

## Electronic Supplementary Information

### Screening out unfeasible hypothetical zeolite structures via the closest non-adjacent O...O pairs

Junran Lu,<sup>a</sup> Lin Li,<sup>a</sup> Hongxiao Cao,<sup>a</sup> Yi Li<sup>a\*</sup>, Jihong Yu<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> The State Key Laboratory of Inorganic Synthesis and Preparative Chemistry, College of Chemistry, Jilin University, Qianjin Street 2699, Changchun 130012, China.

Corresponding authors' Email: yili@jlu.edu.cn, jihong@jlu.edu.cn

#### Table of contents

Table S1. Framework densities, framework energies relative to  $\alpha$ -quartz, and local interatomic distances for all existing non-interrupted zeolite frameworks.

Table S2. Framework densities, framework energies relative to  $\alpha$ -quartz, FD- $\Delta E$  offsets, and local interatomic distances for 941 hypothetical zeolites selected from Deem\_PCOD database.

Table S3. 153 unfeasible hypothetical frameworks detected by the TTT criteria.

Table S4. Shortest non-adjacent O...O distances for different sizes of rings among 231 existing zeolites.

Table S5. Shortest non-adjacent O...O distances for different sizes of rings among 941 hypothetical zeolites.

**Table S1.** Framework densities, framework energies relative to  $\alpha$ -quartz, and local interatomic distances for all existing non-interrupted zeolite frameworks

Zeolite	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
ABW	18.89	11.69	1.5993	0.0081	0.0197	2.6115	0.0266	0.0803	3.0870	0.0236	0.0578	0.0001	0.0005
ACO	16.99	18.47	1.5978	0.0112	0.0259	2.6091	0.0196	0.0392	3.0981	0.0339	0.0784	0.0003	0.0030
AEI	15.57	16.55	1.6028	0.0032	0.0101	2.6171	0.0307	0.0784	3.0730	0.0141	0.0440	0.0000	0.0025
AEL	19.68	9.97	1.5998	0.0063	0.0256	2.6123	0.0198	0.0885	3.0832	0.0298	0.1251	0.0001	0.0021
AEN	20.69	10.42	1.6029	0.0080	0.0322	2.6171	0.0397	0.1540	3.0674	0.0540	0.1775	0.0002	0.0025
AET	18.18	13.29	1.6027	0.0099	0.0390	2.6168	0.0308	0.1864	3.0695	0.0580	0.1991	0.0001	0.0016
AFG	17.95	13.07	1.5991	0.0062	0.0208	2.6111	0.0238	0.0730	3.0892	0.0177	0.0566	0.0001	0.0004
AFI	18.03	10.78	1.6016	0.0053	0.0137	2.6152	0.0201	0.0658	3.0748	0.0215	0.0555	0.0002	0.0017
AFN	17.96	18.08	1.6064	0.0085	0.0346	2.6231	0.0311	0.1141	3.0531	0.0492	0.1680	0.0001	0.0003
AFO	19.79	9.86	1.6005	0.0061	0.0248	2.6135	0.0221	0.1211	3.0793	0.0267	0.0957	0.0001	0.0022
AFR	15.48	16.73	1.6052	0.0058	0.0232	2.6212	0.0227	0.0768	3.0595	0.0326	0.1039	0.0001	0.0010
AFS	14.85	18.97	1.6064	0.0076	0.0370	2.6231	0.0280	0.0925	3.0540	0.0489	0.1714	0.0001	0.0012
AFT	15.60	16.33	1.6027	0.0030	0.0093	2.6169	0.0294	0.0704	3.0735	0.0185	0.0531	0.0000	0.0026
AFV	16.13	17.42	1.6025	0.0089	0.0312	2.6164	0.0397	0.1416	3.0745	0.0304	0.1185	0.0001	0.0025
AFX	15.60	16.37	1.6027	0.0029	0.0090	2.6169	0.0291	0.0697	3.0736	0.0196	0.0534	0.0000	0.0026
AFY	14.12	27.23	1.6093	0.0135	0.0456	2.6275	0.0405	0.1258	3.0415	0.0873	0.2583	0.0001	0.0027
AHT	19.67	18.48	1.6060	0.0135	0.0486	2.6219	0.0368	0.1904	3.0548	0.0835	0.2500	0.0003	0.0002
ANA	19.90	13.66	1.6036	0.0032	0.0066	2.6184	0.0326	0.0817	3.0666	0.0000	0.0002	0.0001	0.0001
APC	18.38	14.94	1.6001	0.0083	0.0245	2.6125	0.0345	0.1256	3.0848	0.0497	0.1647	0.0002	0.0013
APD	19.34	12.29	1.6010	0.0048	0.0166	2.6143	0.0211	0.0714	3.0787	0.0275	0.1007	0.0002	0.0004
AST	17.53	15.97	1.6013	0.0048	0.0134	2.6148	0.0179	0.0521	3.0786	0.0021	0.0052	0.0002	0.0008
ASV	20.10	21.68	1.6104	0.0083	0.0247	2.6294	0.0249	0.1095	3.0335	0.0613	0.1345	0.0000	0.0003
ATN	18.70	12.30	1.6002	0.0048	0.0129	2.6128	0.0321	0.0927	3.0828	0.0082	0.0265	0.0000	0.0004
ATO	20.00	10.05	1.6020	0.0057	0.0166	2.6158	0.0250	0.0693	3.0718	0.0606	0.1633	0.0001	0.0028
ATS	16.97	12.78	1.6032	0.0055	0.0158	2.6177	0.0265	0.0779	3.0678	0.0256	0.0744	0.0000	0.0009
ATT	18.16	15.11	1.6035	0.0066	0.0266	2.6182	0.0338	0.1130	3.0674	0.0213	0.0628	0.0000	0.0004
ATV	21.07	8.85	1.5994	0.0061	0.0209	2.6117	0.0204	0.0816	3.0840	0.0320	0.1247	0.0001	0.0030
AVL	15.98	17.84	1.6026	0.0082	0.0281	2.6165	0.0396	0.1274	3.0746	0.0327	0.1341	0.0002	0.0029
AWO	18.55	14.00	1.6021	0.0081	0.0261	2.6157	0.0395	0.1538	3.0742	0.0367	0.1435	0.0002	0.0002

Zeolite	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>AWW</b>	17.25	15.00	1.6015	0.0039	0.0101	2.6151	0.0261	0.0755	3.0775	0.0206	0.0615	0.0001	0.0008
<b>BCT</b>	21.06	7.57	1.5992	0.0015	0.0044	2.6113	0.0127	0.0373	3.0843	0.0119	0.0256	0.0002	0.0039
<b>BEA</b>	15.71	14.34	1.6006	0.0038	0.0172	2.6134	0.0283	0.1125	3.0830	0.0410	0.1429	0.0001	0.0016
<b>BEC</b>	15.43	15.93	1.6021	0.0076	0.0314	2.6158	0.0315	0.1138	3.0759	0.0310	0.0999	0.0001	0.0019
<b>BIK</b>	20.81	6.78	1.6019	0.0040	0.0131	2.6158	0.0206	0.0760	3.0705	0.0141	0.0311	0.0002	0.0044
<b>BOF</b>	18.54	11.91	1.6029	0.0050	0.0183	2.6173	0.0305	0.1124	3.0684	0.0238	0.0665	0.0001	0.0016
<b>BOG</b>	16.17	13.90	1.6026	0.0051	0.0238	2.6167	0.0310	0.1273	3.0717	0.0400	0.1532	0.0000	0.0001
<b>BOZ</b>	12.66	45.62	1.6236	0.0077	0.0326	2.6513	0.0165	0.0813	2.9682	0.0338	0.1407	0.0003	0.0002
<b>BPH</b>	14.84	19.11	1.6064	0.0075	0.0360	2.6231	0.0278	0.0914	3.0539	0.0484	0.1724	0.0001	0.0012
<b>BRE</b>	18.43	13.65	1.6033	0.0082	0.0351	2.6180	0.0234	0.0927	3.0676	0.0373	0.1458	0.0001	0.0005
<b>BSV</b>	18.25	38.91	1.6247	0.0061	0.0151	2.6529	0.0168	0.0431	2.9626	0.0136	0.0274	0.0002	0.0005
<b>CAN</b>	18.10	12.86	1.6002	0.0078	0.0269	2.6129	0.0213	0.0861	3.0830	0.0226	0.0758	0.0002	0.0004
<b>CAS</b>	20.84	7.54	1.6001	0.0046	0.0193	2.6126	0.0284	0.1248	3.0801	0.0341	0.1048	0.0000	0.0036
<b>CDO</b>	19.61	13.33	1.6033	0.0089	0.0371	2.6173	0.0528	0.2189	3.0664	0.0502	0.1905	0.0006	0.0017
<b>CFI</b>	18.11	10.63	1.6015	0.0073	0.0285	2.6151	0.0230	0.0982	3.0743	0.0413	0.1633	0.0000	0.0023
<b>CGF</b>	18.76	17.19	1.6076	0.0091	0.0330	2.6249	0.0320	0.1184	3.0462	0.0481	0.1782	0.0000	0.0008
<b>CGS</b>	17.11	19.17	1.6093	0.0054	0.0239	2.6279	0.0237	0.0857	3.0387	0.0252	0.0881	0.0002	0.0002
<b>CHA</b>	15.59	16.26	1.6027	0.0031	0.0087	2.6170	0.0300	0.0694	3.0734	0.0160	0.0405	0.0000	0.0026
<b>CON-</b>	16.06	14.61	1.6026	0.0069	0.0306	2.6167	0.0253	0.1082	3.0720	0.0478	0.1559	0.0000	0.0004
<b>CSV</b>	16.23	16.63	1.6025	0.0061	0.0274	2.6164	0.0304	0.1428	3.0736	0.0434	0.1748	0.0001	0.0015
<b>CZP</b>	20.58	40.79	1.6210	0.0085	0.0260	2.6461	0.0588	0.2056	2.9837	0.0498	0.1298	0.0006	0.0022
<b>DAC</b>	18.74	11.25	1.6004	0.0059	0.0285	2.6131	0.0326	0.1436	3.0815	0.0370	0.1285	0.0001	0.0007
<b>DDR</b>	18.10	11.92	1.5984	0.0054	0.0255	2.6098	0.0306	0.1521	3.0916	0.0372	0.1372	0.0002	0.0003
<b>DFO</b>	15.09	19.15	1.6061	0.0065	0.0271	2.6225	0.0220	0.1175	3.0559	0.0449	0.1640	0.0001	0.0014
<b>DFT</b>	19.06	13.89	1.6035	0.0031	0.0086	2.6184	0.0226	0.0615	3.0672	0.0297	0.0765	0.0001	0.0001
<b>DOH</b>	18.80	10.55	1.5967	0.0039	0.0177	2.6070	0.0210	0.0904	3.0998	0.0320	0.1170	0.0000	0.0008
<b>DON</b>	17.37	10.17	1.5999	0.0048	0.0154	2.6123	0.0199	0.0714	3.0833	0.0343	0.1132	0.0000	0.0014
<b>EAB</b>	16.49	16.37	1.6018	0.0057	0.0164	2.6155	0.0337	0.0952	3.0773	0.0259	0.0723	0.0001	0.0019
<b>EDI</b>	16.64	22.79	1.6046	0.0134	0.0359	2.6202	0.0191	0.0742	3.0665	0.0456	0.1182	0.0003	0.0046
<b>EEI</b>	19.11	10.44	1.5989	0.0071	0.0415	2.6104	0.0331	0.1777	3.0882	0.0464	0.2360	0.0003	0.0015
<b>EMT</b>	13.50	20.08	1.6072	0.0055	0.0162	2.6245	0.0289	0.0858	3.0499	0.0319	0.0739	0.0002	0.0012

Zeolite	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
EON	17.42	14.99	1.6028	0.0080	0.0397	2.6170	0.0315	0.1089	3.0707	0.0412	0.1760	0.0000	0.0000
EPI	18.80	12.03	1.6023	0.0058	0.0206	2.6163	0.0290	0.1133	3.0717	0.0417	0.1323	0.0000	0.0010
ERI	16.51	16.35	1.6021	0.0082	0.0303	2.6159	0.0301	0.0832	3.0756	0.0265	0.1018	0.0001	0.0015
ESV	17.77	13.17	1.5994	0.0049	0.0245	2.6114	0.0355	0.1540	3.0879	0.0241	0.0851	0.0001	0.0006
ETR	15.66	21.09	1.6106	0.0060	0.0255	2.6299	0.0258	0.0910	3.0322	0.0287	0.0939	0.0001	0.0000
EUO	18.27	11.35	1.5996	0.0084	0.0416	2.6116	0.0342	0.1706	3.0851	0.0456	0.2058	0.0002	0.0012
EZT	17.41	16.61	1.6059	0.0055	0.0237	2.6221	0.0273	0.0886	3.0550	0.0480	0.1583	0.0000	0.0003
FAR	17.89	13.10	1.5983	0.0048	0.0212	2.6098	0.0273	0.0742	3.0935	0.0146	0.0594	0.0001	0.0009
FAU	13.50	19.84	1.6074	0.0054	0.0153	2.6247	0.0292	0.0748	3.0490	0.0308	0.0715	0.0002	0.0011
FER	18.72	11.34	1.5996	0.0074	0.0303	2.6118	0.0320	0.1291	3.0855	0.0427	0.1577	0.0000	0.0007
FRA	18.50	12.85	1.6003	0.0044	0.0219	2.6130	0.0322	0.1233	3.0826	0.0258	0.1017	0.0001	0.0000
GIS	17.13	14.95	1.6026	0.0020	0.0040	2.6166	0.0313	0.0695	3.0737	0.0193	0.0386	0.0001	0.0021
GIU	17.94	13.25	1.5980	0.0069	0.0308	2.6092	0.0297	0.1376	3.0950	0.0260	0.1049	0.0000	0.0009
GME	15.62	16.47	1.6027	0.0027	0.0076	2.6169	0.0283	0.0620	3.0736	0.0226	0.0599	0.0000	0.0026
GON	19.35	8.97	1.5999	0.0035	0.0135	2.6123	0.0294	0.1028	3.0822	0.0383	0.1203	0.0000	0.0026
GOO	18.82	19.12	1.6059	0.0103	0.0371	2.6214	0.0559	0.2101	3.0560	0.0375	0.1314	0.0007	0.0008
HEU	17.83	12.48	1.6012	0.0068	0.0272	2.6144	0.0312	0.1212	3.0792	0.0348	0.1118	0.0001	0.0007
IFO	17.34	15.27	1.6066	0.0102	0.0301	2.6232	0.0273	0.1028	3.0504	0.0704	0.2172	0.0001	0.0018
IFR	17.17	14.95	1.6044	0.0062	0.0237	2.6198	0.0213	0.0892	3.0619	0.0312	0.0973	0.0001	0.0008
IFW	16.45	13.61	1.6010	0.0067	0.0298	2.6141	0.0305	0.1259	3.0792	0.0405	0.1485	0.0001	0.0001
IFY	17.47	19.28	1.6068	0.0089	0.0376	2.6236	0.0334	0.1272	3.0511	0.0466	0.1806	0.0000	0.0002
IHW	18.97	10.90	1.6007	0.0078	0.0380	2.6134	0.0309	0.1546	3.0790	0.0484	0.2156	0.0002	0.0019
IMF	18.14	11.27	1.6006	0.0055	0.0335	2.6135	0.0273	0.1303	3.0801	0.0407	0.1906	0.0000	0.0010
IRN	15.90	17.44	1.6008	0.0067	0.0344	2.6138	0.0237	0.1160	3.0825	0.0306	0.1302	0.0001	0.0021
IRR	11.75	24.78	1.6088	0.0120	0.0463	2.6269	0.0276	0.1028	3.0424	0.0726	0.2424	0.0001	0.0013
ISV	15.37	16.39	1.6017	0.0089	0.0433	2.6152	0.0312	0.1116	3.0783	0.0286	0.0944	0.0000	0.0025
ITE	16.41	14.08	1.6011	0.0053	0.0176	2.6142	0.0277	0.0977	3.0797	0.0395	0.1355	0.0000	0.0008
ITG	16.74	13.97	1.6018	0.0069	0.0329	2.6154	0.0297	0.1423	3.0757	0.0316	0.1515	0.0000	0.0005
ITH	17.69	12.47	1.5989	0.0074	0.0336	2.6108	0.0265	0.1313	3.0893	0.0315	0.1233	0.0000	0.0001
ITR	17.68	12.49	1.5989	0.0074	0.0344	2.6107	0.0267	0.1348	3.0897	0.0315	0.1061	0.0000	0.0000
ITT	12.95	19.71	1.6055	0.0113	0.0569	2.6215	0.0326	0.2133	3.0582	0.0612	0.1830	0.0000	0.0010

Zeolite	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
ITW	18.39	14.75	1.6014	0.0068	0.0221	2.6148	0.0268	0.1205	3.0779	0.0261	0.0867	0.0001	0.0004
IWR	15.89	15.53	1.6029	0.0081	0.0368	2.6173	0.0251	0.1044	3.0707	0.0352	0.1404	0.0001	0.0006
IWS	14.98	17.44	1.6025	0.0091	0.0415	2.6166	0.0318	0.1535	3.0737	0.0456	0.1683	0.0000	0.0019
IWV	15.80	14.55	1.6026	0.0084	0.0382	2.6167	0.0287	0.1521	3.0710	0.0516	0.2122	0.0001	0.0002
IWW	16.77	13.84	1.6017	0.0077	0.0343	2.6152	0.0313	0.1601	3.0763	0.0300	0.1451	0.0000	0.0004
JBW	20.19	9.52	1.6000	0.0051	0.0164	2.6126	0.0297	0.0961	3.0817	0.0085	0.0191	0.0001	0.0023
JNT	19.94	18.81	1.6064	0.0111	0.0462	2.6227	0.0475	0.1874	3.0511	0.0490	0.1606	0.0003	0.0016
JOZ	16.40	33.52	1.6164	0.0185	0.0551	2.6395	0.0157	0.0610	3.0017	0.0715	0.1984	0.0003	0.0020
JRY	19.11	12.96	1.6009	0.0135	0.0475	2.6141	0.0275	0.1120	3.0789	0.0476	0.1422	0.0002	0.0010
JSN	17.94	16.30	1.6048	0.0085	0.0356	2.6205	0.0293	0.1180	3.0603	0.0346	0.1218	0.0001	0.0003
JSR	11.99	49.64	1.6268	0.0038	0.0141	2.6559	0.0269	0.1077	2.9516	0.0142	0.0480	0.0002	0.0014
JST	13.64	54.02	1.6280	0.0037	0.0096	2.6581	0.0269	0.1021	2.9455	0.0093	0.0225	0.0001	0.0017
JSW	18.66	16.52	1.6045	0.0091	0.0369	2.6197	0.0329	0.1324	3.0624	0.0487	0.1464	0.0000	0.0000
KFI	15.47	17.21	1.6026	0.0028	0.0065	2.6169	0.0312	0.0736	3.0738	0.0077	0.0203	0.0001	0.0026
LAU	18.28	14.16	1.6047	0.0041	0.0167	2.6203	0.0289	0.0964	3.0605	0.0245	0.0915	0.0001	0.0006
LEV	16.48	15.96	1.6018	0.0062	0.0182	2.6155	0.0345	0.0953	3.0770	0.0247	0.0769	0.0001	0.0018
LIO	17.93	13.12	1.5988	0.0058	0.0206	2.6107	0.0246	0.0762	3.0905	0.0175	0.0557	0.0001	0.0005
LOS	17.90	13.21	1.5983	0.0049	0.0177	2.6099	0.0262	0.0754	3.0932	0.0170	0.0471	0.0001	0.0009
LOV	17.38	24.70	1.6083	0.0128	0.0406	2.6261	0.0256	0.0875	3.0440	0.0642	0.2058	0.0001	0.0005
LTA	14.50	19.21	1.6004	0.0069	0.0168	2.6133	0.0213	0.0629	3.0857	0.0125	0.0308	0.0002	0.0034
LTF	17.35	16.86	1.6044	0.0088	0.0394	2.6197	0.0312	0.1001	3.0630	0.0341	0.1512	0.0001	0.0002
LTJ	19.00	14.72	1.6026	0.0034	0.0105	2.6167	0.0380	0.1239	3.0721	0.0352	0.1169	0.0001	0.0007
LTL	17.06	18.06	1.6052	0.0060	0.0189	2.6210	0.0247	0.0700	3.0584	0.0277	0.1073	0.0001	0.0004
LTN	17.11	14.85	1.5991	0.0064	0.0185	2.6111	0.0316	0.1033	3.0901	0.0331	0.0883	0.0001	0.0014
MAR	17.90	13.10	1.5985	0.0052	0.0213	2.6101	0.0266	0.0739	3.0925	0.0155	0.0593	0.0001	0.0007
MAZ	17.18	17.07	1.6055	0.0088	0.0359	2.6215	0.0308	0.0846	3.0572	0.0373	0.1360	0.0001	0.0003
MEI	14.82	18.80	1.6063	0.0093	0.0404	2.6228	0.0290	0.1090	3.0545	0.0454	0.2087	0.0001	0.0009
MEL	18.09	10.39	1.6004	0.0053	0.0220	2.6130	0.0337	0.1475	3.0811	0.0357	0.1266	0.0002	0.0010
MEP	19.77	9.19	1.5975	0.0057	0.0251	2.6084	0.0236	0.1089	3.0942	0.0306	0.1208	0.0000	0.0022
MER	16.96	16.22	1.6044	0.0031	0.0077	2.6197	0.0320	0.0747	3.0642	0.0169	0.0443	0.0000	0.0016
MFI	18.27	9.64	1.6006	0.0046	0.0222	2.6134	0.0303	0.1398	3.0796	0.0341	0.1536	0.0001	0.0016

<b>Zeolite</b>	<b>FD</b> (T nm <sup>-3</sup> )	<b><math>\Delta E</math></b> (kJ mol <sup>-1</sup> )	<b><math>\langle D_{TO} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{TO}</math></b> (Å)	<b><math>R_{TO}</math></b> (Å)	<b><math>\langle D_{OO} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>R_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>\langle D_{TT} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{TT}</math></b> (Å)	<b><math>R_{TT}</math></b> (Å)	<b><math>\epsilon_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>\epsilon_{TT}</math></b> (Å)
<b>MFS</b>	18.41	12.50	1.6000	0.0074	0.0336	2.6124	0.0288	0.1392	3.0840	0.0443	0.1772	0.0001	0.0002
<b>MON</b>	18.95	13.38	1.6034	0.0070	0.0165	2.6180	0.0255	0.0712	3.0678	0.0306	0.0673	0.0000	0.0001
<b>MOR</b>	17.75	12.24	1.5988	0.0043	0.0150	2.6105	0.0303	0.1128	3.0906	0.0407	0.1292	0.0000	0.0004
<b>MOZ</b>	17.30	17.65	1.6042	0.0070	0.0354	2.6194	0.0269	0.0868	3.0638	0.0272	0.1749	0.0000	0.0002
<b>MRE</b>	20.18	7.66	1.6005	0.0060	0.0237	2.6134	0.0203	0.0919	3.0777	0.0383	0.1369	0.0001	0.0039
<b>MSE</b>	16.83	13.45	1.6008	0.0082	0.0401	2.6137	0.0339	0.1583	3.0809	0.0410	0.1694	0.0001	0.0007
<b>MSO</b>	18.71	11.95	1.6003	0.0043	0.0191	2.6130	0.0321	0.1102	3.0819	0.0091	0.0319	0.0000	0.0009
<b>MTF</b>	21.37	8.50	1.6009	0.0067	0.0357	2.6138	0.0353	0.1360	3.0774	0.0394	0.1586	0.0002	0.0024
<b>MTN</b>	19.31	10.20	1.5970	0.0053	0.0265	2.6076	0.0250	0.1274	3.0974	0.0379	0.1610	0.0001	0.0014
<b>MTT</b>	19.77	8.71	1.6002	0.0047	0.0205	2.6129	0.0262	0.1096	3.0802	0.0291	0.0919	0.0000	0.0031
<b>MTW</b>	19.03	9.18	1.5999	0.0046	0.0233	2.6123	0.0287	0.1291	3.0822	0.0404	0.1666	0.0000	0.0025
<b>MVY</b>	21.04	18.89	1.6104	0.0087	0.0309	2.6289	0.0381	0.1519	3.0307	0.0727	0.2416	0.0004	0.0028
<b>MWF</b>	16.65	16.27	1.6039	0.0050	0.0187	2.6187	0.0337	0.1073	3.0673	0.0111	0.0493	0.0001	0.0019
<b>MWW</b>	16.62	14.33	1.6011	0.0081	0.0455	2.6142	0.0280	0.1045	3.0804	0.0512	0.1824	0.0001	0.0015
<b>NAB</b>	16.23	32.74	1.6141	0.0140	0.0304	2.6355	0.0146	0.0369	3.0153	0.0660	0.1368	0.0001	0.0001
<b>NAT</b>	17.61	21.41	1.6076	0.0091	0.0261	2.6251	0.0227	0.0711	3.0500	0.0116	0.0310	0.0002	0.0031
<b>NES</b>	17.78	12.74	1.6014	0.0097	0.0411	2.6145	0.0368	0.1806	3.0766	0.0512	0.2506	0.0003	0.0006
<b>NON</b>	19.50	9.79	1.5979	0.0076	0.0405	2.6091	0.0254	0.1257	3.0924	0.0377	0.1832	0.0000	0.0020
<b>NPO</b>	17.44	24.18	1.6128	0.0140	0.0309	2.6335	0.0188	0.0585	3.0172	0.0527	0.1124	0.0001	0.0041
<b>NPT</b>	13.42	41.65	1.6198	0.0127	0.0366	2.6450	0.0172	0.0487	2.9873	0.0600	0.1621	0.0002	0.0002
<b>NSI</b>	20.96	6.94	1.6004	0.0055	0.0184	2.6131	0.0281	0.1180	3.0781	0.0321	0.0909	0.0001	0.0040
<b>OBW</b>	12.53	46.51	1.6239	0.0073	0.0360	2.6517	0.0152	0.0525	2.9671	0.0384	0.1806	0.0003	0.0000
<b>OFF</b>	16.50	16.73	1.6020	0.0080	0.0292	2.6158	0.0298	0.0762	3.0761	0.0284	0.0986	0.0000	0.0016
<b>OKO</b>	17.76	13.84	1.6022	0.0081	0.0402	2.6156	0.0412	0.2095	3.0729	0.0590	0.2268	0.0005	0.0003
<b>OSI</b>	19.07	9.70	1.6018	0.0062	0.0242	2.6156	0.0210	0.0717	3.0721	0.0094	0.0318	0.0001	0.0032
<b>OSO</b>	12.80	55.42	1.6284	0.0015	0.0035	2.6588	0.0407	0.1197	2.9435	0.0011	0.0023	0.0000	0.0015
<b>OWE</b>	17.72	15.94	1.6028	0.0093	0.0349	2.6171	0.0300	0.1003	3.0723	0.0312	0.1116	0.0001	0.0016
<b>PAU</b>	16.50	16.51	1.6041	0.0047	0.0169	2.6192	0.0339	0.1031	3.0659	0.0106	0.0381	0.0000	0.0020
<b>PCR</b>	19.31	10.35	1.5981	0.0061	0.0269	2.6093	0.0333	0.1689	3.0926	0.0401	0.1540	0.0001	0.0009
<b>PHI</b>	17.00	15.69	1.6038	0.0031	0.0087	2.6186	0.0319	0.0874	3.0674	0.0169	0.0528	0.0000	0.0018
<b>PON</b>	18.39	15.49	1.6031	0.0101	0.0391	2.6175	0.0334	0.1283	3.0696	0.0571	0.1777	0.0001	0.0005

