SUPPORTING INFORMATION

Superexchange interactions in $AgMF_4$ (M = Co, Ni, Cu) polymorphs

Mateusz A. Domański[1]*, Wojciech Grochala[1]*

[1]*Centre of New Technologies, University of Warsaw, S. Banacha 2C, 02-097 Warsaw, Poland*

m.domanski@cent.uw.edu.pl, w.grochala@cent.uw.edu.pl

https://doi.org/10.1515/znb-2021-0124. Received August 27, 2021; accepted September 23, 2021

This work is dedicated to Professor Richard Dronskowski on the occasion of his 60th birthday

1. Additional structural information

Table S1. Key geometric parameters in the LP-$AgCuF_4$ structure.

Interaction	d(M'-M") / Å	M'-F-M" angle	d(M'-F) / Å	d(M"-F) / Å
J_{2D}^{Ag}	3.616	122.2°	2.054 (Ag)	2.077 (Ag)
J_{y}^{Ag}	4.764	-	-	-
J_{z}^{Ag}	5.946	-	-	-
J_{x}^{Ag}	5.440	-	-	-
J_{2D}^{Cu}	3.616	140.8°	1.917 (Cu)	1.921 (Cu)
J_{y}^{Cu}	4.764	-	-	-
J_{z}^{Cu}	5.946	-	-	-
J_{x}^{Cu}	5.440	-	-	-
J_{1}^{mix}	3.810	127.8°	2.188 (Cu)	2.054 (Ag)
J_{2}^{mix}	3.810	115.4°	1.917 (Cu)	2.570 (Ag)
J_{3}^{mix}	3.453	108.1°	2.188 (Cu)	2.077 (Ag)
		99.5°	1.921 (Cu)	2.570 (Ag)
J_{4}^{mix}	4.533	-	-	-
J_{5}^{mix}	5.884	-	-	-

Table S2. Key geometric parameters in the HP-$AgCuF_4$ structure.

Interaction	d(M'-M") / Å	M'-F-M" angle	d(M'-F) / Å	d(M"-F) / Å
J_{2D}^{Ag}	3.731	106.4°	2.064 (Ag)	2.579 (Ag)
J_{y}^{Ag}	5.293	-	-	-
J_{z}^{Ag}	5.260	-	-	-
J_{x}^{Ag}	5.064	-	-	-
J_{2D}^{Cu}	3.731	124.3°	1.925 (Cu)	2.291 (Cu)
J_{y}^{Cu}	5.293	-	-	-
J_{z}^{Cu}	5.260	-	-	-
J_{x}^{Cu}	5.064	-	-	-
J_{1}^{mix}	3.662	136.7°	1.875 (Cu)	2.064 (Ag)
J_{2}^{mix}	3.662	112.4°	2.291 (Cu)	2.115 (Ag)
J_{3}^{mix}	3.529	121.7°	1.925 (Cu)	2.115 (Ag)
		(1 path only)	-	-
J_{4}^{mix}	3.768	114.6°	1.875 (Cu)	2.579 (Ag)
J_{5}^{mix}	6.497	-	-	-

Table S3. Key geometric parameters in the LP-$AgNiF_4$ structure.

Interaction	d(M'-M") / Å	M'-F-M" angle	d(M'-F) / Å	d(M"-F) / Å
J_{2D}^{Ag}	3.709	116.5°	2.028 (Ag)	2.332 (Ag)
J_{y}^{Ag}	4.805	-	-	-
J_{z}^{Ag}	5.650	-	-	-
J_{x}^{Ag}	5.624	-	-	-
J_{2D}^{Ni}	3.709	135.8°	1.995 (Ni)	2.008 (Ni)
J_{y}^{Ni}	4.805	-	-	-
J_{z}^{Ni}	5.650	-	-	-
J_{x}^{Ni}	5.624	-	-	-
J_{1}^{mix}	3.699	137.7°	1.941 (Ni)	2.025 (Ag)
J_{2}^{mix}	3.699	120.0°	2.008 (Ni)	2.260 (Ag)
J_{3}^{mix}	3.350	102.9°	1.941 (Ni)	2.332 (Ag)
		103.7°	1.995 (Ni)	2.260 (Ag)
J_{4}^{mix}	4.534	-	-	-
J_{5}^{mix}	5.858	-	-	-

Table S4. Key geometric parameters in the HP-$AgNiF_4$ structure.

