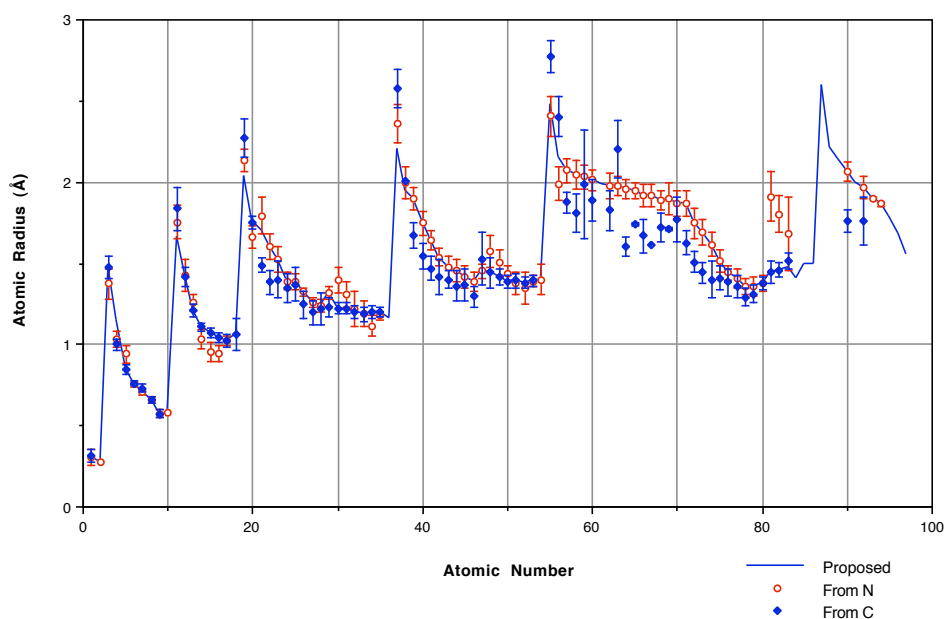


Covalent Radii Revisited

Beatriz Cordero, Verónica Gómez, Ana Platero, Marc Revés, Jorge Echeverría,
Eduard Cremades, Flavia Barragán, Santiago Alvarez

Supporting Information

A. Effect of the choice of different reference elements on the atomic radii.



B. Comparison of Bond Lengths from the CSD with the Sum of the Proposed Atomic Radii.

Bond	Sum	esd	$d_{av}(\text{CSD})$	esd		Δ_{av}	Δ_{max}	# data
Li-Li	2.56	0.14	2.64	0.22	σ	0.17	0.79	292
Li-C	2.04	0.08	2.26	0.11	2σ	0.22	1.78	1492
Li-Br	2.48	0.10	2.55	0.10	σ	0.08	0.72	133
Be-N	1.67	0.06	1.74	0.05	2σ	0.07	0.25	189
Be-S	2.01	0.06	2.08	0.06	σ	0.08	0.16	9
Be-Cl	1.98	0.07	1.98	0.05	σ	0.04	0.12	79
Be-Br	2.16	0.06	2.14	0.03	σ	0.03	0.09	12
B-C	1.61	0.04	1.66	0.06	2σ	0.07	0.97	10000
B-O	1.50	0.05	1.44	0.08	σ	0.08	0.96	6304

