Tables of Overlap Integrals. II.
Bonds between Some First Row and Second Row Atoms

L. Klasinc, D. Schulte-Frohlinde*, and M. Randić

*Institute »Ruđer Bošković«, Zagreb, Croatia, Yugoslavia and
*Kernforschungszentrum Karlsruhe, Institut für Strahlenchemie,
Karlsruhe, Deutschland*

Tables of overlap integrals for some bonds between the first row atoms and the second row atoms are given. They are based on atomic orbitals of Clementi and include the basic overlap integrals of the valence shell orbitals only, *i. e.* overlaps between 2s and 2p orbitals of the first row atoms with 3s and 3p orbitals of the second row atoms. The intervals of interatomic distances are limited so as to cover known variations in bond lengths reported in the, literature.

Overlap integrals are more and more used in qualitative discussions of bonding and molecular structure so that it seems worthwhile to tabulate their values for the most frequent kind of bonds. In fact such bond overlaps are available in tables prepared by Mulliken, Rieke, Orloff and Orloff[1] some time ago which have been since widely used. The tables of Mulliken *et al.* are based on Slater orbitals, and their limitations are in fact due to limited accuracy of Slater orbitals. Recently better functions have become available, of which those given by Clementi[2], which are built of two Slater type functions where before a single exponential function was used, are considerably more accurate and yet do not introduce an excessive amount of computation and are expected to be used in molecular calculations. Clementi functions, *i. e.* the parameters which characterize them are obtained by minimizing energy of atoms, and are orthogonal which is another advantage. Therefore, revised tables of overlap integrals, based on these more satisfactory functions of Clementi may find use. We prepared and published tables of overlap integrals between the elements of the first row atoms[3,4], and wish now to report on the overlap integrals between atoms of the first and the second rows. In the near future we shall report the tables on overlaps between the atoms of the second row, and on the overlap integrals for hydrides of the second row atoms.

In Table I we list the functions of Clementi for the convenience of the reader, since the original publication is not easily available. The functions are shown as a linear combination of Slater-type orbitals Φ_i, the exponent of which is given in brackets. In the remaining tables are listed all basic overlap integrals between 2s and 2p orbital of the first row atoms with the 3s and 3p orbital of the second row atoms, *i. e.* only the overlap of the valence shell orbitals. In particular we consider boron, carbon, nitrogen, oxygen and fluorine from the first row, and silicon, phosphorus, sulphur, and chlorine from the second row atoms. The range of bond distances for which the overlap integrals

TABLE I

Clementi Orbitals for Several First and Second Row Atoms.
Φ_{ns} *and* Φ_{np} *(n = 1, 2, or 3) are normalized Slater type functions the exponents of which are given in brackets.*

Boron:	$\Psi_{2s} = -\,0.25123\ \Phi_{1s}$ (4.30481) $+\ 0.00989\ \Phi_{1s}$ (6.84691) $+$ $+\ 0.18097\ \Phi_{2s}$ (0.88143) $+\ 0.87265\ \Phi_{2s}$ (1.40704)
	$\Psi_{2p} = \qquad 0.83837\ \Phi_{2p}$ (1.00366) $+\ 0.21763\ \Phi_{2p}$ (2.20855)
Carbon:	$\Psi_{2s} = -\,0.27176\ \Phi_{1s}$ (5.23090) $+\ 0.01555\ \Phi_{1s}$ (7.96897) $+$ $+\ 0.27368\ \Phi_{2s}$ (1.16782) $+\ 0.78907\ \Phi_{2s}$ (1.82031) $+$
	$\Psi_{p2} = \qquad 0.80168\ \Phi_{2p}$ (1.25572) $+\ 0.26048\ \Phi_{2p}$ (2.72625)
Nitrogen:	$\Psi_{2s} = -\,0.28596\ \Phi_{1s}$ (6.11863) $+\ 0.01913\ \Phi_{1s}$ (8.93843) $+$ $+\ 0.30811\ \Phi_{2s}$ (1.39327) $+\ 0.76300\ \Phi_{2s}$ (2.22157)
	$\Psi_{2p} = \qquad 0.78256\ \Phi_{2p}$ (1.50585) $+\ 0.28321\ \Phi_{2p}$ (3.26741)
Oxygen:	$\Psi_{2s} = -\,0.30084\ \Phi_{1s}$ (7.06227) $+\ 0.02533\ \Phi_{1s}$ (10.10850) $+$ $+\ 0.32340\ \Phi_{2s}$ (1.62705) $+\ 0.75263\ \Phi_{2s}$ (2.62158)
	$\Psi_{2p} = \qquad 0.74190\ \Phi_{2p}$ (1.65372) $+\ 0.33549\ \Phi_{2p}$ (3.68127)
Fluorine:	$\Psi_{2s} = -\,0.31340\ \Phi_{1s}$ (7.91788) $+\ 0.02923\ \Phi_{1s}$ (11.01100) $+$ $+\ 0.40163\ \Phi_{2s}$ (1.94665) $+\ 0.68011\ \Phi_{2s}$ (3.09603)
	$\Psi_{2p} = \qquad 0.72531\ \Phi_{2p}$ (1.84539) $+\ 0.35754\ \Phi_{2p}$ (4.17099)
Silicon:	$\Psi_{3s} = +\,0.08076\ \Phi_{1s}$ (9.60935) $+\ 0.01924\ \Phi_{1s}$ (14.53720) $-$ $-\ 0.27440\ \Phi_{2s}$ (4.13382) $-\ 0.08971\ \Phi_{2s}$ (6.05401) $+$ $+\ 0.67830\ \Phi_{3s}$ (1.39955) $+\ 0.42977\ \Phi_{3s}$ (2.23938)
	$\Psi_{3p} = -\,0.17507\ \Phi_{2p}$ (4.08524) $-\ 0.05446\ \Phi_{2p}$ (7.81297) $+$ $+\ 0.69577\ \Phi_{3p}$ (1.09340) $+\ 0.38129\ \Phi_{3p}$ (1.86255)
Phosphorus:	$\Psi_{3s} = \qquad 0.11559\ \Phi_{1s}$ (13.54050) $-\ 0.02116\ \Phi_{1s}$ (17.77350) $-$ $-\ 0.41650\ \Phi_{2s}$ (4.50000) $-\ 0.00731\ \Phi_{2s}$ (8.50000) $+$ $+\ 0.77817\ \Phi_{3s}$ (1.63895) $+\ 0.39127\ \Phi_{3s}$ (2.92052)
	$\Psi_{3p} = -\,0.19689\ \Phi_{2p}$ (4.55551) $-\ 0.05826\ \Phi_{2p}$ (8.51709) $+$ $+\ 0.60660\ \Phi_{3p}$ (1.23975) $+\ 0.47850\ \Phi_{3p}$ (2.08127)
Sulphur:	$\Psi_{3s} = +\,0.12585\ \Phi_{1s}$ (13.71740) $-\ 0.01924\ \Phi_{1s}$ (17.69130) $-$ $-\ 0.41437\ \Phi_{2s}$ (4.50000) $-\ 0.07015\ \Phi_{2s}$ (7.00000) $+$ $+\ 0.72311\ \Phi_{3s}$ (1.81513) $+\ 0.48648\ \Phi_{3s}$ (3.15955)
	$\Psi_{3p} = -\,0.20738\ \Phi_{2p}$ (4.90727) $-\ 0.06876\ \Phi_{2p}$ (8.90262) $+$ $+\ 0.55335\ \Phi_{3p}$ (2.33358) $+\ 0.55074\ \Phi_{3p}$ (1.32171)
Chlorine:	$\Psi_{3s} = \qquad 0.10635\ \Phi_{1s}$ (12.05870) $+\ 0.01811\ \Phi_{1s}$ (17.65010) $-$ $-\ 0.34780\ \Phi_{2s}$ (4.92606) $-\ 0.14259\ \Phi_{2s}$ (6.98333) $+$ $+\ 0.69985\ \Phi_{3s}$ (2.00905) $+\ 0.48475\ \Phi_{3s}$ (3.34163)
	$\Psi_{3p} = -\,0.23282\ \Phi_{p2}$ (5.35736) $-\ 0.06743\ \Phi_{2p}$ (9.56702) $+$ $+\ 0.67838\ \Phi_{3p}$ (1.60921) $+\ 0.43171\ \Phi_{3p}$ (2.85870)

have been calculated (summarized in Table II) is selected from the data collected in *Tables of Interatomic Distances*[5]. The limiting values are chosen so that overlap for the extreme case of bond length reported in ref. 5 are possible to consider.