Interaction	d(M'-M") / Å	M'-F-M" angle	d(M'-F) / Å	d(M"-F) / Å
J_{2D}^{Ag}	3.633	119.5	2.059 (Ag)	2.146 (Ag)
J_{y}^{Ag}	4.909	-	-	-
J_{z}^{Ag}	5.358	-	-	-
J_{x}^{Ag}	5.382	-	-	-
J_{2D}^{Ni}	3.633	134.1	1.973 (Ni)	1.974 (Ni)
J_{y}^{Ni}	4.909	-	-	-
J_{z}^{Ni}	5.358	-	-	-
J_{x}^{Ni}	5.382	-	-	-
J_{1}^{mix}	3.642	128.3°	1.987 (Ni)	2.059 (Ag)
J_{2}^{mix}	3.642	100.1°	1.974 (Ni)	2.627 (Ag)
J_{3}^{mix}	3.406	110.9°	1.987 (Ni)	2.146 (Ag)
		94.5°	1.973 (Ni)	2.627 (Ag)
J_{4}^{mix}	4.152	122.9°	1.974 (Ni)	2.736 (Ag)
J_{5}^{mix}	5.975	-	-	-

Table S5. Key geometric parameters in the LP-$AgCoF_4$ structure.

Interaction	d(M'-M") / Å	M'-F-M" angle	d(M'-F) / Å	d(M"-F) / Å
J_{2D}^{Ag}	3.740	118.0	2.030 (Ag)	2.330 (Ag)
J_{y}^{Ag}	4.796	-	-	-
J_{z}^{Ag}	5.738	-	-	-
J_{x}^{Ag}	5.716	-	-	-
J_{2D}^{Co}	3.740	134.6	2.025 (Co)	2.029 (Co)
J_{y}^{Co}	4.797	-	-	-
J_{z}^{Co}	5.738	-	-	-
J_{x}^{Co}	5.716	-	-	-
J_{1}^{mix}	3.731	136.6°	1.985 (Co)	2.030 (Ag)
J_{2}^{mix}	3.731	120.5°	2.025 (Co)	2.271 (Ag)
J_{3}^{mix}	3.402	103.8°	1.985 (Co)	2.330 (Ag)
		104.5°	2.029 (Co)	2.271 (Ag)
J_{4}^{mix}	4.607	-	-	-
J_{5}^{mix}	5.881	-	-	-

2. Obtained magnetic configurations

Table S6. Collinear spin value on magnetic centers for each magnetic configuration of the LP-$AgCuF_4$ structure, which were used for magnetic SE constants calculations.

2·S	State	Ag																Cu													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	**AFM_1***	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**
0	AFM_2	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_3	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_4	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_6	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_7	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_8	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_9	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_10	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_11	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_12	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_13	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_14	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_15	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_16	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5
0	AFM_17	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5
0	AFM_18	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5
16	FM16_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
16	FM16_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
16	FM16_3	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5
16	FM16_4	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5
16	FM16_5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5
32	FM32	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5

* groundstate

Table S7. Collinear spin value on magnetic centers for each magnetic configuration of the HP-$AgCuF_4$ structure, which were used for magnetic SE constants calculations.

		Ag																Cu														
2·S	State	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	AFM_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_2	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_3	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_4	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_6	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_7	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_8	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_9	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_10	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
0	AFM_11	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_12	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_13	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_14	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_15	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_16	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
0	AFM_16	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5
0	AFM_17	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5
0	AFM_18	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5
0	**AFM_19***	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**
8	FM8_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
8	FM8_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
8	FM8_3	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
8	FM8_4	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
16	FM16_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
16	FM16_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
16	FM16_3	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
16	FM16_4	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5
16	FM16_5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5
16	FM16_6	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5
16	FM16_7	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5
32	FM32	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5

* groundstate

Table S8. Collinear spin value on magnetic centers for each magnetic configuration of the LP-$AgNiF_4$ structure, which were used for magnetic SE constants calculations.

