{-1})	S_n (cm^{-1})	S (n, μ_{xx})	S (n, μ_{xy})	S (n, μ_{xz})
1	8.62	0.085	0.01	0.01	0.01
2	17.94	0.176	0.14	0.03	0.01
3	18.43	0.119	0.03	0.04	0.01
4	24.33	0.247	0.00	0.13	0.01
5	29.97	0.220	0.01	0.01	0.13
6	43.22	0.123	0.91	0.01	0.01
7	54.02	0.150	0.26	0.03	0.00
8	58.39	0.180	0.01	0.01	0.03
9	67.12	0.145	0.17	0.01	0.00
10	70.95	0.130	0.04	0.05	0.01
11	99.61	0.125	0.01	0.07	0.01
12	106.52	0.151	0.02	0.01	0.07
13	106.78	0.051	0.01	0.01	0.04
14	107.26	0.132	0.00	0.06	0.01
15	108.76	0.167	0.01	0.00	0.00
16	114.68	0.067	0.01	0.00	0.00
17	114.71	0.080	0.01	0.00	0.00
18	140.11	0.109	0.01	0.01	0.00
19	140.76	0.040	0.04	0.00	0.01
20	141.19	0.038	0.00	0.01	0.04
21	142.11	0.129	0.01	0.04	0.00

Table S1: Continued from previous page

Modes (n)	Frequencies (cm^{-1})	S_n (cm^{-1})	S (n, μ_{xx})	S (n, μ_{xy})	S (n, μ_{xz})
22	143.98	0.123	0.09	0.01	0.00
23	144.75	0.039	0.02	0.06	0.00
24	157.60	0.020	0.00	0.00	0.02
25	158.17	0.081	0.00	0.02	0.23
26	159.14	0.096	0.00	0.28	0.02
27	159.88	0.042	0.00	0.08	0.03
28	160.56	0.039	0.00	0.03	0.12
29	161.30	0.079	0.01	0.06	0.08
30	167.76	0.094	0.00	0.00	0.00
31	167.77	0.083	0.01	0.02	0.00
32	184.62	0.122	0.00	0.00	0.01
33	184.73	0.122	0.00	0.01	0.00
34	193.02	0.038	0.01	0.01	0.01
35	202.14	0.095	0.15	0.00	0.00
36	216.40	0.027	0.02	0.02	0.01
37	216.89	0.066	0.00	0.02	0.03
38	218.12	0.088	0.00	0.00	0.06
39	218.13	0.099	0.01	0.02	0.06
40	218.22	0.126	0.01	0.11	0.08
41	218.24	0.117	0.00	0.11	0.07
42	219.96	0.057	0.01	0.01	0.02
43	220.00	0.054	0.00	0.14	0.02
44	220.07	0.115	0.00	0.01	0.18
45	220.47	0.111	0.03	0.05	0.02

Table S1: Continued from previous page

Modes (n)	Frequencies (cm^{-1})	S_n (cm^{-1})	S (n, μ_{xx})	S (n, μ_{xy})	S (n, μ_{xz})
46	223.18	0.079	0.05	0.08	0.01
47	224.41	0.072	0.05	0.04	0.01
48	230.85	0.034	0.01	0.01	0.00
49	231.24	0.031	0.01	0.01	0.02
50	231.75	0.036	0.00	0.02	0.02
51	232.10	0.036	0.01	0.02	0.00
52	235.13	0.019	0.00	0.00	0.01
53	235.33	0.029	0.01	0.00	0.00
54	257.49	0.097	0.00	0.00	0.00
55	257.49	0.108	0.01	0.00	0.00
56	289.55	0.030	0.00	0.00	0.00
57	291.07	0.025	0.00	0.00	0.00
58	329.19	0.091	0.00	0.00	0.02
59	329.25	0.125	0.00	0.02	0.01
60	337.26	0.101	0.00	0.02	0.02
61	337.36	0.143	0.00	0.02	0.04
62	337.40	0.099	0.00	0.03	0.00
63	337.72	0.101	0.00	0.02	0.01
64	351.19	0.101	0.00	0.08	0.03
65	354.95	0.147	0.00	0.07	0.21
66	355.21	0.148	0.00	0.20	0.08
67	359.02	0.064	0.01	0.00	0.00
68	360.26	0.032	0.02	0.01	0.00
69	363.49	0.085	0.00	0.04	0.02

