

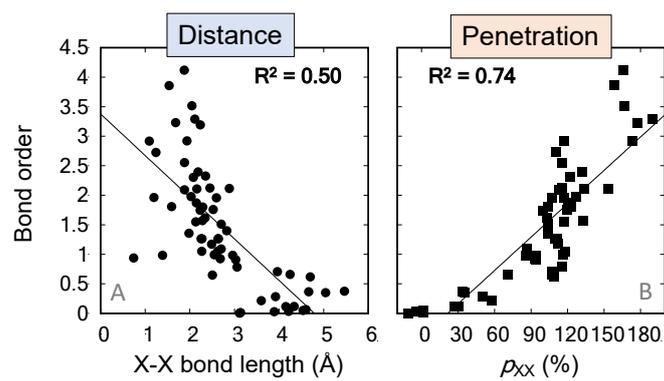
# Beyond Bond Distances: A Purely Geometrical Descriptor Correlating with Covalency-Related Bonding Terms

Jorge Pardos,<sup>a</sup> Jorge Gonzalo,<sup>b</sup> Pedro Merino<sup>a</sup> and Jorge Echeverría<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) and Departamento de Química Orgánica, Universidad de Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza (Spain).

<sup>b</sup>Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) and Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza (Spain).

SUPPPORTING INFORMATION



**Figure S1.** Correlations between the computed DDEC6 bond orders and the bond distance (left) or penetration index (right) for 63 diatomic  $X_2$  molecules.