B-F	1.41	0.06	1.35	0.06	σ	0.06	0.47	10000
B-P	1.91	0.06	1.95	0.06	σ	0.05	0.35	1150
C-Mg	2.17	0.08	2.22	0.10	σ	0.07	0.65	476
C-Zr	2.51	0.08	2.31	0.10	3σ	0.20	0.42	1663
C-Te	2.14	0.05	2.13	0.04	σ	0.03	0.34	2684
C-Nd	2.77	0.07	2.65	0.08	2σ	0.13	0.34	84
C-Ir	2.17	0.07	1.97	0.13	3σ	0.20	0.87	5009
C-Bi	2.24	0.05	2.24	0.05	σ	0.04	0.41	842
N-Zr	2.45	0.08	2.22	0.15	3σ	0.24	0.55	2956
(sp ³)			2.40	0.12	σ			
N-Ba	2.86	0.12	2.92	0.11	σ	0.10	0.53	619
N-Yb	2.58	0.09	2.42	0.12	2σ	0.17	0.46	1335
O-P	1.73	0.05	1.57	0.05	3σ	0.16	0.46	10000
O-Zr	2.41	0.09	2.13	0.12	4σ	0.28	0.60	3468
O-Rh	2.08	0.09	2.09	0.09	σ	0.06	0.69	3389
O-Gd	2.62	0.08	2.43	0.09	3σ	0.19	0.58	3650
O-Yb	2.53	0.10	2.34	0.12	2σ	0.20	0.56	2451
F-P	1.64	0.06	1.56	0.05	2σ	0.08	0.40	10000
F-Ti	2.17	0.11	1.95	0.15	2σ	0.24	0.60	610
F-Mn l.s.	1.96	0.08	1.84	0.04	2σ	0.12	0.18	162
h.s.	2.18	0.11	2.14	0.06	σ	0.06	0.16	49
F-Ni	1.81	0.07	2.00	0.07	3σ	0.20	0.31	41
F _{term} -Ru	2.03	0.10	2.03	0.06	σ	0.05	0.14	18
F-Pt	1.93	0.08	1.97	0.06	σ	0.04	0.19	35
Na-N	2.37	0.12	2.53	0.15	2σ	0.16	0.87	1650
Na-As	2.85	0.13	3.06	0.08	2σ	0.21	0.40	15
Mg-P	2.48	0.10	2.61	0.06	2σ	0.12	0.28	57
Mg-S	2.46	0.10	2.52	0.09	σ	0.09	0.27	52
Mg-Ge	2.61	0.11	2.71	0.05	σ	0.10	0.14	6
Mg-Se	2.61	0.10	2.48	0.05	σ	0.14	0.21	7
Al-Al	2.43	0.08	2.68	0.11	4σ	0.26	0.59	232
Al-P	2.28	0.07	2.46	0.08	3σ	0.17	0.47	202
Al-Cl	2.23	0.08	2.14	0.06	σ	0.10	0.31	2147
Al-Cr	2.60	0.09	2.43	0.08	2σ	0.17	0.22	2
Al-I	2.61	0.07	2.54	0.06	σ	0.08	0.17	175