<b>Zeolite</b>	<b>FD</b> (T nm <sup>-3</sup> )	<b><math>\Delta E</math></b> (kJ mol <sup>-1</sup> )	<b><math>\langle D_{TO} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{TO}</math></b> (Å)	<b><math>R_{TO}</math></b> (Å)	<b><math>\langle D_{OO} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>R_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>\langle D_{TT} \rangle</math></b> (Å)	<b><math>\sigma_{TT}</math></b> (Å)	<b><math>R_{TT}</math></b> (Å)	<b><math>\epsilon_{OO}</math></b> (Å)	<b><math>\epsilon_{TT}</math></b> (Å)
<b>POS</b>	15.83	16.61	1.6017	0.0103	0.0418	2.6154	0.0258	0.1047	3.0767	0.0476	0.1942	0.0001	0.0009
<b>PSI</b>	20.52	9.27	1.6004	0.0070	0.0300	2.6132	0.0225	0.1322	3.0793	0.0320	0.1313	0.0001	0.0031
<b>PUN</b>	15.12	30.67	1.6158	0.0114	0.0358	2.6381	0.0256	0.1023	3.0071	0.0538	0.1759	0.0001	0.0001
<b>RHO</b>	14.89	18.24	1.6055	0.0023	0.0049	2.6215	0.0363	0.0826	3.0594	0.0017	0.0037	0.0001	0.0022
<b>RRO</b>	18.04	15.32	1.6008	0.0109	0.0380	2.6134	0.0467	0.2747	3.0817	0.0569	0.1753	0.0003	0.0012
<b>RSN</b>	17.41	24.67	1.6086	0.0129	0.0418	2.6266	0.0254	0.0919	3.0427	0.0626	0.2029	0.0001	0.0004
<b>RTE</b>	17.58	12.64	1.6001	0.0064	0.0224	2.6126	0.0305	0.1018	3.0840	0.0216	0.0705	0.0000	0.0001
<b>RTH</b>	16.43	13.95	1.6009	0.0052	0.0159	2.6139	0.0281	0.1069	3.0807	0.0387	0.1303	0.0001	0.0008
<b>RUT</b>	18.28	12.35	1.5992	0.0048	0.0174	2.6112	0.0301	0.1043	3.0882	0.0203	0.0632	0.0000	0.0002
<b>RWR</b>	20.19	13.47	1.6025	0.0098	0.0298	2.6164	0.0292	0.1064	3.0694	0.0506	0.1375	0.0002	0.0024
<b>SAF</b>	19.31	10.06	1.6014	0.0070	0.0239	2.6148	0.0207	0.0836	3.0747	0.0394	0.1286	0.0001	0.0028
<b>SAO</b>	14.16	20.42	1.6070	0.0079	0.0277	2.6240	0.0333	0.1327	3.0516	0.0331	0.1298	0.0000	0.0018
<b>SAS</b>	16.00	15.85	1.6003	0.0036	0.0091	2.6131	0.0301	0.0826	3.0848	0.0161	0.0572	0.0000	0.0022
<b>SAT</b>	16.90	15.68	1.6012	0.0087	0.0287	2.6145	0.0288	0.0863	3.0795	0.0323	0.0967	0.0001	0.0011
<b>SAV</b>	15.54	17.20	1.6028	0.0049	0.0150	2.6170	0.0328	0.1002	3.0732	0.0141	0.0650	0.0000	0.0026
<b>SBE</b>	13.97	18.87	1.6067	0.0047	0.0194	2.6236	0.0261	0.1114	3.0526	0.0336	0.0986	0.0001	0.0015
<b>SBN</b>	16.38	28.28	1.6102	0.0135	0.0483	2.6293	0.0161	0.0526	3.0373	0.0574	0.1930	0.0002	0.0028
<b>SBS</b>	13.90	20.09	1.6074	0.0055	0.0214	2.6247	0.0203	0.0833	3.0500	0.0425	0.1251	0.0002	0.0019
<b>SBT</b>	13.90	19.93	1.6075	0.0052	0.0193	2.6249	0.0199	0.0739	3.0491	0.0407	0.1171	0.0002	0.0017
<b>SEW</b>	16.68	13.86	1.6015	0.0089	0.0436	2.6149	0.0328	0.1424	3.0768	0.0479	0.1662	0.0001	0.0001
<b>SFE</b>	18.40	11.31	1.6035	0.0073	0.0329	2.6183	0.0268	0.0958	3.0645	0.0465	0.2075	0.0000	0.0024
<b>SFF</b>	17.65	13.49	1.6032	0.0055	0.0281	2.6176	0.0351	0.1516	3.0676	0.0407	0.1764	0.0002	0.0006
<b>SFG</b>	18.23	10.49	1.5994	0.0055	0.0283	2.6115	0.0257	0.1461	3.0859	0.0351	0.1350	0.0000	0.0013
<b>SFH</b>	17.56	12.05	1.6027	0.0071	0.0286	2.6170	0.0241	0.1008	3.0693	0.0493	0.2038	0.0001	0.0017
<b>SFN</b>	17.62	11.46	1.6035	0.0069	0.0296	2.6182	0.0247	0.1170	3.0650	0.0510	0.1950	0.0001	0.0022
<b>SFO</b>	15.49	16.58	1.6053	0.0057	0.0231	2.6212	0.0226	0.0742	3.0595	0.0309	0.1021	0.0001	0.0011
<b>SFS</b>	16.94	12.10	1.6007	0.0048	0.0210	2.6135	0.0320	0.1323	3.0805	0.0430	0.1754	0.0001	0.0004
<b>SFV</b>	17.93	10.86	1.5997	0.0048	0.0245	2.6118	0.0320	0.1596	3.0851	0.0376	0.1653	0.0002	0.0006
<b>SFW</b>	15.61	16.40	1.6027	0.0028	0.0089	2.6169	0.0289	0.0692	3.0736	0.0206	0.0592	0.0000	0.0026
<b>SGT</b>	18.08	12.88	1.5993	0.0073	0.0267	2.6116	0.0162	0.0572	3.0869	0.0494	0.1706	0.0002	0.0008
<b>SIV</b>	17.06	15.33	1.6032	0.0028	0.0100	2.6176	0.0318	0.0847	3.0706	0.0183	0.0574	0.0001	0.0020

Zeolite	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
SOD	17.81	13.05	1.5972	0.0000	0.0001	2.6080	0.0310	0.0660	3.0996	0.0000	0.0001	0.0001	0.0015
SOF	16.98	18.65	1.6055	0.0070	0.0302	2.6215	0.0234	0.1284	3.0581	0.0367	0.1110	0.0001	0.0007
SOS	17.20	45.77	1.6241	0.0196	0.0636	2.6508	0.0440	0.1748	2.9636	0.0889	0.3334	0.0010	0.0024
SSF	17.31	12.34	1.6001	0.0041	0.0173	2.6126	0.0301	0.1027	3.0830	0.0413	0.1332	0.0001	0.0005
SSY	18.45	11.30	1.6038	0.0071	0.0334	2.6187	0.0277	0.1266	3.0634	0.0451	0.1924	0.0000	0.0024
STF	17.75	13.17	1.6039	0.0056	0.0247	2.6187	0.0329	0.1348	3.0641	0.0392	0.1605	0.0001	0.0010
STI	17.17	14.70	1.6029	0.0073	0.0323	2.6174	0.0294	0.1404	3.0714	0.0322	0.1305	0.0001	0.0015
STO	18.72	9.65	1.6000	0.0054	0.0237	2.6126	0.0226	0.1152	3.0820	0.0316	0.1591	0.0000	0.0020
STT	16.91	14.66	1.6008	0.0074	0.0377	2.6135	0.0334	0.1650	3.0815	0.0475	0.1997	0.0002	0.0011
STW	16.46	19.94	1.6040	0.0064	0.0287	2.6189	0.0310	0.1207	3.0670	0.0513	0.1649	0.0001	0.0021
SVV	17.99	13.72	1.5999	0.0053	0.0177	2.6123	0.0267	0.1096	3.0851	0.0187	0.0641	0.0001	0.0002
SZR	18.44	12.64	1.5999	0.0051	0.0177	2.6123	0.0317	0.1123	3.0845	0.0310	0.1369	0.0001	0.0001
TER	17.93	12.27	1.6008	0.0060	0.0252	2.6138	0.0290	0.1471	3.0800	0.0438	0.1913	0.0001	0.0002
THO	16.64	22.54	1.6045	0.0135	0.0369	2.6202	0.0192	0.0752	3.0664	0.0453	0.1182	0.0003	0.0044
TOL	17.87	13.44	1.5973	0.0073	0.0336	2.6081	0.0298	0.1503	3.0985	0.0257	0.1035	0.0000	0.0011
TON	19.79	8.32	1.6002	0.0033	0.0160	2.6128	0.0240	0.0847	3.0803	0.0241	0.0721	0.0001	0.0031
TSC	13.55	19.42	1.6051	0.0048	0.0135	2.6209	0.0279	0.0760	3.0615	0.0287	0.1020	0.0001	0.0021
TUN	17.79	11.90	1.6011	0.0057	0.0257	2.6142	0.0310	0.1397	3.0782	0.0424	0.2263	0.0001	0.0007
UEI	18.54	14.18	1.6022	0.0079	0.0255	2.6159	0.0389	0.1498	3.0735	0.0366	0.1407	0.0002	0.0001
UFI	15.67	16.93	1.6004	0.0065	0.0202	2.6133	0.0273	0.0959	3.0840	0.0373	0.0949	0.0001	0.0020
UOS	17.98	15.48	1.6007	0.0085	0.0258	2.6136	0.0228	0.0928	3.0818	0.0319	0.1234	0.0001	0.0008
UOV	16.54	14.74	1.6023	0.0082	0.0429	2.6162	0.0313	0.1821	3.0734	0.0390	0.1920	0.0000	0.0005
UOZ	19.56	20.55	1.6088	0.0080	0.0292	2.6270	0.0197	0.0864	3.0407	0.0516	0.1327	0.0001	0.0004
USI	16.03	20.20	1.6093	0.0073	0.0244	2.6277	0.0293	0.1333	3.0391	0.0491	0.1668	0.0001	0.0003
UTL	15.80	15.26	1.6030	0.0083	0.0356	2.6171	0.0346	0.1534	3.0697	0.0590	0.2567	0.0002	0.0001
UWY	16.81	13.93	1.6005	0.0069	0.0334	2.6133	0.0268	0.1651	3.0820	0.0394	0.1735	0.0000	0.0004
VET	20.22	7.91	1.6035	0.0069	0.0239	2.6181	0.0284	0.1135	3.0622	0.0440	0.1447	0.0000	0.0051
VFI	14.93	19.27	1.6057	0.0126	0.0410	2.6214	0.0422	0.1746	3.0569	0.0742	0.1894	0.0004	0.0007
VNI	17.99	22.68	1.6074	0.0146	0.0511	2.6246	0.0273	0.1232	3.0476	0.0610	0.2144	0.0001	0.0005
VSV	17.54	24.49	1.6095	0.0121	0.0371	2.6281	0.0248	0.1009	3.0376	0.0588	0.1551	0.0001	0.0001
WEI	16.21	34.54	1.6181	0.0098	0.0255	2.6422	0.0156	0.0647	2.9941	0.0404	0.0978	0.0002	0.0016



<b>Zeolite</b>	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>YUG</b>	18.91	11.66	1.6005	0.0049	0.0198	2.6133	0.0319	0.1063	3.0810	0.0310	0.1017	0.0000	0.0007
<b>ZON</b>	17.92	16.52	1.6047	0.0084	0.0354	2.6203	0.0288	0.1187	3.0610	0.0347	0.1279	0.0001	0.0001

**Table S2.** Framework densities, framework energies relative to  $\alpha$ -quartz, FD– $\Delta E$  offsets, and local interatomic distances for 941 hypothetical zeolites selected from Deem\_PCOD database. Unfeasible structures detected by the LID criteria are underlined.

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8312971</b>	10.06	27.68	1.35	1.6098	0.0099	2.6287	0.0232	3.0391	0.0748	0.0320	0.1005	0.2065	0.0002	0.0029
<b>PCOD8329332</b>	10.19	19.61	4.03	1.6042	0.0057	2.6195	0.0209	3.0667	0.0597	0.0182	0.0728	0.1745	0.0001	0.0030
<b>PCOD8322921</b>	10.20	22.95	1.74	1.6060	0.0106	2.6224	0.0274	3.0569	0.0720	0.0376	0.0957	0.2196	0.0001	0.0021
<b>PCOD8321585</b>	10.21	19.33	4.21	1.6022	0.0081	2.6163	0.0187	3.0763	0.0688	0.0251	0.0900	0.1771	0.0002	0.0030
<b>PCOD8326122</b>	10.27	23.01	1.63	1.6097	0.0115	2.6284	0.0283	3.0405	0.0865	0.0327	0.1268	0.2336	0.0001	0.0036
<b>PCOD8330856</b>	10.27	29.47	2.79	1.6105	0.0150	2.6295	0.0402	3.0337	0.0884	0.0443	0.1548	0.2635	0.0000	0.0007
<b>PCOD8200794</b>	10.29	27.04	1.15	1.6087	0.0110	2.6268	0.0305	3.0444	0.0773	0.0377	0.1398	0.2546	0.0001	0.0029
<b>PCOD8329851</b>	10.38	23.90	0.91	1.6070	0.0140	2.6236	0.0374	3.0514	0.0758	0.0469	0.1249	0.2515	0.0002	0.0013
<u><b>PCOD8327563</b></u>	10.40	23.78	0.97	1.6051	0.0100	2.6204	0.0426	3.0633	<u>0.0896</u>	0.0444	0.1992	0.2763	0.0004	0.0041
<b>PCOD8292630</b>	10.42	27.62	1.68	1.6092	0.0137	2.6273	0.0442	3.0425	0.0802	0.0579	0.2187	0.2396	0.0002	0.0033
<b>PCOD8196363</b>	10.47	27.18	1.43	1.6082	0.0115	2.6261	0.0255	3.0467	0.0828	0.0363	0.1294	0.2500	0.0002	0.0029
<b>PCOD8200851</b>	10.53	23.18	1.25	1.6070	0.0083	2.6241	0.0211	3.0525	0.0709	0.0324	0.0855	0.2366	0.0002	0.0026
<b>PCOD8200684</b>	10.55	29.85	3.33	1.6105	0.0121	2.6295	0.0353	3.0360	0.0868	0.0542	0.2537	0.3268	0.0000	0.0030
<b>PCOD8313092</b>	10.56	28.92	2.71	1.6090	0.0104	2.6273	0.0277	3.0433	0.0783	0.0326	0.1216	0.2099	0.0001	0.0032
<u><b>PCOD8321996</b></u>	10.61	26.92	1.39	1.6039	0.0112	2.6173	<u>0.0676</u>	3.0704	0.0888	0.0378	<u>0.3186</u>	0.2591	<u>0.0015</u>	<u>0.0053</u>
<b>PCOD8320054</b>	10.64	29.32	3.07	1.6088	0.0133	2.6268	0.0365	3.0433	0.0861	0.0452	0.1625	0.2581	0.0001	0.0024
<b>PCOD8315654</b>	10.66	29.47	3.18	1.6118	0.0138	2.6317	0.0405	3.0265	0.0884	0.0554	0.2714	0.3301	0.0001	0.0002
<b>PCOD8261270</b>	10.68	25.31	0.35	1.6074	0.0099	2.6247	0.0265	3.0512	0.0712	0.0319	0.0968	0.2098	0.0001	0.0033
<b>PCOD8319194</b>	10.69	19.04	3.93	1.6033	0.0059	2.6180	0.0153	3.0708	0.0701	0.0181	0.0858	0.1811	0.0002	0.0026
<b>PCOD8274922</b>	10.71	27.37	1.80	1.6091	0.0103	2.6275	0.0277	3.0428	0.0830	0.0361	0.1266	0.2535	0.0001	0.0033
<u><b>PCOD8320524</b></u>	10.75	28.38	2.53	1.6078	0.0126	2.6251	0.0341	3.0494	<u>0.0897</u>	0.0411	0.1575	0.2549	0.0001	0.0033
<b>PCOD8292620</b>	10.76	28.73	2.78	1.6108	0.0106	2.6303	0.0271	3.0341	0.0875	0.0367	0.0999	0.2476	0.0001	0.0029
<b>PCOD8327293</b>	10.77	22.72	1.33	1.6074	0.0096	2.6246	0.0285	3.0497	0.0724	0.0306	0.1082	0.2334	0.0001	0.0017
<u><b>PCOD8322015</b></u>	10.81	29.31	3.22	1.6124	0.0164	2.6319	0.0537	3.0267	<u>0.1155</u>	0.0519	0.2001	0.3295	0.0008	0.0034
<u><b>PCOD8327476</b></u>	10.87	28.17	2.51	1.6111	0.0135	2.6305	0.0321	3.0317	<u>0.0930</u>	0.0508	0.1338	0.2934	0.0001	0.0019
<b>PCOD8323834</b>	10.91	27.63	2.17	1.6103	0.0122	2.6294	0.0330	3.0358	0.0825	0.0552	0.1669	0.2834	0.0000	0.0023
<b>PCOD8308288</b>	10.92	24.83	0.27	1.6087	0.0092	2.6269	0.0251	3.0436	0.0695	0.0334	0.1031	0.2313	0.0001	0.0023
<b>PCOD8307691</b>	10.93	22.95	1.01	1.6079	0.0079	2.6255	0.0232	3.0479	0.0659	0.0288	0.0933	0.2130	0.0002	0.0022

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8318323</b>	10.93	29.37	3.38	1.6100	0.0125	2.6283	0.0445	3.0372	0.0753	0.0429	0.1890	0.2785	0.0005	0.0019
<b>PCOD8325055</b>	10.94	25.84	0.98	1.6071	0.0120	2.6242	0.0280	3.0513	0.0843	0.0372	0.0970	0.2345	0.0001	0.0019
<b>PCOD8329781</b>	10.95	25.89	1.02	1.6096	0.0109	2.6282	0.0286	3.0404	0.0813	0.0330	0.0891	0.2311	0.0001	0.0031
<b>PCOD8307129</b>	10.95	24.19	0.14	1.6079	0.0095	2.6254	0.0280	3.0480	0.0727	0.0344	0.1246	0.2308	0.0001	0.0023
<b><u>PCOD8316367</u></b>	10.96	28.86	3.06	1.6097	0.0175	2.6272	<u>0.0670</u>	3.0388	0.0806	<u>0.0699</u>	<u>0.2984</u>	0.2876	0.0010	0.0020
<b>PCOD8322022</b>	10.97	28.89	3.09	1.6095	0.0119	2.6280	0.0313	3.0405	0.0880	0.0401	0.1370	0.2690	0.0000	0.0029
<b>PCOD8200818</b>	10.97	23.31	0.73	1.6070	0.0085	2.6241	0.0224	3.0527	0.0714	0.0334	0.0975	0.2390	0.0002	0.0027
<b>PCOD8323191</b>	10.97	21.31	2.09	1.6098	0.0124	2.6280	0.0449	3.0363	0.0652	0.0468	0.2413	0.2219	0.0005	0.0003
<b>PCOD8301757</b>	10.97	26.54	1.48	1.6090	0.0103	2.6272	0.0285	3.0433	0.0784	0.0342	0.1105	0.2284	0.0001	0.0030
<b>PCOD8320103</b>	10.97	22.20	1.48	1.6070	0.0083	2.6240	0.0257	3.0522	0.0684	0.0284	0.1159	0.2163	0.0001	0.0021
<b>PCOD8309325</b>	10.97	24.05	0.21	1.6070	0.0088	2.6241	0.0198	3.0522	0.0749	0.0274	0.0889	0.2093	0.0002	0.0025
<b>PCOD8261275</b>	10.99	27.06	1.86	1.6086	0.0102	2.6265	0.0320	3.0455	0.0852	0.0381	0.1426	0.2562	0.0000	0.0036
<b>PCOD8326900</b>	11.00	29.19	3.33	1.6028	0.0077	2.6173	0.0163	3.0734	0.0697	0.0245	0.0894	0.1774	0.0002	0.0031
<b>PCOD8196364</b>	11.01	26.74	1.67	1.6077	0.0119	2.6251	0.0286	3.0495	0.0827	0.0392	0.1372	0.2559	0.0001	0.0028
<b><u>PCOD8193831</u></b>	11.01	28.91	3.15	1.6083	0.0147	2.6257	0.0417	3.0462	<u>0.0936</u>	0.0615	0.2732	<u>0.3579</u>	0.0002	0.0025
<b><u>PCOD8196409</u></b>	11.04	28.78	3.09	1.6082	0.0141	2.6258	0.0386	3.0464	<u>0.0954</u>	0.0590	0.2809	<u>0.3635</u>	0.0001	0.0025
<b><u>PCOD8307109</u></b>	11.05	25.47	0.84	1.6072	0.0126	2.6231	0.0545	3.0517	0.0832	0.0636	<u>0.3412</u>	0.3250	0.0011	0.0026
<b>PCOD8196416</b>	11.05	25.55	0.90	1.6068	0.0107	2.6236	0.0293	3.0542	0.0816	0.0426	0.1601	0.2729	0.0001	0.0032
<b>PCOD8329412</b>	11.07	19.96	2.91	1.6075	0.0119	2.6248	0.0306	3.0471	0.0555	0.0453	0.1031	0.2164	0.0000	0.0002
<b>PCOD8312657</b>	11.07	28.66	3.04	1.6101	0.0122	2.6290	0.0366	3.0375	0.0852	0.0511	0.1453	0.2899	0.0000	0.0028
<b>PCOD8316869</b>	11.07	26.72	1.71	1.6090	0.0108	2.6273	0.0296	3.0428	0.0736	0.0345	0.1206	0.2297	0.0001	0.0027
<b>PCOD8196412</b>	11.08	24.23	0.02	1.6066	0.0101	2.6234	0.0209	3.0548	0.0784	0.0346	0.1039	0.2322	0.0002	0.0028
<b>PCOD8200870</b>	11.09	26.15	1.34	1.6080	0.0102	2.6256	0.0291	3.0481	0.0839	0.0403	0.1497	0.2713	0.0001	0.0032
<b>PCOD8200919</b>	11.10	25.35	0.81	1.6080	0.0104	2.6256	0.0277	3.0479	0.0745	0.0373	0.1440	0.2398	0.0002	0.0026
<b>PCOD8200940</b>	11.10	25.01	0.58	1.6079	0.0097	2.6256	0.0218	3.0481	0.0804	0.0323	0.0996	0.2388	0.0002	0.0028
<b>PCOD8323349</b>	11.14	24.53	0.28	1.6070	0.0100	2.6240	0.0290	3.0531	0.0679	0.0325	0.0961	0.2080	0.0001	0.0031
<b>PCOD8320017</b>	11.15	22.51	1.09	1.6069	0.0082	2.6238	0.0227	3.0532	0.0676	0.0293	0.0942	0.1951	0.0002	0.0026
<b>PCOD8196419</b>	11.15	23.50	0.42	1.6056	0.0099	2.6217	0.0277	3.0599	0.0763	0.0382	0.1256	0.2570	0.0000	0.0032
<b>PCOD8328225</b>	11.15	23.45	0.44	1.6050	0.0112	2.6208	0.0327	3.0624	0.0796	0.0410	0.1315	0.2045	0.0001	0.0029
<b><u>PCOD8329775</u></b>	11.16	24.85	0.52	1.6063	0.0136	2.6213	<u>0.0603</u>	3.0572	0.0735	0.0592	0.2449	<u>0.3429</u>	<u>0.0014</u>	0.0037
<b><u>PCOD8196708</u></b>	11.17	27.57	2.39	1.6072	0.0138	2.6241	0.0395	3.0515	<u>0.0943</u>	0.0583	0.2817	<u>0.3723</u>	0.0001	0.0025

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8315762	11.18	24.40	0.23	1.6064	0.0114	2.6230	0.0322	3.0552	0.0716	0.0372	0.1367	0.2037	0.0001	0.0024
PCOD8316868	11.18	26.43	1.62	1.6093	0.0096	2.6279	0.0183	3.0415	0.0860	0.0284	0.0700	0.2341	0.0002	0.0029
PCOD8196446	11.20	25.57	1.05	1.6067	0.0116	2.6235	0.0323	3.0541	0.0824	0.0433	0.1664	0.2785	0.0000	0.0027
PCOD8315708	11.20	27.91	2.65	1.6082	0.0135	2.6256	0.0407	3.0463	0.0818	0.0498	0.2165	0.2965	0.0003	0.0024
<u>PCOD8324447</u>	11.25	28.74	3.27	1.6143	0.0101	2.6354	0.0539	3.0177	<u>0.1100</u>	0.0373	0.2138	<u>0.3492</u>	0.0005	0.0037
PCOD8327278	11.28	25.21	0.89	1.6085	0.0097	2.6265	0.0246	3.0454	0.0816	0.0317	0.0901	0.2467	0.0002	0.0027
PCOD8196712	11.29	22.57	0.91	1.6056	0.0092	2.6218	0.0209	3.0593	0.0766	0.0342	0.1202	0.2446	0.0002	0.0026
PCOD8200941	11.30	22.04	1.26	1.6060	0.0080	2.6224	0.0239	3.0575	0.0685	0.0342	0.1154	0.2455	0.0002	0.0028
PCOD8326718	11.30	23.07	0.56	1.6059	0.0091	2.6223	0.0221	3.0579	0.0722	0.0299	0.0810	0.2087	0.0001	0.0026
PCOD8292641	11.30	24.96	0.74	1.6084	0.0090	2.6263	0.0278	3.0458	0.0760	0.0343	0.1123	0.2378	0.0000	0.0030
PCOD8196417	11.37	24.45	0.45	1.6058	0.0104	2.6220	0.0307	3.0590	0.0793	0.0456	0.1687	0.2782	0.0000	0.0032
PCOD8307383	11.38	24.02	0.17	1.6058	0.0117	2.6222	0.0189	3.0583	0.0797	0.0436	0.0737	0.2192	0.0002	0.0028
PCOD8298138	11.38	25.42	1.14	1.6066	0.0121	2.6234	0.0299	3.0540	0.0829	0.0422	0.1110	0.2411	0.0001	0.0022
PCOD8265553	11.39	23.47	0.19	1.6053	0.0115	2.6211	0.0326	3.0608	0.0802	0.0575	0.2395	0.2955	0.0001	0.0028
PCOD8255421	11.39	24.84	0.75	1.6078	0.0112	2.6252	0.0324	3.0486	0.0784	0.0376	0.1267	0.2473	0.0000	0.0027
PCOD8310673	11.39	25.63	1.29	1.6080	0.0112	2.6254	0.0318	3.0483	0.0805	0.0406	0.1125	0.2183	0.0001	0.0032
<u>PCOD8307474</u>	11.40	22.68	0.73	1.6058	0.0147	2.6212	0.0529	3.0573	0.0580	<u>0.0652</u>	0.2110	0.2342	0.0007	0.0015
<u>PCOD8255713</u>	11.40	27.84	2.81	1.6073	0.0171	2.6241	0.0454	3.0508	<u>0.0956</u>	<u>0.0785</u>	<u>0.3404</u>	0.3178	0.0002	0.0023
PCOD8312377	11.41	23.55	0.12	1.6073	0.0091	2.6245	0.0253	3.0506	0.0717	0.0350	0.1241	0.2395	0.0001	0.0023
PCOD8265558	11.41	26.14	1.65	1.6072	0.0124	2.6243	0.0282	3.0513	0.0841	0.0407	0.1020	0.2396	0.0001	0.0021
<u>PCOD8317669</u>	11.41	26.96	2.22	1.6093	0.0128	2.6276	0.0364	3.0428	<u>0.0971</u>	0.0582	0.1587	0.3333	0.0000	0.0040
PCOD8329746	11.42	26.37	1.83	1.6081	0.0115	2.6251	0.0457	3.0476	0.0762	0.0391	0.1870	0.2597	0.0005	0.0029
<u>PCOD8288252</u>	11.43	27.75	2.77	1.6073	0.0158	2.6242	0.0428	3.0519	<u>0.1037</u>	0.0578	0.2125	0.3183	0.0001	0.0033
PCOD8292631	11.43	27.27	2.44	1.6100	0.0101	2.6289	0.0257	3.0384	0.0826	0.0339	0.0929	0.2311	0.0002	0.0030
<u>PCOD8287200</u>	11.43	25.09	0.96	1.6056	0.0147	2.6217	0.0347	3.0594	<u>0.0922</u>	0.0595	0.1543	0.2848	0.0000	0.0028
PCOD8316033	11.46	26.21	1.75	1.6093	0.0141	2.6273	0.0443	3.0392	0.0779	0.0450	0.1842	0.2452	0.0003	0.0003
<u>PCOD8313111</u>	11.49	26.01	1.65	1.6067	0.0147	2.6231	0.0454	3.0547	<u>0.0934</u>	0.0682	0.2658	<u>0.3679</u>	0.0003	0.0035
<u>PCOD8196694</u>	11.50	29.47	4.02	1.6082	0.0156	2.6256	0.0442	3.0461	<u>0.0995</u>	0.0707	0.2927	<u>0.3686</u>	0.0002	0.0020
<u>PCOD8307137</u>	11.51	26.21	1.80	1.6099	0.0104	2.6281	0.0322	3.0386	<u>0.1015</u>	0.0480	0.1346	<u>0.4175</u>	0.0005	0.0030
PCOD8321916	11.51	23.38	0.13	1.6078	0.0079	2.6253	0.0280	3.0487	0.0655	0.0287	0.1185	0.2187	0.0001	0.0027
PCOD8196447	11.52	24.15	0.40	1.6067	0.0104	2.6236	0.0223	3.0536	0.0796	0.0364	0.1109	0.2401	0.0002	0.0024