2·S	State	Ag																Ni													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	AFM_1	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
0	**AFM_2***	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**
0	AFM_3	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	AFM_4	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
0	AFM_5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
0	AFM_6	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
0	AFM_7	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
0	AFM_8	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
0	AFM_9	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
0	AFM_10	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
0	AFM_11	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
0	AFM_12	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
0	AFM_13	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1
0	AFM_14	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1
4	FM4	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1
8	FM8	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
10	FM10	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1
16	FM16_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
16	FM16_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
16	FM16_3	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
24	FM24	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1
32	FM32	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
48	FM48	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

* groundstate

Table S9. Collinear spin value on magnetic centers for each magnetic configuration of the HP-$AgNiF_4$ structure, which were used for magnetic SE constants calculations.

2·S	State	Ag																Ni													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	AFM_1	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
0	AFM_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
0	**AFM_3***	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-0.5**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**-1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**
0	AFM_4	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
0	AFM_5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
0	AFM_6	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
0	AFM_7	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
0	AFM_8	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
0	AFM_9	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
0	AFM_10	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
0	AFM_11	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
0	AFM_12	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1
4	FM4	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
8	FM8	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
16	FM16_1	0.5	-0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	0.5	-0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	
16	FM16_2	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
16	FM16_3	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
16	FM16_4	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
32	FM32	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
48	FM48	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

* groundstate

3. Sets of equations

Table S10. Coefficients of each type *J* in every calculated magnetic confuguration of the LP-$AgCuF_4$ structure, calculated using formulas derived from Heisenberg Hamiltonian. Energies obtained from DFT calculations (E_{DFT}), Ising Hamiltonian (E_H) and differences between them (ΔE, solution's error for a given state) are provided in eV. All values correspond to 2 x 2 x 2 supercell (Z=16).

2·S	State	E_0	J_{2D}^{Ag}	J_y^{Ag}	J_z^{Ag}	J_x^{Ag}	J_{2D}^{M}	J_y^{M}	J_z^{M}	J_x^{M}	J_1^{mix}	J_2^{mix}	J_3^{mix}	J_4^{mix}	J_5^{mix}	E_{DFT}	E_H	ΔE
0	**AFM_1***	**1**	**8**	**-4**	**-4**	**-4**	**8**	**-4**	**-4**	**-4**	**-8**	**-8**	**8**	**8**	**16**	**-329.8155**	**-329.8135**	**0.0019**
0	AFM_2	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	-4	8	8	-8	-8	-16	-329.7124	-329.7144	-0.0019
0	AFM_3	1	0	2	-4	-2	4	-2	-4	2	0	2	-2	-2	4	-329.3870	-329.3801	0.0069
0	AFM_4	1	0	4	4	-4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.4745	-329.4766	-0.0020
0	AFM_5	1	8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.4010	-329.4045	-0.0035
0	AFM_6	1	-8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.0229	-329.0224	0.0004
0	AFM_7	1	0	4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	-8	-8	16	-329.6150	-329.6137	0.0014
0	AFM_8	1	-8	-4	-4	4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.3255	-329.3263	-0.0008
0	AFM_9	1	8	-4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.1942	-329.1958	-0.0016
0	AFM_10	1	0	4	4	-4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.8726	-328.8713	0.0013
0	AFM_11	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-329.4679	-329.4695	-0.0016
0	AFM_12	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-329.4365	-329.4329	0.0036
0	AFM_13	1	0	2	-4	-2	4	-2	-4	-2	-2	0	0	0	8	-329.4746	-329.4771	-0.0024
0	AFM_14	1	0	4	4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-329.7673	-329.7714	-0.0041
0	AFM_15	1	8	-4	-4	4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-329.1721	-329.1732	-0.0012
0	AFM_16	1	-8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-329.3355	-329.3414	-0.0059
0	AFM_17	1	0	4	4	4	0	4	4	4	0	0	8	-8	-16	-329.3353	-329.3388	-0.0035
0	AFM_18	1	0	3	3	3	0	3	3	3	-2	2	-6	6	12	-329.2877	-329.2892	-0.0016
16	FM16_1	1	0	4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	8	8	-16	-329.1645	-329.1658	-0.0013
16	FM16_2	1	-8	-4	-4	-4	-8	-4	-4	-4	8	8	8	8	16	-329.0155	-329.0155	-0.0001
16	FM16_3	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	-4	-4	-4	4	4	8	-329.0255	-329.0272	-0.0017
16	FM16_4	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	-4	4	4	-4	-4	-8	-329.2319	-329.2232	0.0087
16	FM16_5	1	0	-4	-4	0	-8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-329.3365	-329.3221	0.0144
32	FM32	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.8847	-328.8911	-0.0064

