

Electronic structure and magnetic properties of a trigonal prismatic Cu^{II}₆ cluster

Ekaterina Zueva, Maria M. Petrova, Radovan Herchel, Zdeněk Trávníček, Raphael G. Raptis, Logesh
Mathivathanan and John E. McGrady

Supplementary information

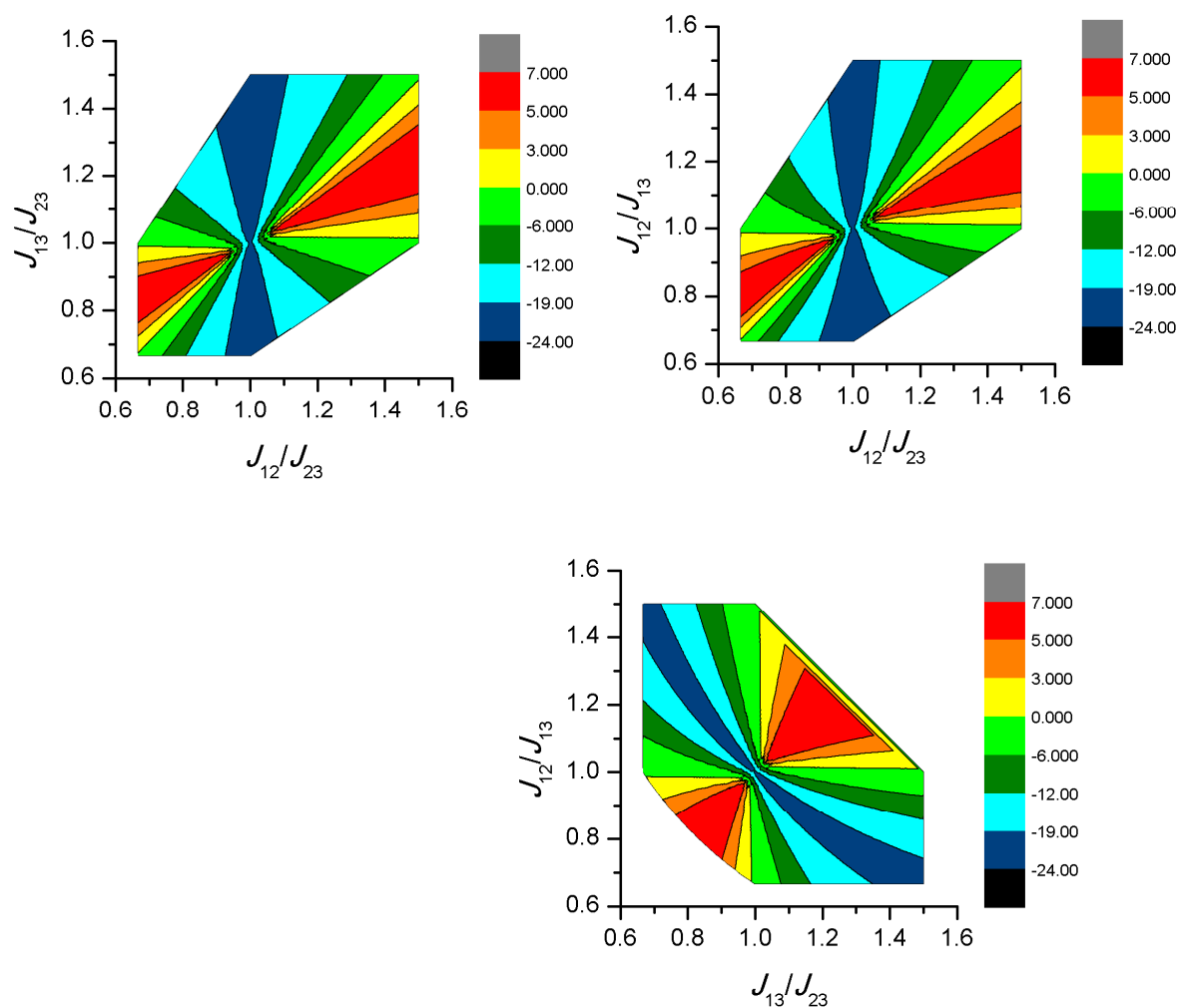


Fig. S1 The energy difference between the ground and first excited states (computed within the $H(4)^{HDVV}$ model) depending on the ratios of intra-triangle J_{ij} . Positive values correspond to the triplet ground state, negative – to the singlet ground state. $J_{14} = -20 \text{ cm}^{-1}$ (fixed), J_{12} , J_{13} and J_{23} were varying from -400 to -600 cm^{-1} .

Table S1: SCF single determinants computed for 1^- : atomic spin densities, computed $\langle S^2 \rangle$ values and energies (in a.u.).