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8316532</b>	11.52	22.77	0.54	1.6064	0.0088	2.6227	0.0344	3.0553	0.0777	0.0329	0.1788	0.2587	0.0003	0.0027
<b><u>PCOD8297460</u></b>	11.53	22.35	0.82	1.6038	0.0127	2.6186	0.0366	3.0680	0.0781	<u>0.0767</u>	<u>0.3208</u>	0.3116	0.0001	0.0024
<b>PCOD8316376</b>	11.55	26.24	1.86	1.6094	0.0123	2.6279	0.0355	3.0389	0.0806	0.0416	0.1397	0.2491	0.0000	0.0010
<b>PCOD8326816</b>	11.57	27.70	2.89	1.6070	0.0139	2.6230	0.0508	3.0537	0.0787	0.0469	0.1505	0.2612	0.0008	0.0036
<b>PCOD8307682</b>	11.57	25.03	1.05	1.6088	0.0089	2.6270	0.0248	3.0437	0.0769	0.0300	0.0894	0.2438	0.0002	0.0026
<b>PCOD8303097</b>	11.58	22.01	1.00	1.6057	0.0094	2.6219	0.0250	3.0595	0.0781	0.0403	0.1184	0.2514	0.0001	0.0031
<b>PCOD8316035</b>	11.58	25.97	1.71	1.6078	0.0115	2.6254	0.0257	3.0482	0.0821	0.0354	0.1077	0.2396	0.0001	0.0024
<b>PCOD8313398</b>	11.60	25.84	1.63	1.6090	0.0111	2.6273	0.0363	3.0423	0.0634	0.0397	0.1429	0.2164	0.0001	0.0023
<b><u>PCOD8319437</u></b>	11.61	25.31	1.29	1.6081	0.0143	2.6255	0.0395	3.0457	0.0659	<u>0.0652</u>	0.2037	0.2932	0.0002	0.0012
<b>PCOD8196713</b>	11.61	20.87	1.75	1.6044	0.0083	2.6199	0.0201	3.0651	0.0718	0.0341	0.1236	0.2459	0.0002	0.0026
<b>PCOD8329305</b>	11.62	24.06	0.44	1.6069	0.0111	2.6237	0.0331	3.0534	0.0659	0.0447	0.1266	0.2045	0.0000	0.0028
<b><u>PCOD8317985</u></b>	11.62	27.41	2.74	1.6091	0.0134	2.6271	0.0425	3.0431	<u>0.0922</u>	0.0499	0.1881	0.2928	0.0002	0.0033
<b>PCOD8196411</b>	11.66	24.69	0.91	1.6067	0.0104	2.6236	0.0242	3.0541	0.0792	0.0340	0.1092	0.2409	0.0001	0.0029
<b>PCOD8316043</b>	11.66	26.78	2.34	1.6071	0.0139	2.6235	0.0505	3.0535	0.0852	0.0498	0.2520	0.2636	0.0005	0.0040
<b>PCOD8312321</b>	11.66	23.18	0.12	1.6062	0.0094	2.6227	0.0238	3.0561	0.0704	0.0365	0.1024	0.2108	0.0001	0.0023
<b><u>PCOD8304708</u></b>	11.67	27.38	2.77	1.6070	0.0154	2.6226	<u>0.0698</u>	3.0517	0.0582	0.0589	0.2595	0.2220	<u>0.0012</u>	0.0017
<b>PCOD8193833</b>	11.67	22.22	0.76	1.6055	0.0101	2.6215	0.0248	3.0599	0.0715	0.0399	0.0980	0.2495	0.0001	0.0025
<b>PCOD8292632</b>	11.69	26.23	1.99	1.6080	0.0103	2.6257	0.0262	3.0483	0.0756	0.0331	0.1001	0.2100	0.0001	0.0032
<b>PCOD8316036</b>	11.70	23.00	0.21	1.6059	0.0098	2.6223	0.0254	3.0574	0.0706	0.0369	0.1124	0.2113	0.0001	0.0023
<b>PCOD8328510</b>	11.70	19.74	2.43	1.6072	0.0106	2.6244	0.0295	3.0494	0.0531	0.0449	0.1061	0.1844	0.0001	0.0004
<b>PCOD8312314</b>	11.70	25.92	1.80	1.6115	0.0118	2.6314	0.0311	3.0283	0.0595	0.0477	0.1396	0.2253	0.0001	0.0006
<b>PCOD8305122</b>	11.73	21.07	1.49	1.6049	0.0085	2.6207	0.0211	3.0624	0.0753	0.0316	0.1041	0.2082	0.0002	0.0022
<b><u>PCOD8322944</u></b>	11.77	25.61	1.66	1.6037	0.0155	2.6169	<u>0.0668</u>	3.0714	0.0686	<u>0.0693</u>	0.2283	0.2984	<u>0.0016</u>	<u>0.0051</u>
<b>PCOD8318338</b>	11.78	27.80	3.17	1.6095	0.0121	2.6276	0.0345	3.0403	0.0794	0.0485	0.1647	0.2736	0.0003	0.0026
<b>PCOD8328255</b>	11.79	25.41	1.53	1.6067	0.0122	2.6235	0.0359	3.0542	0.0743	0.0490	0.1624	0.2312	0.0000	0.0031
<b><u>PCOD8307972</u></b>	11.80	24.87	1.17	1.6092	0.0130	2.6273	0.0429	3.0407	0.0671	0.0585	<u>0.2757</u>	0.2400	0.0002	0.0016
<b>PCOD8313826</b>	11.82	25.92	1.91	1.6073	0.0120	2.6242	0.0334	3.0513	0.0802	0.0438	0.1320	0.2596	0.0001	0.0027
<b>PCOD8307105</b>	11.82	23.79	0.46	1.6047	0.0136	2.6198	0.0417	3.0627	0.0821	0.0514	0.1885	0.2872	0.0003	0.0015
<b>PCOD8328256</b>	11.82	27.41	2.93	1.6072	0.0134	2.6241	0.0355	3.0523	0.0829	0.0449	0.1498	0.2244	0.0000	0.0032
<b>PCOD8297639</b>	11.84	19.63	2.37	1.6031	0.0101	2.6175	0.0299	3.0714	0.0773	0.0506	0.1819	0.2560	0.0001	0.0027

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8325006	11.86	24.94	1.29	1.6087	0.0105	2.6264	0.0453	3.0435	0.0855	0.0433	0.1508	0.2373	0.0004	0.0021
<u>PCOD8116632</u>	11.87	24.69	1.13	1.6065	0.0097	2.6230	0.0375	3.0568	<u>0.0921</u>	0.0475	0.2062	<u>0.3991</u>	0.0001	0.0046
PCOD8306633	11.88	19.96	2.11	1.6038	0.0068	2.6188	0.0213	3.0682	0.0654	0.0284	0.0964	0.1902	0.0001	0.0028
PCOD8316365	11.88	26.91	2.65	1.6091	0.0092	2.6276	0.0212	3.0423	0.0813	0.0306	0.0735	0.2293	0.0002	0.0028
PCOD8288096	11.88	23.86	0.57	1.6065	0.0122	2.6232	0.0301	3.0547	0.0879	0.0405	0.1146	0.2618	0.0001	0.0023
PCOD8194776	11.89	21.55	1.00	1.6043	0.0107	2.6195	0.0278	3.0656	0.0751	0.0437	0.1055	0.2476	0.0001	0.0025
PCOD8317687	11.90	26.03	2.07	1.6074	0.0112	2.6245	0.0310	3.0510	0.0770	0.0391	0.1106	0.2517	0.0000	0.0029
PCOD8324911	11.90	21.95	0.72	1.6050	0.0093	2.6206	0.0336	3.0629	0.0809	0.0405	0.1498	0.2625	0.0001	0.0032
PCOD8196714	11.90	22.72	0.19	1.6057	0.0095	2.6220	0.0220	3.0586	0.0772	0.0340	0.1175	0.2449	0.0002	0.0023
PCOD8196690	11.91	22.76	0.16	1.6049	0.0104	2.6204	0.0292	3.0631	0.0818	0.0399	0.1296	0.2422	0.0000	0.0029
PCOD8275019	11.92	23.76	0.53	1.6062	0.0102	2.6227	0.0321	3.0568	0.0662	0.0364	0.1110	0.2265	0.0001	0.0030
PCOD8301771	11.93	23.78	0.56	1.6073	0.0085	2.6243	0.0322	3.0511	0.0675	0.0332	0.1209	0.2120	0.0000	0.0025
PCOD8194775	11.95	22.13	0.55	1.6045	0.0115	2.6198	0.0255	3.0645	0.0796	0.0431	0.1179	0.2586	0.0000	0.0022
PCOD8201049	11.96	24.26	0.92	1.6058	0.0118	2.6221	0.0224	3.0587	0.0804	0.0451	0.0871	0.2292	0.0002	0.0029
PCOD8287212	11.96	22.90	0.01	1.6069	0.0130	2.6238	0.0326	3.0524	0.0796	0.0512	0.1570	0.2768	0.0000	0.0019
PCOD8330297	11.97	21.42	1.01	1.6053	0.0095	2.6213	0.0281	3.0602	0.0632	0.0408	0.1119	0.2082	0.0001	0.0022
PCOD8287211	11.98	22.07	0.57	1.6062	0.0125	2.6226	0.0324	3.0553	0.0809	0.0493	0.1417	0.2782	0.0000	0.0014
PCOD8297228	11.98	24.17	0.88	1.6084	0.0124	2.6262	0.0350	3.0431	0.0726	0.0469	0.1330	0.2730	0.0000	0.0002
PCOD8200993	11.99	23.49	0.42	1.6070	0.0088	2.6241	0.0205	3.0526	0.0778	0.0331	0.0900	0.2424	0.0002	0.0028
<u>PCOD8315647</u>	11.99	24.64	1.20	1.6070	0.0164	2.6232	0.0552	3.0506	0.0643	<u>0.0715</u>	0.2214	0.2613	0.0008	0.0009
PCOD8297227	12.00	24.08	0.83	1.6096	0.0113	2.6282	0.0310	3.0376	0.0732	0.0437	0.1216	0.2714	0.0000	0.0004
PCOD8301799	12.02	23.60	0.52	1.6085	0.0106	2.6265	0.0276	3.0434	0.0765	0.0384	0.0868	0.2297	0.0001	0.0008
PCOD8274967	12.04	21.78	0.70	1.6057	0.0074	2.6218	0.0239	3.0593	0.0681	0.0287	0.0997	0.2221	0.0001	0.0028
<u>PCOD8322792</u>	12.06	24.56	1.22	1.6060	0.0106	2.6219	0.0440	3.0581	<u>0.0927</u>	0.0387	0.2262	0.2930	0.0004	0.0034
PCOD8275427	12.06	22.82	0.03	1.6083	0.0113	2.6260	0.0345	3.0434	0.0652	0.0430	0.1438	0.2719	0.0000	0.0001
<u>PCOD8307101</u>	12.07	22.48	0.19	1.6059	0.0125	2.6213	0.0412	3.0600	<u>0.1028</u>	0.0439	0.1785	<u>0.4024</u>	0.0008	0.0047
PCOD8255618	12.07	24.56	1.23	1.6073	0.0130	2.6245	0.0348	3.0507	0.0848	0.0507	0.1578	0.2759	0.0000	0.0025
PCOD8274173	12.08	24.31	1.07	1.6082	0.0129	2.6256	0.0412	3.0440	0.0677	0.0460	0.1839	0.2775	0.0003	0.0001
PCOD8288100	12.08	22.17	0.39	1.6062	0.0130	2.6226	0.0293	3.0556	0.0808	0.0522	0.1440	0.2776	0.0000	0.0016
<u>PCOD8312121</u>	12.09	23.95	0.83	1.6081	0.0156	2.6251	0.0510	3.0453	0.0666	<u>0.0750</u>	0.2421	0.2715	0.0006	0.0008
PCOD8275276	12.09	22.29	0.30	1.6081	0.0110	2.6256	0.0295	3.0449	0.0715	0.0396	0.1239	0.2463	0.0000	0.0002

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8297400</b>	12.10	22.55	0.11	1.6083	0.0125	2.6260	0.0355	3.0431	0.0652	0.0471	0.1495	0.2678	0.0001	0.0002
<b>PCOD8265260</b>	12.12	23.02	0.23	1.6085	0.0110	2.6264	0.0299	3.0424	0.0728	0.0334	0.1335	0.2486	0.0000	0.0001
<b>PCOD8297423</b>	12.12	24.04	0.93	1.6075	0.0136	2.6247	0.0357	3.0490	0.0688	0.0488	0.1624	0.2272	0.0000	0.0014
<b>PCOD8324833</b>	12.13	22.82	0.10	1.6061	0.0097	2.6224	0.0331	3.0567	<u>0.0891</u>	0.0342	0.1429	0.2402	0.0000	0.0022
<b>PCOD8196413</b>	12.14	23.14	0.33	1.6058	0.0099	2.6221	0.0218	3.0584	0.0761	0.0358	0.1044	0.2343	0.0002	0.0026
<b>PCOD8288108</b>	12.14	22.62	0.02	1.6059	0.0132	2.6221	0.0304	3.0571	0.0833	0.0523	0.1464	0.2828	0.0000	0.0018
<b>PCOD8298127</b>	12.14	21.87	0.54	1.6085	0.0122	2.6262	0.0352	3.0420	0.0623	0.0446	0.1530	0.2511	0.0001	0.0006
<b>PCOD8275748</b>	12.14	21.50	0.79	1.6067	0.0132	2.6234	0.0380	3.0509	0.0614	0.0506	0.1760	0.2818	0.0001	0.0003
<b>PCOD8299383</b>	12.16	22.83	0.14	1.6061	0.0092	2.6224	0.0281	3.0571	0.0730	0.0350	0.1013	0.2394	0.0000	0.0028
<b>PCOD8275707</b>	12.16	21.38	0.85	1.6067	0.0129	2.6233	0.0384	3.0509	0.0604	0.0483	0.1713	0.2756	0.0001	0.0003
<b>PCOD8196698</b>	12.17	22.95	0.23	1.6054	0.0116	2.6214	0.0313	3.0596	0.0795	0.0535	0.1875	0.2816	0.0000	0.0021
<b>PCOD8316327</b>	12.17	23.41	0.55	1.6058	0.0099	2.6222	0.0215	3.0579	0.0807	0.0319	0.1220	0.2488	0.0002	0.0023
<b>PCOD8321872</b>	12.17	23.01	0.27	1.6049	0.0111	2.6206	0.0223	3.0631	0.0769	0.0333	0.0834	0.1953	0.0002	0.0027
<b>PCOD8318347</b>	12.20	23.59	0.70	1.6079	0.0080	2.6253	0.0319	3.0483	0.0687	0.0308	0.1585	0.2303	0.0001	0.0028
<b>PCOD8276280</b>	12.22	21.74	0.55	1.6059	0.0078	2.6222	0.0259	3.0578	0.0571	0.0321	0.1155	0.2115	0.0001	0.0025
<b>PCOD8292926</b>	12.23	24.63	1.44	1.6069	0.0139	2.6238	0.0343	3.0529	0.0858	0.0519	0.1547	0.2803	0.0000	0.0027
<b>PCOD8196448</b>	12.23	24.68	1.48	1.6070	0.0110	2.6240	0.0259	3.0525	0.0806	0.0364	0.1216	0.2471	0.0001	0.0024
<b>PCOD8287203</b>	12.24	25.08	1.76	1.6073	0.0133	2.6245	0.0333	3.0508	0.0851	0.0556	0.1533	0.2800	0.0000	0.0026
<b>PCOD8323380</b>	12.26	23.37	0.60	1.6077	0.0113	2.6252	0.0317	3.0477	0.0656	0.0493	0.1310	0.2467	0.0001	0.0015
<b>PCOD8277636</b>	12.27	25.57	2.12	1.6063	0.0108	2.6224	0.0405	3.0575	0.0865	0.0382	0.1478	0.2875	0.0004	0.0044
<b>PCOD8255720</b>	12.30	25.20	1.90	1.6060	0.0147	2.6222	0.0361	3.0577	<u>0.0920</u>	0.0607	0.1639	0.2882	0.0000	0.0027
<b>PCOD8193832</b>	12.32	22.34	0.03	1.6055	0.0105	2.6214	0.0270	3.0600	0.0716	0.0394	0.0980	0.2359	0.0000	0.0025
<b>PCOD8287166</b>	12.33	21.95	0.30	1.6066	0.0096	2.6233	0.0315	3.0548	0.0767	0.0350	0.1063	0.2565	0.0001	0.0028
<b>PCOD8308290</b>	12.33	23.49	0.76	1.6075	0.0085	2.6250	0.0228	3.0496	0.0693	0.0301	0.0863	0.2207	0.0002	0.0024
<b>PCOD8287156</b>	12.35	21.41	0.65	1.6064	0.0121	2.6227	0.0388	3.0544	0.0609	0.0587	0.1589	0.1848	0.0002	0.0013
<b>PCOD8298160</b>	12.36	23.55	0.84	1.6069	0.0094	2.6237	0.0302	3.0532	0.0701	0.0330	0.1254	0.2126	0.0000	0.0027
<b>PCOD8297421</b>	12.38	22.83	0.35	1.6049	0.0106	2.6206	0.0273	3.0629	0.0771	0.0457	0.1061	0.2281	0.0001	0.0028
<b>PCOD8255661</b>	12.38	23.58	0.87	1.6057	0.0134	2.6219	0.0326	3.0584	0.0856	0.0509	0.1301	0.2778	0.0000	0.0024
<b>PCOD8322639</b>	12.38	23.62	0.90	1.6068	0.0121	2.6232	0.0453	3.0532	0.0743	0.0482	0.2370	0.2555	0.0003	0.0023
<b>PCOD8200852</b>	12.39	21.85	0.30	1.6063	0.0076	2.6229	0.0225	3.0559	0.0667	0.0334	0.0881	0.2413	0.0002	0.0026
<b>PCOD8316048</b>	12.39	23.10	0.56	1.6067	0.0101	2.6235	0.0256	3.0533	0.0783	0.0433	0.1176	0.2248	0.0001	0.0019

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8195611	12.40	22.22	0.03	1.6055	0.0105	2.6215	0.0302	3.0598	0.0720	0.0393	0.1352	0.2520	0.0001	0.0025
PCOD8323357	12.44	22.78	0.38	1.6067	0.0114	2.6233	0.0383	3.0530	0.0702	0.0431	0.1948	0.2523	0.0001	0.0016
PCOD8194009	12.45	25.25	2.08	1.6066	0.0121	2.6232	0.0341	3.0549	0.0787	0.0420	0.1340	0.2485	0.0001	0.0029
PCOD8288182	12.46	21.04	0.78	1.6047	0.0122	2.6202	0.0303	3.0624	0.0826	0.0501	0.1528	0.2880	0.0000	0.0013
PCOD8327491	12.48	22.81	0.44	1.6054	0.0110	2.6214	0.0283	3.0600	0.0727	0.0348	0.1053	0.2139	0.0001	0.0022
PCOD8256582	12.48	23.00	0.57	1.6051	0.0143	2.6208	0.0353	3.0613	0.0858	0.0552	0.1674	0.2773	0.0000	0.0022
PCOD8274203	12.48	21.70	0.31	1.6061	0.0095	2.6225	0.0273	3.0570	0.0781	0.0362	0.1149	0.2701	0.0001	0.0025
<u>PCOD8056809</u>	12.49	24.21	1.41	1.6080	0.0076	2.6251	0.0427	3.0496	<u>0.1015</u>	0.0323	0.2304	<u>0.3851</u>	0.0004	0.0047
PCOD8292736	12.50	19.84	1.57	1.6043	0.0059	2.6197	0.0196	3.0658	0.0631	0.0225	0.0802	0.1913	0.0001	0.0029
PCOD8323374	12.50	23.05	0.63	1.6048	0.0119	2.6204	0.0271	3.0633	0.0771	0.0461	0.1286	0.2109	0.0002	0.0024
PCOD8193824	12.51	23.14	0.70	1.6056	0.0113	2.6216	0.0297	3.0594	0.0747	0.0471	0.1395	0.2545	0.0000	0.0026
PCOD8275094	12.51	22.96	0.59	1.6060	0.0087	2.6222	0.0295	3.0581	0.0696	0.0337	0.1098	0.2062	0.0000	0.0032
PCOD8275711	12.52	21.58	0.36	1.6055	0.0080	2.6215	0.0297	3.0602	0.0761	0.0336	0.1214	0.2405	0.0000	0.0030
PCOD8323375	12.53	21.87	0.15	1.6038	0.0113	2.6188	0.0244	3.0682	0.0747	0.0439	0.1158	0.1909	0.0002	0.0024
PCOD8256588	12.53	22.74	0.45	1.6053	0.0131	2.6211	0.0327	3.0606	0.0858	0.0503	0.1544	0.2764	0.0000	0.0022
PCOD8193821	12.54	23.26	0.81	1.6060	0.0104	2.6224	0.0304	3.0573	0.0683	0.0372	0.1524	0.2481	0.0000	0.0027
PCOD8193996	12.55	22.91	0.59	1.6057	0.0114	2.6218	0.0284	3.0587	0.0731	0.0419	0.1053	0.2388	0.0000	0.0024
<u>PCOD8327934</u>	12.56	22.47	0.30	1.6068	0.0144	2.6231	0.0427	3.0529	<u>0.0927</u>	0.0494	0.1562	0.3020	0.0004	0.0018
PCOD8256627	12.60	20.97	0.69	1.6057	0.0115	2.6219	0.0300	3.0568	0.0837	0.0472	0.1544	0.2965	0.0000	0.0007
PCOD8275789	12.61	21.93	0.03	1.6046	0.0090	2.6199	0.0344	3.0645	0.0876	0.0353	0.1507	0.2484	0.0001	0.0029
PCOD8317398	12.61	22.25	0.19	1.6057	0.0100	2.6219	0.0292	3.0594	0.0793	0.0414	0.1221	0.2525	0.0001	0.0033
PCOD8307693	12.62	21.91	0.02	1.6068	0.0069	2.6235	0.0305	3.0537	0.0634	0.0247	0.1300	0.2129	0.0001	0.0028
PCOD8314888	12.65	22.50	0.40	1.6068	0.0088	2.6238	0.0254	3.0532	0.0684	0.0343	0.1095	0.2415	0.0001	0.0025
PCOD8288254	12.66	21.91	0.01	1.6044	0.0119	2.6197	0.0317	3.0652	0.0858	0.0408	0.1375	0.2625	0.0000	0.0027
PCOD8311099	12.66	21.47	0.29	1.6062	0.0067	2.6228	0.0221	3.0564	0.0678	0.0208	0.0831	0.1842	0.0002	0.0027
<u>PCOD8255716</u>	12.66	22.44	0.38	1.6039	0.0135	2.6187	0.0391	3.0670	0.0785	<u>0.0752</u>	<u>0.3188</u>	0.3101	0.0001	0.0020
<u>PCOD8167045</u>	12.69	21.90	0.03	1.6053	0.0093	2.6211	0.0229	3.0624	<u>0.0965</u>	0.0342	0.1151	<u>0.3569</u>	0.0000	0.0043
PCOD8328373	12.69	21.99	0.10	1.6047	0.0107	2.6203	0.0304	3.0636	0.0628	0.0395	0.1230	0.2317	0.0001	0.0026
PCOD8194777	12.69	22.10	0.17	1.6045	0.0121	2.6200	0.0255	3.0637	0.0799	0.0430	0.1098	0.2481	0.0001	0.0018
PCOD8316639	12.71	21.82	0.00	1.6047	0.0102	2.6204	0.0203	3.0637	0.0763	0.0456	0.1106	0.2214	0.0002	0.0026
PCOD8287229	12.73	21.77	0.02	1.6064	0.0114	2.6230	0.0323	3.0542	0.0810	0.0510	0.1615	0.2410	0.0001	0.0015



Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8317982	12.75	21.38	0.26	1.6047	0.0088	2.6203	0.0214	3.0639	0.0715	0.0341	0.1113	0.2258	0.0001	0.0027
PCOD8194963	12.75	22.61	0.58	1.6043	0.0125	2.6196	0.0324	3.0655	0.0800	0.0524	0.1589	0.2647	0.0000	0.0024
PCOD8292723	12.76	21.93	0.13	1.6064	0.0069	2.6230	0.0244	3.0550	0.0712	0.0252	0.1031	0.2186	0.0001	0.0023
PCOD8309987	12.78	20.60	0.77	1.6069	0.0091	2.6232	0.0349	3.0512	0.0727	0.0349	0.1973	0.2368	0.0005	0.0007
PCOD8327305	12.78	21.49	0.16	1.6059	0.0090	2.6222	0.0344	3.0571	0.0664	0.0354	0.1232	0.2159	0.0000	0.0021
PCOD8292725	12.78	21.72	0.00	1.6072	0.0065	2.6242	0.0289	3.0517	0.0616	0.0236	0.1127	0.2110	0.0000	0.0025
PCOD8325399	12.78	21.37	0.24	1.6061	0.0090	2.6224	0.0349	3.0564	0.0657	0.0355	0.1248	0.2178	0.0000	0.0021
PCOD8265609	12.78	22.24	0.36	1.6052	0.0116	2.6209	0.0347	3.0610	0.0699	0.0475	0.1558	0.2267	0.0000	0.0021
PCOD8275720	12.81	21.97	0.20	1.6047	0.0091	2.6200	0.0340	3.0642	0.0886	0.0361	0.1408	0.2520	0.0001	0.0029
PCOD8255657	12.81	21.33	0.23	1.6073	0.0107	2.6245	0.0324	3.0501	0.0744	0.0412	0.1575	0.2718	0.0001	0.0018
PCOD8307183	12.82	22.85	0.82	1.6058	0.0099	2.6222	0.0231	3.0578	0.0778	0.0325	0.1131	0.2328	0.0002	0.0022
PCOD8195612	12.83	21.07	0.40	1.6043	0.0108	2.6196	0.0339	3.0655	0.0677	0.0448	0.1678	0.2670	0.0001	0.0023
PCOD8289711	12.85	22.06	0.30	1.6061	0.0095	2.6226	0.0256	3.0571	0.0775	0.0395	0.1158	0.2424	0.0001	0.0027
PCOD8286879	12.85	22.87	0.85	1.6061	0.0107	2.6223	0.0333	3.0573	0.0714	0.0416	0.1270	0.2286	0.0002	0.0031
PCOD8288147	12.85	21.32	0.20	1.6050	0.0095	2.6207	0.0281	3.0622	0.0799	0.0460	0.1467	0.2390	0.0001	0.0026
PCOD8322931	12.88	22.31	0.50	1.6040	0.0114	2.6192	0.0260	3.0670	0.0770	0.0377	0.1031	0.2205	0.0002	0.0024
PCOD8330275	12.88	21.12	0.31	1.6049	0.0084	2.6205	0.0332	3.0631	0.0625	0.0281	0.1332	0.2123	0.0001	0.0031
PCOD8297402	12.88	22.52	0.65	1.6064	0.0107	2.6229	0.0362	3.0558	0.0801	0.0377	0.1528	0.2780	0.0000	0.0029
PCOD8196467	12.91	22.17	0.44	1.6050	0.0116	2.6207	0.0314	3.0614	0.0777	0.0468	0.1356	0.2544	0.0000	0.0019
PCOD8309151	12.92	20.84	0.46	1.6064	0.0093	2.6230	0.0238	3.0540	0.0623	0.0334	0.1010	0.2351	0.0001	0.0011
PCOD8194964	12.93	22.02	0.36	1.6048	0.0117	2.6204	0.0254	3.0624	0.0793	0.0417	0.1018	0.2421	0.0001	0.0018
PCOD8196422	12.95	21.76	0.19	1.6045	0.0091	2.6199	0.0269	3.0652	0.0720	0.0358	0.1280	0.2369	0.0001	0.0030
PCOD8292735	12.95	20.81	0.45	1.6053	0.0057	2.6213	0.0193	3.0610	0.0658	0.0193	0.0851	0.1817	0.0002	0.0027
PCOD8193988	12.95	22.33	0.59	1.6044	0.0122	2.6196	0.0336	3.0652	0.0723	0.0501	0.1606	0.2781	0.0000	0.0025
PCOD8195613	12.96	20.78	0.46	1.6046	0.0105	2.6200	0.0309	3.0640	0.0674	0.0464	0.1516	0.2622	0.0001	0.0021
PCOD8286925	12.96	22.79	0.92	1.6068	0.0106	2.6234	0.0335	3.0537	0.0686	0.0408	0.1359	0.2225	0.0001	0.0028
<u>PCOD8160775</u>	13.00	21.14	0.18	1.6038	0.0103	2.6182	0.0335	3.0710	<u>0.1035</u>	0.0376	0.1615	<u>0.3645</u>	0.0005	<u>0.0054</u>
PCOD8297424	13.01	21.91	0.35	1.6039	0.0092	2.6188	0.0341	3.0684	0.0703	0.0374	0.1607	0.2416	0.0001	0.0034
PCOD8328266	13.01	20.95	0.30	1.6029	0.0106	2.6174	0.0250	3.0724	0.0742	0.0392	0.1046	0.2234	0.0002	0.0026
PCOD8307692	13.01	21.84	0.31	1.6076	0.0066	2.6249	0.0269	3.0493	0.0619	0.0237	0.0921	0.2021	0.0001	0.0022
PCOD8194772	13.01	22.63	0.85	1.6047	0.0108	2.6200	0.0320	3.0638	0.0783	0.0400	0.1425	0.2521	0.0002	0.0027