* groundstate

$\frac{\sum_{i=1}^{N} |\Delta_i|}{N} =$ 3.25E-03

Table S11. Coefficients of each type *J* in every calculated magnetic confuguration of the HP-$AgCuF_4$ structure, calculated using formulas derived from Heisenberg Hamiltonian. Energies obtained from DFT calculations (E_{DFT}), Ising Hamiltonian (E_H) and differences between them (ΔE, solution's error for a given state) are provided in eV. All values correspond to 2 x 2 x 2 supercell (Z=16).

2·S	State	E_0	J_{2D}^{Ag}	J_y^{Ag}	J_z^{Ag}	J_x^{Ag}	J_{2D}^{M}	J_y^{M}	J_z^{M}	J_x^{M}	J_1^{mix}	J_2^{mix}	J_3^{mix}	J_4^{mix}	J_5^{mix}	E_{DFT}	E_H	ΔE
0	AFM_1	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	-4	-8	-8	8	8	16	-328.2783	-328.2756	0.0027
0	AFM_2	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	-4	8	8	-8	-8	-16	-328.7002	-328.6982	0.0020
0	AFM_3	1	0	2	-4	-2	4	-2	-4	2	0	2	-2	-2	4	-328.5611	-328.5607	0.0005
0	AFM_4	1	0	4	4	-4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.5066	-328.5078	-0.0013
0	AFM_5	1	8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4827	-328.4846	-0.0019
0	AFM_6	1	-8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4983	-328.4979	0.0004
0	AFM_7	1	0	4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	-8	-8	16	-328.3763	-328.3771	-0.0008
0	AFM_8	1	-8	-4	-4	4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4955	-328.4950	0.0004
0	AFM_9	1	8	-4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4839	-328.4840	-0.0001
0	AFM_10	1	0	4	4	-4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.5036	-328.5050	-0.0014
0	AFM_11	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4843	-328.4838	0.0005
0	AFM_12	1	8	-4	-4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4843	-328.4838	0.0005
0	AFM_13	1	0	2	-4	-2	4	-2	-4	-2	-2	0	0	0	8	-328.5106	-328.5094	0.0012
0	AFM_14	1	0	4	4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.5023	-328.5048	-0.0025
0	AFM_15	1	8	-4	-4	4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4775	-328.4815	-0.0040
0	AFM_16	1	-8	-4	-4	4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4983	-328.4979	0.0004
0	AFM_16	1	0	4	4	4	0	4	4	4	0	0	8	-8	-16	-328.3737	-328.3716	0.0021
0	AFM_17	1	0	3	3	3	0	3	3	3	-2	2	-6	6	12	-328.6994	-328.7002	-0.0008
0	AFM_18	1	0	4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	8	8	-16	-328.6316	-328.6320	-0.0004
0	**AFM_19***	**1**	**-8**	**-4**	**-4**	**-4**	**-8**	**-4**	**-4**	**-4**	**8**	**8**	**8**	**8**	**16**	**-329.0024**	**-329.0051**	**-0.0026**
8	FM8_1	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	-4	-4	-4	4	4	8	-328.3873	-328.3867	0.0006
8	FM8_2	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	-4	4	4	-4	-4	-8	-328.5981	-328.5980	0.0001
8	FM8_3	1	0	-4	-4	0	-8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4907	-328.4928	-0.0022
8	FM8_4	1	0	-4	-4	0	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4888	-328.4893	-0.0005
16	FM16_1	1	-8	-4	-4	-4	8	-4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.5005	-328.5002	0.0003
16	FM16_2	1	-8	-4	-4	-4	-8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.5026	-328.5007	0.0019
16	FM16_3	1	-8	-4	-4	-4	8	-4	-4	4	0	0	0	0	0	-328.4975	-328.4971	0.0004
16	FM16_4	1	-8	-4	-4	-4	0	4	-4	-4	0	0	0	0	0	-328.4992	-328.4973	0.0019
16	FM16_5	1	-8	-4	-4	-4	0	4	4	-4	0	0	0	0	0	-328.4988	-328.5040	-0.0051
16	FM16_6	1	-2	0	0	0	-2	0	0	0	-2	-2	-8	0	0	-328.4150	-328.4086	0.0065
16	FM16_7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-8	-16	-328.3621	-328.3610	0.0011
32	FM32	1	-8	-4	-4	-4	-8	-4	-4	-4	-8	-8	-8	-8	-16	-327.9998	-328.0024	-0.0026