Table S1: Continued from previous page

Modes (n)	Frequencies (cm^{-1})	S_n (cm^{-1})	S (n, μ_{xx})	S (n, μ_{xy})	S (n, μ_{xz})
70	399.03	0.041	0.02	0.05	0.06
71	399.78	0.067	0.01	0.07	0.05
72	399.80	0.053	0.02	0.01	0.03
73	404.19	0.083	0.30	0.00	0.00
74	414.55	0.141	0.01	0.26	0.03
75	414.92	0.126	0.00	0.04	0.27
76	416.67	0.116	0.00	0.07	0.18
77	416.90	0.111	0.04	0.14	0.06
78	417.53	0.131	0.02	0.10	0.06
79	417.69	0.120	0.02	0.06	0.04
80	429.95	0.091	0.00	0.03	0.00
81	431.15	0.065	0.35	0.01	0.00
82	435.19	0.083	0.01	0.01	0.17
83	436.31	0.046	0.03	0.05	0.05
84	436.72	0.078	0.07	0.15	0.03
85	437.91	0.056	0.15	0.08	0.00
86	479.05	0.084	0.00	0.21	0.01
87	479.34	0.070	0.00	0.01	0.21
88	480.96	0.037	0.01	0.01	0.00
89	481.29	0.038	0.00	0.00	0.03
90	489.34	0.055	0.00	0.02	0.01
91	489.38	0.054	0.00	0.00	0.02
92	514.29	0.028	0.00	0.00	0.00
93	515.09	0.031	0.01	0.00	0.01

Table S1: Continued from previous page

Modes (n)	Frequencies (cm^{-1})	S_n (cm^{-1})	S (n, μ_{xx})	S (n, μ_{xy})	S (n, μ_{xz})
94	515.25	0.029	0.02	0.00	0.01
95	516.21	0.076	0.12	0.00	0.00
96	520.31	0.113	0.00	0.01	0.01
97	521.09	0.102	0.01	0.01	0.01
98	528.07	0.086	0.04	0.01	0.00
99	529.22	0.079	0.01	0.00	0.01
100	530.46	0.069	0.09	0.00	0.00
101	531.81	0.080	0.19	0.01	0.00
102	535.59	0.091	0.00	0.00	0.01
103	536.21	0.097	0.05	0.02	0.00
104	554.98	0.020	0.00	0.00	0.00
105	555.04	0.018	0.00	0.00	0.00
106	578.43	0.031	0.01	0.14	0.01
107	579.04	0.042	0.01	0.06	0.11
108	579.13	0.027	0.02	0.14	0.01
109	579.49	0.033	0.00	0.02	0.18
110	671.58	0.235	0.00	0.25	0.01

Table S2: For normal mode n, vibronic-phonon couplings $S(\mu_{n,yx})$, $S(\mu_{n,yy})$, $S(\mu_{n,yz})$, $S(\mu_{n,zx})$, $S(\mu_{n,zy})$, $S(\mu_{n,zz})$.

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
1	0.03	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
2	0.13	0.03	0.00	0.02	0.01	0.04
3	0.21	0.01	0.02	0.04	0.02	0.01

Table S2: Continued from previous page

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
4	0.65	0.05	0.01	0.05	0.01	0.05
5	0.06	0.01	0.04	0.69	0.05	0.01
6	0.06	0.00	0.01	0.00	0.00	0.06
7	0.14	0.31	0.02	0.01	0.02	0.25
8	0.02	0.03	0.33	0.11	0.34	0.02
9	0.05	0.20	0.01	0.01	0.01	0.28
10	0.03	0.03	0.07	0.01	0.08	0.03
11	0.32	0.00	0.01	0.04	0.01	0.00
12	0.04	0.01	0.01	0.41	0.01	0.01
13	0.06	0.01	0.01	0.27	0.01	0.01
14	0.43	0.00	0.00	0.05	0.02	0.00
15	0.08	0.07	0.06	0.01	0.08	0.07
16	0.03	0.13	0.15	0.00	0.14	0.13
17	0.01	0.10	0.10	0.03	0.08	0.08
18	0.12	0.02	0.02	0.00	0.02	0.02
19	0.01	0.12	0.01	0.00	0.00	0.14
20	0.01	0.00	0.01	0.18	0.00	0.00
21	0.17	0.05	0.04	0.02	0.01	0.06
22	0.03	0.38	0.00	0.00	0.01	0.37
23	0.02	0.05	0.08	0.04	0.01	0.03
24	0.01	0.00	0.45	0.02	0.45	0.01
25	0.02	0.00	0.03	0.20	0.04	0.01
26	0.23	0.01	0.06	0.01	0.04	0.01
27	0.06	0.05	0.14	0.02	0.11	0.03
28	0.02	0.01	0.17	0.09	0.18	0.00