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8320075	13.02	20.90	0.32	1.6053	0.0101	2.6208	0.0369	3.0596	0.0725	0.0407	0.1909	0.2567	0.0002	0.0012
PCOD8287165	13.05	22.30	0.66	1.6065	0.0089	2.6232	0.0254	3.0551	0.0818	0.0434	0.1149	0.2399	0.0001	0.0028
PCOD8330350	13.06	21.39	0.05	1.6060	0.0124	2.6221	0.0401	3.0562	0.0651	0.0494	0.1364	0.2495	0.0003	0.0016
PCOD8193825	13.08	21.41	0.09	1.6045	0.0111	2.6198	0.0292	3.0646	0.0706	0.0520	0.1366	0.2735	0.0000	0.0024
PCOD8292652	13.09	21.84	0.39	1.6058	0.0076	2.6220	0.0260	3.0584	0.0672	0.0288	0.0996	0.2164	0.0001	0.0027
PCOD8331110	13.09	21.82	0.37	1.6054	0.0071	2.6212	0.0280	3.0607	0.0644	0.0300	0.1075	0.2185	0.0000	0.0029
PCOD8200942	13.11	21.99	0.51	1.6065	0.0080	2.6232	0.0253	3.0549	0.0657	0.0332	0.0962	0.2389	0.0002	0.0025
PCOD8256583	13.13	21.54	0.23	1.6067	0.0095	2.6235	0.0304	3.0538	0.0744	0.0324	0.1125	0.2328	0.0001	0.0026
PCOD8265568	13.13	23.35	1.47	1.6054	0.0114	2.6214	0.0304	3.0602	0.0698	0.0370	0.1254	0.2263	0.0001	0.0025
PCOD8196461	13.16	22.84	1.14	1.6050	0.0111	2.6206	0.0311	3.0622	0.0817	0.0405	0.1206	0.2483	0.0001	0.0025
PCOD8287111	13.16	19.52	1.13	1.6035	0.0084	2.6183	0.0260	3.0691	0.0713	0.0357	0.1057	0.2165	0.0001	0.0021
PCOD8207798	13.16	20.99	0.12	1.6042	0.0117	2.6193	0.0367	3.0658	0.0813	0.0535	0.2535	0.3003	0.0002	0.0024
PCOD8256584	13.16	22.27	0.76	1.6056	0.0125	2.6216	0.0336	3.0589	0.0723	0.0496	0.1699	0.2545	0.0000	0.0021
PCOD8287218	13.18	20.61	0.36	1.6058	0.0091	2.6219	0.0291	3.0580	0.0590	0.0311	0.1148	0.2129	0.0000	0.0021
PCOD8313426	13.19	18.27	1.95	1.6052	0.0094	2.6203	0.0378	3.0597	0.0724	0.0535	0.1984	0.2903	0.0007	0.0010
PCOD8195610	13.19	22.87	1.20	1.6057	0.0111	2.6218	0.0361	3.0592	0.0727	0.0400	0.1384	0.2316	0.0000	0.0029
PCOD8255656	13.23	22.14	0.73	1.6067	0.0102	2.6235	0.0312	3.0541	0.0780	0.0368	0.1176	0.2566	0.0001	0.0028
PCOD8265696	13.24	20.50	0.38	1.6032	0.0111	2.6177	0.0276	3.0709	0.0706	0.0427	0.0910	0.2346	0.0001	0.0022
PCOD8312122	13.24	22.37	0.91	1.6081	0.0121	2.6256	0.0378	3.0446	0.0565	0.0553	0.2289	0.2516	0.0001	0.0002
PCOD8320052	13.27	22.69	1.15	1.6066	0.0103	2.6234	0.0263	3.0536	0.0681	0.0404	0.1243	0.2167	0.0001	0.0018
PCOD8323836	13.27	21.97	0.66	1.6069	0.0090	2.6238	0.0342	3.0518	0.0533	0.0370	0.1471	0.2400	0.0000	0.0016
PCOD8298162	13.27	21.84	0.58	1.6042	0.0137	2.6192	0.0352	3.0662	0.0852	0.0469	0.1554	0.2727	0.0001	0.0024
PCOD8275115	13.28	19.97	0.70	1.6050	0.0061	2.6208	0.0211	3.0624	0.0621	0.0199	0.0959	0.1877	0.0002	0.0026
PCOD8194967	13.29	20.51	0.32	1.6027	0.0122	2.6169	0.0318	3.0732	0.0742	0.0556	0.1533	0.2805	0.0000	0.0022
PCOD8193851	13.30	20.75	0.15	1.6042	0.0093	2.6193	0.0298	3.0663	0.0681	0.0408	0.1199	0.2428	0.0001	0.0027
PCOD8298141	13.33	21.06	0.09	1.6046	0.0125	2.6200	0.0259	3.0628	0.0752	0.0422	0.1018	0.2430	0.0001	0.0010
PCOD8329329	13.33	21.70	0.54	1.6063	0.0080	2.6229	0.0184	3.0555	0.0681	0.0325	0.1104	0.2152	0.0002	0.0021
PCOD8194011	13.33	21.03	0.08	1.6047	0.0102	2.6202	0.0283	3.0636	0.0687	0.0385	0.1191	0.2263	0.0000	0.0023
PCOD8298135	13.34	21.07	0.12	1.6040	0.0115	2.6189	0.0352	3.0669	0.0785	0.0430	0.1476	0.2411	0.0001	0.0023
PCOD8329327	13.35	21.93	0.71	1.6072	0.0090	2.6242	0.0313	3.0507	0.0559	0.0361	0.1325	0.2191	0.0000	0.0016
PCOD8308133	13.36	21.43	0.38	1.6049	0.0102	2.6202	0.0436	3.0621	0.0677	0.0391	0.1643	0.2089	0.0002	0.0018

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8328231	13.37	20.64	0.15	1.6070	0.0098	2.6238	0.0293	3.0505	0.0642	0.0374	0.1150	0.2229	0.0000	0.0003
PCOD8274923	13.39	21.81	0.67	1.6064	0.0076	2.6231	0.0226	3.0552	0.0660	0.0333	0.0866	0.2387	0.0002	0.0024
PCOD8314793	13.39	21.16	0.23	1.6072	0.0092	2.6242	0.0253	3.0504	0.0692	0.0383	0.1524	0.2266	0.0000	0.0013
PCOD8314890	13.39	20.46	0.25	1.6056	0.0075	2.6216	0.0282	3.0594	0.0574	0.0272	0.1218	0.2076	0.0000	0.0026
PCOD8269770	13.39	21.38	0.38	1.6047	0.0086	2.6203	0.0207	3.0639	0.0716	0.0343	0.1112	0.2262	0.0002	0.0027
PCOD8311295	13.42	20.82	0.02	1.6069	0.0099	2.6239	0.0213	3.0516	0.0677	0.0405	0.0832	0.2136	0.0002	0.0013
PCOD8288263	13.42	19.71	0.73	1.6047	0.0091	2.6202	0.0314	3.0629	0.0806	0.0374	0.1434	0.2487	0.0000	0.0020
PCOD8303095	13.44	22.06	0.89	1.6076	0.0120	2.6247	0.0330	3.0472	0.0754	0.0361	0.1338	0.2575	0.0001	0.0002
PCOD8288101	13.44	20.89	0.09	1.6060	0.0084	2.6223	0.0281	3.0571	0.0732	0.0332	0.1135	0.2254	0.0001	0.0022
PCOD8287396	13.45	21.61	0.60	1.6059	0.0120	2.6221	0.0334	3.0570	0.0887	0.0433	0.1507	0.3012	0.0001	0.0016
<u>PCOD8060369</u>	13.49	21.47	0.53	1.6036	0.0091	2.6177	0.0524	3.0692	0.0827	0.0461	<u>0.2793</u>	0.2708	0.0006	0.0027
PCOD8328754	13.49	20.99	0.21	1.6079	0.0122	2.6249	0.0442	3.0467	0.0742	0.0445	0.2042	0.2415	0.0004	0.0012
PCOD8196703	13.51	21.10	0.30	1.6042	0.0117	2.6194	0.0331	3.0650	0.0751	0.0566	0.1910	0.2845	0.0000	0.0016
PCOD8197313	13.52	20.46	0.12	1.6037	0.0101	2.6185	0.0301	3.0685	0.0733	0.0488	0.1538	0.2594	0.0000	0.0024
PCOD8265550	13.52	20.97	0.22	1.6059	0.0118	2.6218	0.0421	3.0564	0.0594	0.0511	0.2255	0.2201	0.0004	0.0012
PCOD8303406	13.52	21.77	0.78	1.6078	0.0146	2.6246	0.0490	3.0462	0.0569	0.0609	0.1892	0.2148	0.0005	0.0000
PCOD8301801	13.53	20.89	0.18	1.6060	0.0065	2.6222	0.0320	3.0570	0.0603	0.0256	0.1257	0.1999	0.0001	0.0020
PCOD8256590	13.53	20.56	0.05	1.6041	0.0095	2.6193	0.0322	3.0663	0.0774	0.0358	0.1271	0.2267	0.0000	0.0024
PCOD8195289	13.54	20.00	0.41	1.6025	0.0107	2.6165	0.0340	3.0748	0.0721	0.0456	0.1358	0.2561	0.0001	0.0027
PCOD8325423	13.54	20.41	0.13	1.6077	0.0127	2.6252	0.0348	3.0467	0.0506	0.0476	0.1322	0.2193	0.0001	0.0004
PCOD8265317	13.55	20.22	0.25	1.6037	0.0085	2.6185	0.0290	3.0683	0.0482	0.0375	0.1399	0.1879	0.0001	0.0021
PCOD8196488	13.56	20.75	0.11	1.6045	0.0090	2.6199	0.0217	3.0646	0.0706	0.0387	0.1187	0.2491	0.0002	0.0023
PCOD8292270	13.58	21.74	0.81	1.6062	0.0100	2.6228	0.0290	3.0559	0.0793	0.0366	0.1156	0.2579	0.0001	0.0023
PCOD8196716	13.60	20.72	0.13	1.6043	0.0089	2.6197	0.0232	3.0652	0.0719	0.0342	0.1225	0.2463	0.0002	0.0023
PCOD8197302	13.60	20.82	0.20	1.6034	0.0095	2.6180	0.0289	3.0702	0.0775	0.0384	0.1227	0.2298	0.0001	0.0029
PCOD8265707	13.60	20.76	0.16	1.6054	0.0122	2.6211	0.0372	3.0586	0.0635	0.0529	0.1563	0.2341	0.0002	0.0009
PCOD8326837	13.61	19.88	0.43	1.6082	0.0091	2.6259	0.0308	3.0443	0.0442	0.0447	0.1088	0.2008	0.0000	0.0003
PCOD8328645	13.63	21.31	0.57	1.6071	0.0105	2.6241	0.0281	3.0504	0.0524	0.0419	0.1014	0.2253	0.0001	0.0008
PCOD8317699	13.63	20.48	0.00	1.6040	0.0115	2.6187	0.0387	3.0677	0.0647	0.0403	0.1499	0.2340	0.0004	0.0032
PCOD8275237	13.64	21.35	0.61	1.6085	0.0075	2.6264	0.0334	3.0432	0.0556	0.0342	0.1753	0.2058	0.0000	0.0007
PCOD8293227	13.64	21.51	0.72	1.6057	0.0082	2.6218	0.0308	3.0591	0.0766	0.0329	0.1191	0.2244	0.0001	0.0027

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8265151	13.65	21.66	0.83	1.6058	0.0100	2.6221	0.0262	3.0580	0.0703	0.0338	0.1174	0.2180	0.0001	0.0024
PCOD8275122	13.67	20.69	0.19	1.6054	0.0056	2.6214	0.0281	3.0606	0.0645	0.0194	0.0862	0.1819	0.0001	0.0026
PCOD8196700	13.70	20.05	0.22	1.6036	0.0107	2.6184	0.0305	3.0681	0.0729	0.0454	0.1521	0.2420	0.0000	0.0017
PCOD8195290	13.70	19.82	0.38	1.6035	0.0105	2.6183	0.0245	3.0686	0.0741	0.0405	0.1141	0.2451	0.0001	0.0016
PCOD8323838	13.70	19.89	0.33	1.6075	0.0053	2.6249	0.0251	3.0488	0.0360	0.0193	0.0821	0.1164	0.0002	0.0015
PCOD8298125	13.71	21.76	0.96	1.6045	0.0120	2.6198	0.0287	3.0640	0.0767	0.0432	0.1173	0.2310	0.0001	0.0016
PCOD8267100	13.74	21.40	0.74	1.6041	0.0107	2.6193	0.0296	3.0667	0.0835	0.0447	0.1267	0.2410	0.0001	0.0027
PCOD8315812	13.75	20.52	0.14	1.6047	0.0119	2.6198	0.0408	3.0630	0.0618	0.0509	0.1849	0.2170	0.0004	0.0017
PCOD8256706	13.76	20.80	0.35	1.6049	0.0094	2.6205	0.0310	3.0620	0.0848	0.0344	0.1272	0.2388	0.0000	0.0019
PCOD8275117	13.78	19.70	0.38	1.6050	0.0060	2.6209	0.0225	3.0620	0.0600	0.0198	0.0931	0.1870	0.0002	0.0025
PCOD8297293	13.79	20.34	0.06	1.6065	0.0086	2.6229	0.0357	3.0539	0.0490	0.0392	0.1165	0.1716	0.0002	0.0015
PCOD8287179	13.79	20.30	0.04	1.6060	0.0110	2.6222	0.0310	3.0558	0.0677	0.0479	0.1640	0.2604	0.0000	0.0010
PCOD8299421	13.80	20.00	0.15	1.6044	0.0069	2.6198	0.0190	3.0652	0.0615	0.0344	0.0780	0.1826	0.0002	0.0025
PCOD8265367	13.81	20.82	0.41	1.6045	0.0133	2.6194	0.0467	3.0634	0.0633	0.0506	0.1645	0.1800	0.0005	0.0014
PCOD8275293	13.84	19.31	0.59	1.6040	0.0124	2.6189	0.0350	3.0662	0.0789	0.0473	0.1913	0.2687	0.0001	0.0016
PCOD8328391	13.84	19.97	0.14	1.6069	0.0089	2.6238	0.0225	3.0510	0.0531	0.0301	0.1024	0.2117	0.0001	0.0005
PCOD8266160	13.86	20.48	0.23	1.6069	0.0110	2.6232	0.0458	3.0513	0.0632	0.0417	0.1959	0.2217	0.0005	0.0007
PCOD8269892	13.86	20.84	0.48	1.6044	0.0087	2.6198	0.0228	3.0651	0.0723	0.0350	0.1230	0.2510	0.0001	0.0024
PCOD8319324	13.87	20.81	0.46	1.6054	0.0087	2.6214	0.0261	3.0595	0.0660	0.0360	0.0903	0.2153	0.0001	0.0018
PCOD8200214	13.87	20.70	0.39	1.6046	0.0090	2.6201	0.0199	3.0641	0.0692	0.0333	0.1141	0.2333	0.0001	0.0023
PCOD8328215	13.90	20.09	0.00	1.6074	0.0055	2.6247	0.0203	3.0500	0.0425	0.0215	0.0832	0.1253	0.0002	0.0019
PCOD8256619	13.90	20.61	0.36	1.6047	0.0092	2.6202	0.0319	3.0630	0.0838	0.0346	0.1316	0.2371	0.0000	0.0019
PCOD8328398	13.91	20.86	0.54	1.6051	0.0093	2.6207	0.0324	3.0618	0.0627	0.0340	0.1468	0.2197	0.0000	0.0024
PCOD8197948	13.91	20.47	0.27	1.6029	0.0102	2.6172	0.0308	3.0724	0.0779	0.0399	0.1464	0.2268	0.0001	0.0026
<u>PCOD8224235</u>	13.92	19.81	0.17	1.6041	0.0092	2.6190	0.0263	3.0679	<u>0.1021</u>	0.0379	0.1239	<u>0.3681</u>	0.0001	0.0038
PCOD8329311	13.93	20.68	0.44	1.6050	0.0084	2.6206	0.0300	3.0627	0.0565	0.0365	0.1217	0.2250	0.0000	0.0028
PCOD8255636	13.95	20.43	0.29	1.6044	0.0119	2.6195	0.0358	3.0641	0.0738	0.0496	0.1964	0.2662	0.0002	0.0015
PCOD8207198	13.95	20.98	0.66	1.6038	0.0102	2.6184	0.0404	3.0689	0.0855	0.0462	0.1566	0.2723	0.0004	0.0035
PCOD8287889	13.95	20.61	0.41	1.6063	0.0133	2.6226	0.0365	3.0542	0.0596	0.0493	0.1452	0.2273	0.0001	0.0007
PCOD8275434	13.95	20.87	0.59	1.6081	0.0100	2.6257	0.0375	3.0453	0.0741	0.0376	0.1638	0.2964	0.0001	0.0010
PCOD8328938	13.96	20.89	0.62	1.6053	0.0114	2.6212	0.0290	3.0599	0.0588	0.0381	0.1354	0.2207	0.0001	0.0016

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8256599	13.96	20.01	0.01	1.6062	0.0111	2.6225	0.0324	3.0547	0.0660	0.0469	0.1630	0.2411	0.0001	0.0009
PCOD8266000	13.99	20.34	0.26	1.6043	0.0082	2.6196	0.0252	3.0655	0.0670	0.0365	0.1091	0.2457	0.0000	0.0026
PCOD8267108	13.99	19.58	0.25	1.6028	0.0122	2.6171	0.0250	3.0720	0.0728	0.0458	0.1138	0.2501	0.0001	0.0014
PCOD8297653	14.03	19.57	0.21	1.6060	0.0108	2.6219	0.0376	3.0550	0.0625	0.0437	0.2090	0.2414	0.0003	0.0000
PCOD8298176	14.05	19.47	0.27	1.6049	0.0068	2.6205	0.0272	3.0621	0.0603	0.0251	0.1067	0.1988	0.0001	0.0019
PCOD8297464	14.06	20.09	0.16	1.6034	0.0121	2.6179	0.0381	3.0703	0.0800	0.0460	0.1665	0.2599	0.0002	0.0029
PCOD8330346	14.06	20.41	0.38	1.6033	0.0120	2.6177	0.0390	3.0709	0.0819	0.0474	0.1634	0.2612	0.0002	0.0031
PCOD8195614	14.09	20.34	0.37	1.6045	0.0102	2.6199	0.0333	3.0643	0.0660	0.0418	0.1468	0.2495	0.0000	0.0021
PCOD8275569	14.10	20.31	0.35	1.6082	0.0128	2.6256	0.0379	3.0427	0.0644	0.0529	0.2012	0.2473	0.0003	0.0012
PCOD8172248	14.10	19.87	0.06	1.6067	0.0087	2.6235	0.0242	3.0518	0.0531	0.0268	0.1094	0.2077	0.0001	0.0005
<u>PCOD8217478</u>	14.10	20.26	0.32	1.6046	0.0074	2.6195	0.0342	3.0672	<u>0.1082</u>	0.0275	0.1629	<u>0.3693</u>	0.0004	<u>0.0055</u>
PCOD8265628	14.10	19.48	0.21	1.6087	0.0089	2.6267	0.0254	3.0398	0.0526	0.0333	0.1136	0.2161	0.0001	0.0018
PCOD8299431	14.10	19.58	0.15	1.6064	0.0090	2.6230	0.0332	3.0537	0.0650	0.0358	0.1157	0.2502	0.0000	0.0011
PCOD8255669	14.11	20.09	0.22	1.6060	0.0117	2.6221	0.0359	3.0561	0.0649	0.0500	0.1841	0.2193	0.0001	0.0010
PCOD8307695	14.12	20.21	0.31	1.6069	0.0086	2.6236	0.0345	3.0520	0.0386	0.0455	0.1379	0.1434	0.0000	0.0014
PCOD8200326	14.13	20.14	0.27	1.6039	0.0087	2.6190	0.0250	3.0676	0.0699	0.0386	0.1002	0.2450	0.0001	0.0026
PCOD8059486	14.14	19.93	0.13	1.6038	0.0068	2.6188	0.0207	3.0682	0.0655	0.0313	0.0967	0.2064	0.0001	0.0027
PCOD8293232	14.16	20.25	0.38	1.6045	0.0123	2.6195	0.0381	3.0637	0.0737	0.0496	0.1937	0.2523	0.0002	0.0014
PCOD8309154	14.16	20.42	0.50	1.6070	0.0080	2.6240	0.0333	3.0516	0.0331	0.0276	0.1325	0.1296	0.0000	0.0019
PCOD8275433	14.18	20.42	0.52	1.6055	0.0102	2.6214	0.0334	3.0589	0.0734	0.0402	0.1392	0.2360	0.0000	0.0016
PCOD8267700	14.19	19.26	0.28	1.6048	0.0123	2.6202	0.0381	3.0614	0.0761	0.0480	0.1635	0.2467	0.0001	0.0007
PCOD8325760	14.20	19.44	0.13	1.6038	0.0095	2.6185	0.0378	3.0671	0.0598	0.0335	0.1744	0.2234	0.0002	0.0016
PCOD8297555	14.21	19.85	0.15	1.6066	0.0092	2.6233	0.0325	3.0534	0.0678	0.0336	0.1418	0.2262	0.0001	0.0014
PCOD8328689	14.22	20.33	0.49	1.6025	0.0110	2.6164	0.0387	3.0751	0.0630	0.0523	0.1672	0.1954	0.0002	0.0032
PCOD8312182	14.22	20.02	0.28	1.6059	0.0083	2.6222	0.0298	3.0556	0.0456	0.0337	0.1194	0.1872	0.0001	0.0004
PCOD8255541	14.24	19.38	0.14	1.6068	0.0109	2.6234	0.0392	3.0509	0.0583	0.0415	0.1501	0.2177	0.0002	0.0002
PCOD8271001	14.25	19.72	0.10	1.6028	0.0096	2.6170	0.0315	3.0734	0.0713	0.0429	0.1292	0.2546	0.0000	0.0028
PCOD8292946	14.29	20.23	0.49	1.6052	0.0134	2.6208	0.0370	3.0595	0.0731	0.0539	0.1859	0.2588	0.0002	0.0009
PCOD8268839	14.31	20.01	0.35	1.6046	0.0094	2.6201	0.0288	3.0636	0.0655	0.0371	0.1129	0.2259	0.0001	0.0021
PCOD8316520	14.32	20.04	0.39	1.6016	0.0108	2.6150	0.0361	3.0789	0.0448	0.0483	0.1939	0.1660	0.0000	0.0024
PCOD8256296	14.32	19.71	0.17	1.6064	0.0144	2.6229	0.0355	3.0524	0.0573	0.0543	0.1394	0.1839	0.0000	0.0006

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8325449	14.32	19.83	0.24	1.6071	0.0125	2.6240	0.0343	3.0492	0.0742	0.0398	0.1386	0.2462	0.0001	0.0001
PCOD8319320	14.32	20.16	0.48	1.6050	0.0101	2.6208	0.0306	3.0610	0.0627	0.0451	0.1192	0.2458	0.0001	0.0014
PCOD8287561	14.33	19.90	0.30	1.6066	0.0133	2.6232	0.0339	3.0524	0.0550	0.0519	0.1458	0.2220	0.0001	0.0005
PCOD8327295	14.33	19.99	0.37	1.6074	0.0053	2.6248	0.0284	3.0486	0.0275	0.0192	0.1012	0.0740	0.0002	0.0008
PCOD8266162	14.34	19.00	0.30	1.6036	0.0072	2.6185	0.0221	3.0688	0.0650	0.0313	0.1064	0.1901	0.0001	0.0023
PCOD8314904	14.34	19.65	0.15	1.6054	0.0098	2.6214	0.0307	3.0589	0.0641	0.0465	0.1134	0.2686	0.0001	0.0013
PCOD8297297	14.37	20.16	0.52	1.6056	0.0090	2.6217	0.0260	3.0580	0.0748	0.0327	0.1027	0.2254	0.0001	0.0012
PCOD8275449	14.37	19.82	0.29	1.6051	0.0102	2.6207	0.0351	3.0610	0.0758	0.0381	0.1417	0.2394	0.0000	0.0017
PCOD8287401	14.38	19.43	0.03	1.6056	0.0125	2.6217	0.0304	3.0573	0.0585	0.0452	0.1128	0.2278	0.0000	0.0005
PCOD8297441	14.39	20.11	0.51	1.6052	0.0116	2.6210	0.0263	3.0593	0.0719	0.0448	0.1214	0.2773	0.0000	0.0005
PCOD8307496	14.40	18.78	0.39	1.6041	0.0084	2.6192	0.0294	3.0661	0.0463	0.0282	0.0990	0.1750	0.0000	0.0023
PCOD8323479	14.41	19.31	0.01	1.6067	0.0063	2.6235	0.0273	3.0524	0.0457	0.0272	0.0903	0.1984	0.0001	0.0009
PCOD8297785	14.45	19.70	0.28	1.6034	0.0076	2.6181	0.0249	3.0703	0.0714	0.0300	0.1066	0.1980	0.0001	0.0026
PCOD8288490	14.45	19.50	0.15	1.6050	0.0127	2.6204	0.0387	3.0604	0.0647	0.0545	0.1745	0.2108	0.0002	0.0005
PCOD8292952	14.46	19.53	0.18	1.6055	0.0122	2.6213	0.0338	3.0580	0.0667	0.0485	0.1900	0.2348	0.0001	0.0006
PCOD8297501	14.46	20.19	0.64	1.6058	0.0108	2.6219	0.0330	3.0570	0.0830	0.0357	0.1391	0.2603	0.0000	0.0012
PCOD8323497	14.49	20.15	0.63	1.6020	0.0112	2.6156	0.0377	3.0775	0.0651	0.0471	0.1386	0.1974	0.0001	0.0029
PCOD8323427	14.49	19.38	0.11	1.6020	0.0100	2.6158	0.0288	3.0771	0.0621	0.0406	0.1169	0.1984	0.0001	0.0025
PCOD8330370	14.50	19.37	0.11	1.6020	0.0101	2.6158	0.0285	3.0770	0.0622	0.0412	0.1157	0.2057	0.0001	0.0024
PCOD8329430	14.51	18.82	0.26	1.6042	0.0107	2.6193	0.0313	3.0645	0.0607	0.0360	0.1391	0.2137	0.0000	0.0008
PCOD8287380	14.52	19.61	0.30	1.6041	0.0119	2.6190	0.0375	3.0662	0.0788	0.0487	0.1991	0.2581	0.0002	0.0020
PCOD8330339	14.53	19.43	0.18	1.6027	0.0108	2.6166	0.0388	3.0739	0.0645	0.0370	0.1479	0.1941	0.0002	0.0028
PCOD8265454	14.53	19.06	0.07	1.6033	0.0090	2.6179	0.0284	3.0695	0.0704	0.0361	0.1153	0.2119	0.0000	0.0016
PCOD8287569	14.55	19.39	0.18	1.6030	0.0099	2.6172	0.0366	3.0721	0.0610	0.0378	0.1359	0.2547	0.0003	0.0028
PCOD8275130	14.56	19.30	0.12	1.6051	0.0057	2.6210	0.0243	3.0613	0.0566	0.0201	0.0876	0.1876	0.0002	0.0022
PCOD8329341	14.57	19.44	0.24	1.6053	0.0072	2.6212	0.0317	3.0601	0.0487	0.0240	0.1290	0.2263	0.0000	0.0020
<u>PCOD8167047</u>	14.59	19.46	0.26	1.6034	0.0103	2.6176	0.0334	3.0714	<u>0.1030</u>	0.0486	0.1665	<u>0.3951</u>	0.0005	0.0041
PCOD8330289	14.59	19.46	0.26	1.6055	0.0120	2.6213	0.0393	3.0583	0.0794	0.0436	0.1996	0.2701	0.0002	0.0013
PCOD8193855	14.60	19.63	0.39	1.6043	0.0076	2.6195	0.0286	3.0655	0.0583	0.0310	0.1110	0.2142	0.0000	0.0022
PCOD8258256	14.60	19.60	0.37	1.6042	0.0069	2.6196	0.0206	3.0657	0.0582	0.0349	0.0773	0.1765	0.0002	0.0023
PCOD8314357	14.60	18.69	0.25	1.6035	0.0099	2.6182	0.0345	3.0684	0.0522	0.0420	0.1489	0.1643	0.0000	0.0013

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8327944</b>	14.63	19.80	0.54	1.6060	0.0098	2.6223	0.0340	3.0551	0.0653	0.0339	0.1274	0.2002	0.0000	0.0004
<b>PCOD8292750</b>	14.65	19.14	0.11	1.6041	0.0056	2.6193	0.0232	3.0668	0.0585	0.0228	0.0815	0.1886	0.0001	0.0026
<b>PCOD8084708</b>	14.66	19.03	0.04	1.6044	0.0087	2.6195	0.0319	3.0640	0.0613	0.0367	0.1479	0.2000	0.0001	0.0014
<b>PCOD8315717</b>	14.66	19.22	0.17	1.6057	0.0106	2.6218	0.0277	3.0566	0.0648	0.0571	0.1257	0.2256	0.0001	0.0002
<b>PCOD8277571</b>	14.66	19.50	0.36	1.6059	0.0114	2.6220	0.0326	3.0562	0.0819	0.0487	0.1666	0.2911	0.0000	0.0008
<b>PCOD8288185</b>	14.66	18.91	0.04	1.6063	0.0117	2.6227	0.0312	3.0536	0.0668	0.0416	0.1390	0.2310	0.0000	0.0002
<b>PCOD8322647</b>	14.69	18.70	0.15	1.6061	0.0101	2.6226	0.0282	3.0551	0.0471	0.0462	0.1096	0.2031	0.0001	0.0010
<b>PCOD8255673</b>	14.70	19.09	0.12	1.6024	0.0103	2.6165	0.0282	3.0743	0.0655	0.0414	0.0965	0.1969	0.0001	0.0019
<b>PCOD8177390</b>	14.72	19.31	0.29	1.6038	0.0110	2.6187	0.0341	3.0676	0.0679	0.0476	0.1464	0.2624	0.0000	0.0021
<b>PCOD8275859</b>	14.74	19.10	0.17	1.6053	0.0111	2.6211	0.0309	3.0591	0.0805	0.0469	0.1581	0.2726	0.0000	0.0007
<b>PCOD8250146</b>	14.74	19.02	0.11	1.6038	0.0109	2.6186	0.0348	3.0678	0.0659	0.0462	0.1461	0.2482	0.0000	0.0021
<b>PCOD8182441</b>	14.76	19.42	0.40	1.6040	0.0108	2.6189	0.0355	3.0669	0.0696	0.0441	0.1501	0.2531	0.0001	0.0021
<b>PCOD8194789</b>	14.77	19.06	0.17	1.6025	0.0111	2.6166	0.0316	3.0737	0.0684	0.0443	0.1151	0.2391	0.0000	0.0017
<b>PCOD8321687</b>	14.77	19.09	0.20	1.6052	0.0075	2.6211	0.0342	3.0602	0.0408	0.0232	0.1353	0.1584	0.0000	0.0017
<b>PCOD8177901</b>	14.78	19.08	0.19	1.6034	0.0075	2.6181	0.0281	3.0701	0.0544	0.0315	0.1106	0.2281	0.0000	0.0027
<b>PCOD8323210</b>	14.79	19.30	0.36	1.6053	0.0079	2.6211	0.0332	3.0599	0.0427	0.0295	0.1203	0.1837	0.0001	0.0016
<b>PCOD8195078</b>	14.80	18.88	0.07	1.6036	0.0074	2.6185	0.0263	3.0687	0.0509	0.0327	0.0943	0.2254	0.0001	0.0024
<b>PCOD8275951</b>	14.80	19.28	0.35	1.6057	0.0105	2.6215	0.0393	3.0561	0.0732	0.0396	0.1709	0.2702	0.0002	0.0003
<b>PCOD8195292</b>	14.80	19.24	0.33	1.6034	0.0120	2.6180	0.0270	3.0686	0.0706	0.0435	0.1035	0.2473	0.0000	0.0009
<b>PCOD8267707</b>	14.81	19.07	0.21	1.6041	0.0113	2.6191	0.0358	3.0653	0.0791	0.0467	0.1505	0.2595	0.0001	0.0014
<b>PCOD8239101</b>	14.81	18.76	0.00	1.6055	0.0082	2.6217	0.0216	3.0578	0.0567	0.0292	0.0914	0.1927	0.0002	0.0007
<b>PCOD8324829</b>	14.82	18.80	0.04	1.6063	0.0093	2.6228	0.0290	3.0545	0.0454	0.0404	0.1091	0.2087	0.0001	0.0010
<b>PCOD8287405</b>	14.82	19.51	0.53	1.6057	0.0103	2.6218	0.0309	3.0572	0.0765	0.0460	0.1890	0.2409	0.0000	0.0010
<b>PCOD8270297</b>	14.84	19.05	0.23	1.6031	0.0095	2.6176	0.0250	3.0706	0.0729	0.0455	0.1400	0.2665	0.0001	0.0015
<b>PCOD8297791</b>	14.84	19.02	0.21	1.6066	0.0114	2.6231	0.0357	3.0511	0.0688	0.0458	0.1671	0.2348	0.0002	0.0006
<b>PCOD8327297</b>	14.84	19.11	0.28	1.6064	0.0075	2.6231	0.0278	3.0540	0.0484	0.0364	0.0917	0.1725	0.0001	0.0013
<b>PCOD8201211</b>	14.84	19.25	0.38	1.6049	0.0069	2.6206	0.0303	3.0620	0.0519	0.0307	0.1071	0.1965	0.0000	0.0019
<b>PCOD8323974</b>	14.85	18.97	0.18	1.6064	0.0076	2.6230	0.0280	3.0540	0.0489	0.0372	0.0925	0.1715	0.0001	0.0012
<b>PCOD8059487</b>	14.85	19.48	0.54	1.6035	0.0070	2.6182	0.0241	3.0695	0.0631	0.0312	0.0972	0.2066	0.0000	0.0024
<b>PCOD8288184</b>	14.86	18.82	0.09	1.6055	0.0088	2.6215	0.0252	3.0581	0.0626	0.0477	0.1093	0.2095	0.0000	0.0009
<b>PCOD8255854</b>	14.86	19.38	0.48	1.6066	0.0118	2.6233	0.0342	3.0519	0.0751	0.0449	0.2003	0.2419	0.0001	0.0003