The Tables III—XII are directly photocopied from a computer output. The first column gives the internuclear distance in Angströms, the remaining columns give the basic overlap integrals: (2s, 3s), (2s, 3p), (2p, 3s), (2p, 3p)$_\sigma$

and $(2p, 3p)_\pi$. By letter A is designated the atom from the first row and by letter B the atom from the second row, while the letters S and P at the end of the headings for the last two columns distinguish *sigma* and *pi* overlaps.

TABLE II

The Intervals for the Internuclear Distances (in Ångströms) for which the Basic Overlap Integrals are Tabulated

	Si	P	S	Cl
B	1.50—1.99	1.90—1.99	1.60—1.89	1.60—1.79
C	1.80—1.99	1.50—1.89	1.50—1.99	1.40—1.79
N	1.50—1.79	1.70—2.09	1.40—1.79	1.70—2.09
O	1.50—1.69	1.30—1.09	1.40—1.79	1.30—1.69
F	1.50—1.79	1.30—1.79	1.50—1.69	1.50—1.79

TABLE III

Basic Overlap Integrals for Boron-Silicon Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.52652	0.57068	0.48153	0.10108	0.48168
1.510	0.52283	0.57001	0.48126	0.10670	0.47780
1.520	0.51914	0.56928	0.48094	0.11223	0.47394
1.530	0.51544	0.56850	0.48056	0.11767	0.47009
1.540	0.51175	0.56766	0.48012	0.12303	0.46626
1.550	0.50805	0.56678	0.47963	0.12830	0.46244
1.560	0.50436	0.56585	0.47909	0.13349	0.45864
1.570	0.50066	0.56487	0.47850	0.13859	0.45485
1.580	0.49697	0.56384	0.47785	0.14360	0.45108
1.590	0.49328	0.56276	0.47715	0.14853	0.44732
1.600	0.48959	0.56163	0.47641	0.15338	0.44358
1.610	0.48590	0.56046	0.47561	0.15814	0.43986
1.620	0.48222	0.55924	0.47477	0.16281	0.43615
1.630	0.47853	0.55798	0.47387	0.16740	0.43246
1.640	0.47486	0.55667	0.47294	0.17191	0.42879
1.650	0.47118	0.55532	0.47195	0.17634	0.42514
1.660	0.46751	0.55392	0.47092	0.18068	0.42150
1.670	0.46385	0.55249	0.46985	0.18494	0.41788
1.680	0.46019	0.55101	0.46873	0.18912	0.41428
1.690	0.45654	0.54950	0.46758	0.19321	0.41070
1.700	0.45290	0.54794	0.46638	0.19723	0.40714
1.710	0.44926	0.54634	0.46514	0.20116	0.40359
1.720	0.44562	0.54471	0.46386	0.20502	0.40006
1.730	0.44200	0.54304	0.46254	0.20879	0.39655
1.740	0.43839	0.54133	0.46119	0.21249	0.39306
1.750	0.43478	0.53959	0.45979	0.21611	0.38959
1.760	0.43118	0.53782	0.45836	0.21965	0.38614
1.770	0.42759	0.53600	0.45690	0.22311	0.38271
1.780	0.42401	0.53416	0.45540	0.22650	0.37930
1.790	0.42044	0.53228	0.45387	0.22981	0.37590
1.800	0.41688	0.53037	0.45230	0.23304	0.37253
1.810	0.41333	0.52843	0.45070	0.23620	0.36917
1.820	0.40979	0.52646	0.44907	0.23929	0.36584
1.830	0.40627	0.52446	0.44741	0.24230	0.36252
1.840	0.40275	0.52243	0.44572	0.24524	0.35923
1.850	0.39925	0.52037	0.44401	0.24810	0.35595
1.860	0.39576	0.51828	0.44226	0.25090	0.35270
1.870	0.39228	0.51617	0.44048	0.25362	0.34946
1.880	0.38881	0.51403	0.43868	0.25627	0.34625
1.890	0.38536	0.51187	0.43685	0.25885	0.34305
1.900	0.38192	0.50968	0.43500	0.26136	0.33988
1.910	0.37850	0.50746	0.43312	0.26381	0.33673
1.920	0.37509	0.50523	0.43122	0.26618	0.33359
1.930	0.37169	0.50297	0.42930	0.26849	0.33048
1.940	0.36831	0.50069	0.42735	0.27073	0.32738
1.950	0.36494	0.49839	0.42538	0.27291	0.32431
1.960	0.36159	0.49606	0.42339	0.27502	0.32126
1.970	0.35826	0.49372	0.42138	0.27706	0.31823
1.980	0.35494	0.49136	0.41935	0.27905	0.31522
1.990	0.35163	0.48898	0.41730	0.28096	0.31222

TABLE IV

Basic Overlap Integrals for Boron-Phosphorus Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.900	0.33672	0.44164	0.42958	0.29805	0.29105
1.910	0.33329	0.43910	0.42711	0.29944	0.28797
1.920	0.32988	0.43654	0.42463	0.30076	0.28490
1.930	0.32649	0.43397	0.42212	0.30202	0.28187
1.940	0.32313	0.43138	0.41961	0.30321	0.27885
1.950	0.31978	0.42878	0.41708	0.30434	0.27587
1.960	0.31645	0.42617	0.41454	0.30541	0.27290
1.970	0.31314	0.42355	0.41198	0.30641	0.26996
1.980	0.30986	0.42091	0.40942	0.30736	0.26705
1.990	0.30659	0.41827	0.40684	0.30825	0.26416

TABLE V

Basic Overlap Integrals for Boron-Sulphur Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.600	0.40297	0.46046	0.48955	0.24724	0.35604
1.610	0.39906	0.45853	0.48724	0.25017	0.35228
1.620	0.39516	0.45657	0.48490	0.25300	0.34855
1.630	0.39128	0.45458	0.48253	0.25575	0.34485
1.640	0.38741	0.45255	0.48012	0.25841	0.34118
1.650	0.38356	0.45049	0.47768	0.26098	0.33754
1.660	0.37973	0.44839	0.47522	0.26346	0.33393
1.670	0.37591	0.44627	0.47272	0.26586	0.33034
1.680	0.37211	0.44411	0.47020	0.26817	0.32679
1.690	0.36833	0.44193	0.46765	0.27041	0.32326
1.700	0.36456	0.43972	0.46508	0.27256	0.31976
1.710	0.36082	0.43748	0.46248	0.27463	0.31629
1.720	0.35709	0.43521	0.45986	0.27662	0.31285
1.730	0.35339	0.43292	0.45722	0.27853	0.30944
1.740	0.34970	0.43061	0.45455	0.28037	0.30605
1.750	0.34603	0.42827	0.45187	0.28213	0.30270
1.760	0.34239	0.42591	0.44916	0.28381	0.29937
1.770	0.33876	0.42353	0.44644	0.28542	0.29607
1.780	0.33515	0.42113	0.44370	0.28696	0.29280
1.790	0.33157	0.41871	0.44094	0.28843	0.28956
1.800	0.32801	0.41627	0.43817	0.28982	0.28634
1.810	0.32447	0.41381	0.43538	0.29115	0.28315
1.820	0.32095	0.41133	0.43258	0.29241	0.28000
1.830	0.31745	0.40884	0.42977	0.29360	0.27686
1.840	0.31398	0.40633	0.42694	0.29472	0.27376
1.850	0.31052	0.40381	0.42410	0.29578	0.27069
1.860	0.30709	0.40127	0.42125	0.29677	0.26764
1.870	0.30369	0.39872	0.41839	0.29771	0.26462
1.880	0.30030	0.39616	0.41552	0.29858	0.26162
1.890	0.29694	0.39358	0.41265	0.29938	0.25866

