

Supplementary material: *Ab initio* wavefunction analysis of electron removal quasi-particle state of NdNiO₂ with fully correlated quantum chemical methods

Vamshi M. Katukuri,¹ Nikolay A. Bogdanov,¹ and Ali Alavi^{1,2}

¹Max Planck Institute for Solid State Research, Heisenbergstrasse 1, 70569 Stuttgart, Germany

²Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, UK

(Dated: May 3, 2022)

MUTUAL/TWO ORBITAL ENTROPY DATA

In Tables S1 and S2, we show that values of the two orbital entanglement plotted in Figure 4 in the main text.

TABLE S1. Mutual/two orbital entanglement data for NdNiO₂ used to plot Figure 4a in main text. The numbers in the first column and first row correspond to the orbital numbers labeled in Figure 4a in the main text.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	0.0000	0.0001	0.0005	0.0014	0.0007	0.0007	0.0005	0.0012	0.0009	0.0001	0.0005	0.0005	0.0005	0.0004
2	0.0001	0.0000	0.6316	0.0034	0.0022	0.0022	0.0005	0.0001	0.0001	0.0014	0.0016	0.0002	0.0002	0.0003
3	0.0005	0.6316	0.0000	0.0377	0.0257	0.0258	0.0020	0.0000	0.0001	0.0003	0.0036	0.0006	0.0006	0.0003
4	0.0014	0.0034	0.0377	0.0000	0.0080	0.0080	0.0026	0.0015	0.0021	0.0001	0.0873	0.0046	0.0046	0.0021
5	0.0007	0.0022	0.0257	0.0080	0.0000	0.0061	0.0031	0.0003	0.0003	0.0001	0.0042	0.0521	0.0030	0.0027
6	0.0007	0.0022	0.0258	0.0080	0.0061	0.0000	0.0031	0.0003	0.0003	0.0001	0.0042	0.0030	0.0521	0.0027
7	0.0005	0.0005	0.0020	0.0026	0.0031	0.0031	0.0000	0.0006	0.0001	0.0001	0.0018	0.0027	0.0027	0.0457
8	0.0012	0.0001	0.0000	0.0015	0.0003	0.0003	0.0006	0.0000	0.0001	0.0001	0.0002	0.0003	0.0003	0.0004
9	0.0009	0.0001	0.0001	0.0021	0.0003	0.0003	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0005	0.0002	0.0002	0.0001
10	0.0001	0.0014	0.0003	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.0001
11	0.0005	0.0016	0.0036	0.0873	0.0042	0.0042	0.0018	0.0002	0.0005	0.0000	0.0000	0.0041	0.0041	0.0017
12	0.0005	0.0002	0.0006	0.0046	0.0521	0.0030	0.0027	0.0003	0.0002	0.0001	0.0041	0.0000	0.0030	0.0027
13	0.0005	0.0002	0.0006	0.0046	0.0030	0.0521	0.0027	0.0003	0.0002	0.0001	0.0041	0.0030	0.0000	0.0027
14	0.0004	0.0003	0.0003	0.0021	0.0027	0.0027	0.0457	0.0004	0.0001	0.0001	0.0017	0.0027	0.0027	0.0000

TABLE S2. Mutual/two orbital entanglement data for CaCuO₂ used to plot Figure 4b in the main text. The numbers in the first column and first row correspond to the orbital numbers labeled in Figure 4b in the main text.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	0.0000	0.0002	0.0005	0.0009	0.0006	0.0006	0.0005	0.0070	0.0004	0.0002	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005
2	0.0002	0.0000	1.0704	0.0030	0.0017	0.0017	0.0006	0.0001	0.0001	0.0018	0.0011	0.0003	0.0003	0.0005
3	0.0005	1.0704	0.0000	0.0055	0.0035	0.0035	0.0009	0.0001	0.0001	0.0015	0.0013	0.0004	0.0004	0.0006
4	0.0009	0.0030	0.0055	0.0000	0.0042	0.0042	0.0020	0.0011	0.0009	0.0004	0.0572	0.0039	0.0039	0.0020
5	0.0006	0.0017	0.0035	0.0042	0.0000	0.0025	0.0021	0.0007	0.0001	0.0004	0.0039	0.0423	0.0023	0.0020
6	0.0006	0.0017	0.0035	0.0042	0.0025	0.0000	0.0021	0.0007	0.0001	0.0004	0.0039	0.0023	0.0423	0.0020
7	0.0005	0.0006	0.0009	0.0020	0.0021	0.0021	0.0000	0.0012	0.0000	0.0005	0.0018	0.0021	0.0021	0.0386
8	0.0070	0.0001	0.0001	0.0011	0.0007	0.0007	0.0012	0.0000	0.0001	0.0002	0.0005	0.0005	0.0005	0.0007
9	0.0004	0.0001	0.0001	0.0009	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000
10	0.0002	0.0018	0.0015	0.0004	0.0004	0.0004	0.0005	0.0002	0.0001	0.0000	0.0003	0.0004	0.0004	0.0005
11	0.0005	0.0011	0.0013	0.0572	0.0039	0.0039	0.0018	0.0005	0.0001	0.0003	0.0000	0.0037	0.0037	0.0018
12	0.0005	0.0003	0.0004	0.0039	0.0423	0.0023	0.0021	0.0005	0.0001	0.0004	0.0037	0.0000	0.0023	0.0020
13	0.0005	0.0003	0.0004	0.0039	0.0023	0.0423	0.0021	0.0005	0.0001	0.0004	0.0037	0.0023	0.0000	0.0020
14	0.0005	0.0005	0.0006	0.0020	0.0020	0.0020	0.0386	0.0007	0.0000	0.0005	0.0018	0.0020	0.0020	0.0000