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8078966	14.91	18.17	0.30	1.6061	0.0114	2.6219	0.0440	3.0539	0.0574	0.0539	0.1700	0.1910	0.0005	0.0005
PCOD8188014	14.91	19.01	0.28	1.6028	0.0101	2.6171	0.0269	3.0725	0.0660	0.0403	0.1121	0.2324	0.0001	0.0020
PCOD8316462	14.91	18.53	0.05	1.6070	0.0082	2.6239	0.0300	3.0493	0.0588	0.0385	0.1231	0.2227	0.0000	0.0007
PCOD8268335	14.92	18.93	0.23	1.6042	0.0110	2.6192	0.0363	3.0649	0.0773	0.0441	0.1411	0.2415	0.0001	0.0011
PCOD8206296	14.93	19.05	0.32	1.6030	0.0099	2.6174	0.0265	3.0715	0.0664	0.0372	0.1164	0.2322	0.0001	0.0019
PCOD8174197	14.95	18.55	0.00	1.6013	0.0083	2.6146	0.0221	3.0807	0.0672	0.0311	0.1127	0.1838	0.0000	0.0027
PCOD8318888	14.95	18.54	0.01	1.6041	0.0101	2.6193	0.0271	3.0654	0.0591	0.0440	0.1528	0.1867	0.0000	0.0015
PCOD8313047	14.97	18.91	0.27	1.6070	0.0050	2.6241	0.0241	3.0511	0.0317	0.0237	0.1091	0.0992	0.0001	0.0012
PCOD8288548	14.98	19.04	0.37	1.6042	0.0124	2.6193	0.0369	3.0638	0.0736	0.0573	0.1840	0.2452	0.0001	0.0005
PCOD8292983	14.98	18.58	0.05	1.6059	0.0111	2.6221	0.0311	3.0549	0.0711	0.0438	0.1788	0.2330	0.0000	0.0002
PCOD8250245	15.03	18.74	0.21	1.6036	0.0112	2.6183	0.0363	3.0678	0.0665	0.0454	0.1411	0.2267	0.0001	0.0015
PCOD8265597	15.04	18.54	0.09	1.6040	0.0105	2.6191	0.0283	3.0657	0.0631	0.0503	0.1540	0.2318	0.0001	0.0013
PCOD8250160	15.06	18.66	0.19	1.6044	0.0096	2.6197	0.0344	3.0637	0.0674	0.0386	0.1380	0.2350	0.0000	0.0012
PCOD8188016	15.06	18.78	0.27	1.6044	0.0097	2.6196	0.0343	3.0638	0.0683	0.0386	0.1383	0.2352	0.0000	0.0012
PCOD8224441	15.07	18.33	0.03	1.6032	0.0083	2.6176	0.0317	3.0708	0.0616	0.0312	0.1336	0.1963	0.0000	0.0022
PCOD8206321	15.08	18.29	0.05	1.6037	0.0093	2.6185	0.0349	3.0674	0.0673	0.0388	0.1430	0.2424	0.0001	0.0015
PCOD8323436	15.08	18.41	0.04	1.6052	0.0065	2.6209	0.0342	3.0602	0.0487	0.0247	0.1318	0.1794	0.0000	0.0014
PCOD8330439	15.09	18.59	0.17	1.6016	0.0086	2.6152	0.0263	3.0788	0.0480	0.0331	0.0840	0.1654	0.0001	0.0023
PCOD8188445	15.10	18.45	0.09	1.6021	0.0100	2.6160	0.0271	3.0758	0.0601	0.0370	0.0973	0.2135	0.0000	0.0021
PCOD8194773	15.10	18.41	0.06	1.6022	0.0098	2.6161	0.0271	3.0755	0.0564	0.0407	0.1022	0.2298	0.0000	0.0021
PCOD8246232	15.11	18.58	0.18	1.6047	0.0068	2.6201	0.0309	3.0631	0.0445	0.0301	0.1186	0.2015	0.0000	0.0019
PCOD8068543	15.11	18.65	0.23	1.6038	0.0096	2.6188	0.0310	3.0675	0.0639	0.0418	0.1159	0.2457	0.0001	0.0021
PCOD8268342	15.11	18.24	0.05	1.6048	0.0109	2.6202	0.0335	3.0611	0.0778	0.0435	0.1563	0.2748	0.0001	0.0002
PCOD8235824	15.11	18.63	0.22	1.6034	0.0105	2.6180	0.0313	3.0689	0.0653	0.0406	0.1463	0.2403	0.0000	0.0013
PCOD8188450	15.11	18.65	0.23	1.6035	0.0105	2.6181	0.0315	3.0685	0.0654	0.0407	0.1501	0.2434	0.0000	0.0013
PCOD8298585	15.12	18.19	0.08	1.6043	0.0112	2.6195	0.0345	3.0634	0.0764	0.0452	0.1569	0.2687	0.0001	0.0004
PCOD8321589	15.18	18.56	0.24	1.6014	0.0098	2.6148	0.0331	3.0794	0.0647	0.0312	0.1186	0.2024	0.0001	0.0019
PCOD8267763	15.19	18.21	0.01	1.6047	0.0107	2.6200	0.0335	3.0616	0.0778	0.0407	0.1538	0.2660	0.0001	0.0002
PCOD8298581	15.21	18.17	0.00	1.6045	0.0113	2.6197	0.0341	3.0626	0.0764	0.0423	0.1542	0.2686	0.0001	0.0003
PCOD8265036	15.22	18.30	0.10	1.6034	0.0070	2.6180	0.0312	3.0702	0.0424	0.0232	0.1274	0.1834	0.0000	0.0026
PCOD8287551	15.22	18.45	0.20	1.6034	0.0074	2.6182	0.0237	3.0695	0.0632	0.0302	0.1059	0.1853	0.0001	0.0020



Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8194038</b>	15.24	18.34	0.14	1.6027	0.0100	2.6169	0.0333	3.0726	0.0577	0.0363	0.1229	0.1841	0.0001	0.0018
<b>PCOD8084804</b>	15.24	18.30	0.12	1.6035	0.0112	2.6181	0.0340	3.0681	0.0647	0.0523	0.1892	0.2523	0.0001	0.0011
<b>PCOD8287407</b>	15.24	18.31	0.13	1.6047	0.0113	2.6201	0.0375	3.0617	0.0791	0.0503	0.2089	0.2660	0.0002	0.0007
<b>PCOD8191654</b>	15.25	18.28	0.11	1.6030	0.0101	2.6173	0.0324	3.0711	0.0660	0.0438	0.1502	0.2306	0.0000	0.0014
<b>PCOD8191655</b>	15.26	18.29	0.13	1.6032	0.0102	2.6176	0.0331	3.0700	0.0659	0.0442	0.1649	0.2383	0.0000	0.0013
<b>PCOD8275488</b>	15.26	18.14	0.04	1.6063	0.0072	2.6225	0.0317	3.0537	0.0590	0.0380	0.1712	0.2547	0.0003	0.0004
<b>PCOD8202737</b>	15.26	18.37	0.19	1.6032	0.0098	2.6177	0.0322	3.0700	0.0668	0.0446	0.1516	0.2350	0.0000	0.0013
<b>PCOD8224778</b>	15.28	18.25	0.12	1.6031	0.0098	2.6176	0.0320	3.0701	0.0658	0.0431	0.1611	0.2369	0.0000	0.0013
<b>PCOD8207674</b>	15.30	17.79	0.17	1.6024	0.0110	2.6163	0.0334	3.0738	0.0709	0.0445	0.1377	0.2324	0.0000	0.0013
<b>PCOD8323005</b>	15.31	18.18	0.10	1.6063	0.0109	2.6225	0.0346	3.0539	0.0748	0.0510	0.2114	0.2574	0.0002	0.0004
<b>PCOD8235822</b>	15.32	18.53	0.36	1.6040	0.0104	2.6190	0.0322	3.0655	0.0686	0.0456	0.1635	0.2615	0.0000	0.0011
<b>PCOD8327501</b>	15.35	18.23	0.18	1.6047	0.0070	2.6202	0.0263	3.0624	0.0495	0.0276	0.1014	0.2073	0.0001	0.0012
<b>PCOD8057587</b>	15.35	18.33	0.25	1.6041	0.0068	2.6191	0.0349	3.0664	0.0457	0.0295	0.1400	0.2029	0.0001	0.0023
<b>PCOD8207815</b>	15.35	18.16	0.14	1.6025	0.0081	2.6166	0.0256	3.0740	0.0678	0.0388	0.1476	0.2033	0.0000	0.0020
<b>PCOD8057582</b>	15.36	18.68	0.50	1.6044	0.0098	2.6197	0.0327	3.0633	0.0679	0.0400	0.1491	0.2307	0.0000	0.0009
<b>PCOD8270296</b>	15.38	18.23	0.22	1.6030	0.0099	2.6174	0.0241	3.0704	0.0705	0.0445	0.1335	0.2526	0.0001	0.0008
<b>PCOD8172547</b>	15.39	18.51	0.41	1.6041	0.0107	2.6192	0.0266	3.0649	0.0594	0.0302	0.0898	0.1968	0.0001	0.0008
<b>PCOD8246794</b>	15.39	18.31	0.28	1.6068	0.0084	2.6235	0.0333	3.0506	0.0774	0.0298	0.1511	0.2451	0.0001	0.0002
<b>PCOD8239268</b>	15.40	18.35	0.32	1.6028	0.0095	2.6170	0.0292	3.0724	0.0503	0.0401	0.1277	0.2191	0.0000	0.0018
<b>PCOD8068618</b>	15.42	18.22	0.25	1.6040	0.0083	2.6190	0.0316	3.0661	0.0641	0.0392	0.1314	0.2282	0.0000	0.0014
<b>PCOD8287233</b>	15.43	17.88	0.02	1.6047	0.0108	2.6203	0.0323	3.0615	0.0618	0.0451	0.1495	0.2101	0.0000	0.0006
<b>PCOD8293075</b>	15.46	17.81	0.01	1.6049	0.0095	2.6200	0.0342	3.0608	0.0699	0.0507	0.1536	0.2760	0.0004	0.0004
<b>PCOD8275312</b>	15.46	18.05	0.17	1.6051	0.0076	2.6207	0.0353	3.0618	0.0624	0.0282	0.1381	0.2409	0.0002	0.0029
<b>PCOD8069999</b>	15.47	18.18	0.26	1.6048	0.0084	2.6204	0.0289	3.0615	0.0648	0.0382	0.1246	0.2230	0.0001	0.0011
<b>PCOD8298395</b>	15.47	17.68	0.08	1.6044	0.0106	2.6196	0.0322	3.0627	0.0789	0.0405	0.1569	0.2657	0.0001	0.0002
<b><u>PCOD8202721</u></b>	15.48	18.44	0.45	1.6029	0.0125	2.6171	0.0356	3.0711	0.0713	<u>0.0676</u>	0.1819	0.2450	0.0001	0.0010
<b>PCOD8069998</b>	15.48	18.27	0.34	1.6049	0.0083	2.6206	0.0287	3.0610	0.0652	0.0348	0.1169	0.2288	0.0001	0.0010
<b>PCOD8292231</b>	15.48	18.00	0.15	1.6043	0.0084	2.6195	0.0288	3.0645	0.0413	0.0302	0.1203	0.1857	0.0000	0.0014
<b><u>PCOD8191641</u></b>	15.48	18.41	0.44	1.6030	0.0122	2.6173	0.0358	3.0705	0.0713	<u>0.0685</u>	0.1903	0.2502	0.0001	0.0010
<b>PCOD8164664</b>	15.51	17.95	0.15	1.6036	0.0113	2.6185	0.0260	3.0669	0.0625	0.0366	0.1185	0.2018	0.0001	0.0005
<b>PCOD8265788</b>	15.53	17.65	0.03	1.6027	0.0104	2.6168	0.0367	3.0716	0.0488	0.0369	0.1835	0.1716	0.0001	0.0007

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8070119	15.53	17.89	0.13	1.6041	0.0083	2.6192	0.0305	3.0656	0.0665	0.0409	0.1352	0.2483	0.0000	0.0015
PCOD8329212	15.54	17.84	0.10	1.6034	0.0092	2.6179	0.0308	3.0688	0.0568	0.0469	0.1302	0.2423	0.0000	0.0010
PCOD8266005	15.54	17.59	0.06	1.6027	0.0082	2.6169	0.0226	3.0729	0.0582	0.0304	0.0938	0.2095	0.0000	0.0020
PCOD8194995	15.54	17.89	0.14	1.6033	0.0106	2.6180	0.0261	3.0679	0.0684	0.0423	0.1196	0.2516	0.0001	0.0001
PCOD8266251	15.55	17.92	0.17	1.6021	0.0121	2.6157	0.0386	3.0760	0.0733	0.0550	0.1773	0.2506	0.0002	0.0022
PCOD8250254	15.55	17.79	0.09	1.6034	0.0078	2.6178	0.0370	3.0690	0.0543	0.0331	0.1537	0.1954	0.0003	0.0016
PCOD8068380	15.56	18.02	0.25	1.6055	0.0086	2.6215	0.0267	3.0584	0.0466	0.0382	0.0967	0.1742	0.0001	0.0010
PCOD8323814	15.57	17.66	0.01	1.6028	0.0064	2.6170	0.0370	3.0716	0.0781	0.0304	0.1826	0.2430	0.0001	0.0011
PCOD8206142	15.57	18.03	0.26	1.6036	0.0094	2.6182	0.0349	3.0684	0.0514	0.0434	0.1363	0.1859	0.0001	0.0018
PCOD8266271	15.59	17.92	0.21	1.6030	0.0081	2.6174	0.0266	3.0715	0.0571	0.0311	0.1103	0.1823	0.0001	0.0019
PCOD8206791	15.60	17.52	0.05	1.6043	0.0089	2.6196	0.0278	3.0645	0.0448	0.0409	0.1205	0.1364	0.0000	0.0015
PCOD8230635	15.61	17.71	0.09	1.6014	0.0109	2.6149	0.0269	3.0789	0.0614	0.0335	0.1298	0.1936	0.0001	0.0016
PCOD8289850	15.62	17.55	0.02	1.6042	0.0111	2.6192	0.0348	3.0636	0.0661	0.0456	0.1550	0.2476	0.0001	0.0000
PCOD8057712	15.64	17.70	0.11	1.6037	0.0061	2.6185	0.0236	3.0681	0.0483	0.0234	0.0963	0.1916	0.0001	0.0019
PCOD8267340	15.65	17.58	0.03	1.6029	0.0078	2.6171	0.0334	3.0722	0.0468	0.0281	0.1327	0.1720	0.0001	0.0023
PCOD8298578	15.65	17.52	0.01	1.6018	0.0092	2.6153	0.0432	3.0764	0.0485	0.0380	0.2015	0.1695	0.0002	0.0012
PCOD8207623	15.67	17.48	0.01	1.6039	0.0094	2.6190	0.0265	3.0657	0.0514	0.0324	0.1221	0.1931	0.0001	0.0007
PCOD8196746	15.68	17.82	0.23	1.6024	0.0068	2.6165	0.0219	3.0748	0.0619	0.0214	0.0989	0.1753	0.0001	0.0023
PCOD8230113	15.69	17.51	0.03	1.6016	0.0093	2.6152	0.0276	3.0782	0.0595	0.0338	0.1461	0.1877	0.0001	0.0019
PCOD8286942	15.71	17.60	0.11	1.6017	0.0083	2.6154	0.0233	3.0778	0.0613	0.0355	0.0896	0.1855	0.0000	0.0021
PCOD8295265	15.71	17.07	0.25	1.6055	0.0088	2.6215	0.0267	3.0567	0.0661	0.0342	0.1400	0.2071	0.0000	0.0006
PCOD8323528	15.71	17.44	0.00	1.6072	0.0060	2.6243	0.0284	3.0492	0.0364	0.0255	0.0899	0.1039	0.0001	0.0002
PCOD8255844	15.71	17.61	0.12	1.6052	0.0091	2.6208	0.0392	3.0591	0.0469	0.0324	0.1590	0.1972	0.0001	0.0003
PCOD8079170	15.72	17.66	0.16	1.6039	0.0083	2.6187	0.0290	3.0667	0.0481	0.0330	0.1278	0.1876	0.0000	0.0014
PCOD8287412	15.74	17.65	0.17	1.6038	0.0067	2.6185	0.0273	3.0670	0.0574	0.0307	0.1319	0.2100	0.0001	0.0013
PCOD8114602	15.75	17.51	0.09	1.6022	0.0060	2.6162	0.0201	3.0755	0.0691	0.0197	0.0985	0.1913	0.0001	0.0019
PCOD8323410	15.78	17.51	0.11	1.6048	0.0072	2.6204	0.0279	3.0609	0.0452	0.0253	0.0900	0.1519	0.0000	0.0004
PCOD8230242	15.78	17.35	0.01	1.6044	0.0106	2.6196	0.0358	3.0628	0.0520	0.0410	0.1319	0.1880	0.0001	0.0003
PCOD8194699	15.79	17.70	0.26	1.6037	0.0079	2.6186	0.0287	3.0674	0.0448	0.0304	0.1222	0.1802	0.0001	0.0013
PCOD8256774	15.80	17.32	0.01	1.6011	0.0082	2.6143	0.0320	3.0809	0.0528	0.0332	0.1271	0.1844	0.0000	0.0022
PCOD8177285	15.80	17.41	0.07	1.6043	0.0077	2.6195	0.0246	3.0641	0.0542	0.0296	0.0884	0.2056	0.0000	0.0010

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8070065	15.80	17.42	0.08	1.6032	0.0087	2.6177	0.0286	3.0694	0.0648	0.0361	0.1449	0.2228	0.0000	0.0008
PCOD8250376	15.81	17.65	0.24	1.6040	0.0107	2.6191	0.0319	3.0654	0.0599	0.0436	0.1317	0.2070	0.0000	0.0008
PCOD8224299	15.82	17.43	0.11	1.6044	0.0078	2.6196	0.0253	3.0638	0.0538	0.0320	0.0904	0.1926	0.0000	0.0009
PCOD8323613	15.82	17.43	0.11	1.6028	0.0080	2.6169	0.0384	3.0735	0.0271	0.0299	0.1205	0.1269	0.0001	0.0028
PCOD8278736	15.84	17.33	0.05	1.6018	0.0067	2.6154	0.0264	3.0775	0.0721	0.0219	0.1254	0.2138	0.0000	0.0020
PCOD8328559	15.85	17.42	0.12	1.6048	0.0113	2.6204	0.0279	3.0605	0.0477	0.0457	0.1014	0.1703	0.0001	0.0002
PCOD8255699	15.86	17.55	0.23	1.6031	0.0100	2.6177	0.0279	3.0691	0.0690	0.0356	0.1306	0.2036	0.0001	0.0004
PCOD8202513	15.91	17.48	0.22	1.6050	0.0094	2.6207	0.0304	3.0603	0.0455	0.0401	0.1169	0.1477	0.0001	0.0007
PCOD8078965	15.92	17.55	0.29	1.6041	0.0109	2.6191	0.0324	3.0653	0.0620	0.0472	0.1339	0.2664	0.0001	0.0011
PCOD8287612	15.94	17.25	0.10	1.6036	0.0092	2.6182	0.0324	3.0690	0.0704	0.0381	0.1474	0.2471	0.0001	0.0023
PCOD8329960	15.95	17.39	0.20	1.6023	0.0112	2.6161	0.0382	3.0744	0.0660	0.0415	0.1676	0.2444	0.0001	0.0015
PCOD8256053	15.97	17.43	0.25	1.6030	0.0102	2.6173	0.0338	3.0719	0.0693	0.0410	0.1337	0.2408	0.0001	0.0025
PCOD8177530	15.97	16.94	0.08	1.6026	0.0092	2.6166	0.0318	3.0727	0.0564	0.0330	0.1276	0.2186	0.0000	0.0011
PCOD8079061	15.97	16.92	0.09	1.6033	0.0073	2.6178	0.0337	3.0699	0.0399	0.0315	0.1363	0.1495	0.0000	0.0017
PCOD8062906	15.99	17.05	0.01	1.6022	0.0095	2.6158	0.0387	3.0740	0.0677	0.0353	0.1710	0.2142	0.0002	0.0004
PCOD8210685	15.99	17.04	0.01	1.6034	0.0058	2.6180	0.0276	3.0693	0.0442	0.0218	0.1005	0.1766	0.0000	0.0017
PCOD8210396	15.99	17.46	0.30	1.6033	0.0091	2.6179	0.0305	3.0691	0.0532	0.0432	0.1206	0.2055	0.0000	0.0010
PCOD8084987	16.01	17.15	0.11	1.6021	0.0104	2.6157	0.0373	3.0756	0.0618	0.0556	0.1605	0.2574	0.0002	0.0016
PCOD8225818	16.02	17.02	0.02	1.6022	0.0095	2.6159	0.0385	3.0735	0.0680	0.0363	0.1929	0.2149	0.0002	0.0003
PCOD8292985	16.02	17.04	0.03	1.6039	0.0106	2.6189	0.0259	3.0659	0.0639	0.0424	0.1035	0.2255	0.0001	0.0006
PCOD8328802	16.03	17.42	0.31	1.6017	0.0099	2.6154	0.0323	3.0765	0.0586	0.0363	0.1275	0.2095	0.0001	0.0008
PCOD8230406	16.05	17.01	0.05	1.6047	0.0085	2.6201	0.0352	3.0620	0.0550	0.0366	0.1483	0.2155	0.0001	0.0010
PCOD8206627	16.06	17.09	0.11	1.6036	0.0081	2.6183	0.0317	3.0673	0.0528	0.0381	0.1511	0.1855	0.0001	0.0009
PCOD8224431	16.07	17.15	0.16	1.6047	0.0085	2.6201	0.0286	3.0619	0.0524	0.0341	0.1235	0.1752	0.0000	0.0006
PCOD8177499	16.07	17.15	0.16	1.6047	0.0085	2.6201	0.0286	3.0619	0.0524	0.0340	0.1234	0.1755	0.0000	0.0006
PCOD8250241	16.08	16.94	0.03	1.6004	0.0081	2.6132	0.0226	3.0847	0.0583	0.0283	0.0878	0.1810	0.0001	0.0023
PCOD8210273	16.08	17.05	0.11	1.6031	0.0050	2.6176	0.0260	3.0703	0.0336	0.0176	0.1076	0.1108	0.0000	0.0014
PCOD8267131	16.10	17.06	0.13	1.6035	0.0083	2.6183	0.0256	3.0677	0.0507	0.0289	0.0907	0.2166	0.0001	0.0007
PCOD8267175	16.10	17.13	0.18	1.6035	0.0086	2.6182	0.0316	3.0680	0.0459	0.0372	0.1426	0.2012	0.0000	0.0010
PCOD8206619	16.11	17.12	0.18	1.6020	0.0086	2.6157	0.0287	3.0762	0.0570	0.0295	0.1078	0.1792	0.0000	0.0016
PCOD8275162	16.12	16.81	0.02	1.6029	0.0040	2.6173	0.0289	3.0722	0.0317	0.0263	0.0888	0.1753	0.0000	0.0025

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8191840	16.14	17.04	0.16	1.6050	0.0089	2.6206	0.0306	3.0596	0.0562	0.0329	0.1184	0.2041	0.0001	0.0002
PCOD8323492	16.15	16.98	0.13	1.6049	0.0062	2.6205	0.0327	3.0615	0.0326	0.0266	0.1170	0.1367	0.0000	0.0012
PCOD8325695	16.17	16.79	0.02	1.6020	0.0112	2.6153	0.0422	3.0760	0.0567	0.0546	0.2535	0.2429	0.0004	0.0014
PCOD8275535	16.17	17.05	0.19	1.6044	0.0103	2.6197	0.0227	3.0629	0.0673	0.0409	0.0943	0.1800	0.0001	0.0002
PCOD8308140	16.18	16.78	0.02	1.6014	0.0063	2.6149	0.0297	3.0790	0.0364	0.0308	0.1044	0.1766	0.0000	0.0019
PCOD8068222	16.18	17.08	0.23	1.6014	0.0077	2.6145	0.0356	3.0794	0.0585	0.0320	0.1608	0.2408	0.0002	0.0021
PCOD8230860	16.19	17.03	0.20	1.6031	0.0108	2.6175	0.0387	3.0698	0.0561	0.0434	0.1684	0.2318	0.0001	0.0009
PCOD8086151	16.19	16.99	0.17	1.6039	0.0091	2.6189	0.0300	3.0661	0.0611	0.0321	0.1102	0.2024	0.0001	0.0009
PCOD8240750	16.19	16.85	0.08	1.6038	0.0085	2.6187	0.0296	3.0668	0.0602	0.0326	0.1030	0.2091	0.0001	0.0010
PCOD8057974	16.22	16.90	0.15	1.6032	0.0052	2.6178	0.0227	3.0700	0.0402	0.0229	0.0745	0.1903	0.0001	0.0017
PCOD8207762	16.23	16.98	0.21	1.6036	0.0112	2.6184	0.0275	3.0671	0.0578	0.0399	0.1067	0.2286	0.0001	0.0005
PCOD8256732	16.24	16.87	0.14	1.6010	0.0081	2.6142	0.0298	3.0806	0.0330	0.0287	0.0975	0.1072	0.0001	0.0014
PCOD8059987	16.24	16.79	0.09	1.6022	0.0099	2.6160	0.0313	3.0746	0.0555	0.0396	0.1382	0.1796	0.0000	0.0012
PCOD8208038	16.25	16.65	0.00	1.6030	0.0079	2.6175	0.0284	3.0710	0.0390	0.0282	0.1040	0.1519	0.0001	0.0015
PCOD8207692	16.25	16.74	0.06	1.6018	0.0092	2.6155	0.0307	3.0767	0.0591	0.0370	0.1318	0.1821	0.0000	0.0014
PCOD8241500	16.26	16.96	0.23	1.6017	0.0121	2.6153	0.0313	3.0768	0.0578	0.0464	0.1272	0.2242	0.0000	0.0009
PCOD8208037	16.27	16.89	0.18	1.6035	0.0100	2.6183	0.0284	3.0672	0.0529	0.0351	0.1109	0.2114	0.0001	0.0003
PCOD8217827	16.33	16.78	0.17	1.6022	0.0087	2.6160	0.0260	3.0752	0.0546	0.0312	0.0936	0.1928	0.0000	0.0017
PCOD8188235	16.34	16.61	0.06	1.6030	0.0086	2.6174	0.0278	3.0702	0.0616	0.0333	0.1097	0.2121	0.0001	0.0008
PCOD8269333	16.36	16.54	0.03	1.6021	0.0102	2.6159	0.0284	3.0746	0.0579	0.0350	0.1298	0.2231	0.0001	0.0005
PCOD8235524	16.37	16.49	0.01	1.6034	0.0090	2.6180	0.0300	3.0682	0.0595	0.0348	0.1132	0.1670	0.0000	0.0007
PCOD8230781	16.37	16.67	0.14	1.6049	0.0094	2.6204	0.0301	3.0605	0.0609	0.0425	0.1255	0.2312	0.0000	0.0003
PCOD8193306	16.38	16.56	0.06	1.6035	0.0078	2.6182	0.0265	3.0685	0.0423	0.0290	0.1083	0.1690	0.0001	0.0013
PCOD8255000	16.38	16.54	0.06	1.6035	0.0078	2.6183	0.0264	3.0684	0.0422	0.0295	0.1040	0.1669	0.0001	0.0013
PCOD8095196	16.39	16.58	0.09	1.6024	0.0071	2.6164	0.0282	3.0735	0.0289	0.0237	0.0970	0.0865	0.0000	0.0011
PCOD8058374	16.39	16.49	0.04	1.6034	0.0085	2.6179	0.0374	3.0683	0.0397	0.0393	0.1650	0.1844	0.0001	0.0008
PCOD8328480	16.40	16.61	0.13	1.6029	0.0105	2.6173	0.0273	3.0697	0.0602	0.0436	0.1013	0.2239	0.0000	0.0002
PCOD8258299	16.40	16.52	0.07	1.6025	0.0071	2.6166	0.0255	3.0731	0.0317	0.0245	0.0916	0.1296	0.0001	0.0010
PCOD8267808	16.40	16.56	0.09	1.6022	0.0082	2.6161	0.0308	3.0748	0.0479	0.0313	0.1230	0.1662	0.0000	0.0015
PCOD8079227	16.41	16.74	0.22	1.6043	0.0069	2.6194	0.0274	3.0644	0.0399	0.0249	0.1160	0.1763	0.0000	0.0011
PCOD8207879	16.41	16.50	0.06	1.6011	0.0095	2.6143	0.0286	3.0796	0.0635	0.0404	0.1398	0.1977	0.0000	0.0010

