



Supplement of

**Empirical electronic polarizabilities of iodine (I^-) and bromine (Br^- , Br^{7+})
for the prediction of refractive indices**

Shaghayegh Nezamabadi et al.

Correspondence to: Shaghayegh Nezamabadi (shne@uni-bremen.de) and Reinhard X. Fischer (rfischer@uni-bremen.de)

The copyright of individual parts of the supplement might differ from the article licence.

Supplements

Table S1: Fractional atomic coordinates, site occupancy factor, and displacement parameters resulting from the refinement of KI.

Atom	Wyck Symb	sof	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U11 (Å ²)	U22 (Å ²)	U33 (Å ²)	U23 (Å ²)	U13 (Å ²)	U12 (Å ²)	Ueq/Uiso (Å ²)
K1	4a	1	0	0	0	0.03727(9)	0.03727(9)	0.03727(9)	0	0	0	0.03727(9)
I1	4b	1	0.5	0.5	0.5	0.03477(7)	0.03477(7)	0.03477(7)	0	0	0	0.03477(7)

Table S2: Fractional atomic coordinates, site occupancy factor, and displacement parameters resulting from the refinement of NaI·2H₂O.

Atom	Wyck Symb	sof	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U11 (Å ²)	U22 (Å ²)	U33 (Å ²)	U23 (Å ²)	U13 (Å ²)	U12 (Å ²)	Ueq/Uiso (Å ²)
Na1	2i	1	0.1424(2)	0.3239(2)	0.4804(2)	0.0456(6)	0.0387(6)	0.0506(6)	0.0054(4)	0.0245(5)	0.0192(5)	0.0431(3)
I1	2i	1	0.37653(2)	0.23924(3)	0.22296(2)	0.0366(2)	0.0442(2)	0.0368(2)	-0.00112(8)	0.0164(1)	0.0139(1)	0.0396(1)
O1	2i	1	0.0114(5)	0.6264(5)	0.2877(4)	0.050(1)	0.046(1)	0.047(1)	0.0103(9)	0.0221(9)	0.0223(9)	0.0466(5)
O2	2i	1	0.7797(4)	0.9918(4)	0.2909(3)	0.045(1)	0.052(1)	0.0405(9)	-0.0027(8)	0.0132(8)	0.0265(9)	0.0449(4)
H1	2i	1	-0.09(1)	0.60(1)	0.18(1)							0.08(2)
H2	2i	1	0.12(1)	0.77(1)	0.30(4)							0.13(4)
H3	2i	1	0.74(1)	0.95(1)	0.14(1)							0.09(2)
H4	2i	1	0.658(9)	0.02(1)	0.277(8)							0.07(1)

Table S3: Fractional atomic coordinates, site occupancy factor, and displacement parameters resulting from the refinement of KBr.

Atom	Wyck Symb	sof	x	y	z	U11 (Å ²)	U22 (Å ²)	U33 (Å ²)	U23 (Å ²)	U13 (Å ²)	U12 (Å ²)	Ueq/Uiso (Å ²)
K1	4a	1	0	0	0	0.0319(3)	0.0319(3)	0.0319(3)	0	0	0	0.0319(3)
Br1	4b	1	0.5	0.5	0.5	0.0315(3)	0.0315(3)	0.0315(3)	0	0	0	0.0315(3)

20

Table S4: Fractional atomic coordinates, site occupancy factor, and displacement parameters resulting from the refinement of NaBrO₄·H₂O.

Atom	Wyck Symb	sof	x	y	z	U11 (Å ²)	U22 (Å ²)	U33 (Å ²)	U23 (Å ²)	U13 (Å ²)	U12 (Å ²)	Ueq/Uiso (Å ²)
Na1	4d	1	0.25	0.25	0.5	0.0325(5)	0.0315(5)	0.0309(5)	-0.0016(4)	0.0089(4)	-0.0020(4)	0.0324(2)
Na2	4e	1	0	0.4516(2)	0.25	0.0377(5)	0.0349(6)	0.0350(6)	0	0.0139(5)	0	0.0357(2)
Br1	8f	1	0.12732(2)	0.96246(3)	0.19869(2)	0.0346(1)	0.0241(1)	0.0277(1)	-0.00415(5)	0.01548(7)	-0.00242(6)	0.02763(7)
O1	8f	1	0.1646(1)	-0.0305(3)	0.3505(1)	0.068(1)	0.0432(8)	0.0268(7)	-0.0086(6)	0.0112(7)	-0.0137(7)	0.0476(4)
O2	8f	1	0.2105(1)	-0.0254(3)	0.1491(2)	0.061(1)	0.056(1)	0.076(1)	-0.0215(9)	0.051(1)	-0.0184(8)	0.0571(5)
O3	8f	1	0.0620(1)	0.1809(3)	0.1442(2)	0.083(1)	0.0482(10)	0.056(1)	0.0097(8)	0.0267(9)	0.0312(9)	0.0619(5)
O4	8f	1	0.0729(1)	0.7225(3)	0.1529(1)	0.0575(9)	0.0409(8)	0.0381(7)	-0.0116(6)	0.0197(7)	-0.0241(7)	0.0449(4)
O5	8f	1	0.3759(1)	0.0117(3)	0.0511(2)	0.0394(8)	0.0434(9)	0.0356(8)	-0.0010(7)	0.0133(7)	-0.0081(7)	0.0395(3)
H1	8f	1	0.388(2)	0.002(5)	-0.000(4)							0.06(1)
H2	8f	1	0.365(3)	0.118(7)	0.057(4)							0.09(2)