Al-W	2.83	0.11	2.67	0.04	2 σ	0.17	0.22	2
Al-Bi	2.69	0.08	2.83	0.11	2 σ	0.14	0.33	11
Si-P	2.18	0.05	2.26	0.04	2 σ	0.08	0.81	1264
Si-Cl	2.13	0.06	2.08	0.08	σ	0.08	0.55	1105
Si-Cr	2.50	0.07	2.39	0.05	2 σ	0.11	0.17	19
Si-Fe	2.43	0.05	2.32	0.08	2 σ	0.12	0.43	287
Si-Br	2.31	0.05	2.30	0.13	σ	0.08	0.81	64
Si-Ru	2.56	0.09	2.39	0.08	2 σ	0.18	0.39	289
Si-Rh	2.52	0.09	2.34	0.08	3 σ	0.19	0.33	110
Si-I	2.50	0.05	2.49	0.04	σ	0.03	0.08	40
Si-La	3.18	0.10	3.29	0.12	σ	0.11	0.31	5
Si-Os	2.55	0.06	2.39	0.06	3 σ	0.16	0.30	85
Si-Au	2.46	0.08	2.35	0.03	2 σ	0.12	0.17	7
P-P	2.14	0.06	2.21	0.06	σ	0.07	0.83	3282
P-Cl	2.09	0.07	2.02	0.06	2 σ	0.08	0.72	2479
P-V	2.60	0.11	2.49	0.07	σ	0.12	0.27	342
P-Ni	2.31	0.07	2.20	0.06	2 σ	0.12	0.50	4730
P-Br	2.27	0.06	2.25	0.14	σ	0.10	0.70	166
P-Zr	2.82	0.10	2.72	0.09	σ	0.11	0.31	619
P-Mo	2.61	0.08	2.50	0.07	2 σ	0.12	0.53	4972
P-Pd	2.46	0.09	2.29	0.05	2 σ	0.17	0.32	8585
P-La	3.14	0.11	3.08	0.10	σ	0.10	0.29	32
P-Sm	3.05	0.08	2.98	0.12	σ	0.12	0.33	48
P-Re	2.58	0.10	2.44	0.06	2 σ	0.14	0.62	5118
P-Ir	2.48	0.09	2.32	0.05	2 σ	0.16	0.45	4613
S-Ge	2.25	0.07	2.24	0.08	σ	0.04	0.59	504
S-As	2.23	0.07	2.27	0.13	σ	0.07	0.87	868
S-Ca	2.80	0.13	2.92	0.09	σ	0.12	0.34	24
S-Ti	2.65	0.10	2.44	0.12	2 σ	0.22	0.46	1113
S-Zn	2.27	0.07	2.37	0.11	2 σ	0.11	0.71	3520
S-Rh	2.46	0.10	2.36	0.06	σ	0.11	0.40	1495
S-In	2.46	0.08	2.53	0.09	σ	0.08	0.67	574
S-La	3.12	0.11	3.00	0.05	σ	0.12	0.26	78
S-Sm	3.03	0.08	2.86	0.07	2 σ	0.17	0.36	122
S-Nd	3.06	0.10	2.91	0.06	2 σ	0.15	0.37	124

S-Gd	3.00	0.09	2.86	0.07	2 σ	0.15	0.34	10
S-W	2.66	0.10	2.38	0.12	3 σ	0.28	0.56	3573
S-Pt	2.40	0.08	2.32	0.08	σ	0.10	0.65	3098
S-Pb	2.51	0.08	2.80	0.20	5 σ	0.36	1.30	413
S-Ra	3.26	0.05	3.29	-	σ	0.03	-	1
S-Th	3.11	0.09	2.92	0.05	2 σ	0.20	0.34	22
Cl-K	3.05	0.14	3.21	0.15	σ	0.17	0.65	90
Cl-Cr	2.41	0.09	2.34	0.09	σ	0.10	0.42	1069
Cl-Cd	2.47	0.13	2.57	0.10	σ	0.12	0.28	1722
Cl-Rb	3.22	0.13	3.39	0.13	2 σ	0.17	0.39	7
Cl-Tc	2.49	0.11	2.38	0.09	2 σ	0.13	0.54	491
Cl-Re	2.53	0.11	2.40	0.07	2 σ	0.14	0.43	4971
Cl-Au	2.38	0.10	2.31	0.11	σ	0.10	0.85	1538
Cl _{term} -Hg	2.34	0.09	2.42	0.11	2 σ	0.09	0.69	2542
Cl _{term} -Bi	2.50	0.08	2.61	0.11	σ	0.06	0.62	649
Cl-Er	2.91	0.10	2.64	0.08	3 σ	0.27	0.41	160
Cl-Th	3.08	0.10	2.75	0.11	3 σ	0.33	0.67	147
K-K	4.06	0.24	3.70	0.43	2 σ	0.39	0.76	4
K-As	3.22	0.16	3.60	0.07	3 σ	0.69	0.78	5
K-Sb	3.43	0.09	3.73	0.24	4 σ	0.31	0.73	8
K-I	3.43	0.07	3.55	0.12	2 σ	0.15	0.37	29
Ca-Se	2.96	0.14	2.93		σ	0.03	0.03	1
Ca-As	2.95	0.14	2.98	0.03	σ	0.04	0.07	4
Ca-I	3.16	0.13	3.13	0.06	σ	0.06	0.14	18
Cr-Br	2.59	0.08	2.57	0.14	σ	0.10	0.45	53
Cr-Te	2.77	0.09	2.69	0.07	σ	0.08	0.22	85
Co-In	2.68	0.08	2.61	0.05	σ	0.37	0.48	30
Ni-Sn	2.63	0.08	2.52	0.10	2 σ	0.13	0.27	50
Zn-Zn _{acyc}	2.44	0.08	2.32	0.03	2 σ	0.12	0.14	3
Zn-I	2.62	0.07	2.58	0.07	σ	0.07	0.37	318
Ga-Ga	2.44	0.07	2.58	0.15	2 σ	0.15	0.56	316
" only Ga ₂			2.44	0.07	σ	0.04	0.35	76
Ga-In	2.64	0.08	2.60		σ	0.04	0.04	1
Ga-Sb	2.61	0.08	2.73	0.09	2 σ	0.12	0.41	57