TABLE VI

Basic Overlap Integrals for Boron-Chlorine Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.600	0.36305	0.40448	0.47560	0.27050	0.30939
1.610	0.35919	0.40235	0.47279	0.27259	0.30578
1.620	0.35535	0.40019	0.46996	0.27459	0.30221
1.630	0.35153	0.39801	0.46711	0.27650	0.29866
1.640	0.34774	0.39579	0.46423	0.27833	0.29515
1.650	0.34396	0.39355	0.46133	0.28008	0.29167
1.660	0.34020	0.39129	0.45841	0.28174	0.28822
1.670	0.33647	0.38900	0.45548	0.28332	0.28480
1.680	0.33275	0.38668	0.45252	0.28482	0.28142
1.690	0.32906	0.38434	0.44955	0.28625	0.27806
1.700	0.32539	0.38198	0.44656	0.28759	0.27474
1.710	0.32175	0.37960	0.44355	0.28886	0.27145
1.720	0.31812	0.37720	0.44053	0.29006	0.26818
1.730	0.31452	0.37478	0.43750	0.29118	0.26495
1.740	0.31095	0.37234	0.43446	0.29223	0.26175
1.750	0.30739	0.36989	0.43140	0.29320	0.25859
1.760	0.30387	0.36742	0.42834	0.29411	0.25545
1.770	0.30036	0.36493	0.42526	0.29495	0.25234
1.780	0.29688	0.36243	0.42218	0.29572	0.24926
1.790	0.29343	0.35991	0.41908	0.29643	0.24622

TABLE VII

Basic Overlap Integrals for Carbon-Silicon Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.800	0.34435	0.50287	0.35162	0.25450	0.28241
1.810	0.34087	0.50016	0.34985	0.25639	0.27944
1.820	0.33740	0.49743	0.34805	0.25820	0.27649
1.830	0.33395	0.49468	0.34623	0.25994	0.27356
1.840	0.33052	0.49191	0.34438	0.26162	0.27066
1.850	0.32711	0.48912	0.34252	0.26322	0.26777
1.860	0.32371	0.48632	0.34063	0.26476	0.26492
1.870	0.32033	0.48350	0.33873	0.26624	0.26208
1.880	0.31698	0.48067	0.33681	0.26765	0.25926
1.890	0.31364	0.47782	0.33486	0.26899	0.25647
1.900	0.31032	0.47495	0.33290	0.27027	0.25370
1.910	0.30703	0.47208	0.33093	0.27149	0.25096
1.920	0.30375	0.46919	0.32893	0.27265	0.24823
1.930	0.30049	0.46629	0.32693	0.27375	0.24553
1.940	0.29725	0.46338	0.32490	0.27478	0.24285
1.950	0.29404	0.46046	0.32287	0.27575	0.24020
1.960	0.29084	0.45753	0.32082	0.27668	0.23756
1.970	0.28767	0.45459	0.31876	0.27755	0.23495
1.980	0.28452	0.45164	0.31668	0.27835	0.23236
1.990	0.28139	0.44869	0.31460	0.27911	0.22979

TABLE VIII

Basic Overlap Integrals for Carbon-Phosphorus Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.42077	0.53105	0.41675	0.23428	0.35204
1.510	0.41664	0.52863	0.41521	0.23775	0.34815
1.520	0.41252	0.52617	0.41362	0.24110	0.34428
1.530	0.40841	0.52367	0.41199	0.24435	0.34044
1.540	0.40431	0.52113	0.41031	0.24750	0.33664
1.550	0.40023	0.51855	0.40859	0.25055	0.33286
1.560	0.39616	0.51593	0.40682	0.25349	0.32911
1.570	0.39211	0.51327	0.40502	0.25633	0.32539
1.580	0.38808	0.51058	0.40317	0.25907	0.32170
1.590	0.38406	0.50786	0.40129	0.26172	0.31804
1.600	0.38006	0.50511	0.39937	0.26426	0.31441
1.610	0.37608	0.50232	0.39741	0.26672	0.31080
1.620	0.37211	0.49950	0.39542	0.26907	0.30723
1.630	0.36816	0.49666	0.39340	0.27134	0.30369
1.640	0.36424	0.49378	0.39134	0.27351	0.30018
1.650	0.36033	0.49088	0.38926	0.27559	0.29669
1.660	0.35644	0.48796	0.38714	0.27759	0.29324
1.670	0.35257	0.48501	0.38499	0.27950	0.28982
1.680	0.34872	0.48204	0.38282	0.28132	0.28642
1.690	0.34490	0.47904	0.38062	0.28305	0.28306
1.700	0.34109	0.47603	0.37839	0.28470	0.27972
1.710	0.33731	0.47299	0.37614	0.28627	0.27642
1.720	0.33355	0.46994	0.37387	0.28776	0.27314
1.730	0.32981	0.46686	0.37157	0.28917	0.26989
1.740	0.32609	0.46378	0.36925	0.29049	0.26668
1.750	0.32240	0.46067	0.36692	0.29175	0.26349
1.760	0.31873	0.45755	0.36456	0.29292	0.26033
1.770	0.31509	0.45442	0.36218	0.29402	0.25720
1.780	0.31147	0.45127	0.35979	0.29505	0.25410
1.790	0.30787	0.44811	0.35738	0.29600	0.25103
1.800	0.30430	0.44494	0.35495	0.29689	0.24799
1.810	0.30075	0.44176	0.35251	0.29770	0.24498
1.820	0.29723	0.43858	0.35005	0.29845	0.24199
1.830	0.29373	0.43538	0.34758	0.29912	0.23904
1.840	0.29026	0.43217	0.34510	0.29973	0.23611
1.850	0.28682	0.42896	0.34262	0.30028	0.23321
1.860	0.28340	0.42575	0.34011	0.30076	0.23034
1.870	0.28000	0.42252	0.33759	0.30118	0.22750
1.880	0.27664	0.41930	0.33507	0.30154	0.22469
1.890	0.27329	0.41607	0.33254	0.30184	0.22191