	Atomic spin density	$\langle S^2 \rangle$	E
HS: $ \alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₄ : 0.58 Cu ₂ : 0.59 Cu ₅ : 0.59 Cu ₃ : 0.59 Cu ₆ : 0.59	12.019	-13407.5090202
BS ₁ : $ \alpha\alpha\beta\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : 0.55 Cu ₃ : -0.54 Cu ₆ : -0.56	2.746	-13407.5215044
BS ₂ : $ \alpha\beta\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : 0.54 Cu ₂ : -0.55 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : -0.56	2.744	-13407.5216433
BS ₃ : $ \alpha\alpha\beta\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : -0.54 Cu ₆ : 0.55	2.748	-13407.5214552
BS ₄ : $ \alpha\beta\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : 0.55 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : -0.56	2.757	-13407.5206636
BS ₅ : $ \alpha\alpha\alpha\beta\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₄ : -0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₅ : -0.59 Cu ₃ : 0.59 Cu ₆ : -0.59	3.011	-13407.5095703
BS ₆ : $ \alpha\beta\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : -0.55 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.55	2.754	-13407.5209101
BS ₇ : $ \alpha\beta\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₄ : 0.54 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : -0.56	2.750	-13407.5213565
BS ₈ : $ \alpha\alpha\beta\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : 0.54 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : -0.54 Cu ₆ : -0.56	2.740	-13407.5219403
BS ₉ : $ \alpha\beta\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : -0.56 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.55	2.762	-13407.5203681
BS ₁₀ : $ \alpha\beta\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : -0.56 Cu ₂ : -0.55 Cu ₅ : 0.55 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : -0.56	2.747	-13407.5214843
BS ₁₁ : $ \alpha\alpha\beta\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : 0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : 0.56 Cu ₃ : -0.55 Cu ₆ : -0.55	3.753	-13407.5210123
BS ₁₂ : $ \alpha\beta\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : 0.56 Cu ₂ : -0.55 Cu ₅ : -0.55 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.56	3.752	-13407.5210414

BS ₁₃ : $ \beta\alpha\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₂ : 0.56 Cu ₃ : 0.56	Cu ₄ : -0.54 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : 0.56	3.755	-13407.520912
BS ₁₄ : $ \alpha\alpha\alpha\beta\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : 0.54 Cu ₅ : -0.56 Cu ₆ : -0.56	3.875	-13407.5157909
BS ₁₅ : $ \alpha\alpha\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : -0.56 Cu ₅ : 0.55 Cu ₆ : -0.56	3.880	-13407.5153546
BS ₁₆ : $ \alpha\alpha\alpha\beta\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : -0.56 Cu ₅ : -0.56 Cu ₆ : 0.55	3.885	-13407.5150618
BS ₁₇ : $ \alpha\beta\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₂ : -0.55 Cu ₃ : 0.56	Cu ₄ : 0.56 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : -0.55	3.753	-13407.5210539
BS ₁₈ : $ \beta\alpha\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₂ : 0.56 Cu ₃ : 0.56	Cu ₄ : 0.55 Cu ₅ : -0.55 Cu ₆ : 0.56	3.756	-13407.5208161
BS ₁₉ : $ \alpha\alpha\beta\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₃ : -0.54	Cu ₄ : -0.54 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : 0.56	3.740	-13407.5220581
BS ₂₀ : $ \beta\alpha\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : -0.55 Cu ₂ : 0.56 Cu ₃ : 0.56	Cu ₄ : 0.56 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : -0.55	3.760	-13407.5204885
BS ₂₁ : $ \alpha\alpha\beta\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₂ : 0.56 Cu ₃ : -0.54	Cu ₄ : 0.55 Cu ₅ : -0.55 Cu ₆ : 0.56	3.745	-13407.5216451
BS ₂₂ : $ \alpha\beta\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56 Cu ₂ : -0.55 Cu ₃ : 0.56	Cu ₄ : -0.54 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : 0.56	3.743	-13407.5217933
BS ₂₃ : $ \alpha\beta\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.55 Cu ₂ : -0.56 Cu ₃ : -0.56	Cu ₄ : 0.58 Cu ₅ : 0.59 Cu ₆ : 0.59	3.887	-13407.5149062
BS ₂₄ : $ \beta\alpha\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.56 Cu ₂ : 0.55 Cu ₃ : -0.56	Cu ₄ : 0.58 Cu ₅ : 0.59 Cu ₆ : 0.59	3.879	-13407.5154481
BS ₂₅ : $ \beta\beta\alpha\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : -0.56 Cu ₂ : -0.56 Cu ₃ : 0.54	Cu ₄ : 0.58 Cu ₅ : 0.59 Cu ₆ : 0.59	3.875	-13407.5157415
BS ₂₆ : $ \alpha\alpha\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : 0.56 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : -0.55	6.887	-13407.5148725
BS ₂₇ : $ \alpha\alpha\alpha\alpha\beta\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : 0.55 Cu ₅ : -0.55 Cu ₆ : 0.56	6.882	-13407.5152097
BS ₂₈ : $ \alpha\alpha\alpha\beta\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₃ : 0.59	Cu ₄ : -0.54 Cu ₅ : 0.56 Cu ₆ : 0.56	6.877	-13407.5156257
BS ₂₉ : $ \alpha\alpha\beta\alpha\alpha\rangle$	Cu ₁ : 0.56	Cu ₄ : 0.58	6.878	-13407.5155716

	Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : 0.59 Cu ₃ :-0.55 Cu ₆ : 0.59		
BS ₃₀ : $\alpha\beta\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ : 0.56 Cu ₄ : 0.58 Cu ₂ :-0.55 Cu ₅ : 0.59 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.59	6.881	-13407.5152981
BS ₃₁ : $\beta\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ :-0.55 Cu ₄ : 0.58 Cu ₂ : 0.56 Cu ₅ : 0.59 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.59	6.889	-13407.5147255

Table S2: SCF single determinants computed for D_{3h} -optimized HS-state structure of **1**⁺: atomic spin densities, computed $\langle S^2 \rangle$ values and energies (in a.u.).

	Atomic spin density	$\langle S^2 \rangle$	E
HS: $\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ :0.59 Cu ₄ : 0.59 Cu ₂ :0.59 Cu ₅ : 0.59 Cu ₃ :0.59 Cu ₆ : 0.59	12.020	-13408.769351
BS1: $\alpha\alpha\alpha\beta\beta\beta$ \rangle	Cu ₁ : 0.59 Cu ₄ :-0.59 Cu ₂ : 0.59 Cu ₅ :-0.59 Cu ₃ : 0.59 Cu ₆ :-0.59	3.008	-13408.7700751
BS2: $\alpha\beta\alpha\beta\alpha\beta$ \rangle $\alpha\alpha\beta\beta\beta\alpha$ \rangle $\alpha\beta\beta\beta\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ : 0.57 Cu ₄ :-0.57 Cu ₂ :-0.55 Cu ₅ : 0.55 Cu ₃ : 0.57 Cu ₆ :-0.57	2.767	-13408.7800948
BS3: $\alpha\alpha\beta\alpha\beta\beta$ \rangle $\alpha\beta\beta\alpha\beta\alpha$ \rangle $\alpha\beta\alpha\beta\beta\alpha$ \rangle $\alpha\alpha\beta\beta\alpha\beta$ \rangle $\alpha\beta\beta\alpha\alpha\beta$ \rangle $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\beta$ \rangle	Cu ₁ :-0.57 Cu ₄ :-0.56 Cu ₂ :-0.57 Cu ₅ : 0.57 Cu ₃ : 0.56 Cu ₆ : 0.57	2.772	-13408.779736
BS4: $\alpha\alpha\beta\alpha\alpha\beta$ \rangle $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha$ \rangle $\beta\alpha\alpha\beta\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ : 0.57 Cu ₄ : 0.57 Cu ₂ : 0.57 Cu ₅ : 0.57 Cu ₃ :-0.56 Cu ₆ :-0.56	3.776	-13408.7794931
BS5: $\alpha\alpha\alpha\beta\alpha\beta$ \rangle $\alpha\alpha\alpha\alpha\beta\beta$ \rangle $\alpha\alpha\alpha\beta\beta\alpha$ \rangle $\alpha\beta\beta\alpha\alpha\alpha$ \rangle $\beta\alpha\beta\alpha\alpha\alpha$ \rangle $\beta\beta\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ : 0.59 Cu ₄ :-0.57 Cu ₂ : 0.59 Cu ₅ : 0.56 Cu ₃ : 0.59 Cu ₆ :-0.57	3.890	-13408.7749214
BS6: $\alpha\alpha\beta\alpha\beta\alpha$ \rangle $\beta\alpha\alpha\alpha\alpha\beta$ \rangle $\alpha\beta\alpha\beta\alpha\alpha$ \rangle $\alpha\beta\alpha\alpha\alpha\beta$ \rangle $\beta\alpha\alpha\alpha\beta\alpha$ \rangle $\alpha\alpha\beta\beta\alpha\alpha$ \rangle	Cu ₁ : 0.57 Cu ₄ : 0.57 Cu ₂ : 0.57 Cu ₅ :-0.56 Cu ₃ :-0.56 Cu ₆ : 0.57	3.771	-13408.7799272
BS7: $\alpha\alpha\alpha\beta\alpha\alpha$ \rangle $\alpha\alpha\beta\alpha\alpha\alpha$ \rangle $\alpha\beta\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle $\beta\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha$ \rangle $\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\beta$ \rangle	Cu ₁ : 0.59 Cu ₄ :-0.56 Cu ₂ : 0.59 Cu ₅ : 0.57 Cu ₃ : 0.59 Cu ₆ : 0.57	6.893	-13408.7747005

$ \alpha\alpha\alpha\beta\rangle$			
-----------------------------------	--	--	--