Ge-Ge only Ge ₂	2.40	0.08	2.46	0.08	σ	0.07	0.31	64
Ge-Br	2.40	0.07	2.38	0.12	σ	0.08	0.73	82
Ge-Te	2.48	0.08	2.59	0.02	2σ	0.11	0.15	31
Ge-Ru _{acyc}	2.66	0.11	2.47	0.04	2σ	0.19	0.26	17
Ge-Ir	2.61	0.10	2.47	0.05	2σ	0.14	0.29	25
Ge-Pb	2.66	0.09	2.64		σ	0.02	0.02	1
As-As	2.38	0.08	2.46	0.09	σ	0.09	0.45	593
As-Mo	2.73	0.09	2.60	0.06	2σ	0.13	0.36	250
As-Cd	2.63	0.13	2.62		σ	0.01	0.01	1
As-Ba	3.34	0.15	3.33		σ	0.01	0.01	1
As-Ta	2.89	0.12	2.64	0.12	2σ	0.25	0.45	11
Se-Se	2.40	0.07	2.36	0.11	σ	0.08	1.13	1212
Se-Rb	3.40	0.13	3.50	0.03	σ	0.11	0.12	2
Se-Te	2.58	0.08	2.68	0.19	2σ	0.16	0.76	132
Se-W _{acy}	2.82	0.11	2.56	0.14	3σ	0.26	0.55	83
Se-Pb	2.66	0.09	2.90	0.15	3σ			
Se-Ra	3.41	0.06	3.40	-	σ	0.01	-	1
Br-Rh	2.62	0.10	2.54	0.08	σ	0.10	0.36	198
Br-In	2.62	0.08	2.58	0.13	σ	0.10	0.88	336
Br-La	3.27	0.11	3.05	0.15	2σ	0.24	0.38	32
Br-Re	2.71	0.10	2.57	0.07	2σ	0.14	0.32	865
Br-Tl	2.65	0.10	2.59	0.08	σ	0.09	0.26	139
Nb-Nb	3.28	0.11	2.90	0.12	3σ	0.38	0.76	224
Pd-Tl	2.84	0.13	2.90	0.09	σ	0.07	0.28	20
Ag-Te	2.83	0.09	2.83	0.10	σ	0.08	0.36	319
Ag-I	2.85	0.08	2.88	0.10	σ	0.08	0.51	616
In-In	2.84	0.10	3.02	0.22	2σ	0.22	0.73	77
In-W	3.04	0.12	2.84	0.06	2σ	0.20	0.28	7
In-Re	2.93	0.12	2.80	0.04	σ	0.13	0.21	24
Sn-Sn	2.78	0.08	2.96	0.13	3σ	0.18	0.67	568
Sn-Pt	2.75	0.09	2.62	0.09	2σ	0.15	0.28	105
Sn-Bi	2.87	0.08	2.94	0.02	σ	0.07	0.10	10
Sb-Sb	2.78	0.10	2.85	0.12	σ	0.08	0.50	279
Sb-Hf	3.14	0.15	2.93	0.11	2σ	0.21	0.29	2