L. KLASINC, D. SCHULTE-FROHLINDE, AND M. RANDIĆ

TABLE IX
Basic Overlap Integrals for Carbon-Sulphur Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.38186	0.49028	0.42624	0.26659	0.32264
1.510	0.37758	0.48750	0.42386	0.26912	0.31873
1.520	0.37332	0.48468	0.42144	0.27156	0.31485
1.530	0.36908	0.48184	0.41899	0.27389	0.31101
1.540	0.36486	0.47896	0.41650	0.27611	0.30720
1.550	0.36067	0.47605	0.41398	0.27824	0.30343
1.560	0.35650	0.47311	0.41143	0.28027	0.29970
1.570	0.35236	0.47015	0.40885	0.28220	0.29600
1.580	0.34824	0.46716	0.40624	0.28404	0.29233
1.590	0.34414	0.46414	0.40360	0.28578	0.28870
1.600	0.34007	0.46110	0.40094	0.28743	0.28511
1.610	0.33602	0.45804	0.39825	0.28899	0.28155
1.620	0.33201	0.45495	0.39554	0.29046	0.27802
1.630	0.32802	0.45185	0.39281	0.29184	0.27453
1.640	0.32405	0.44873	0.39005	0.29314	0.27107
1.650	0.32011	0.44559	0.38727	0.29435	0.26765
1.660	0.31620	0.44243	0.38448	0.29548	0.26426
1.670	0.31232	0.43926	0.38167	0.29653	0.26090
1.680	0.30847	0.43607	0.37884	0.29750	0.25758
1.690	0.30465	0.43287	0.37600	0.29839	0.25430
1.700	0.30085	0.42966	0.37314	0.29920	0.25104
1.710	0.29709	0.42644	0.37027	0.29994	0.24782
1.720	0.29335	0.42320	0.36739	0.30061	0.24463
1.730	0.28964	0.41996	0.36450	0.30120	0.24148
1.740	0.28596	0.41671	0.36159	0.30172	0.23836
1.750	0.28232	0.41345	0.35868	0.30218	0.23527
1.760	0.27870	0.41019	0.35576	0.30256	0.23222
1.770	0.27511	0.40692	0.35284	0.30288	0.22920
1.780	0.27156	0.40365	0.34990	0.30313	0.22621
1.790	0.26803	0.40037	0.34696	0.30332	0.22325
1.800	0.26454	0.39709	0.34402	0.30345	0.22032
1.810	0.26107	0.39381	0.34107	0.30352	0.21743
1.820	0.25764	0.39053	0.33812	0.30353	0.21457
1.830	0.25424	0.38725	0.33517	0.30347	0.21174
1.840	0.25087	0.38397	0.33222	0.30337	0.20894
1.850	0.24753	0.38069	0.32927	0.30320	0.20617
1.860	0.24422	0.37741	0.32631	0.30298	0.20343
1.870	0.24095	0.37413	0.32336	0.30271	0.20072
1.880	0.23770	0.37086	0.32041	0.30239	0.19804
1.890	0.23449	0.36759	0.31746	0.30202	0.19540
1.900	0.23131	0.36433	0.31452	0.30159	0.19278
1.910	0.22815	0.36107	0.31158	0.30112	0.19019
1.920	0.22504	0.35782	0.30864	0.30061	0.18764
1.930	0.22195	0.35458	0.30571	0.30004	0.18511
1.940	0.21889	0.35134	0.30279	0.29943	0.18261
1.950	0.21587	0.34811	0.29987	0.29878	0.18014
1.960	0.21287	0.34490	0.29696	0.29809	0.17770
1.970	0.20991	0.34168	0.29405	0.29735	0.17528
1.980	0.20698	0.33848	0.29115	0.29658	0.17290
1.990	0.20408	0.33529	0.28827	0.29576	0.17054

TABLE X
Basic Overlap Integrals for Carbon-Chlorine Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.400	0.38965	0.46938	0.45097	0.27113	0.32814
1.410	0.38510	0.46664	0.44832	0.27395	0.32388
1.420	0.38058	0.46386	0.44562	0.27665	0.31966
1.430	0.37607	0.46103	0.44288	0.27923	0.31548
1.440	0.37160	0.45817	0.44010	0.28169	0.31134
1.450	0.36715	0.45527	0.43728	0.28403	0.30725
1.460	0.36272	0.45234	0.43443	0.28627	0.30319
1.470	0.35832	0.44937	0.43154	0.28839	0.29917
1.480	0.35394	0.44637	0.42862	0.29040	0.29519
1.490	0.34959	0.44334	0.42567	0.29230	0.29126
1.500	0.34527	0.44028	0.42269	0.29409	0.28736
1.510	0.34098	0.43719	0.41968	0.29579	0.28350
1.520	0.33672	0.43407	0.41664	0.29737	0.27969
1.530	0.33248	0.43094	0.41359	0.29886	0.27591
1.540	0.32827	0.42777	0.41050	0.30025	0.27217
1.550	0.32410	0.42459	0.40740	0.30154	0.26848
1.560	0.31995	0.42138	0.40427	0.30274	0.26482
1.570	0.31584	0.41816	0.40113	0.30385	0.26120
1.580	0.31175	0.41492	0.39797	0.30486	0.25762
1.590	0.30770	0.41166	0.39479	0.30578	0.25408
1.600	0.30368	0.40839	0.39160	0.30662	0.25058
1.610	0.29969	0.40510	0.38840	0.30737	0.24712
1.620	0.29574	0.40180	0.38518	0.30803	0.24369
1.630	0.29181	0.39849	0.38195	0.30862	0.24030
1.640	0.28792	0.39517	0.37871	0.30912	0.23696
1.650	0.28407	0.39184	0.37546	0.30954	0.23365
1.660	0.28024	0.38850	0.37221	0.30989	0.23037
1.670	0.27645	0.38515	0.36895	0.31016	0.22714
1.680	0.27270	0.38180	0.36568	0.31035	0.22394
1.690	0.26898	0.37844	0.36241	0.31048	0.22078
1.700	0.26529	0.37508	0.35913	0.31053	0.21765
1.710	0.26164	0.37172	0.35586	0.31051	0.21456
1.720	0.25802	0.36835	0.35258	0.31043	0.21151
1.730	0.25443	0.36498	0.34930	0.31028	0.20849
1.740	0.25088	0.36162	0.34602	0.31007	0.20551
1.750	0.24737	0.35825	0.34274	0.30979	0.20257
1.760	0.24389	0.35489	0.33947	0.30945	0.19966
1.770	0.24044	0.35153	0.33620	0.30905	0.19678
1.780	0.23703	0.34817	0.33293	0.30860	0.19394
1.790	0.23365	0.34482	0.32967	0.30809	0.19113

TABLE XI

Basic Overlap Integrals for Nitrogen-Silicon Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.39224	0.53841	0.31211	0.17956	0.30002
1.510	0.38852	0.53613	0.31135	0.18279	0.29683
1.520	0.38482	0.53381	0.31054	0.18594	0.29367
1.530	0.38112	0.53144	0.30969	0.18899	0.29052
1.540	0.37742	0.52904	0.30879	0.19195	0.28740
1.550	0.37374	0.52661	0.30784	0.19483	0.28430
1.560	0.37007	0.52413	0.30685	0.19762	0.28122
1.570	0.36641	0.52162	0.30581	0.20032	0.27816
1.580	0.36276	0.51908	0.30474	0.20294	0.27512
1.590	0.35912	0.51650	0.30362	0.20547	0.27211
1.600	0.35550	0.51389	0.30247	0.20792	0.26911
1.610	0.35188	0.51125	0.30128	0.21029	0.26614
1.620	0.34829	0.50858	0.30005	0.21257	0.26320
1.630	0.34470	0.50588	0.29879	0.21478	0.26027
1.640	0.34113	0.50315	0.29749	0.21691	0.25737
1.650	0.33757	0.50039	0.29615	0.21896	0.25449
1.660	0.33403	0.49762	0.29479	0.22093	0.25163
1.670	0.33051	0.49481	0.29339	0.22283	0.24879
1.680	0.32700	0.49199	0.29197	0.22465	0.24598
1.690	0.32351	0.48914	0.29051	0.22640	0.24319
1.700	0.32003	0.48627	0.28903	0.22807	0.24042
1.710	0.31658	0.48338	0.28752	0.22967	0.23768
1.720	0.31314	0.48047	0.28598	0.23121	0.23496
1.730	0.30972	0.47754	0.28442	0.23267	0.23226
1.740	0.30632	0.47460	0.28283	0.23406	0.22958
1.750	0.30294	0.47163	0.28122	0.23539	0.22693
1.760	0.29958	0.46866	0.27959	0.23665	0.22430
1.770	0.29624	0.46567	0.27793	0.23784	0.22169
1.780	0.29292	0.46266	0.27626	0.23897	0.21911
1.790	0.28962	0.45964	0.27456	0.24003	0.21654