* groundstate

$\frac{\sum_{i=1}^{N} |\Delta_i|}{N} =$ 1.56E-03

Table S12. Coefficients of each type *J* in every calculated magnetic confuguration of the LP-$AgNiF_4$ structure, calculated using formulas derived from Heisenberg Hamiltonian. Energies obtained from DFT calculations (E_{DFT}), Ising Hamiltonian (E_H) and differences between them (ΔE, solution's error for a given state) are provided in eV. All values correspond to 2 x 2 x 2 supercell (Z=16).

2·S	State	E_0	J_{2D}^{Ag}	J_y^{Ag}	J_z^{Ag}	J_x^{Ag}	J_{2D}^{M}	J_y^{M}	J_z^{M}	J_x^{M}	J_1^{mix}	J_2^{mix}	J_3^{mix}	J_4^{mix}	J_5^{mix}	E_{DFT}	E_H	ΔE
0	AFM_1	1	-8	-4	-4	4	-32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.2003	-374.1922	0.0081
0	**AFM_2***	**1**	**8**	**-4**	**-4**	**-4**	**32**	**-16**	**-16**	**-16**	**16**	**16**	**-16**	**-16**	**-32**	**-375.1954**	**-375.1969**	**-0.0015**
0	AFM_3	1	8	-4	-4	-4	32	-16	-16	-16	-16	-16	16	16	32	-373.9419	-373.9417	0.0003
0	AFM_4	1	8	-4	-4	4	32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.5936	-374.5913	0.0023
0	AFM_5	1	0	4	-4	-4	0	16	-16	-16	0	0	16	16	-32	-374.2307	-374.2290	0.0016
0	AFM_6	1	0	4	-4	4	0	16	-16	-16	0	0	0	0	0	-374.3880	-374.3939	-0.0060
0	AFM_7	1	0	4	-4	-4	0	16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.3883	-374.3832	0.0051
0	AFM_8	1	0	4	-4	-4	0	16	-16	-16	0	0	-16	-16	32	-374.5281	-374.5261	0.0020
0	AFM_9	1	0	-4	4	-4	0	-16	16	-16	16	16	0	0	0	-375.0153	-375.0121	0.0032
0	AFM_10	1	0	4	4	-4	0	16	16	-16	0	0	0	0	0	-374.3877	-374.3847	0.0030
0	AFM_11	1	-8	-4	-4	4	0	-16	16	-16	0	0	0	0	0	-374.3467	-374.3497	-0.0031
0	AFM_12	1	0	-4	4	-4	-32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.2154	-374.2193	-0.0038
0	AFM_13	1	-1	-2	2	-2	-4	-4	4	-4	10	6	0	-2	4	-374.7355	-374.7324	0.0031
0	AFM_14	1	-1	2	2	-2	-4	4	4	-4	2	0	-2	0	4	-374.4446	-374.4477	-0.0031
4	FM4	1	0	2	-4	2	0	8	-16	-8	4	0	-4	-4	8	-374.5575	-374.5575	0.0001
8	FM8	1	-4	0	-4	0	-32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.2091	-374.2121	-0.0030
10	FM10	1	-1	-1	-1	1	-16	-16	0	0	6	6	4	2	8	-374.5390	-374.5452	-0.0062
16	FM16_1	1	-8	-4	-4	-4	-32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-374.1705	-374.1758	-0.0053
16	FM16_2	1	-8	-4	-4	-4	0	16	-16	-16	0	0	0	0	0	-374.3168	-374.3214	-0.0046
16	FM16_3	1	-8	-4	-4	-4	-32	-16	-16	-16	16	16	16	16	32	-374.8149	-374.8131	0.0018
24	FM24	1	-4	0	-4	0	-16	0	-16	0	0	-8	-8	-8	0	-374.2638	-374.2646	-0.0008
32	FM32	1	-8	-4	-4	4	-32	-16	-16	-16	0	0	0	0	0	-374.1909	-374.1866	0.0043
48	FM48	1	-8	-4	-4	-4	-32	-16	-16	-16	-16	-16	-16	-16	-32	-373.5297	-373.5272	0.0024