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8178950</b>	16.43	16.44	0.04	1.6019	0.0105	2.6156	0.0307	3.0758	0.0631	0.0415	0.1056	0.2066	0.0001	0.0009
<b>PCOD8241484</b>	16.44	16.47	0.07	1.6039	0.0122	2.6187	0.0334	3.0646	0.0521	0.0482	0.1558	0.1944	0.0001	0.0007
<b>PCOD8206399</b>	16.47	16.56	0.16	1.6038	0.0094	2.6185	0.0366	3.0665	0.0614	0.0537	0.1749	0.2612	0.0002	0.0008
<b>PCOD8274259</b>	16.47	16.52	0.13	1.6021	0.0077	2.6160	0.0245	3.0754	0.0452	0.0283	0.0964	0.1699	0.0001	0.0013
<b>PCOD8086115</b>	16.49	16.44	0.10	1.6044	0.0067	2.6198	0.0267	3.0627	0.0364	0.0276	0.1191	0.1587	0.0001	0.0002
<b>PCOD8327034</b>	16.50	16.48	0.14	1.6021	0.0081	2.6159	0.0300	3.0757	0.0273	0.0308	0.0844	0.1033	0.0001	0.0016
<b>PCOD8321602</b>	16.51	16.35	0.05	1.6021	0.0082	2.6159	0.0300	3.0756	0.0265	0.0303	0.0831	0.1018	0.0001	0.0015
<b>PCOD8240361</b>	16.53	16.38	0.10	1.6028	0.0110	2.6170	0.0308	3.0716	0.0592	0.0379	0.1295	0.2158	0.0000	0.0010
<b>PCOD8061081</b>	16.55	16.31	0.07	1.6030	0.0089	2.6174	0.0308	3.0705	0.0608	0.0373	0.1222	0.1929	0.0001	0.0010
<b>PCOD8057904</b>	16.55	16.27	0.04	1.6004	0.0100	2.6132	0.0292	3.0836	0.0556	0.0284	0.1073	0.1763	0.0000	0.0015
<b>PCOD8057902</b>	16.56	16.39	0.13	1.6022	0.0088	2.6161	0.0330	3.0747	0.0425	0.0371	0.1550	0.1548	0.0000	0.0013
<b>PCOD8196809</b>	16.58	16.39	0.15	1.6016	0.0104	2.6152	0.0274	3.0767	0.0614	0.0460	0.1066	0.2394	0.0001	0.0006
<b>PCOD8080521</b>	16.59	16.33	0.11	1.6031	0.0050	2.6176	0.0260	3.0703	0.0336	0.0176	0.1076	0.1108	0.0000	0.0014
<b>PCOD8230494</b>	16.60	16.30	0.11	1.6016	0.0073	2.6151	0.0336	3.0774	0.0319	0.0360	0.1588	0.1575	0.0001	0.0013
<b>PCOD8195148</b>	16.61	16.36	0.16	1.6021	0.0069	2.6160	0.0285	3.0755	0.0344	0.0296	0.0895	0.1699	0.0000	0.0018
<b>PCOD8039026</b>	16.62	15.99	0.08	1.6041	0.0129	2.6191	0.0280	3.0621	0.0599	0.0485	0.1235	0.2094	0.0000	0.0021
<b>PCOD8203076</b>	16.64	16.35	0.19	1.6037	0.0089	2.6186	0.0253	3.0662	0.0593	0.0439	0.1224	0.2066	0.0001	0.0000
<b>PCOD8092398</b>	16.64	16.07	0.00	1.6035	0.0100	2.6183	0.0284	3.0672	0.0529	0.0351	0.1109	0.2114	0.0001	0.0003
<b>PCOD8323621</b>	16.64	16.09	0.01	1.6014	0.0079	2.6149	0.0321	3.0788	0.0291	0.0342	0.0951	0.1023	0.0000	0.0016
<b>PCOD8250952</b>	16.65	16.26	0.14	1.6030	0.0110	2.6172	0.0334	3.0701	0.0471	0.0507	0.1407	0.1958	0.0001	0.0005
<b>PCOD8250953</b>	16.66	16.26	0.15	1.6031	0.0104	2.6174	0.0320	3.0692	0.0471	0.0476	0.1375	0.1987	0.0001	0.0002
<b>PCOD8084263</b>	16.67	16.19	0.11	1.6039	0.0070	2.6188	0.0341	3.0653	0.0498	0.0306	0.1582	0.1761	0.0001	0.0005
<b>PCOD8278785</b>	16.67	16.21	0.12	1.6022	0.0088	2.6161	0.0330	3.0747	0.0425	0.0371	0.1550	0.1548	0.0000	0.0013
<b>PCOD8208422</b>	16.69	16.15	0.10	1.6016	0.0104	2.6152	0.0274	3.0767	0.0614	0.0460	0.1066	0.2394	0.0001	0.0006
<b>PCOD8191720</b>	16.69	16.13	0.08	1.6027	0.0084	2.6168	0.0331	3.0717	0.0458	0.0339	0.1593	0.1453	0.0001	0.0007
<b>PCOD8322663</b>	16.70	16.14	0.11	1.6011	0.0076	2.6144	0.0326	3.0804	0.0303	0.0362	0.1020	0.0994	0.0000	0.0018
<b>PCOD8172642</b>	16.70	16.06	0.05	1.6025	0.0097	2.6167	0.0250	3.0720	0.0573	0.0383	0.1177	0.1865	0.0001	0.0003
<b>PCOD8210381</b>	16.72	16.01	0.03	1.6026	0.0066	2.6168	0.0276	3.0726	0.0441	0.0235	0.1206	0.1750	0.0000	0.0013
<b>PCOD8321603</b>	16.73	16.17	0.15	1.6014	0.0086	2.6149	0.0337	3.0786	0.0329	0.0311	0.1114	0.1142	0.0000	0.0015
<b>PCOD8182548</b>	16.74	16.31	0.26	1.6001	0.0105	2.6126	0.0313	3.0853	0.0589	0.0344	0.1272	0.1804	0.0000	0.0015
<b>PCOD8060448</b>	16.75	16.00	0.05	1.6028	0.0095	2.6172	0.0263	3.0706	0.0567	0.0317	0.1248	0.1866	0.0001	0.0004

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8235418	16.75	16.14	0.15	1.6014	0.0094	2.6148	0.0280	3.0785	0.0539	0.0347	0.1102	0.1781	0.0000	0.0011
PCOD8327059	16.76	16.18	0.19	1.6008	0.0070	2.6139	0.0328	3.0819	0.0308	0.0374	0.1011	0.0929	0.0001	0.0019
PCOD8278786	16.76	16.06	0.11	1.6040	0.0098	2.6190	0.0266	3.0639	0.0499	0.0411	0.1094	0.1868	0.0000	0.0006
PCOD8069007	16.77	16.06	0.11	1.6035	0.0117	2.6182	0.0291	3.0671	0.0592	0.0474	0.1104	0.2426	0.0000	0.0002
PCOD8251564	16.78	16.03	0.10	1.6022	0.0091	2.6161	0.0306	3.0745	0.0447	0.0376	0.1216	0.1544	0.0000	0.0012
PCOD8327031	16.78	16.03	0.11	1.6012	0.0082	2.6145	0.0316	3.0799	0.0326	0.0400	0.1056	0.1116	0.0001	0.0015
PCOD8312438	16.82	15.95	0.09	1.6022	0.0056	2.6161	0.0320	3.0748	0.0246	0.0237	0.1075	0.1081	0.0000	0.0014
PCOD8097531	16.82	16.05	0.16	1.6028	0.0101	2.6169	0.0321	3.0700	0.0620	0.0402	0.1546	0.2057	0.0002	0.0004
PCOD8321601	16.83	15.85	0.03	1.6003	0.0078	2.6131	0.0354	3.0846	0.0334	0.0307	0.1132	0.0981	0.0000	0.0020
PCOD8236883	16.84	15.85	0.04	1.6060	0.0085	2.6221	0.0352	3.0536	0.0486	0.0409	0.1640	0.2120	0.0002	0.0012
PCOD8082880	16.86	15.82	0.04	1.6049	0.0083	2.6206	0.0255	3.0609	0.0479	0.0257	0.0999	0.1596	0.0000	0.0010
PCOD8321883	16.86	15.87	0.08	1.6005	0.0060	2.6134	0.0330	3.0837	0.0305	0.0163	0.0914	0.0751	0.0001	0.0019
PCOD8098851	16.88	15.97	0.16	1.6031	0.0094	2.6176	0.0339	3.0690	0.0563	0.0351	0.1401	0.2005	0.0000	0.0001
PCOD8095713	16.88	15.87	0.10	1.6032	0.0052	2.6178	0.0227	3.0700	0.0402	0.0229	0.0745	0.1903	0.0001	0.0017
PCOD8322681	16.90	15.82	0.08	1.6010	0.0081	2.6142	0.0298	3.0806	0.0330	0.0287	0.0975	0.1072	0.0001	0.0014
PCOD8098730	16.91	15.63	0.03	1.6022	0.0076	2.6161	0.0289	3.0745	0.0471	0.0323	0.1172	0.1835	0.0000	0.0010
PCOD8202351	16.93	15.79	0.10	1.6028	0.0113	2.6169	0.0330	3.0708	0.0657	0.0523	0.1892	0.3043	0.0001	0.0003
PCOD8081675	16.94	15.72	0.05	1.6018	0.0079	2.6154	0.0253	3.0768	0.0502	0.0306	0.0920	0.1895	0.0000	0.0013
PCOD8318576	16.95	15.63	0.00	1.6024	0.0057	2.6164	0.0298	3.0734	0.0299	0.0220	0.1117	0.1275	0.0000	0.0009
PCOD8089713	16.95	15.87	0.17	1.6021	0.0103	2.6158	0.0348	3.0747	0.0563	0.0447	0.1291	0.1916	0.0000	0.0006
PCOD8080398	16.96	15.77	0.10	1.6014	0.0077	2.6145	0.0356	3.0794	0.0585	0.0320	0.1608	0.2408	0.0002	0.0021
PCOD8323706	16.98	15.71	0.09	1.6002	0.0074	2.6129	0.0312	3.0848	0.0334	0.0278	0.0939	0.1036	0.0001	0.0016
PCOD8085501	16.99	15.66	0.06	1.5983	0.0109	2.6097	0.0269	3.0938	0.0594	0.0309	0.1147	0.1710	0.0000	0.0013
PCOD8070627	16.99	15.63	0.04	1.6058	0.0093	2.6220	0.0260	3.0542	0.0570	0.0309	0.0993	0.1886	0.0001	0.0018
PCOD8211431	17.01	15.62	0.05	1.6017	0.0075	2.6153	0.0301	3.0767	0.0625	0.0240	0.1023	0.2205	0.0001	0.0011
PCOD8060446	17.01	15.67	0.09	1.6022	0.0104	2.6160	0.0343	3.0737	0.0666	0.0471	0.1436	0.2592	0.0001	0.0002
PCOD8290013	17.02	15.65	0.08	1.6021	0.0105	2.6159	0.0304	3.0744	0.0646	0.0393	0.1207	0.2116	0.0000	0.0006
PCOD8060562	17.02	15.60	0.05	1.6021	0.0103	2.6159	0.0343	3.0739	0.0663	0.0504	0.1450	0.2546	0.0001	0.0002
PCOD8257504	17.03	15.76	0.18	1.6006	0.0065	2.6135	0.0279	3.0825	0.0370	0.0292	0.0954	0.1285	0.0001	0.0012
PCOD8067544	17.04	15.62	0.08	1.6006	0.0086	2.6136	0.0273	3.0825	0.0551	0.0286	0.0949	0.1523	0.0001	0.0015
PCOD8085973	17.05	15.64	0.11	1.6040	0.0098	2.6190	0.0266	3.0639	0.0499	0.0411	0.1094	0.1868	0.0000	0.0006

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8323672	17.08	15.50	0.04	1.6001	0.0078	2.6127	0.0328	3.0852	0.0338	0.0276	0.1145	0.1374	0.0001	0.0016
PCOD8307622	17.08	15.55	0.08	1.6027	0.0046	2.6170	0.0314	3.0720	0.0184	0.0171	0.0864	0.0668	0.0001	0.0011
PCOD8207078	17.09	15.54	0.07	1.6043	0.0098	2.6196	0.0284	3.0623	0.0544	0.0402	0.1196	0.1660	0.0000	0.0006
PCOD8085277	17.11	15.57	0.12	1.6005	0.0090	2.6134	0.0251	3.0829	0.0503	0.0274	0.0881	0.1805	0.0001	0.0013
PCOD8321848	17.11	15.57	0.12	1.6005	0.0087	2.6133	0.0280	3.0831	0.0351	0.0281	0.0787	0.1207	0.0001	0.0012
PCOD8070958	17.11	15.59	0.13	1.6030	0.0097	2.6171	0.0372	3.0691	0.0639	0.0404	0.1535	0.2374	0.0003	0.0003
PCOD8323709	17.12	15.41	0.02	1.5994	0.0083	2.6115	0.0310	3.0889	0.0372	0.0334	0.1051	0.1016	0.0000	0.0017
PCOD8323711	17.15	15.46	0.09	1.5998	0.0078	2.6123	0.0301	3.0865	0.0342	0.0290	0.1016	0.1325	0.0001	0.0015
PCOD8323707	17.16	15.48	0.11	1.5998	0.0079	2.6123	0.0310	3.0865	0.0351	0.0249	0.0977	0.1341	0.0001	0.0014
PCOD8268895	17.17	15.47	0.12	1.6016	0.0078	2.6151	0.0316	3.0775	0.0489	0.0310	0.1201	0.1657	0.0000	0.0011
PCOD8327151	17.19	15.30	0.02	1.5994	0.0075	2.6116	0.0302	3.0886	0.0331	0.0309	0.0917	0.1247	0.0001	0.0016
PCOD8327150	17.20	15.33	0.04	1.5994	0.0076	2.6115	0.0307	3.0888	0.0346	0.0325	0.0963	0.1308	0.0001	0.0016
PCOD8059902	17.22	15.37	0.09	1.6029	0.0089	2.6173	0.0281	3.0694	0.0565	0.0356	0.1211	0.1923	0.0001	0.0005
PCOD8178240	17.22	15.34	0.07	1.6038	0.0103	2.6186	0.0330	3.0654	0.0590	0.0456	0.1384	0.2242	0.0000	0.0003
PCOD8080986	17.23	15.39	0.12	1.6001	0.0087	2.6126	0.0302	3.0853	0.0462	0.0331	0.1193	0.1638	0.0000	0.0016
PCOD8242436	17.23	15.39	0.12	1.6013	0.0097	2.6146	0.0297	3.0785	0.0523	0.0341	0.1666	0.1811	0.0000	0.0006
PCOD8272108	17.26	15.38	0.14	1.5997	0.0074	2.6121	0.0342	3.0869	0.0384	0.0288	0.1168	0.1202	0.0000	0.0015
PCOD8321849	17.30	15.21	0.06	1.5993	0.0075	2.6115	0.0288	3.0889	0.0328	0.0309	0.0845	0.1244	0.0001	0.0015
PCOD8271074	17.30	15.23	0.08	1.6010	0.0106	2.6142	0.0287	3.0791	0.0586	0.0504	0.1297	0.2289	0.0000	0.0000
PCOD8330616	17.32	15.14	0.04	1.6023	0.0120	2.6161	0.0318	3.0725	0.0558	0.0550	0.1589	0.2299	0.0000	0.0006
PCOD8241081	17.33	15.21	0.10	1.6041	0.0102	2.6192	0.0282	3.0630	0.0554	0.0395	0.1263	0.2378	0.0000	0.0009
PCOD8280633	17.34	15.19	0.09	1.6018	0.0072	2.6155	0.0270	3.0763	0.0378	0.0293	0.0786	0.1356	0.0000	0.0010
PCOD8236886	17.34	15.27	0.14	1.6065	0.0102	2.6232	0.0273	3.0503	0.0704	0.0302	0.1029	0.2172	0.0001	0.0018
PCOD8209586	17.34	15.18	0.09	1.6004	0.0091	2.6130	0.0354	3.0827	0.0546	0.0418	0.1554	0.1734	0.0002	0.0006
PCOD8168221	17.35	15.20	0.11	1.6007	0.0092	2.6134	0.0362	3.0817	0.0550	0.0385	0.1572	0.1727	0.0002	0.0008
PCOD8240622	17.36	15.27	0.17	1.6022	0.0114	2.6161	0.0310	3.0738	0.0539	0.0419	0.1215	0.2041	0.0000	0.0004
PCOD8313199	17.37	15.18	0.11	1.6003	0.0067	2.6131	0.0284	3.0841	0.0512	0.0200	0.1096	0.1773	0.0001	0.0015
PCOD8330413	17.37	15.09	0.06	1.6037	0.0059	2.6185	0.0302	3.0657	0.0379	0.0243	0.1055	0.1296	0.0001	0.0002
PCOD8313976	17.38	15.06	0.04	1.6022	0.0078	2.6161	0.0309	3.0738	0.0397	0.0348	0.1124	0.1577	0.0000	0.0006
PCOD8183502	17.40	15.05	0.06	1.6041	0.0083	2.6186	0.0449	3.0628	0.0591	0.0333	0.2287	0.2344	0.0006	0.0010
PCOD8088327	17.42	15.08	0.10	1.6023	0.0102	2.6162	0.0315	3.0729	0.0591	0.0419	0.1528	0.2073	0.0000	0.0000

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8065963	17.42	15.06	0.08	1.6037	0.0105	2.6184	0.0372	3.0648	0.0509	0.0434	0.1511	0.1543	0.0002	0.0011
PCOD8107740	17.43	15.04	0.08	1.6018	0.0092	2.6155	0.0235	3.0755	0.0512	0.0390	0.1176	0.1656	0.0001	0.0000
PCOD8179034	17.44	15.03	0.08	1.6038	0.0091	2.6186	0.0369	3.0641	0.0589	0.0350	0.1791	0.2162	0.0001	0.0013
PCOD8275742	17.45	15.05	0.11	1.6010	0.0074	2.6142	0.0245	3.0798	0.0573	0.0254	0.1024	0.1947	0.0000	0.0007
PCOD8270138	17.45	15.02	0.09	1.6031	0.0071	2.6176	0.0276	3.0692	0.0346	0.0322	0.1124	0.1272	0.0001	0.0002
PCOD8070315	17.47	14.94	0.06	1.6017	0.0094	2.6153	0.0317	3.0757	0.0544	0.0419	0.1108	0.1911	0.0001	0.0000
PCOD8318118	17.49	14.80	0.02	1.6009	0.0099	2.6139	0.0352	3.0800	0.0515	0.0441	0.1700	0.1962	0.0001	0.0005
PCOD8268116	17.51	15.03	0.16	1.6029	0.0093	2.6172	0.0316	3.0696	0.0470	0.0468	0.1378	0.1785	0.0000	0.0005
PCOD8081812	17.52	14.90	0.07	1.5998	0.0096	2.6122	0.0300	3.0863	0.0480	0.0277	0.1025	0.1796	0.0000	0.0011
PCOD8183073	17.53	14.80	0.01	1.6029	0.0084	2.6173	0.0285	3.0694	0.0477	0.0491	0.1399	0.1941	0.0001	0.0006
PCOD8285178	17.53	14.81	0.02	1.6002	0.0076	2.6130	0.0251	3.0836	0.0502	0.0305	0.1011	0.1609	0.0001	0.0006
PCOD8244280	17.53	14.80	0.02	1.5991	0.0065	2.6111	0.0321	3.0896	0.0222	0.0260	0.1405	0.1154	0.0001	0.0013
PCOD8178224	17.54	14.92	0.11	1.6026	0.0057	2.6167	0.0327	3.0721	0.0301	0.0235	0.1259	0.1197	0.0001	0.0009
PCOD8070185	17.61	14.84	0.12	1.5988	0.0096	2.6107	0.0237	3.0908	0.0532	0.0315	0.1164	0.1779	0.0001	0.0009
PCOD8086466	17.61	14.70	0.03	1.6014	0.0078	2.6148	0.0271	3.0777	0.0408	0.0313	0.0950	0.1644	0.0000	0.0004
PCOD8070992	17.62	14.71	0.04	1.6021	0.0111	2.6160	0.0280	3.0731	0.0558	0.0407	0.1148	0.1876	0.0001	0.0008
PCOD8251680	17.62	14.82	0.12	1.6023	0.0103	2.6163	0.0286	3.0723	0.0518	0.0396	0.1209	0.1919	0.0000	0.0005
PCOD8060522	17.62	14.85	0.13	1.6026	0.0094	2.6167	0.0300	3.0706	0.0606	0.0399	0.1497	0.2418	0.0000	0.0008
PCOD8166716	17.62	15.11	0.32	1.6025	0.0099	2.6165	0.0321	3.0717	0.0566	0.0468	0.1240	0.1973	0.0000	0.0003
PCOD8059969	17.63	14.69	0.04	1.6027	0.0045	2.6168	0.0310	3.0720	0.0303	0.0151	0.1019	0.1001	0.0001	0.0010
PCOD8198870	17.63	14.87	0.16	1.6011	0.0065	2.6142	0.0276	3.0798	0.0551	0.0259	0.1078	0.1849	0.0000	0.0009
PCOD8290879	17.64	14.74	0.08	1.6020	0.0054	2.6156	0.0359	3.0751	0.0403	0.0229	0.1410	0.2125	0.0001	0.0006
PCOD8257779	17.64	14.83	0.15	1.6030	0.0086	2.6173	0.0268	3.0698	0.0561	0.0358	0.1332	0.2246	0.0000	0.0002
PCOD8217837	17.65	14.57	0.02	1.6019	0.0073	2.6158	0.0193	3.0749	0.0577	0.0249	0.1024	0.1881	0.0001	0.0002
PCOD8206946	17.66	14.64	0.03	1.6030	0.0085	2.6174	0.0276	3.0693	0.0395	0.0381	0.1025	0.1294	0.0000	0.0002
PCOD8290182	17.68	14.71	0.10	1.6006	0.0087	2.6135	0.0321	3.0817	0.0364	0.0361	0.1357	0.1391	0.0000	0.0005
PCOD8198644	17.68	14.65	0.07	1.6015	0.0076	2.6149	0.0332	3.0772	0.0547	0.0305	0.1370	0.2007	0.0001	0.0003
PCOD8186345	17.70	14.75	0.15	1.6024	0.0065	2.6163	0.0366	3.0730	0.0255	0.0179	0.1135	0.0662	0.0001	0.0004
PCOD8309700	17.71	14.53	0.00	1.5994	0.0064	2.6116	0.0321	3.0879	0.0213	0.0272	0.1539	0.0915	0.0000	0.0011
PCOD8186339	17.71	14.70	0.13	1.6004	0.0094	2.6132	0.0326	3.0830	0.0390	0.0376	0.1293	0.1712	0.0000	0.0010
PCOD8179872	17.72	14.61	0.08	1.6013	0.0092	2.6147	0.0266	3.0780	0.0444	0.0327	0.0968	0.1708	0.0001	0.0003



Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8290045	17.73	14.73	0.16	1.6011	0.0086	2.6143	0.0298	3.0794	0.0508	0.0316	0.1074	0.1737	0.0000	0.0004
PCOD8087069	17.73	14.60	0.08	1.6017	0.0070	2.6152	0.0285	3.0768	0.0360	0.0273	0.1187	0.1305	0.0000	0.0008
PCOD8095286	17.74	14.67	0.13	1.6031	0.0087	2.6176	0.0257	3.0689	0.0393	0.0356	0.1076	0.1355	0.0001	0.0002
PCOD8231237	17.76	14.55	0.08	1.6016	0.0080	2.6151	0.0296	3.0763	0.0513	0.0350	0.1510	0.1744	0.0000	0.0000
PCOD8178144	17.77	14.54	0.07	1.6026	0.0071	2.6166	0.0308	3.0716	0.0367	0.0347	0.1089	0.1320	0.0001	0.0000
PCOD8088442	17.78	14.57	0.11	1.6011	0.0091	2.6142	0.0362	3.0794	0.0379	0.0364	0.1382	0.1385	0.0001	0.0007
PCOD8243411	17.79	14.49	0.06	1.6007	0.0095	2.6136	0.0327	3.0809	0.0474	0.0377	0.1311	0.1551	0.0000	0.0001
PCOD8070036	17.81	14.47	0.07	1.6031	0.0071	2.6175	0.0324	3.0687	0.0367	0.0266	0.1329	0.1468	0.0000	0.0004
PCOD8211480	17.81	14.71	0.23	1.6007	0.0094	2.6134	0.0353	3.0807	0.0597	0.0454	0.1630	0.1993	0.0002	0.0001
PCOD8240405	17.82	14.48	0.08	1.6031	0.0071	2.6175	0.0323	3.0686	0.0367	0.0264	0.1291	0.1594	0.0000	0.0004
PCOD8315377	17.82	14.35	0.00	1.5996	0.0064	2.6118	0.0324	3.0871	0.0212	0.0284	0.1537	0.1066	0.0000	0.0009
PCOD8330788	17.82	14.43	0.05	1.6029	0.0052	2.6173	0.0293	3.0701	0.0288	0.0170	0.0903	0.1233	0.0000	0.0002
PCOD8231670	17.83	14.43	0.06	1.6033	0.0091	2.6177	0.0358	3.0672	0.0434	0.0364	0.1598	0.1792	0.0001	0.0009
PCOD8294496	17.84	14.30	0.01	1.6029	0.0077	2.6171	0.0300	3.0693	0.0579	0.0333	0.1292	0.2339	0.0002	0.0004
PCOD8178875	17.84	14.46	0.10	1.6020	0.0076	2.6158	0.0272	3.0742	0.0343	0.0270	0.1007	0.1225	0.0000	0.0002
PCOD8254984	17.85	14.41	0.07	1.6025	0.0091	2.6166	0.0277	3.0717	0.0626	0.0379	0.1234	0.1981	0.0000	0.0001
PCOD8066215	17.85	14.20	0.07	1.6041	0.0104	2.6187	0.0432	3.0636	0.0461	0.0389	0.2156	0.1995	0.0004	0.0008
PCOD8086461	17.86	14.51	0.14	1.6005	0.0087	2.6133	0.0317	3.0822	0.0469	0.0306	0.1197	0.1754	0.0000	0.0005
PCOD8028858	17.88	14.38	0.08	1.6016	0.0077	2.6152	0.0297	3.0770	0.0512	0.0324	0.1149	0.1838	0.0000	0.0008
PCOD8096832	17.89	14.39	0.10	1.5999	0.0075	2.6124	0.0322	3.0862	0.0353	0.0310	0.1061	0.1461	0.0001	0.0017
PCOD8061492	17.91	14.36	0.09	1.6013	0.0076	2.6145	0.0358	3.0785	0.0259	0.0306	0.1317	0.1015	0.0002	0.0008
PCOD8074541	17.93	14.27	0.05	1.6025	0.0061	2.6166	0.0307	3.0718	0.0432	0.0248	0.1113	0.1701	0.0001	0.0003
PCOD8235604	17.93	14.51	0.21	1.6016	0.0083	2.6148	0.0395	3.0768	0.0364	0.0414	0.1522	0.1480	0.0003	0.0004
PCOD8267927	17.93	14.22	0.02	1.6009	0.0087	2.6140	0.0250	3.0800	0.0502	0.0347	0.1137	0.1904	0.0001	0.0002
PCOD8073415	17.94	14.23	0.03	1.6004	0.0085	2.6132	0.0334	3.0834	0.0320	0.0320	0.1155	0.1101	0.0000	0.0011
PCOD8198046	17.94	14.26	0.06	1.6003	0.0085	2.6131	0.0232	3.0828	0.0536	0.0346	0.1009	0.1858	0.0001	0.0001
PCOD8331133	17.96	14.24	0.05	1.6027	0.0066	2.6168	0.0283	3.0705	0.0535	0.0424	0.1268	0.1997	0.0001	0.0004
PCOD8225116	17.96	14.22	0.04	1.6021	0.0079	2.6159	0.0290	3.0734	0.0476	0.0335	0.1008	0.1732	0.0000	0.0004
PCOD8237027	17.96	14.25	0.07	1.6028	0.0050	2.6171	0.0342	3.0708	0.0245	0.0156	0.1077	0.1110	0.0001	0.0006
PCOD8070936	17.96	14.22	0.05	1.6021	0.0085	2.6159	0.0291	3.0735	0.0445	0.0308	0.1380	0.1513	0.0001	0.0003
PCOD8315376	17.98	14.05	0.04	1.5998	0.0063	2.6121	0.0327	3.0860	0.0210	0.0294	0.1548	0.1113	0.0000	0.0007