TABLE XII

Basic Overlap Integrals for Nitrogen-Phosphorus Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.700	0.28471	0.43936	0.29840	0.27521	0.21624
1.710	0.28112	0.43586	0.29617	0.27576	0.21336
1.720	0.27757	0.43236	0.29393	0.27624	0.21052
1.730	0.27404	0.42885	0.29168	0.27665	0.20770
1.740	0.27054	0.42533	0.28941	0.27700	0.20492
1.750	0.26707	0.42182	0.28713	0.27727	0.20216
1.760	0.26362	0.41830	0.28484	0.27749	0.19944
1.770	0.26021	0.41478	0.28253	0.27764	0.19674
1.780	0.25682	0.41126	0.28022	0.27773	0.19408
1.790	0.25347	0.40774	0.27790	0.27776	0.19144
1.800	0.25014	0.40423	0.27557	0.27773	0.18883
1.810	0.24684	0.40071	0.27323	0.27764	0.18626
1.820	0.24357	0.39720	0.27089	0.27749	0.18371
1.830	0.24033	0.39369	0.26854	0.27730	0.18119
1.840	0.23712	0.39019	0.26619	0.27704	0.17870
1.850	0.23394	0.38669	0.26383	0.27674	0.17623
1.860	0.23080	0.38320	0.26147	0.27638	0.17380
1.870	0.22768	0.37971	0.25911	0.27598	0.17139
1.880	0.22459	0.37624	0.25674	0.27553	0.16901
1.890	0.22152	0.37277	0.25437	0.27503	0.16666
1.900	0.21849	0.36931	0.25201	0.27448	0.16434
1.910	0.21549	0.36585	0.24964	0.27389	0.16204
1.920	0.21252	0.36241	0.24728	0.27325	0.15978
1.930	0.20958	0.35898	0.24491	0.27258	0.15753
1.940	0.20667	0.35556	0.24255	0.27186	0.15532
1.950	0.20379	0.35215	0.24019	0.27110	0.15313
1.960	0.20094	0.34875	0.23784	0.27031	0.15097
1.970	0.19812	0.34537	0.23548	0.26947	0.14883
1.980	0.19533	0.34200	0.23314	0.26860	0.14672
1.990	0.19257	0.33864	0.23079	0.26769	0.14464
2.000	0.18984	0.33530	0.22845	0.26675	0.14258
2.010	0.18714	0.33197	0.22612	0.26578	0.14054
2.020	0.18446	0.32866	0.22380	0.26477	0.13853
2.030	0.18182	0.32536	0.22148	0.26373	0.13655
2.040	0.17921	0.32208	0.21917	0.26266	0.13459
2.050	0.17662	0.31881	0.21686	0.26156	0.13266
2.060	0.17406	0.31556	0.21457	0.26044	0.13074
2.070	0.17154	0.31232	0.21228	0.25928	0.12886
2.080	0.16904	0.30911	0.21000	0.25810	0.12699
2.090	0.16657	0.30591	0.20773	0.25690	0.12515

TABLE XIII

Basic Overlap Integrals for Nitrogen-Sulphur Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.400	0.36977	0.50250	0.37124	0.25735	0.29571
1.410	0.36529	0.49925	0.36910	0.25977	0.29178
1.420	0.36084	0.49595	0.36692	0.26208	0.28788
1.430	0.35641	0.49263	0.36470	0.26427	0.28403
1.440	0.35200	0.48927	0.36243	0.26634	0.28022
1.450	0.34762	0.48588	0.36013	0.26831	0.27644
1.460	0.34327	0.48246	0.35778	0.27017	0.27270
1.470	0.33894	0.47902	0.35541	0.27191	0.26900
1.480	0.33464	0.47555	0.35300	0.27356	0.26534
1.490	0.33037	0.47206	0.35055	0.27510	0.26172
1.500	0.32613	0.46854	0.34808	0.27654	0.25814
1.510	0.32192	0.46500	0.34557	0.27788	0.25459
1.520	0.31774	0.46145	0.34304	0.27912	0.25108
1.530	0.31359	0.45788	0.34048	0.28027	0.24761
1.540	0.30946	0.45429	0.33790	0.28133	0.24418
1.550	0.30537	0.45068	0.33530	0.28229	0.24079
1.560	0.30132	0.44707	0.33267	0.28317	0.23743
1.570	0.29729	0.44344	0.33002	0.28396	0.23412
1.580	0.29330	0.43980	0.32736	0.28466	0.23083
1.590	0.28934	0.43615	0.32467	0.28528	0.22759
1.600	0.28541	0.43249	0.32197	0.28582	0.22438
1.610	0.28151	0.42883	0.31926	0.28627	0.22121
1.620	0.27765	0.42516	0.31653	0.28665	0.21808
1.630	0.27382	0.42148	0.31379	0.28696	0.21498
1.640	0.27003	0.41781	0.31103	0.28719	0.21192
1.650	0.26627	0.41413	0.30827	0.28734	0.20889
1.660	0.26255	0.41045	0.30550	0.28743	0.20590
1.670	0.25886	0.40676	0.30272	0.28745	0.20295
1.680	0.25521	0.40308	0.29993	0.28739	0.20003
1.690	0.25159	0.39941	0.29714	0.28728	0.19715
1.700	0.24800	0.39573	0.29434	0.28710	0.19430
1.710	0.24446	0.39206	0.29154	0.28686	0.19148
1.720	0.24094	0.38839	0.28874	0.28655	0.18870
1.730	0.23747	0.38473	0.28593	0.28619	0.18596
1.740	0.23402	0.38107	0.28312	0.28577	0.18325
1.750	0.23062	0.37743	0.28032	0.28530	0.18057
1.760	0.22725	0.37379	0.27751	0.28477	0.17792
1.770	0.22391	0.37016	0.27471	0.28418	0.17531
1.780	0.22061	0.36654	0.27190	0.28355	0.17273
1.790	0.21735	0.36292	0.26910	0.28286	0.17018

TABLE XIV

Basic Overlap Integrals for Nitrogen-Chlorine Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.700	0.21569	0.34531	0.28265	0.29582	0.16905
1.710	0.21227	0.34152	0.27948	0.29489	0.16633
1.720	0.20890	0.33774	0.27632	0.29391	0.16365
1.730	0.20557	0.33397	0.27316	0.29287	0.16101
1.740	0.20227	0.33022	0.27002	0.29179	0.15841
1.750	0.19902	0.32649	0.26689	0.29066	0.15584
1.760	0.19580	0.32277	0.26377	0.28948	0.15330
1.770	0.19263	0.31907	0.26066	0.28825	0.15080
1.780	0.18950	0.31539	0.25756	0.28698	0.14834
1.790	0.18640	0.31173	0.25448	0.28567	0.14591
1.800	0.18335	0.30808	0.25141	0.28432	0.14352
1.810	0.18034	0.30446	0.24836	0.28293	0.14116
1.820	0.17736	0.30086	0.24532	0.28150	0.13883
1.830	0.17443	0.29728	0.24230	0.28004	0.13654
1.840	0.17153	0.29372	0.23930	0.27854	0.13428
1.850	0.16867	0.29018	0.23631	0.27701	0.13205
1.860	0.16585	0.28666	0.23334	0.27545	0.12986
1.870	0.16307	0.28317	0.23039	0.27385	0.12769
1.880	0.16032	0.27970	0.22746	0.27223	0.12556
1.890	0.15762	0.27626	0.22454	0.27058	0.12346
1.900	0.15495	0.27284	0.22165	0.26890	0.12139
1.910	0.15232	0.26944	0.21877	0.26719	0.11935
1.920	0.14972	0.26607	0.21592	0.26547	0.11735
1.930	0.14716	0.26272	0.21309	0.26371	0.11537
1.940	0.14464	0.25940	0.21027	0.26194	0.11342
1.950	0.14215	0.25610	0.20748	0.26014	0.11150
1.960	0.13970	0.25283	0.20471	0.25833	0.10960
1.970	0.13729	0.24959	0.20196	0.25649	0.10774
1.980	0.13491	0.24637	0.19924	0.25464	0.10591
1.990	0.13256	0.24318	0.19653	0.25277	0.10410
2.000	0.13025	0.24002	0.19385	0.25089	0.10232
2.010	0.12798	0.23688	0.19119	0.24899	0.10057
2.020	0.12573	0.23377	0.18856	0.24707	0.09884
2.030	0.12352	0.23069	0.18594	0.24515	0.09714
2.040	0.12135	0.22763	0.18335	0.24321	0.09547
2.050	0.11920	0.22460	0.18079	0.24126	0.09382
2.060	0.11709	0.22160	0.17825	0.23930	0.09220
2.070	0.11501	0.21863	0.17573	0.23733	0.09060
2.080	0.11297	0.21569	0.17323	0.23535	0.08903
2.090	0.11095	0.21277	0.17076	0.23336	0.08748