Table S2: Continued from previous page

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
29	0.03	0.03	0.15	0.07	0.21	0.01
30	0.01	0.35	0.19	0.01	0.19	0.35
31	0.02	0.19	0.38	0.01	0.33	0.19
32	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00
33	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.01
34	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
35	0.00	0.17	0.02	0.00	0.01	0.19
36	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	0.06
37	0.03	0.01	0.09	0.01	0.08	0.04
38	0.00	0.15	0.17	0.03	0.16	0.16
39	0.00	0.18	0.12	0.03	0.12	0.17
40	0.04	0.04	0.05	0.03	0.05	0.05
41	0.06	0.06	0.09	0.02	0.09	0.03
42	0.02	0.05	0.01	0.02	0.01	0.01
43	0.16	0.02	0.01	0.02	0.01	0.03
44	0.01	0.01	0.02	0.20	0.02	0.00
45	0.06	0.10	0.03	0.01	0.05	0.06
46	0.09	0.10	0.01	0.01	0.02	0.09
47	0.07	0.07	0.02	0.01	0.04	0.10
48	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
49	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
50	0.00	0.01	0.00	0.02	0.02	0.01
51	0.04	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
52	0.00	0.00	0.18	0.00	0.18	0.00
53	0.01	0.00	0.11	0.00	0.11	0.00

Table S2: Continued from previous page

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
54	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
55	0.02	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00
56	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
57	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	0.00	0.01	0.10	0.02	0.10	0.01
59	0.03	0.10	0.01	0.01	0.02	0.10
60	0.03	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00
61	0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00
62	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
63	0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	0.01
64	0.14	0.01	0.00	0.06	0.00	0.00
65	0.12	0.00	0.01	0.39	0.01	0.00
66	0.37	0.00	0.01	0.15	0.00	0.00
67	0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	0.05
68	0.02	0.05	0.00	0.01	0.00	0.06
69	0.08	0.02	0.01	0.04	0.02	0.02
70	0.02	0.02	0.04	0.02	0.03	0.03
71	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.03
72	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.03
73	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.11
74	0.02	0.10	0.00	0.00	0.00	0.09
75	0.00	0.01	0.09	0.01	0.09	0.01
76	0.00	0.02	0.06	0.00	0.06	0.01
77	0.01	0.00	0.03	0.01	0.03	0.01
78	0.01	0.16	0.05	0.01	0.05	0.17

Table S2: Continued from previous page

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
79	0.02	0.05	0.16	0.01	0.16	0.05
80	0.12	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
81	0.01	0.05	0.01	0.00	0.01	0.06
82	0.01	0.00	0.01	0.31	0.02	0.00
83	0.09	0.01	0.01	0.07	0.01	0.00
84	0.25	0.02	0.01	0.04	0.01	0.00
85	0.12	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03
86	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
87	0.00	0.00	0.01	0.05	0.01	0.00
88	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02
89	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
90	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.06
91	0.00	0.00	0.06	0.01	0.06	0.00
92	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
93	0.00	0.02	0.04	0.00	0.05	0.02
94	0.00	0.04	0.02	0.01	0.03	0.04
95	0.00	0.24	0.00	0.00	0.01	0.23
96	0.02	0.04	0.04	0.01	0.03	0.04
97	0.01	0.03	0.04	0.01	0.04	0.05
98	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.04
99	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
100	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.08
101	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.14
102	0.00	0.00	0.05	0.00	0.05	0.01
103	0.00	0.08	0.01	0.00	0.00	0.02

Table S2: Continued from previous page

Modes (n)	S (n, μ_{yx})	S (n, μ_{yy})	S (n, μ_{yz})	S (n, μ_{zx})	S (n, μ_{zy})	S (n, μ_{zz})
104	0.00	0.25	0.01	0.00	0.01	0.25
105	0.00	0.00	0.25	0.00	0.25	0.01
106	0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
107	0.05	0.00	0.01	0.08	0.01	0.01
108	0.09	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
109	0.01	0.00	0.01	0.13	0.01	0.00
110	0.20	0.02	0.01	0.01	0.00	0.02