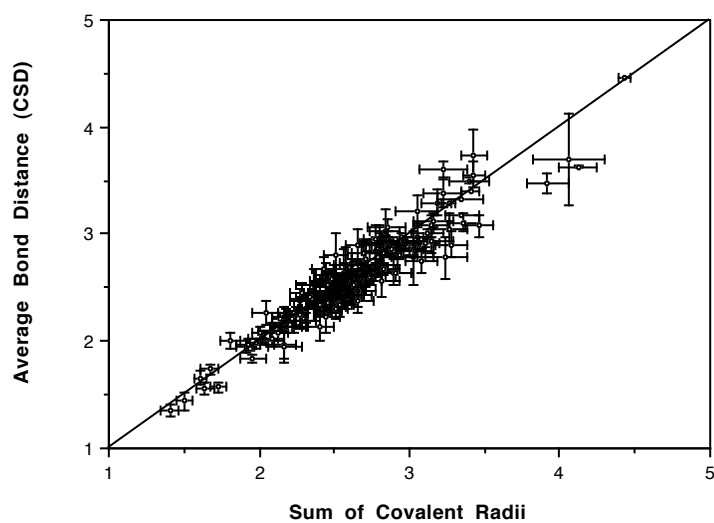
Sb-Os	2.83	0.09	2.66	0.05	2 σ	0.17	0.28	152
W-W	3.24	0.14	2.78	0.20	4 σ	0.46	1.03	1163
Re-Re	3.02	0.14	2.78	0.25	2 σ	0.30	0.84	2250
Os-Os	2.88	0.08	2.86	0.08	σ	0.06	0.74	8689
Pt-Pt	2.71	0.10	2.77	0.17	σ	0.13	0.76	1348
Pt-Tl	2.80	0.12	2.92	0.17	σ	0.19	0.43	51
Ra-Ra	4.43	0.04	4.46	-	σ	0.03	-	1
U-U	3.92	0.14	3.48	0.09	3 σ	0.44	0.56	4
U-I	3.36	0.10	3.11	0.09	3 σ	0.25	0.43	127
U-Sn	3.35	0.11	3.17	-	2 σ	0.18	0.18	1
Th-I	3.46	0.09	3.08	0.10	5 σ	0.38	0.50	3
Th-Th	4.12	0.12	3.63	0.01	4 σ	0.49	0.50	3

Bonds showing a high dispersion:

Re-Re _{acyclic}	3.02	0.14	2.84	0.34	2 σ	0.22	0.81	134
--------------------------	------	------	------	------	------------	------	------	-----

Bonds that are poorly reproduced with the present atomic radii

Mn-C	2.15	0.06	1.83	0.10	5 σ			
Mo-C	2.30	0.06	2.02	0.10	5 σ	0.29	0.82	10000



C. Comparison of Atomic Radii Deduced from $\text{Me}_n\text{E}-\text{EMe}_n$ Bond Lengths obtained from Mogul with those Proposed in this Work.

E	r(E) Mogul	r(E) this work
C	0.77 (6)	0.76 (1)
N	0.71 (6)	0.71 (1)
O	0.74 (1)	0.66 (2)
Si	1.17 (1)	1.11 (2)
P	1.12 (5)	1.07 (3)
S	1.01 (1)	1.05 (3)
Cl	1.00 (3)	1.02 (4)
Ge	1.25 (13)	1.20 (4)
As	1.27 (6)	1.19 (4)
Se	1.16 (5)	1.20 (4)
Br	1.15 (14)	1.20 (3)
Sn	1.41 (9)	1.39 (4)
Sb	1.42 (2)	1.39 (5)
Te	1.36 (5)	1.38 (4)
I	1.38 (7)	1.40 (3)
Bi	1.52	1.48 (4)