TABLE XV

Basic Overlap Integrals for Oxygen-Silicon Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.33708	0.49439	0.26622	0.17612	0.25207
1.510	0.33356	0.49176	0.26542	0.17865	0.24923
1.520	0.33005	0.48910	0.26458	0.18110	0.24640
1.530	0.32655	0.48641	0.26369	0.18347	0.24360
1.540	0.32306	0.48370	0.26276	0.18576	0.24082
1.550	0.31959	0.48095	0.26179	0.18796	0.23806
1.560	0.31612	0.47817	0.26079	0.19008	0.23532
1.570	0.31268	0.47537	0.25974	0.19213	0.23261
1.580	0.30925	0.47254	0.25867	0.19410	0.22991
1.590	0.30583	0.46969	0.25755	0.19599	0.22724
1.600	0.30243	0.46682	0.25640	0.19781	0.22459
1.610	0.29905	0.46392	0.25522	0.19955	0.22196
1.620	0.29568	0.46100	0.25401	0.20122	0.21935
1.630	0.29233	0.45807	0.25277	0.20282	0.21677
1.640	0.28900	0.45511	0.25149	0.20435	0.21421
1.650	0.28569	0.45214	0.25019	0.20580	0.21166
1.660	0.28239	0.44915	0.24886	0.20719	0.20915
1.670	0.27912	0.44615	0.24751	0.20851	0.20665
1.680	0.27587	0.44313	0.24613	0.20976	0.20417
1.690	0.27263	0.44010	0.24472	0.21095	0.20172

TABLE XVI

Basic Overlap Integrals for Oxygen-Phosphorus Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.300	0.39026	0.53151	0.31913	0.18465	0.30619
1.310	0.38609	0.52871	0.31246	0.18841	0.30243
1.320	0.38193	0.52585	0.31173	0.19205	0.29870
1.330	0.37778	0.52294	0.31093	0.19557	0.29500
1.340	0.37364	0.51999	0.31006	0.19896	0.29132
1.350	0.36950	0.51698	0.30914	0.20223	0.28768
1.360	0.36538	0.51393	0.30816	0.20539	0.28407
1.370	0.36127	0.51084	0.30712	0.20842	0.28048
1.380	0.35717	0.50770	0.30603	0.21135	0.27693
1.390	0.35309	0.50453	0.30488	0.21416	0.27341
1.400	0.34902	0.50131	0.30368	0.21685	0.26991
1.410	0.34497	0.49806	0.30243	0.21944	0.26645
1.420	0.34093	0.49478	0.30114	0.22192	0.26302
1.430	0.33691	0.49146	0.29979	0.22429	0.25962
1.440	0.33292	0.48811	0.29840	0.22656	0.25625
1.450	0.32893	0.48473	0.29697	0.22872	0.25292
1.460	0.32497	0.48132	0.29549	0.23078	0.24961
1.470	0.32103	0.47789	0.29397	0.23274	0.24634
1.480	0.31712	0.47443	0.29242	0.23460	0.24309
1.490	0.31322	0.47095	0.29083	0.23637	0.23988
1.500	0.30935	0.46745	0.28919	0.23804	0.23670
1.510	0.30550	0.46393	0.28753	0.23962	0.23355
1.520	0.30167	0.46039	0.28583	0.24110	0.23043
1.530	0.29787	0.45683	0.28410	0.24250	0.22735
1.540	0.29409	0.45325	0.28234	0.24381	0.22429
1.550	0.29034	0.44967	0.28055	0.24503	0.22127
1.560	0.28661	0.44607	0.27873	0.24616	0.21827
1.570	0.28291	0.44245	0.27688	0.24722	0.21531
1.580	0.27924	0.43883	0.27501	0.24819	0.21238
1.590	0.27560	0.43520	0.27312	0.24908	0.20948
1.600	0.27198	0.43156	0.27120	0.24989	0.20661
1.610	0.26839	0.42792	0.26926	0.25063	0.20378
1.620	0.26483	0.42427	0.26730	0.25129	0.20097
1.630	0.26129	0.42061	0.26532	0.25187	0.19819
1.640	0.25779	0.41695	0.26332	0.25239	0.19545
1.650	0.25432	0.41329	0.26130	0.25283	0.19273
1.660	0.25087	0.40963	0.25927	0.25321	0.19005
1.670	0.24746	0.40597	0.25722	0.25352	0.18739
1.680	0.24407	0.40231	0.25516	0.25376	0.18476
1.690	0.24072	0.39865	0.25309	0.25394	0.18217

TABLE XVII

Basic Overlap Integrals for Oxygen-Sulphur Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.400	0.31854	0.47113	0.32122	0.25282	0.25242
1.410	0.31422	0.46734	0.31907	0.25447	0.24883
1.420	0.30994	0.46352	0.31689	0.25600	0.24528
1.430	0.30568	0.45969	0.31467	0.25743	0.24177
1.440	0.30145	0.45583	0.31241	0.25876	0.23830
1.450	0.29726	0.45197	0.31013	0.25999	0.23487
1.460	0.29310	0.44809	0.30781	0.26112	0.23147
1.470	0.28897	0.44419	0.30547	0.26215	0.22812
1.480	0.28488	0.44029	0.30310	0.26308	0.22480
1.490	0.28082	0.43638	0.30070	0.26393	0.22153
1.500	0.27679	0.43246	0.29828	0.26468	0.21829
1.510	0.27280	0.42853	0.29584	0.26535	0.21509
1.520	0.26885	0.42460	0.29338	0.26593	0.21192
1.530	0.26493	0.42067	0.29090	0.26643	0.20880
1.540	0.26105	0.41674	0.28840	0.26685	0.20571
1.550	0.25721	0.41280	0.28588	0.26718	0.20266
1.560	0.25340	0.40886	0.28335	0.26744	0.19965
1.570	0.24963	0.40493	0.28080	0.26763	0.19667
1.580	0.24589	0.40100	0.27824	0.26773	0.19373
1.590	0.24220	0.39708	0.27567	0.26777	0.19083
1.600	0.23854	0.39316	0.27310	0.26774	0.18797
1.610	0.23492	0.38924	0.27051	0.26764	0.18514
1.620	0.23134	0.38534	0.26791	0.26747	0.18234
1.630	0.22780	0.38144	0.26531	0.26724	0.17958
1.640	0.22429	0.37755	0.26270	0.26694	0.17686
1.650	0.22082	0.37367	0.26009	0.26659	0.17417
1.660	0.21740	0.36981	0.25747	0.26617	0.17152
1.670	0.21401	0.36595	0.25486	0.26570	0.16890
1.680	0.21065	0.36211	0.25224	0.26517	0.16631
1.690	0.20734	0.35829	0.24962	0.26459	0.16376
1.700	0.20407	0.35447	0.24700	0.26396	0.16124
1.710	0.20083	0.35068	0.24438	0.26327	0.15876
1.720	0.19763	0.34690	0.24176	0.26254	0.15631
1.730	0.19447	0.34313	0.23915	0.26175	0.15389
1.740	0.19135	0.33939	0.23654	0.26093	0.15150
1.750	0.18827	0.33566	0.23394	0.26005	0.14915
1.760	0.18522	0.33195	0.23134	0.25914	0.14682
1.770	0.18222	0.32826	0.22875	0.25818	0.14453
1.780	0.17925	0.32459	0.22616	0.25718	0.14227
1.790	0.17632	0.32094	0.22358	0.25614	0.14004