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8095289	18.01	14.13	0.03	1.6026	0.0089	2.6168	0.0281	3.0709	0.0357	0.0371	0.1083	0.1480	0.0001	0.0008
PCOD8209245	18.01	14.23	0.11	1.6015	0.0090	2.6150	0.0313	3.0763	0.0528	0.0389	0.1330	0.2134	0.0000	0.0004
PCOD8188707	18.02	14.16	0.07	1.6043	0.0067	2.6197	0.0228	3.0625	0.0411	0.0243	0.0849	0.1186	0.0001	0.0004
PCOD8307665	18.02	14.15	0.06	1.6009	0.0061	2.6140	0.0341	3.0807	0.0310	0.0212	0.1059	0.0795	0.0000	0.0011
PCOD8279136	18.05	14.12	0.07	1.6009	0.0075	2.6140	0.0304	3.0800	0.0449	0.0304	0.1166	0.1741	0.0001	0.0004
PCOD8243507	18.07	14.01	0.01	1.5999	0.0087	2.6123	0.0279	3.0848	0.0501	0.0308	0.1295	0.1822	0.0000	0.0001
PCOD8179173	18.08	14.05	0.05	1.6018	0.0064	2.6156	0.0282	3.0754	0.0343	0.0267	0.0989	0.1071	0.0001	0.0003
PCOD8063144	18.08	14.05	0.06	1.6008	0.0075	2.6139	0.0264	3.0799	0.0404	0.0294	0.1019	0.1519	0.0001	0.0001
PCOD8257777	18.09	14.04	0.05	1.6043	0.0089	2.6196	0.0277	3.0616	0.0517	0.0293	0.1100	0.1847	0.0001	0.0015
PCOD8063232	18.12	14.02	0.08	1.6014	0.0082	2.6148	0.0248	3.0772	0.0319	0.0335	0.1099	0.1187	0.0001	0.0003
PCOD8103956	18.13	13.91	0.00	1.6029	0.0089	2.6172	0.0328	3.0694	0.0448	0.0394	0.1367	0.1970	0.0001	0.0005
PCOD8213046	18.15	13.92	0.03	1.6009	0.0098	2.6141	0.0247	3.0796	0.0441	0.0350	0.1013	0.1678	0.0001	0.0004
PCOD8182998	18.16	13.94	0.06	1.6020	0.0099	2.6158	0.0271	3.0737	0.0450	0.0425	0.1335	0.1526	0.0001	0.0008
PCOD8320305	18.17	13.93	0.06	1.6029	0.0085	2.6172	0.0277	3.0689	0.0490	0.0371	0.1217	0.1949	0.0000	0.0011
PCOD8243020	18.17	13.99	0.10	1.6016	0.0074	2.6151	0.0291	3.0760	0.0517	0.0294	0.1298	0.1849	0.0000	0.0005
PCOD8219153	18.17	13.93	0.06	1.6010	0.0100	2.6139	0.0334	3.0795	0.0406	0.0367	0.1494	0.1646	0.0002	0.0000
PCOD8088115	18.18	13.94	0.07	1.6009	0.0082	2.6139	0.0321	3.0801	0.0348	0.0373	0.1405	0.1529	0.0001	0.0005
PCOD8189533	18.20	13.83	0.02	1.5993	0.0084	2.6113	0.0338	3.0885	0.0332	0.0287	0.1260	0.1128	0.0000	0.0010
PCOD8073438	18.21	13.86	0.05	1.5994	0.0090	2.6116	0.0329	3.0881	0.0356	0.0327	0.1170	0.1285	0.0000	0.0011
PCOD8225131	18.21	13.82	0.02	1.6021	0.0100	2.6159	0.0311	3.0738	0.0378	0.0358	0.1239	0.1456	0.0000	0.0002
PCOD8209392	18.22	14.06	0.20	1.6001	0.0104	2.6126	0.0347	3.0832	0.0506	0.0464	0.1573	0.1974	0.0001	0.0004
PCOD8258339	18.23	13.84	0.06	1.6012	0.0070	2.6146	0.0293	3.0785	0.0309	0.0255	0.1118	0.1007	0.0001	0.0003
PCOD8099688	18.23	13.78	0.02	1.6020	0.0087	2.6158	0.0258	3.0736	0.0569	0.0318	0.1143	0.1888	0.0000	0.0007
PCOD8262315	18.24	13.86	0.08	1.6031	0.0088	2.6176	0.0297	3.0681	0.0387	0.0322	0.1167	0.1474	0.0000	0.0008
PCOD8072345	18.24	13.86	0.09	1.5999	0.0082	2.6122	0.0313	3.0854	0.0450	0.0339	0.1166	0.1616	0.0001	0.0005
PCOD8209934	18.24	13.88	0.10	1.6003	0.0088	2.6130	0.0287	3.0826	0.0497	0.0376	0.1294	0.1794	0.0001	0.0000
PCOD8110532	18.25	13.79	0.05	1.6021	0.0066	2.6159	0.0313	3.0738	0.0471	0.0308	0.1363	0.1977	0.0000	0.0002
PCOD8243266	18.25	13.87	0.10	1.6012	0.0067	2.6144	0.0330	3.0790	0.0248	0.0297	0.1053	0.0761	0.0000	0.0007
PCOD8073440	18.26	13.85	0.09	1.5991	0.0092	2.6110	0.0320	3.0897	0.0359	0.0364	0.1124	0.1353	0.0000	0.0010
PCOD8098327	18.28	13.78	0.07	1.6014	0.0077	2.6147	0.0355	3.0777	0.0297	0.0335	0.1363	0.1112	0.0000	0.0003
PCOD8210062	18.28	13.83	0.11	1.6006	0.0090	2.6134	0.0325	3.0811	0.0484	0.0374	0.1361	0.1921	0.0001	0.0003

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8325566	18.31	13.75	0.07	1.6017	0.0095	2.6151	0.0391	3.0753	0.0461	0.0334	0.1453	0.1495	0.0001	0.0005
PCOD8073500	18.32	13.73	0.07	1.5997	0.0085	2.6120	0.0345	3.0862	0.0326	0.0302	0.1269	0.1019	0.0000	0.0007
PCOD8300086	18.33	13.90	0.20	1.6011	0.0086	2.6141	0.0359	3.0789	0.0407	0.0319	0.1891	0.1637	0.0001	0.0000
PCOD8273328	18.34	13.70	0.07	1.6007	0.0090	2.6138	0.0249	3.0799	0.0459	0.0408	0.1074	0.1590	0.0001	0.0006
PCOD8273359	18.34	13.73	0.09	1.6014	0.0103	2.6147	0.0278	3.0765	0.0484	0.0525	0.1312	0.2021	0.0000	0.0009
PCOD8073258	18.35	13.65	0.05	1.6025	0.0072	2.6166	0.0306	3.0720	0.0359	0.0289	0.1382	0.1315	0.0000	0.0000
PCOD8242749	18.36	13.68	0.07	1.6007	0.0062	2.6137	0.0289	3.0807	0.0325	0.0277	0.1329	0.1400	0.0001	0.0001
PCOD8276325	18.36	13.59	0.02	1.6010	0.0082	2.6141	0.0328	3.0785	0.0453	0.0330	0.1251	0.1910	0.0001	0.0006
PCOD8052423	18.38	13.69	0.11	1.5988	0.0087	2.6106	0.0308	3.0907	0.0324	0.0316	0.1107	0.1058	0.0000	0.0009
PCOD8166818	18.38	13.61	0.05	1.5993	0.0080	2.6114	0.0319	3.0882	0.0302	0.0307	0.1193	0.1049	0.0000	0.0008
PCOD8319635	18.39	13.69	0.12	1.6004	0.0077	2.6130	0.0340	3.0822	0.0265	0.0437	0.1497	0.1106	0.0001	0.0000
PCOD8236328	18.40	13.64	0.09	1.5995	0.0096	2.6115	0.0352	3.0871	0.0376	0.0398	0.1464	0.1309	0.0001	0.0003
PCOD8211717	18.41	13.56	0.05	1.6014	0.0070	2.6147	0.0292	3.0776	0.0305	0.0314	0.1269	0.1331	0.0000	0.0001
PCOD8186416	18.41	13.69	0.14	1.5995	0.0104	2.6115	0.0357	3.0868	0.0496	0.0394	0.1606	0.1921	0.0002	0.0000
PCOD8232428	18.44	13.60	0.10	1.6021	0.0060	2.6159	0.0309	3.0743	0.0250	0.0249	0.1222	0.0807	0.0000	0.0003
PCOD8074064	18.45	13.54	0.07	1.6000	0.0090	2.6126	0.0313	3.0845	0.0341	0.0287	0.1133	0.1154	0.0000	0.0005
PCOD8073543	18.46	13.50	0.05	1.6007	0.0091	2.6137	0.0303	3.0804	0.0424	0.0297	0.1125	0.1628	0.0001	0.0004
PCOD8090218	18.47	13.51	0.07	1.6002	0.0086	2.6128	0.0293	3.0831	0.0482	0.0396	0.1607	0.2075	0.0000	0.0001
PCOD8300489	18.47	13.61	0.14	1.5989	0.0100	2.6107	0.0308	3.0901	0.0387	0.0450	0.1329	0.1588	0.0000	0.0006
PCOD8098002	18.48	13.43	0.03	1.5985	0.0087	2.6102	0.0251	3.0914	0.0310	0.0271	0.1114	0.1156	0.0001	0.0001
PCOD8183105	18.48	13.55	0.11	1.6027	0.0070	2.6171	0.0255	3.0698	0.0486	0.0303	0.1064	0.1849	0.0001	0.0009
PCOD8087731	18.52	13.47	0.09	1.6028	0.0069	2.6171	0.0225	3.0697	0.0406	0.0242	0.0965	0.1542	0.0001	0.0009
PCOD8326815	18.53	13.10	0.15	1.5990	0.0089	2.6109	0.0246	3.0881	0.0458	0.0462	0.1314	0.2202	0.0000	0.0010
PCOD8262847	18.53	13.87	0.38	1.6007	0.0069	2.6135	0.0337	3.0815	0.0327	0.0278	0.1299	0.1449	0.0001	0.0008
PCOD8241793	18.55	13.36	0.04	1.6010	0.0068	2.6141	0.0281	3.0797	0.0338	0.0244	0.1096	0.1210	0.0000	0.0002
PCOD8182952	18.55	13.45	0.11	1.6038	0.0081	2.6189	0.0259	3.0637	0.0379	0.0291	0.0970	0.1584	0.0001	0.0017
PCOD8106072	18.56	13.36	0.05	1.5998	0.0086	2.6122	0.0289	3.0855	0.0305	0.0306	0.1197	0.1185	0.0001	0.0003
PCOD8225456	18.56	13.36	0.06	1.6005	0.0095	2.6133	0.0310	3.0818	0.0427	0.0334	0.1340	0.1387	0.0000	0.0001
PCOD8259991	18.58	13.62	0.26	1.6017	0.0060	2.6153	0.0300	3.0760	0.0292	0.0250	0.1047	0.1092	0.0000	0.0003
PCOD8290468	18.58	13.33	0.06	1.6015	0.0070	2.6149	0.0263	3.0764	0.0438	0.0303	0.1005	0.1871	0.0000	0.0004
PCOD8243564	18.59	13.35	0.08	1.6017	0.0073	2.6153	0.0264	3.0753	0.0445	0.0278	0.0980	0.1478	0.0001	0.0006

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8246643	18.60	13.29	0.05	1.6016	0.0097	2.6151	0.0277	3.0761	0.0357	0.0322	0.0917	0.1357	0.0001	0.0004
PCOD8258969	18.62	13.37	0.13	1.5997	0.0082	2.6120	0.0269	3.0856	0.0314	0.0319	0.1138	0.1143	0.0001	0.0002
PCOD8325644	18.63	13.21	0.02	1.6004	0.0102	2.6132	0.0319	3.0810	0.0406	0.0360	0.1477	0.1443	0.0000	0.0010
PCOD8088193	18.63	13.46	0.19	1.6002	0.0076	2.6129	0.0254	3.0829	0.0520	0.0277	0.1167	0.1784	0.0000	0.0001
PCOD8211701	18.64	13.24	0.06	1.6012	0.0091	2.6144	0.0290	3.0770	0.0512	0.0530	0.1359	0.2095	0.0001	0.0012
PCOD8219945	18.65	13.40	0.18	1.6011	0.0090	2.6142	0.0302	3.0788	0.0457	0.0409	0.1486	0.1725	0.0000	0.0000
PCOD8327844	18.65	13.26	0.08	1.6021	0.0054	2.6160	0.0249	3.0733	0.0339	0.0211	0.0770	0.0999	0.0001	0.0007
PCOD8198832	18.66	13.27	0.10	1.5990	0.0089	2.6109	0.0325	3.0895	0.0365	0.0316	0.1178	0.1330	0.0000	0.0003
PCOD8097783	18.67	13.15	0.02	1.6004	0.0070	2.6131	0.0351	3.0828	0.0341	0.0337	0.1285	0.1507	0.0001	0.0007
PCOD8072054	18.70	13.23	0.11	1.5994	0.0086	2.6115	0.0336	3.0872	0.0353	0.0377	0.1512	0.1288	0.0001	0.0003
PCOD8088719	18.73	13.18	0.10	1.6015	0.0091	2.6149	0.0292	3.0765	0.0467	0.0430	0.1083	0.1912	0.0001	0.0005
PCOD8259023	18.73	13.17	0.10	1.5994	0.0082	2.6115	0.0312	3.0872	0.0524	0.0287	0.1138	0.1707	0.0001	0.0002
PCOD8173427	18.73	13.14	0.08	1.5996	0.0076	2.6118	0.0354	3.0866	0.0390	0.0312	0.1365	0.1440	0.0001	0.0004
PCOD8259711	18.73	13.10	0.05	1.5998	0.0102	2.6121	0.0334	3.0842	0.0426	0.0443	0.1775	0.1636	0.0001	0.0008
PCOD8189576	18.74	13.01	0.00	1.5991	0.0086	2.6110	0.0313	3.0888	0.0493	0.0302	0.1128	0.1422	0.0001	0.0004
PCOD8092706	18.75	13.02	0.02	1.6001	0.0097	2.6126	0.0310	3.0834	0.0459	0.0352	0.1340	0.1407	0.0001	0.0004
PCOD8103054	18.80	13.13	0.13	1.6008	0.0097	2.6138	0.0310	3.0792	0.0477	0.0426	0.1338	0.1793	0.0000	0.0011
PCOD8065409	18.81	12.99	0.05	1.5994	0.0085	2.6115	0.0283	3.0873	0.0379	0.0380	0.1254	0.1395	0.0000	0.0004
PCOD8232239	18.82	12.58	0.21	1.6012	0.0072	2.6145	0.0297	3.0774	0.0312	0.0318	0.1379	0.1173	0.0000	0.0008
PCOD8064289	18.84	12.94	0.05	1.6015	0.0099	2.6148	0.0315	3.0755	0.0496	0.0331	0.1416	0.1958	0.0001	0.0013
PCOD8099355	18.84	13.00	0.09	1.5989	0.0087	2.6106	0.0338	3.0901	0.0334	0.0328	0.1336	0.1076	0.0001	0.0004
PCOD8074749	18.84	13.05	0.13	1.5991	0.0096	2.6109	0.0330	3.0889	0.0490	0.0391	0.1252	0.1955	0.0001	0.0004
PCOD8243691	18.86	12.85	0.01	1.5997	0.0084	2.6119	0.0315	3.0856	0.0386	0.0376	0.1413	0.1605	0.0001	0.0003
PCOD8263681	18.86	13.07	0.17	1.6019	0.0098	2.6156	0.0296	3.0734	0.0512	0.0400	0.1239	0.1956	0.0000	0.0015
PCOD8260013	18.88	12.82	0.01	1.5987	0.0084	2.6104	0.0311	3.0908	0.0319	0.0298	0.1012	0.0982	0.0000	0.0003
PCOD8073501	18.89	13.12	0.23	1.6007	0.0075	2.6135	0.0325	3.0806	0.0310	0.0365	0.1332	0.1121	0.0001	0.0000
PCOD8219361	18.91	12.83	0.04	1.6009	0.0090	2.6140	0.0298	3.0789	0.0411	0.0429	0.1056	0.1708	0.0000	0.0007
PCOD8213334	18.92	13.19	0.30	1.6004	0.0083	2.6130	0.0316	3.0824	0.0369	0.0333	0.1151	0.1257	0.0001	0.0001
PCOD8075380	18.92	12.93	0.13	1.5985	0.0084	2.6101	0.0312	3.0917	0.0378	0.0358	0.1456	0.1373	0.0000	0.0003
PCOD8259425	18.93	12.84	0.08	1.6006	0.0095	2.6135	0.0274	3.0801	0.0467	0.0464	0.1144	0.1804	0.0000	0.0011
PCOD8189960	18.94	12.78	0.04	1.6008	0.0081	2.6139	0.0235	3.0796	0.0264	0.0271	0.0965	0.0803	0.0001	0.0006

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8252799	18.94	12.71	0.01	1.6017	0.0071	2.6153	0.0301	3.0754	0.0308	0.0279	0.1156	0.1047	0.0000	0.0003
PCOD8103186	18.95	12.80	0.07	1.6001	0.0080	2.6127	0.0278	3.0834	0.0448	0.0295	0.1191	0.1666	0.0000	0.0002
PCOD8141547	18.95	12.42	0.19	1.6029	0.0087	2.6169	0.0370	3.0680	0.0543	0.0417	0.1665	0.1896	0.0003	0.0019
PCOD8064489	18.95	12.80	0.07	1.6001	0.0080	2.6127	0.0285	3.0833	0.0373	0.0328	0.1160	0.1317	0.0000	0.0003
PCOD8159596	18.96	12.75	0.04	1.6019	0.0086	2.6155	0.0348	3.0739	0.0372	0.0342	0.1360	0.1328	0.0002	0.0008
PCOD8264773	18.97	12.76	0.05	1.5987	0.0073	2.6104	0.0327	3.0909	0.0455	0.0276	0.1338	0.1619	0.0000	0.0002
PCOD8245244	18.98	12.71	0.03	1.5987	0.0090	2.6104	0.0315	3.0905	0.0372	0.0351	0.1043	0.1355	0.0000	0.0001
PCOD8104545	19.01	12.68	0.05	1.5991	0.0087	2.6111	0.0304	3.0883	0.0297	0.0372	0.1174	0.1126	0.0000	0.0000
PCOD8101405	19.01	12.67	0.04	1.6027	0.0066	2.6169	0.0226	3.0698	0.0431	0.0264	0.0843	0.1474	0.0001	0.0012
PCOD8232833	19.02	12.64	0.02	1.5992	0.0097	2.6112	0.0321	3.0879	0.0373	0.0316	0.1241	0.1239	0.0000	0.0003
PCOD8238549	19.02	12.64	0.02	1.6008	0.0059	2.6138	0.0262	3.0793	0.0456	0.0212	0.0961	0.1304	0.0000	0.0011
PCOD8223545	19.04	12.90	0.23	1.5994	0.0082	2.6113	0.0381	3.0864	0.0434	0.0318	0.2148	0.1862	0.0003	0.0006
PCOD8308701	19.08	12.56	0.02	1.6027	0.0067	2.6169	0.0261	3.0702	0.0284	0.0209	0.0832	0.0841	0.0000	0.0009
PCOD8175779	19.08	12.53	0.01	1.5995	0.0075	2.6116	0.0325	3.0867	0.0254	0.0301	0.1215	0.1086	0.0000	0.0001
PCOD8167566	19.09	12.52	0.02	1.5993	0.0063	2.6114	0.0320	3.0876	0.0197	0.0239	0.1103	0.0762	0.0000	0.0000
PCOD8166844	19.10	12.56	0.05	1.5993	0.0063	2.6115	0.0317	3.0874	0.0201	0.0246	0.1090	0.0764	0.0000	0.0000
PCOD8273381	19.10	12.60	0.08	1.5994	0.0073	2.6115	0.0308	3.0872	0.0396	0.0247	0.1137	0.1455	0.0000	0.0001
PCOD8099864	19.11	12.57	0.07	1.6021	0.0061	2.6158	0.0326	3.0733	0.0292	0.0224	0.1461	0.1269	0.0001	0.0006
PCOD8073265	19.13	12.58	0.09	1.6005	0.0089	2.6134	0.0271	3.0807	0.0514	0.0411	0.1186	0.1747	0.0000	0.0009
PCOD8102090	19.14	12.60	0.12	1.5999	0.0088	2.6123	0.0348	3.0841	0.0382	0.0386	0.1652	0.1562	0.0001	0.0004
PCOD8142649	19.14	12.47	0.03	1.6014	0.0088	2.6146	0.0354	3.0762	0.0441	0.0338	0.1523	0.1592	0.0002	0.0011
PCOD8280240	19.15	12.69	0.19	1.6014	0.0099	2.6148	0.0291	3.0758	0.0440	0.0417	0.1472	0.1932	0.0000	0.0013
PCOD8049981	19.15	12.46	0.04	1.6015	0.0087	2.6148	0.0355	3.0758	0.0434	0.0327	0.1571	0.1620	0.0002	0.0011
PCOD8212629	19.17	12.68	0.20	1.6001	0.0083	2.6124	0.0389	3.0833	0.0403	0.0313	0.2338	0.1552	0.0002	0.0005
PCOD8263321	19.17	12.43	0.03	1.6024	0.0087	2.6164	0.0301	3.0703	0.0455	0.0495	0.1252	0.2087	0.0000	0.0023
PCOD8279905	19.18	12.52	0.10	1.6017	0.0059	2.6153	0.0237	3.0753	0.0281	0.0199	0.1001	0.1027	0.0001	0.0006
PCOD8166947	19.18	12.46	0.07	1.6001	0.0076	2.6126	0.0294	3.0835	0.0296	0.0284	0.1179	0.1022	0.0001	0.0004
PCOD8299839	19.18	12.43	0.05	1.5996	0.0073	2.6119	0.0277	3.0856	0.0307	0.0336	0.0986	0.1158	0.0000	0.0004
PCOD8074186	19.19	12.68	0.22	1.6028	0.0045	2.6170	0.0345	3.0693	0.0211	0.0189	0.1551	0.0733	0.0001	0.0010
PCOD8203264	19.21	12.42	0.07	1.6013	0.0100	2.6145	0.0296	3.0761	0.0503	0.0505	0.1499	0.2099	0.0001	0.0016
PCOD8263142	19.25	12.05	0.15	1.6023	0.0071	2.6164	0.0202	3.0710	0.0373	0.0281	0.0881	0.1154	0.0001	0.0019

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8184109	19.25	12.35	0.06	1.6009	0.0079	2.6140	0.0223	3.0791	0.0360	0.0312	0.0884	0.1340	0.0001	0.0009
PCOD8244420	19.26	12.20	0.03	1.6014	0.0064	2.6148	0.0241	3.0763	0.0382	0.0269	0.1146	0.1536	0.0001	0.0012
PCOD8212659	19.27	12.80	0.38	1.6012	0.0069	2.6143	0.0344	3.0777	0.0334	0.0251	0.1753	0.1232	0.0001	0.0006
PCOD8030566	19.29	12.21	0.00	1.6017	0.0097	2.6154	0.0244	3.0745	0.0574	0.0410	0.0941	0.1941	0.0001	0.0012
PCOD8092485	19.29	12.28	0.05	1.5998	0.0080	2.6123	0.0258	3.0841	0.0455	0.0312	0.1012	0.1819	0.0001	0.0009
PCOD8226345	19.29	12.24	0.03	1.6024	0.0062	2.6166	0.0193	3.0710	0.0357	0.0241	0.0796	0.1209	0.0002	0.0015
PCOD8226678	19.30	12.24	0.03	1.5995	0.0066	2.6118	0.0305	3.0860	0.0231	0.0282	0.1160	0.0884	0.0001	0.0005
PCOD8064814	19.31	12.22	0.04	1.5982	0.0071	2.6094	0.0397	3.0934	0.0397	0.0274	0.1680	0.1588	0.0002	0.0004
PCOD8253793	19.32	12.24	0.05	1.6010	0.0058	2.6142	0.0236	3.0788	0.0290	0.0180	0.0898	0.1258	0.0001	0.0006
PCOD8106914	19.33	11.45	0.48	1.6014	0.0068	2.6149	0.0235	3.0758	0.0337	0.0242	0.1045	0.1355	0.0001	0.0016
PCOD8100187	19.34	12.18	0.03	1.5992	0.0076	2.6111	0.0349	3.0876	0.0389	0.0323	0.1496	0.1713	0.0001	0.0004
PCOD8126287	19.35	12.37	0.18	1.5976	0.0086	2.6085	0.0344	3.0959	0.0336	0.0269	0.1367	0.1240	0.0001	0.0000
PCOD8108172	19.36	12.10	0.00	1.6030	0.0080	2.6174	0.0253	3.0673	0.0432	0.0314	0.1157	0.2056	0.0000	0.0022
PCOD8053556	19.37	12.17	0.06	1.5997	0.0090	2.6120	0.0297	3.0847	0.0382	0.0383	0.1066	0.1203	0.0000	0.0010
PCOD8262533	19.37	12.18	0.07	1.5999	0.0077	2.6122	0.0283	3.0842	0.0453	0.0324	0.1210	0.1849	0.0001	0.0007
PCOD8107265	19.38	12.16	0.06	1.5997	0.0058	2.6120	0.0314	3.0855	0.0276	0.0211	0.1110	0.0939	0.0000	0.0002
PCOD8238333	19.39	12.20	0.09	1.5977	0.0087	2.6089	0.0280	3.0952	0.0364	0.0365	0.1211	0.1514	0.0001	0.0001
PCOD8252568	19.40	12.06	0.01	1.5999	0.0086	2.6121	0.0295	3.0840	0.0436	0.0369	0.1260	0.1995	0.0001	0.0008
PCOD8204154	19.40	12.09	0.03	1.6017	0.0059	2.6154	0.0228	3.0750	0.0286	0.0211	0.0963	0.1200	0.0001	0.0008
PCOD8263726	19.42	12.05	0.02	1.5988	0.0093	2.6105	0.0309	3.0895	0.0401	0.0396	0.1192	0.1494	0.0000	0.0007
PCOD8259339	19.42	12.13	0.08	1.5998	0.0062	2.6120	0.0333	3.0846	0.0330	0.0294	0.1422	0.1579	0.0001	0.0008
PCOD8280218	19.43	12.00	0.00	1.6028	0.0082	2.6172	0.0227	3.0678	0.0479	0.0326	0.1001	0.1771	0.0001	0.0025
PCOD8186502	19.46	11.50	0.31	1.6016	0.0080	2.6150	0.0292	3.0740	0.0478	0.0488	0.1406	0.1884	0.0000	0.0024
PCOD8066265	19.47	11.99	0.03	1.6001	0.0063	2.6126	0.0304	3.0833	0.0269	0.0239	0.1001	0.1043	0.0001	0.0004
PCOD8106085	19.52	11.92	0.04	1.5985	0.0077	2.6100	0.0307	3.0911	0.0360	0.0290	0.1041	0.1498	0.0000	0.0004
PCOD8190086	19.54	11.98	0.09	1.5969	0.0090	2.6075	0.0324	3.0992	0.0317	0.0304	0.1163	0.1256	0.0000	0.0001
PCOD8053512	19.55	11.88	0.04	1.6030	0.0066	2.6176	0.0212	3.0674	0.0408	0.0248	0.0786	0.1286	0.0001	0.0020
PCOD8074925	19.56	11.90	0.06	1.6011	0.0085	2.6142	0.0287	3.0774	0.0388	0.0417	0.1328	0.1561	0.0000	0.0016
PCOD8063798	19.57	11.84	0.03	1.6010	0.0068	2.6142	0.0301	3.0783	0.0253	0.0259	0.1057	0.1005	0.0000	0.0008
PCOD8066118	19.58	11.58	0.14	1.6021	0.0104	2.6159	0.0323	3.0714	0.0324	0.0517	0.1684	0.1374	0.0001	0.0025
PCOD8101543	19.58	11.82	0.02	1.6017	0.0070	2.6153	0.0268	3.0746	0.0441	0.0284	0.0981	0.1424	0.0000	0.0013