* groundstate

$\frac{\sum_{i=1}^{N} |\Delta_i|}{N} =$ 3.25E-03

Table S13. Coefficients of each type *J* in every calculated magnetic confuguration of the HP-$AgNiF_4$ structure, calculated using formulas derived from Heisenberg Hamiltonian. Energies obtained from DFT calculations (E_{DFT}), Ising Hamiltonian (E_H) and differences between them (ΔE, solution's error for a given state) are provided in eV. All values correspond to 2 x 2 x 2 supercell (Z=16).

2·S	State	E_0	J_{2D}^{Ag}	J_y^{Ag}	J_z^{Ag}	J_x^{Ag}	J_{2D}^{M}	J_y^{M}	J_z^{M}	J_x^{M}	J_1^{mix}	J_2^{mix}	J_3^{mix}	J_4^{mix}	J_5^{mix}	E_{DFT}	E_H	ΔE
0	AFM_1	1	-8	-4	-4	4	32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.4496	-373.4435	0.0061
0	AFM_2	1	8	-4	-4	-4	32	-16	-16	-16	-16	-16	16	16	32	-373.5881	-373.5862	0.0018
0	**AFM_3**	**1**	**8**	**-4**	**-4**	**-4**	**32**	**-16**	**-16**	**-16**	**16**	**16**	**-16**	**-16**	**-32**	**-374.2088**	**-374.1987**	**0.0102**
0	AFM_4	1	8	-4	-4	4	-32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.6222	-373.6262	-0.0040
0	AFM_5	1	0	4	-4	-4	0	16	-16	-16	0	0	16	16	-32	-373.6635	-373.6636	-0.0001
0	AFM_6	1	0	4	-4	4	0	16	-16	-16	0	0	0	0	0	-373.5433	-373.5673	-0.0240
0	AFM_7	1	0	4	-4	-4	0	16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.5645	-373.5569	0.0076
0	AFM_8	1	-8	-4	-4	4	0	16	-16	-16	0	0	0	0	0	-373.3530	-373.3359	0.0170
0	AFM_9	1	0	-4	4	-4	0	-16	16	-16	16	16	0	0	0	-374.0146	-374.0311	-0.0165
0	AFM_10	1	0	4	4	-4	0	16	16	-16	0	0	0	0	0	-373.5624	-373.5459	0.0165
0	AFM_11	1	0	-4	4	-4	32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.6702	-373.6696	0.0006
0	AFM_12	1	1	2	0	2	16	0	-16	0	0	4	0	0	-8	-373.6265	-373.6277	-0.0012
4	FM4	1	0	2	-4	2	0	8	-16	-8	0	4	4	4	-8	-373.5769	-373.5757	0.0012
8	FM8	1	-4	0	-4	0	32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.5617	-373.5616	0.0001
16	FM16_1	1	0	0	0	0	0	-16	0	0	4	4	4	-4	8	-373.7018	-373.7018	0.0000
16	FM16_2	1	-8	-4	-4	-4	32	-16	-16	16	0	0	0	0	0	-373.4382	-373.4483	-0.0101
16	FM16_3	1	-8	-4	-4	-4	0	16	-16	-16	0	0	0	0	0	-373.3235	-373.3408	-0.0173
16	FM16_4	1	-8	-4	-4	-4	-32	-16	-16	-16	16	16	16	16	32	-373.9239	-373.9162	0.0077
32	FM32	1	-8	-4	-4	4	-32	-16	-16	-16	0	0	0	0	0	-373.2175	-373.2126	0.0049
48	FM48	1	-8	-4	-4	-4	-32	-16	-16	-16	-16	-16	-16	-16	-32	-372.5182	-372.5187	-0.0005

* groundstate

$\frac{\sum_{i=1}^{N} |\Delta_i|}{N} =$ 7.37E-03