TABLE XVIII

Basic Overlap Integrals for Oxygen-Chlorine Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.300	0.33434	0.47461	0.35284	0.26737	0.26971
1.310	0.32955	0.47056	0.35034	0.26938	0.26560
1.320	0.32479	0.46649	0.34780	0.27126	0.26154
1.330	0.32008	0.46239	0.34521	0.27301	0.25753
1.340	0.31540	0.45826	0.34258	0.27463	0.25356
1.350	0.31075	0.45412	0.33991	0.27614	0.24965
1.360	0.30614	0.44995	0.33721	0.27752	0.24577
1.370	0.30158	0.44577	0.33447	0.27879	0.24195
1.380	0.29705	0.44157	0.33171	0.27994	0.23817
1.390	0.29256	0.43736	0.32891	0.28099	0.23444
1.400	0.28811	0.43313	0.32608	0.28192	0.23076
1.410	0.28370	0.42890	0.32323	0.28275	0.22712
1.420	0.27934	0.42466	0.32035	0.28347	0.22352
1.430	0.27501	0.42041	0.31745	0.28409	0.21998
1.440	0.27073	0.41616	0.31453	0.28461	0.21647
1.450	0.26649	0.41190	0.31160	0.28504	0.21302
1.460	0.26229	0.40765	0.30864	0.28537	0.20960
1.470	0.25814	0.40339	0.30567	0.28561	0.20624
1.480	0.25403	0.39914	0.30269	0.28577	0.20291
1.490	0.24996	0.39488	0.29969	0.28583	0.19963
1.500	0.24594	0.39064	0.29669	0.28581	0.19640
1.510	0.24196	0.38640	0.29367	0.28571	0.19320
1.520	0.23803	0.38217	0.29065	0.28553	0.19005
1.530	0.23414	0.37794	0.28762	0.28527	0.18694
1.540	0.23030	0.37373	0.28459	0.28494	0.18388
1.550	0.22650	0.36952	0.28155	0.28453	0.18086
1.560	0.22275	0.36533	0.27851	0.28405	0.17787
1.570	0.21904	0.36116	0.27547	0.28350	0.17493
1.580	0.21538	0.35699	0.27243	0.28289	0.17203
1.590	0.21176	0.35285	0.26939	0.28221	0.16918
1.600	0.20818	0.34872	0.26635	0.28147	0.16636
1.610	0.20466	0.34460	0.26332	0.28066	0.16358
1.620	0.20117	0.34051	0.26029	0.27980	0.16084
1.630	0.19773	0.33643	0.25727	0.27888	0.15814
1.640	0.19434	0.33238	0.25425	0.27791	0.15548
1.650	0.19099	0.32834	0.25124	0.27688	0.15285
1.660	0.18768	0.32433	0.24824	0.27580	0.15027
1.670	0.18442	0.32034	0.24525	0.27467	0.14772
1.680	0.18121	0.31638	0.24227	0.27349	0.14521
1.690	0.17803	0.31243	0.23930	0.27227	0.14273

TABLE XIX

Basic Overlap Integrals for Fluorine-Silicon Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.29142	0.44927	0.22378	0.16779	0.20815
1.510	0.28812	0.44649	0.22297	0.16969	0.20565
1.520	0.28485	0.44369	0.22212	0.17152	0.20317
1.530	0.28158	0.44086	0.22123	0.17327	0.20072
1.540	0.27834	0.43801	0.22030	0.17494	0.19829
1.550	0.27510	0.43514	0.21934	0.17655	0.19587
1.560	0.27189	0.43225	0.21835	0.17808	0.19348
1.570	0.26869	0.42934	0.21732	0.17954	0.19111
1.580	0.26551	0.42642	0.21627	0.18094	0.18876
1.590	0.26234	0.42347	0.21518	0.18226	0.18643
1.600	0.25920	0.42052	0.21406	0.18352	0.18412
1.610	0.25607	0.41755	0.21292	0.18471	0.18183
1.620	0.25296	0.41456	0.21175	0.18584	0.17957
1.630	0.24988	0.41157	0.21056	0.18690	0.17732
1.640	0.24681	0.40856	0.20934	0.18791	0.17510
1.650	0.24376	0.40554	0.20809	0.18885	0.17290
1.660	0.24073	0.40252	0.20682	0.18973	0.17071
1.670	0.23773	0.39948	0.20554	0.19055	0.16855
1.680	0.23475	0.39644	0.20423	0.19131	0.16641
1.690	0.23178	0.39339	0.20290	0.19202	0.16429
1.700	0.22885	0.39034	0.20155	0.19267	0.16220
1.710	0.22593	0.38729	0.20019	0.19327	0.16012
1.720	0.22303	0.38423	0.19881	0.19382	0.15806
1.730	0.22016	0.38116	0.19741	0.19431	0.15603
1.740	0.21732	0.37810	0.19599	0.19475	0.15401
1.750	0.21449	0.37503	0.19457	0.19514	0.15202
1.760	0.21169	0.37197	0.19313	0.19548	0.15005
1.770	0.20891	0.36890	0.19167	0.19577	0.14809
1.780	0.20616	0.36583	0.19021	0.19602	0.14616
1.790	0.20343	0.36277	0.18873	0.19622	0.14425

