Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics.

Electronic Supplementary Information

Feynman Force Components:
Basis for a Solution to the Covalent vs. Ionic Dilemma

Justyna Dominikowska, [a]* Mirosław Jabłoński,[b] and Marcin Palusiak[a]

[a]Department of Theoretical and Structural Chemistry, Faculty of Chemistry,
University of Łódź, Pomorska 163/165, 90-236 Łódź, Poland

[b]Department of Quantum Chemistry, Faculty of Chemistry,
Nicolaus Copernicus University in Toruń, Gagarina 7, 87-100 Toruń, Poland

*Email: justyna@uni.lodz.pl

Contents:

Table S1. Cartesian coordinates (Å) and total energies (au) for systems investigated in the study calculated at the MP2/aug-cc-pVTZ level of theory).

He_2 (E= -5.7896308)

He	0.000000	0.000000	0.000000
He	0.000000	0.000000	3.101452

H_2 (E= -1.1650231)

H	0.000000	0.000000	0.000000
H	0.000000	0.000000	0.737437

N_2 (E= -109.3647998)

N	0.000000	0.000000	0.000000
N	0.000000	0.000000	1.114093

HF (E= -100.3408907)

H	0.000000	0.000000	0.000000
F	0.000000	0.000000	0.921838

HCl (E= -460.3151301)

H	0.000000	0.000000	0.000000
Cl	0.000000	0.000000	1.274785

HBr (E= -2573.2952874)

H	0.000000	0.000000	0.000000
Br	0.000000	0.000000	1.406605

LiF (E= -107.2702157)

Li	0.000000	0.000000	0.000000
F	0.000000	0.000000	1.594671

LiCl(E= -467.2589174)

Li	0.000000	0.000000	0.000000
Cl	0.000000	0.000000	2.048547

LiBr(E= -2580.2432709)

Li	0.000000	0.000000	0.000000
Br	0.000000	0.000000	2.196729

NaF (E= -261.658502)

Na	0.000000	0.000000	0.000000
F	0.000000	0.000000	1.998947

NaCl(E= -621.661592)

Na	0.000000	0.000000	0.000000
Cl	0.000000	0.000000	2.412567

NaBr(E= -2734.6489302)

Na	0.000000	0.000000	0.000000
Br	0.000000	0.000000	2.553034

Table S2. Feynman force components (au) values for systems investigated in the study (the non-zero components – along the bond axis are given, force orientation refers to molecular geometries from Table S1).

System	Force component	Value
He_2	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{He1}}^{\,n\,\mathrm{He1}}$	5.58E-05
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{He2}}^{\,n\,\mathrm{He1}}$	1.16E-01
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{He2}}^{\,n\,\mathrm{He1}}$	-1.16E-01
	$\vec{F}_{\mathrm{He2}}^{\,n\,\mathrm{He1}}$	-5.61E-05
H_2	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H1}}^{\,n\,\mathrm{H1}}$	1.76E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H2}}^{\,n\,\mathrm{H1}}$	3.39E-01
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{H2}}^{\,n\,\mathrm{H1}}$	-5.15E-01
	$\vec{F}_{\mathrm{H2}}^{\,n\,\mathrm{H1}}$	-1.76E-01
N_2	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{N1}}^{\,n\,\mathrm{N1}}$	1.49E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{N2}}^{\,n\,\mathrm{N1}}$	9.56E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{N2}}^{\,n\,\mathrm{N1}}$	-1.11E+01
	$\vec{F}_{\mathrm{N2}}^{\,n\,\mathrm{N1}}$	-1.49E+00
HF	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-1.03E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	3.07E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-2.97E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	1.03E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	-2.50E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	-4.62E-01
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	2.97E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	2.50E+00
HCl	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	1.49E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	2.78E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-2.93E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-1.49E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	-1.25E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	-1.68E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	2.93E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	1.25E+00

System	Force component	Value
HBr	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	2.04E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	4.75E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-4.95E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{H}}$	-2.04E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{Br}}$	-1.03E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Br}}$	-3.92E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Br}}$	4.95E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{H}}^{\,n\,\mathrm{Br}}$	1.03E+00
LiF	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-2.38E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	3.21E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-2.97E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	2.38E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	-9.46E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	-2.03E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	2.97E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{F}}$	9.46E-01
LiCl	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-1.63E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	3.57E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-3.40E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	1.63E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	-1.06E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	-2.34E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	3.40E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Cl}}$	1.06E+00
LiBr	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-1.45E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	6.24E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	-6.09E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Br}}^{\,n\,\mathrm{Li}}$	1.45E-01

System	Force component	Value
LiBr	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{n\,\mathrm{Br}}$	-1.89E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Li}}^{n\,\mathrm{Br}}$	-4.21E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Li}}^{n\,\mathrm{Br}}$	6.09E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Li}}^{n\,\mathrm{Br}}$	1.89E+00
NaF	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-6.05E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{n\,\mathrm{Na}}$	7.54E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{F}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-6.94E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{F}}^{n\,\mathrm{Na}}$	6.05E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{F}}^{n\,\mathrm{F}}$	-5.97E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{F}}$	-6.34E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{F}}$	6.94E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{F}}$	5.97E-01
NaCl	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-4.32E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{n\,\mathrm{Na}}$	9.43E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Cl}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-9.00E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Cl}}^{n\,\mathrm{Na}}$	4.32E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Cl}}^{n\,\mathrm{Cl}}$	-7.57E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Cl}}$	-8.24E+00
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Cl}}$	9.00E+00
	$\vec{F}_{\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Cl}}$	7.57E-01
NaBr	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-3.86E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{n\,\mathrm{Na}}$	1.69E+01
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Br}}^{n\,\mathrm{Na}}$	-1.65E+01
	$\vec{F}_{\mathrm{Br}}^{n\,\mathrm{Na}}$	3.86E-01
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Br}}^{n\,\mathrm{Br}}$	-1.37E+00
	$\vec{F}_{ed\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Br}}$	-1.52E+01
	$\vec{F}_{n\,\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Br}}$	1.65E+01
	$\vec{F}_{\mathrm{Na}}^{n\,\mathrm{Br}}$	1.37E+00

Table S3. Electronegativity, force (au) and force ratio data for heteropolar molecules investigated in the study [$\chi(\mathrm{B}) - \chi(\mathrm{A})$ is given in Pauling (P), Allred-Rochow (AR) and Allen (A) scales, atom A refers to an atom of partial positive charge (H, Li or Na)].

System	P	AR	A	$\vec{F}_{\mathrm{B}}^{n\mathrm{A}}$	$-\frac{F_{\mathrm{B}}^{n\mathrm{A}}}{F_{\mathrm{n\,B}}^{n\mathrm{A}}}$
HF	1.78	1.90	1.89	0.103	0.0347
HCl	0.96	0.63	0.57	-0.149	-0.0510
HBr	0.76	0.54	0.38	-0.204	-0.0411
LiF	3.00	3.13	3.28	0.238	0.0801
LiCl	2.18	1.86	1.96	0.163	0.0478
LiBr	1.98	1.77	1.77	0.145	0.0238
NaF	3.05	3.09	3.32	0.605	0.0872
NaCl	2.23	1.82	2.00	0.432	0.0481
NaBr	2.03	1.73	1.82	0.386	0.0233