

Supplementary Data

Name	MP2 Bond Energy (kJ mol ⁻¹)	NIST Bond Energy (kJ mol ⁻¹)	K_S	V_S	N_S	κ
LiH	201.5	236.7	0.0076	-0.0456	0.0670	0.1037
BeH ₂	295.3	312.3	0.1353	-0.1421	0.1658	0.2158
BH ₃	372.7	365.8	0.4339	0.1417	0.3631	0.1320
CH ₄	416.8	410.5	0.3998	-0.0777	0.4458	0.1356
NH ₃	380.1	386.0	0.4434	-0.0089	0.4290	0.3480
OH ₂	454.5	458.9	0.5251	-0.0197	0.3777	0.8394
FH	559.9	566.6	0.5438	-0.0791	0.3130	2.2260
BeH	214.2	216.8	0.1405	-0.1494	0.1790	0.2221
BH	321.7	336.4	0.4238	-0.1347	0.3091	0.2351
CH	308.6	333.2	0.0690	0.1207	0.1320	0.4150
NH	297.8	328.5	0.4388	-0.0682	0.4171	0.3002
OH	406.8	425.8	0.5214	-0.0481	0.3714	0.7982
C ₂	600.8	600.0	0.8272	-0.0655	0.7104	0.0000
N ₂	910.8	941.6	1.5618	0.3276	1.0085	0.0000
O ₂	492.5	493.6	0.6244	-0.8429	0.6654	0.0000
F ₂	125.3	154.6	-0.0832	-0.7685	0.3202	0.0000
NaH	146.7	197.6	-0.0047	-0.0231	0.0735	0.0188
MgH ₂	197.5	N/A	0.0290	0.0458	0.1140	0.0395
AlH ₃	275.6	280.0	0.1178	0.0160	0.1822	0.0609
SiH ₄	315.4	316.5	0.2639	-0.0881	0.2690	0.0696
PH ₃	302.5	316.8	0.4482	0.0562	0.3478	0.0223
SH ₂	349.4	362.4	0.3812	0.0035	0.3580	0.2070
ClH	417.7	427.8	0.3511	-0.0370	0.3318	0.3073
MgH	121.5	131.6	0.0300	-0.0684	0.1189	0.0380
AlH	276.6	294.3	0.1169	-0.0650	0.1632	0.0537
SiH	270.0	294.8	0.2876	-0.1520	0.2592	0.0530
PH	264.2	277.2	0.4676	-0.2013	0.3470	0.0162
SH	326.3	351.0	0.3730	-0.0158	0.3520	0.1930
H ₂	421.8	432.1	0.3382	-0.0404	0.5444	0.0000
CN	676.5	745.0	0.8574	0.4268	0.5739	0.1148
CO	1080.6	1071.8	1.5553	2.9900	0.7656	0.6036
NO	594.1	627.8	1.5175	-0.3999	0.8993	-0.0718
BO	823.8	800.0	0.7803	1.7357	0.5084	0.5212
BF	744.9	747.2	0.4009	1.7098	0.3686	0.4257
CF	527.4	536.9	0.7969	1.0506	0.4933	0.1586
CO ₂	811.0	799.0	1.4372	0.9154	0.7333	0.3619
Al ₂	111.4	155.0	0.0641	0.0015	0.1025	0.0000
Si ₂	253.9	311.3	0.2023	0.0053	0.2354	0.0000
P ₂	392.4	485.5	0.4031	0.0264	0.3680	0.0000
S ₂	346.1	421.6	0.2544	0.0518	0.3275	0.0000
Cl ₂	172.0	239.3	0.0454	0.0892	0.2222	0.0000