TABLE XX

Basic Overlap Integrals for Fluorine-Phosphorus Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.300	0.34255	0.49525	0.26774	0.18462	0.25847
1.310	0.33856	0.49209	0.26701	0.18759	0.25508
1.320	0.33458	0.48888	0.26621	0.19043	0.25171
1.330	0.33062	0.48563	0.26535	0.19316	0.24838
1.340	0.32667	0.48235	0.26444	0.19578	0.24507
1.350	0.32273	0.47902	0.26348	0.19829	0.24180
1.360	0.31881	0.47566	0.26246	0.20068	0.23855
1.370	0.31491	0.47227	0.26139	0.20297	0.23534
1.380	0.31102	0.46885	0.26027	0.20515	0.23216
1.390	0.30715	0.46540	0.25910	0.20723	0.22900
1.400	0.30331	0.46192	0.25789	0.20920	0.22588
1.410	0.29948	0.45841	0.25663	0.21107	0.22279
1.420	0.29567	0.45488	0.25534	0.21284	0.21972
1.430	0.29188	0.45133	0.25400	0.21452	0.21669
1.440	0.28812	0.44776	0.25262	0.21610	0.21369
1.450	0.28437	0.44416	0.25120	0.21758	0.21072
1.460	0.28066	0.44056	0.24975	0.21898	0.20779
1.470	0.27696	0.43693	0.24826	0.22028	0.20488
1.480	0.27329	0.43329	0.24674	0.22150	0.20200
1.490	0.26965	0.42964	0.24518	0.22263	0.19916
1.500	0.26603	0.42598	0.24360	0.22367	0.19634
1.510	0.26244	0.42231	0.24199	0.22463	0.19356
1.520	0.25888	0.41863	0.24035	0.22551	0.19080
1.530	0.25534	0.41494	0.23868	0.22631	0.18808
1.540	0.25183	0.41125	0.23699	0.22703	0.18538
1.550	0.24835	0.40755	0.23528	0.22768	0.18272
1.560	0.24490	0.40385	0.23354	0.22825	0.18009
1.570	0.24148	0.40015	0.23178	0.22875	0.17749
1.580	0.23809	0.39644	0.23000	0.22917	0.17491
1.590	0.23472	0.39274	0.22820	0.22953	0.17237
1.600	0.23139	0.38904	0.22639	0.22982	0.16986
1.610	0.22809	0.38534	0.22456	0.23005	0.16738
1.620	0.22481	0.38165	0.22271	0.23021	0.16492
1.630	0.22157	0.37796	0.22085	0.23031	0.16250
1.640	0.21836	0.37427	0.21897	0.23034	0.16010
1.650	0.21518	0.37060	0.21709	0.23032	0.15774
1.660	0.21203	0.36693	0.21519	0.23024	0.15540
1.670	0.20892	0.36326	0.21328	0.23010	0.15309
1.680	0.20583	0.35961	0.21136	0.22991	0.15081
1.690	0.20278	0.35597	0.20943	0.22966	0.14856
1.700	0.19976	0.35234	0.20750	0.22936	0.14633
1.710	0.19677	0.34872	0.20556	0.22901	0.14414
1.720	0.19381	0.34511	0.20361	0.22861	0.14197
1.730	0.19088	0.34152	0.20166	0.22817	0.13983
1.740	0.18799	0.33794	0.19971	0.22768	0.13771
1.750	0.18512	0.33437	0.19775	0.22714	0.13563
1.760	0.18229	0.33082	0.19578	0.22656	0.13357
1.770	0.17950	0.32728	0.19382	0.22593	0.13154
1.780	0.17673	0.32377	0.19186	0.22527	0.12953
1.790	0.17399	0.32026	0.18989	0.22457	0.12755

TABLE XXI

Basic Overlap Integrals for Fluorine-Sulphur Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.23612	0.39356	0.25137	0.24741	0.18120
1.510	0.23242	0.38950	0.24904	0.24750	0.17836
1.520	0.22875	0.38545	0.24670	0.24751	0.17556
1.530	0.22512	0.38140	0.24434	0.24745	0.17279
1.540	0.22153	0.37737	0.24197	0.24732	0.17006
1.550	0.21798	0.37335	0.23959	0.24713	0.16737
1.560	0.21447	0.36934	0.23721	0.24687	0.16471
1.570	0.21100	0.36534	0.23481	0.24654	0.16209
1.580	0.20757	0.36135	0.23241	0.24615	0.15951
1.590	0.20418	0.35738	0.23000	0.24571	0.15696
1.600	0.20083	0.35343	0.22758	0.24520	0.15444
1.610	0.19751	0.34949	0.22517	0.24464	0.15196
1.620	0.19424	0.34556	0.22275	0.24402	0.14952
1.630	0.19101	0.34166	0.22033	0.24335	0.14710
1.640	0.18782	0.33778	0.21791	0.24263	0.14473
1.650	0.18467	0.33391	0.21549	0.24186	0.14238
1.660	0.18156	0.33007	0.21307	0.24105	0.14007
1.670	0.17849	0.32624	0.21065	0.24019	0.13779
1.680	0.17546	0.32244	0.20824	0.23928	0.13554
1.690	0.17246	0.31866	0.20583	0.23833	0.13333

TABLE XXII

Basic Overlap Integrals for Fluorine-Chlorine Bonds

R	S(2S(A),3S(B))	S(2S(A),3P(B))	S(2P(A),3S(B))	S(2P(A),3P(B))S	S(2P(A),3P(B))P
1.500	0.20783	0.35543	0.24972	0.26580	0.16333
1.510	0.20486	0.35108	0.24686	0.26517	0.16049
1.520	0.20053	0.34675	0.24401	0.26447	0.15769
1.530	0.19694	0.34244	0.24115	0.26371	0.15494
1.540	0.19341	0.33816	0.23830	0.26288	0.15222
1.550	0.18992	0.33389	0.23545	0.26200	0.14955
1.560	0.18649	0.32965	0.23260	0.26105	0.14691
1.570	0.18309	0.32543	0.22976	0.26005	0.14432
1.580	0.17975	0.32124	0.22693	0.25900	0.14176
1.590	0.17645	0.31708	0.22410	0.25790	0.13924
1.600	0.17320	0.31294	0.22128	0.25674	0.13676
1.610	0.17000	0.30883	0.21846	0.25554	0.13432
1.620	0.16684	0.30474	0.21566	0.25429	0.13192
1.630	0.16373	0.30069	0.21287	0.25299	0.12956
1.640	0.16066	0.29666	0.21009	0.25165	0.12723
1.650	0.15764	0.29267	0.20732	0.25028	0.12493
1.660	0.15467	0.28870	0.20456	0.24886	0.12268
1.670	0.15174	0.28477	0.20182	0.24740	0.12046
1.680	0.14885	0.28086	0.19909	0.24591	0.11827
1.690	0.14601	0.27699	0.19638	0.24439	0.11612
1.700	0.14322	0.27316	0.19368	0.24283	0.11401
1.710	0.14046	0.26935	0.19100	0.24124	0.11192
1.720	0.13775	0.26558	0.18834	0.23962	0.10988
1.730	0.13509	0.26184	0.18570	0.23797	0.10786
1.740	0.13246	0.25813	0.18307	0.23630	0.10588
1.750	0.12988	0.25446	0.18046	0.23460	0.10393
1.760	0.12734	0.25082	0.17787	0.23287	0.10201
1.770	0.12484	0.24722	0.17530	0.23113	0.10012
1.780	0.12239	0.24365	0.17275	0.22936	0.09827
1.790	0.11997	0.24012	0.17022	0.22757	0.09644

REFERENCES

1. R. S. Mulliken, C. A. Rieke, D. Orloff, and H. Orloff, *J. Chem. Phys.* **17** (1949) 1248.
2. E. Clementi, *Tables of Atomic Functions, a Suplement to IBM Journal of Research and Development* **9** (1965) 2.
3. L. Klasinc, D. Schulte-Frohlinde, and M. Randić, *Theoret. chim. Acta (Berl.)* **8** (1967) 358.
4. L. Klasinc, D. Schulte-Frohlinde, and M. Randić, *Croat. Chem. Acta* **39** (1967) 125.
5. *Tables of Interatomic Distances,* The Chemical Society, *Special Publication* **11** (London, 1958), and **18** (London, 1964).

IZVOD

Tabele integrala prekrivanja. II.
Veze između nekih atoma prve i druge periode

L. Klasinc, D. Schulte-Frohlinde i M. Randić

U radu su prikazane tabele integrala prekrivanja za veze koje čine slijedeći atomi prve periode: B, C, N, O, F s atomima druge periode: Si, P, S, Cl. Kao funkcije odabrane su tzv. Clementijeve orbitale, a razmatrani su samo osnovni integrali prekrivanja valentne ljuske, tj. integrali prekrivanja orbitala 2s i 2p atoma prve periode s orbitalama 3s i 3p atoma druge periode. Interval međuatomskih razmaka odabran je tako da prekriva sve poznate vrijednosti za dužine veza gornjih atoma koje su registrirane u literaturi.

INSTITUT »RUĐER BOŠKOVIĆ«
ZAGREB, JUGOSLAVIJA
       I
KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
INSTITUT FÜR STRAHLENCHEMIE
KARLSRUHE, DEUTSCHLAND