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
PCOD8103191	19.59	12.06	0.20	1.5987	0.0087	2.6103	0.0327	3.0900	0.0429	0.0374	0.1609	0.1515	0.0001	0.0005
PCOD8253792	19.59	12.13	0.25	1.6021	0.0057	2.6160	0.0238	3.0725	0.0220	0.0263	0.1090	0.0853	0.0001	0.0015
PCOD8065512	19.59	11.95	0.12	1.5997	0.0080	2.6121	0.0263	3.0847	0.0403	0.0295	0.1044	0.1395	0.0001	0.0009
PCOD8108886	19.61	11.80	0.05	1.5996	0.0064	2.6118	0.0270	3.0855	0.0341	0.0259	0.0922	0.1329	0.0000	0.0007
PCOD8260200	19.63	11.79	0.06	1.5992	0.0077	2.6112	0.0290	3.0871	0.0428	0.0304	0.1138	0.1479	0.0000	0.0008
PCOD8175660	19.64	11.77	0.06	1.5980	0.0079	2.6093	0.0276	3.0931	0.0368	0.0275	0.0963	0.1410	0.0000	0.0007
PCOD8100640	19.65	11.66	0.02	1.6015	0.0079	2.6149	0.0307	3.0746	0.0419	0.0424	0.1312	0.1889	0.0001	0.0020
PCOD8106132	19.65	11.89	0.14	1.5974	0.0088	2.6083	0.0299	3.0962	0.0368	0.0313	0.1134	0.1443	0.0000	0.0005
PCOD8101754	19.65	11.74	0.05	1.5998	0.0074	2.6121	0.0303	3.0844	0.0260	0.0396	0.1120	0.1092	0.0000	0.0009
PCOD8106011	19.66	11.59	0.05	1.5985	0.0082	2.6100	0.0303	3.0908	0.0351	0.0296	0.1123	0.1447	0.0000	0.0008
PCOD8253230	19.66	11.90	0.17	1.5997	0.0092	2.6119	0.0357	3.0846	0.0393	0.0453	0.1582	0.1361	0.0001	0.0011
PCOD8076067	19.67	11.75	0.07	1.5976	0.0099	2.6085	0.0325	3.0953	0.0377	0.0410	0.1387	0.1493	0.0001	0.0007
PCOD8212295	19.68	11.62	0.01	1.6020	0.0071	2.6158	0.0258	3.0723	0.0419	0.0300	0.1046	0.1313	0.0000	0.0021
PCOD8106010	19.69	11.68	0.04	1.5991	0.0079	2.6110	0.0306	3.0878	0.0329	0.0311	0.1115	0.1386	0.0000	0.0008
PCOD8074911	19.70	11.75	0.10	1.6023	0.0079	2.6163	0.0279	3.0706	0.0377	0.0475	0.1309	0.1251	0.0000	0.0022
PCOD8071734	19.70	11.36	0.17	1.6005	0.0094	2.6132	0.0297	3.0802	0.0428	0.0432	0.1166	0.1897	0.0000	0.0017
PCOD8170247	19.71	11.67	0.05	1.5966	0.0084	2.6069	0.0332	3.1004	0.0347	0.0308	0.1151	0.1317	0.0000	0.0004
PCOD8102052	19.74	11.66	0.07	1.5986	0.0080	2.6102	0.0308	3.0902	0.0337	0.0341	0.1423	0.1357	0.0000	0.0008
PCOD8189478	19.76	11.60	0.05	1.6025	0.0072	2.6167	0.0233	3.0695	0.0425	0.0262	0.0821	0.1268	0.0001	0.0023
PCOD8189713	19.76	11.57	0.04	1.6017	0.0069	2.6152	0.0304	3.0739	0.0315	0.0362	0.1557	0.1227	0.0001	0.0020
PCOD8103161	19.78	11.61	0.08	1.5993	0.0087	2.6114	0.0303	3.0863	0.0353	0.0347	0.1295	0.1470	0.0000	0.0012
PCOD8238064	19.80	11.27	0.13	1.5991	0.0081	2.6110	0.0303	3.0872	0.0308	0.0344	0.1581	0.1590	0.0000	0.0014
PCOD8100218	19.81	11.53	0.05	1.5985	0.0085	2.6101	0.0294	3.0903	0.0360	0.0364	0.1045	0.1521	0.0000	0.0012
PCOD8253969	19.81	11.44	0.01	1.5984	0.0079	2.6099	0.0293	3.0909	0.0321	0.0336	0.1548	0.1668	0.0000	0.0010
PCOD8108406	19.81	11.46	0.02	1.5996	0.0087	2.6119	0.0299	3.0848	0.0329	0.0360	0.1302	0.1382	0.0000	0.0013
PCOD8049791	19.83	11.41	0.01	1.6018	0.0089	2.6154	0.0329	3.0736	0.0505	0.0271	0.1519	0.1983	0.0000	0.0017
PCOD8237350	19.83	11.43	0.01	1.6004	0.0092	2.6132	0.0258	3.0807	0.0403	0.0388	0.0886	0.1685	0.0000	0.0015
PCOD8180088	19.85	11.49	0.07	1.5987	0.0089	2.6105	0.0297	3.0892	0.0383	0.0273	0.1004	0.1305	0.0001	0.0013
PCOD8220674	19.85	12.03	0.44	1.5996	0.0083	2.6118	0.0290	3.0854	0.0386	0.0350	0.1486	0.1718	0.0001	0.0007
PCOD8233108	19.86	11.30	0.05	1.6002	0.0073	2.6128	0.0252	3.0816	0.0424	0.0417	0.1155	0.1732	0.0000	0.0017
PCOD8109096	19.87	11.32	0.02	1.6008	0.0066	2.6139	0.0256	3.0785	0.0177	0.0241	0.1145	0.0608	0.0001	0.0017

Structure code	FD (T nm <sup>-3</sup> )	$\Delta E$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\nu$ (T nm <sup>-3</sup> )	$\langle D_{TO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TO}$ (Å)	$\langle D_{OO} \rangle$ (Å)	$\sigma_{OO}$ (Å)	$\langle D_{TT} \rangle$ (Å)	$\sigma_{TT}$ (Å)	$R_{TO}$ (Å)	$R_{OO}$ (Å)	$R_{TT}$ (Å)	$\epsilon_{OO}$ (Å)	$\epsilon_{TT}$ (Å)
<b>PCOD8330772</b>	19.88	11.34	0.00	1.6014	0.0075	2.6149	0.0208	3.0753	0.0386	0.0332	0.0931	0.1766	0.0001	0.0022
<b>PCOD8062708</b>	19.88	11.34	0.00	1.5991	0.0082	2.6109	0.0273	3.0879	0.0384	0.0341	0.1108	0.1581	0.0000	0.0009
<b>PCOD8213655</b>	19.88	12.01	0.46	1.5999	0.0069	2.6122	0.0303	3.0840	0.0392	0.0265	0.1176	0.1433	0.0001	0.0008
<b>PCOD8210118</b>	19.89	11.34	0.01	1.5997	0.0078	2.6119	0.0272	3.0848	0.0364	0.0331	0.1139	0.1456	0.0000	0.0010
<b>PCOD8173853</b>	19.90	11.55	0.16	1.6009	0.0066	2.6141	0.0250	3.0781	0.0271	0.0240	0.1002	0.0955	0.0001	0.0016
<b>PCOD8107094</b>	19.90	11.10	0.15	1.5987	0.0070	2.6103	0.0311	3.0896	0.0306	0.0313	0.1164	0.1377	0.0001	0.0011
<b>PCOD8065286</b>	19.90	11.34	0.02	1.6026	0.0065	2.6167	0.0274	3.0691	0.0419	0.0262	0.1149	0.1662	0.0000	0.0025
<b>PCOD8280920</b>	19.94	11.27	0.01	1.6013	0.0058	2.6148	0.0213	3.0763	0.0265	0.0212	0.0896	0.0930	0.0001	0.0014
<b>PCOD8075297</b>	19.94	11.29	0.02	1.6016	0.0074	2.6151	0.0300	3.0737	0.0382	0.0341	0.1364	0.1579	0.0000	0.0026
<b>PCOD8254037</b>	19.95	11.86	0.42	1.5997	0.0068	2.6116	0.0408	3.0848	0.0393	0.0365	0.1878	0.1500	0.0003	0.0010
<b>PCOD8308388</b>	19.95	11.28	0.03	1.5970	0.0073	2.6075	0.0362	3.0980	0.0302	0.0255	0.1468	0.1095	0.0002	0.0006
<b>PCOD8154046</b>	19.95	11.31	0.05	1.5977	0.0066	2.6084	0.0365	3.0946	0.0441	0.0280	0.1564	0.1642	0.0003	0.0011
<b>PCOD8260399</b>	19.98	11.21	0.01	1.5999	0.0082	2.6124	0.0253	3.0831	0.0467	0.0312	0.1032	0.1480	0.0001	0.0017
<b>PCOD8273476</b>	19.99	11.31	0.09	1.5991	0.0089	2.6110	0.0287	3.0872	0.0410	0.0374	0.1064	0.1167	0.0000	0.0014



**Table S3.** 153 unfeasible hypothetical frameworks detected by the TTT criteria.

<b>PCOD8326122</b>	5-RingminTTT [ <u>100.5</u> , <u>107.1</u> ]	10-RingminTTT [ <u>140.3</u> , <u>140.3</u> ]
<b>PCOD8200684</b>	10-RingmaxTTT [ <u>173.5</u> , <u>173.6</u> ]	
<b>PCOD8320054</b>	9-RingmaxTTT [ <u>158.3</u> , <u>158.3</u> ]	
<b>PCOD8315654</b>	14-RingminTTT [ <u>140.7</u> , <u>140.7</u> ]	14-RingmaxTTT [ <u>173.7</u> , <u>173.7</u> ]
<b>PCOD8320524</b>	9-RingmaxTTT [ <u>157.5</u> , <u>157.5</u> ]	
<b>PCOD8327476</b>	5-RingminTTT [ <u>107.6</u> , <u>107.6</u> ]	
<b>PCOD8325055</b>	5-RingminTTT [ <u>107.4</u> , <u>107.4</u> ]	
<b>PCOD8322022</b>	5-RingmaxTTT [ <u>130.1</u> , <u>134.4</u> ]	5-Ringspan-TTT [ <u>42.5</u> , <u>47.6</u> ]
<b>PCOD8193831</b>	12-RingmaxTTT [ <u>177.4</u> , <u>177.4</u> ]	
<b>PCOD8196409</b>	12-RingmaxTTT [ <u>177.4</u> , <u>177.4</u> ]	
<b>PCOD8320017</b>	7-Ringspan-TTT [ <u>11.1</u> , <u>11.1</u> ]	
<b>PCOD8196708</b>	12-RingmaxTTT [ <u>177.4</u> , <u>177.4</u> ]	
<b>PCOD8324447</b>	5-Ringspan-TTT [ <u>19.6</u> , <u>36.2</u> ]	
<b>PCOD8298138</b>	5-RingminTTT [ <u>104.2</u> , <u>106.9</u> ]	
<b>PCOD8265553</b>	10-RingmaxTTT [ <u>174.2</u> , <u>174.2</u> ]	10-Ringspan-TTT [ <u>56.1</u> , <u>56.1</u> ]
<b>PCOD8255421</b>	9-RingmaxTTT [ <u>137.3</u> , <u>137.3</u> ]	11-RingmaxTTT [ <u>136.5</u> , <u>136.5</u> ]
	11-RingminTTT [ <u>94.7</u> , <u>94.7</u> ]	11-Ringspan-TTT [ <u>41.8</u> , <u>41.8</u> ]
<b>PCOD8265558</b>	5-RingminTTT [ <u>107.8</u> , <u>107.8</u> ]	
<b>PCOD8329746</b>	10-RingmaxTTT [ <u>159.1</u> , <u>159.1</u> ]	
<b>PCOD8313111</b>	6-RingminTTT [ <u>75.6</u> , <u>119.1</u> ]	
<b>PCOD8196694</b>	12-RingmaxTTT [ <u>177.4</u> , <u>177.4</u> ]	
<b>PCOD8326816</b>	10-RingmaxTTT [ <u>152.7</u> , <u>152.7</u> ]	
<b>PCOD8316043</b>	7-RingminTTT [ <u>85.9</u> , <u>96.1</u> ]	10-RingmaxTTT [ <u>156.7</u> , <u>156.7</u> ]
<b>PCOD8316036</b>	7-Ringspan-TTT [ <u>10.2</u> , <u>10.2</u> ]	
<b>PCOD8312314</b>	10-RingmaxTTT [ <u>154.3</u> , <u>154.3</u> ]	
<b>PCOD8307105</b>	10-RingmaxTTT [ <u>160.0</u> , <u>160.0</u> ]	
<b>PCOD8116632</b>	5-Ringspan-TTT [ <u>25.8</u> , <u>36.2</u> ]	
<b>PCOD8287212</b>	12-RingmaxTTT [ <u>118.8</u> , <u>118.8</u> ]	
<b>PCOD8330297</b>	5-RingminTTT [ <u>107.6</u> , <u>107.6</u> ]	
<b>PCOD8297228</b>	7-RingmaxTTT [ <u>122.8</u> , <u>141.0</u> ]	7-RingminTTT [ <u>89.6</u> , <u>106.5</u> ]
<b>PCOD8275427</b>	7-RingmaxTTT [ <u>122.5</u> , <u>142.5</u> ]	7-RingminTTT [ <u>89.7</u> , <u>106.8</u> ]
<b>PCOD8307101</b>	5-Ringspan-TTT [ <u>18.3</u> , <u>36.3</u> ]	
<b>PCOD8274173</b>	7-RingminTTT [ <u>88.9</u> , <u>91.1</u> ]	
<b>PCOD8312121</b>	4-RingmaxTTT [ <u>90.1</u> , <u>97.3</u> ]	
<b>PCOD8275276</b>	5-RingminTTT [ <u>106.6</u> , <u>107.3</u> ]	
<b>PCOD8297400</b>	7-RingmaxTTT [ <u>122.2</u> , <u>141.1</u> ]	7-RingminTTT [ <u>89.6</u> , <u>108.0</u> ]
<b>PCOD8265260</b>	5-RingminTTT [ <u>105.6</u> , <u>107.0</u> ]	
<b>PCOD8298127</b>	7-RingmaxTTT [ <u>123.5</u> , <u>145.6</u> ]	7-RingminTTT [ <u>85.7</u> , <u>108.0</u> ]
<b>PCOD8275748</b>	7-RingmaxTTT [ <u>121.8</u> , <u>143.2</u> ]	7-RingminTTT [ <u>89.2</u> , <u>107.9</u> ]
<b>PCOD8275707</b>	7-RingmaxTTT [ <u>121.8</u> , <u>141.2</u> ]	7-RingminTTT [ <u>89.0</u> , <u>107.2</u> ]
<b>PCOD8316327</b>	10-RingminTTT [ <u>141.1</u> , <u>141.1</u> ]	
<b>PCOD8323380</b>	10-RingminTTT [ <u>86.2</u> , <u>107.9</u> ]	10-Ringspan-TTT [ <u>39.3</u> , <u>56.7</u> ]
	16-RingmaxTTT [ <u>157.8</u> , <u>157.8</u> ]	16-RingminTTT [ <u>147.2</u> , <u>147.2</u> ]
		16-Ringspan-TTT [ <u>10.6</u> , <u>10.6</u> ]
<b>PCOD8322639</b>	5-RingminTTT [ <u>107.5</u> , <u>107.5</u> ]	7-RingmaxTTT [ <u>142.8</u> , <u>142.8</u> ]
<b>PCOD8056809</b>	6-RingminTTT [ <u>75.9</u> , <u>119.4</u> ]	
<b>PCOD8275094</b>	10-Ringspan-TTT [ <u>3.6</u> , <u>3.6</u> ]	
<b>PCOD8287229</b>	5-Ringspan-TTT [ <u>18.3</u> , <u>35.8</u> ]	
<b>PCOD8327305</b>	5-RingminTTT [ <u>107.4</u> , <u>107.4</u> ]	

**PCOD8325399** 5-RingminTTT [107.3, 107.3]  
**PCOD8265609** 12-RingmaxTTT [122.6, 122.6]  
**PCOD8330275** 5-RingminTTT [107.4, 107.4] 9-RingminTTT [125.1, 125.1]  
**PCOD8287165** 5-RingmaxTTT [100.7, 100.7]  
**PCOD8330350** 7-RingmaxTTT [138.1, 138.1]  
**PCOD8287111** 12-RingmaxTTT [115.9, 145.1]  
**PCOD8314793** 9-RingmaxTTT [149.6, 151.0]  
**PCOD8311295** 9-RingmaxTTT [150.0, 150.0]  
**PCOD8288263** 12-RingmaxTTT [117.0, 117.0]  
**PCOD8328754** 7-RingmaxTTT [147.8, 147.8] 7-Ringspan-TTT [56.2, 56.3]  
**PCOD8326837** 5-RingmaxTTT [120.0, 127.4] 5-Ringspan-TTT [23.5, 37.5]  
**PCOD8317699** 9-RingminTTT [133.3, 133.3]  
**PCOD8275237** 10-RingmaxTTT [153.6, 153.6]  
**PCOD8224235** 5-Ringspan-TTT [15.0, 35.7]  
**PCOD8297653** 7-RingmaxTTT [138.9, 140.4]  
**PCOD8275569** 7-RingmaxTTT [152.6, 154.9] 5-Ringspan-TTT [48.0, 49.9]  
**PCOD8267700** 5-Ringspan-TTT [11.3, 37.2]  
**PCOD8325760** 14-RingmaxTTT [146.4, 146.4] 14-RingminTTT [89.7, 89.9] 14-Ringspan-TTT [56.4, 56.7]  
**PCOD8312182** 16-RingmaxTTT [159.6, 159.6] 16-RingminTTT [155.2, 155.2] 16-Ringspan-TTT [4.4, 4.4]  
**PCOD8287561** 7-RingmaxTTT [142.8, 142.8]  
**PCOD8287401** 7-RingmaxTTT [137.4, 137.4] 7-RingminTTT [83.3, 83.4] 7-Ringspan-TTT [54.1, 54.1]  
**PCOD8288490** 10-RingmaxTTT [159.1, 159.1]  
**PCOD8265454** 12-Ringmax [115.5, 145.6]  
**PCOD8287569** 5-RingmaxTTT [108.1, 126.5]  
**PCOD8167047** 5-Ringspan-TTT [7.6, 37.2]  
**PCOD8288185** 5-Ringspan-TTT [36.2, 36.2] 7-RingmaxTTT [145.3, 145.3] 7-Ringspan-TTT [49.7, 49.7]  
**PCOD8177390** 16-RingmaxTTT [147.5, 147.5] 16-RingminTTT [115.7, 115.7] 16-Ringspan-TTT [31.8, 31.8]  
**PCOD8250146** 16-RingmaxTTT [147.1, 147.1] 16-RingminTTT [115.1, 115.1] 16-Ringspan-TTT [31.9, 31.9]  
**PCOD8182441** 16-RingmaxTTT [147.8, 147.8] 16-RingminTTT [115.8, 115.8] 16-Ringspan-TTT [32.0, 32.0]  
**PCOD8275951** 6-RingmaxTTT [114.0, 152.9]  
**PCOD8267707** 12-RingmaxTTT [116.8, 116.8]  
**PCOD8239101** 16-RingmaxTTT [148.1, 148.1] 16-RingminTTT [115.3, 115.3] 16-Ringspan-TTT [32.8, 32.8]  
**PCOD8297791** 10-RingmaxTTT [161.5, 161.5] 10-Ringspan-TTT [49.9, 67.9]  
**PCOD8288184** 7-RingmaxTTT [140.5, 140.5]  
**PCOD8268335** 12-RingmaxTTT [116.5, 116.5]  
**PCOD8250245** 16-RingmaxTTT [148.0, 148.0] 16-RingminTTT [119.5, 119.5] 16-Ringspan-TTT [28.5, 28.5]  
**PCOD8265597** 16-RingmaxTTT [145.9, 145.9] 16-RingminTTT [105.9, 122.9] 16-Ringspan-TTT [23.0, 40.0]  
**PCOD8250160** 16-RingminTTT [115.2, 115.2] 16-Ringspan-TTT [33.9, 34.0]  
**PCOD8188016** 16-RingminTTT [115.3, 115.3] 16-Ringspan-TTT [33.8, 33.8]  
**PCOD8330439** 5-RingminTTT [107.6, 107.6]  
**PCOD8068543** 16-RingmaxTTT [144.8, 144.8] 16-RingminTTT [116.1, 116.1] 16-Ringspan-TTT [28.7, 28.7]  
**PCOD8275488** 7-RingmaxTTT [139.4, 139.4]  
**PCOD8323005** 5-Ringspan-TTT [10.4, 41.0]  
**PCOD8235822** 16-RingminTTT [119.6, 119.6] 16-Ringspan-TTT [31.3, 31.3]  
**PCOD8068618** 16-RingmaxTTT [146.3, 146.3] 16-RingminTTT [119.2, 119.2] 16-Ringspan-TTT [27.1, 27.1]  
**PCOD8287233** 5-RingspanTTT [12.7, 38.0]  
**PCOD8293075** 7-RingmaxTTT [141.9, 141.9] 7-Ringspan-TTT [48.2, 48.2]  
**PCOD8275312** 5-RingspanTTT [24.5, 40.5] 16-RingminTTT [111.7, 111.7] 16-Ringspan-TTT [37.7, 37.7]  
**PCOD8069999** 16-RingmaxTTT [146.5, 146.5] 16-RingminTTT [118.0, 118.0] 16-Ringspan-TTT [28.6, 28.6]  
**PCOD8069998** 16-RingmaxTTT [146.7, 146.7] 16-RingminTTT [114.8, 114.9] 16-Ringspan-TTT [31.8, 31.8]

**PCOD8070119** 16-RingmaxTTT [146.6, 146.6] 16-RingminTTT [119.8, 119.8] 16-Ringspan-TTT [26.8, 26.8]  
**PCOD8250254** 14-RingmaxTTT [145.3, 145.3]  
**PCOD8068380** 14-RingminTTT [134.9, 134.9] 14-Ringspan-TTT [13.5, 13.5]  
**PCOD8206142** 9-RingmaxTTT [136.8, 143.7] 16-RingmaxTTT [143.7, 143.7] 16-Ringspan-TTT [39.5, 39.2]  
**PCOD8298578** 5-RingminTTT [95.2, 107.2] 10-Ringspan-TTT [4.5, 6.4]  
**PCOD8286942** 5-RingSpan-TTT [1.0, 2.4]  
**PCOD8295265** 7-RingmaxTTT [139.2, 139.2]  
**PCOD8323528** 10-RingminTTT [82.8, 82.8] 10-Ringspan-TTT [62.2, 62.2]  
**PCOD8287412** 14-RingmaxTTT [145.0, 146.0] 14-RingminTTT [94.1, 132.1] 14-RingSpan-TTT [12.9, 51.9]  
**PCOD8202513** 16-RingmaxTTT [147.3, 147.3] 16-RingminTTT [123.7, 123.7] 16-Ringspan-TTT [23.6, 23.6]  
**PCOD8078965** 16-RingmaxTTT [148.2, 148.2] 16-RingminTTT [122.2, 122.2] 16-Ringspan-TTT [26.0, 26.0]  
**PCOD8287612** 16-RingmaxTTT [129.6, 147.5] 16-RingminTTT [110.6, 123.0] 16-Ringspan-TTT [7.9, 35.8]  
**PCOD8256053** 16-RingmaxTTT [134.1, 147.1] 16-RingminTTT [111.4, 121.8] 16-Ringspan-TTT [22.5, 35.5]  
**PCOD8177530** 12-RingmaxTTT [117.1, 145.0]  
**PCOD8084987** 14-RingmaxTTT [146.0, 146.0] 14-Ringspan-TTT [25.8, 25.8]  
**PCOD8230406** 14-Ringspan-TTT [26.0, 26.0]  
**PCOD8206627** 16-RingmaxTTT [146.5, 146.5] 16-RingminTTT [125.9, 125.9] 16-Ringspan-TTT [20.6, 20.6]  
**PCOD8068222** 16-RingmaxTTT [143.4, 143.4] 16-RingminTTT [118.0, 118.0] 16-Ringspan-TTT [25.4, 25.4]  
**PCOD8230860** 6-RingminTTT [77.5, 117.2]  
**PCOD8188235** 12-RingmaxTTT [118.1, 148.2]  
**PCOD8230781** 14-RingSpan-TTT [24.3, 24.3]  
**PCOD8207879** 16-RingmaxTT [144.8, 144.8] 16-RingminTTT [125.4, 125.4] 16-Ringspan-TTT [19.4, 19.4]  
**PCOD8241484** 14-RingmaxTTT [158.1, 158.1]  
**PCOD8206399** 14-RingmaxTTT [145.4, 145.4] 14-RingminTTT [129.4, 129.4] 14-RingSpan-TTT [16.1, 16.1]  
**PCOD8086115** 7-RingmaxTTT [140.3, 140.3]  
**PCOD8061081** 14-RingmaxTTT [145.6, 145.6] 14-Ringspan-TTT [18.2, 18.2]  
**PCOD8057902** 14-RingmaxTTT [145.5, 145.5] 14-Ringspan-TTT [22.0, 22.0]  
**PCOD8230494** 9-RingmaxTTT [136.9, 138.8]  
**PCOD8039026** 16-RingmaxTTT [136.0, 136.0] 16-RingminTTT [111.8, 111.8] 16-Ringspan-TTT [24.2, 24.2]  
**PCOD8092398** 9-RingmaxTTT [137.2, 138.8]  
**PCOD8084263** 7-RingminTTT [89.0, 89.0] 12-RingmaxTTT [126.4, 126.4]  
14-RingmaxTTT [137.8, 141.4] 14-RingminTTT [103.2, 108.1]  
**PCOD8210381** 14-RingmaxTTT [140.1, 140.1] 14-Ringspan-TTT [24.6, 24.6]  
**PCOD8097531** 10-RingmaxTTT [152.5, 153.0] 10-Ringspan-TTT [39.8, 60.2]  
**PCOD8236883** 10-RingmaxTTT [152.3, 152.3] 10-Ringspan-TTT [47.1, 62.5]  
**PCOD8082880** 5-RingmaxTTT [100.0, 117.3]  
**PCOD8098730** 14-RingmaxTTT [140.5, 141.6] 14-Ringspan-TTT [23.5, 24.5]  
**PCOD8059902** 14-RingmaxTTT [144.0, 144.0] 14-Ringspan-TTT [16.8, 16.8]  
**PCOD8178240** 5-Ringspan-TTT [20.0, 42.2]  
**PCOD8242436** 14-RingmaxTTT [136.9, 136.9] 14-Ringspan-TTT [20.6, 20.6]  
**PCOD8236886** 16-RingmaxTTT [155.6, 155.6] 16-Ringspan-TTT [52.1, 52.1]  
**PCOD8318118** 7-Ringspan-TTT [7.8, 22.6]  
**PCOD8294496** 7-Ringspan-TTT [7.9, 41.3] 16-RingminTTT [114.7, 115.8] 16-Ringspan-TTT [37.6, 38.7]  
**PCOD8061492** 9-RingmaxTTT [134.5, 139.0]  
**PCOD8257777** 14-RingminTTT [85.3, 90.9] 14-Ringspan-TTT [60.2, 65.7]  
**PCOD8103956** 7-RingmaxTTT [138.0, 142.2] 7-Ringspan-TTT [41.5, 48.7]  
**PCOD8110532** 10-RingmaxTTT [131.9, 153.7]  
**PCOD8073258** 7-RingmaxTTT [139.5, 139.6]  
**PCOD8236328** 9-RingmaxTTT [135.8, 140.0]  
**PCOD8198832** 14-RingmaxTTT [138.0, 138.2] 14-RingminTTT [101.8, 102.0]

**PCOD8141547** 7-RingminTTT [81.6, 106.4] 7-Ringspan-TTT [23.1, 48.2]  
**PCOD8142649** 7-RingminTTT [85.8, 85.8]  
**PCOD8049981** 7-RingminTTT [85.7, 85.7]  
**PCOD8226678** 7-RingmaxTTT [138.2, 138.3]  
**PCOD8190086** 7-RingmaxTTT [118.6, 133.1]  
**PCOD8066118** 5-Ringspan-TTT [18.3, 35.8]  
**PCOD8101754** 7-RingmaxTTT [137.3, 137.3]  
**PCOD8189713** 9-RingmaxTTT [156.5, 156.5]

---

**Table S4** Shortest non-adjacent O...O distances for different sizes of rings among 231 existing zeolites.

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>ABW</b>	0.3605		0.3914		0.4318			
<b>ACO</b>	0.3717				0.4462			
<b>AEI</b>	0.3365		0.3984		0.4386			
<b>AEL</b>	0.3556		0.3407				0.4471	
<b>AEN</b>	0.3518		0.3454		0.3785			
<b>AET</b>	0.2941		0.3075					
<b>AFG</b>	0.3584		0.3835					
<b>AFI</b>	0.3629		0.3551					0.4909
<b>AFN</b>	0.3280		0.3539		0.4057			
<b>AFO</b>	0.3478		0.3402				0.4287	
<b>AFR</b>	0.3425		0.3629		0.4386			0.4437
<b>AFS</b>	0.3366		0.3613		0.4372			0.4194
<b>AFT</b>	0.3363		0.4013		0.4732			
<b>AFV</b>	0.3347		0.3863		0.4408			
<b>AFX</b>	0.3363		0.4027		0.4486			
<b>AFY</b>	0.3234				0.4606			0.4258
<b>AHT</b>	0.2994		0.3223				0.4365	
<b>ANA</b>	0.3682		0.4279		0.3683			
<b>APC</b>	0.3066		0.4293		0.4081			
<b>APD</b>	0.3321		0.3475		0.3724			
<b>AST</b>	0.3683		0.3485					
<b>ASV</b>	0.3660		0.3085					0.3575
<b>ATN</b>	0.3516		0.3613		0.3516			
<b>ATO</b>	0.3326		0.3367					0.4120
<b>ATS</b>	0.3553		0.3617					0.4715
<b>ATT</b>	0.3495		0.3681		0.4010			
<b>ATV</b>	0.3660		0.3565		0.4207			
<b>AVL</b>	0.3277		0.3864		0.4412			
<b>AWO</b>	0.3351		0.3317		0.4264			
<b>AWW</b>	0.3450		0.3351		0.4678			

<b>BCT</b>	0.3695		0.3759	0.3814		
<b>BEA</b>	0.3168	0.3568	0.3480			0.4718
<b>BEC</b>	0.3254	0.3564	0.3888			0.4728
<b>BIK</b>		0.3616	0.3599	0.3964		
<b>BOF</b>	0.3517	0.3752	0.3308		0.4105	
<b>BOG</b>	0.3362	0.3648	0.3375		0.4759	0.4632
<b>BOZ</b>	0.3313		0.3668	0.4208	0.4603	
<b>BPH</b>	0.3366		0.3611	0.4173		0.4200
<b>BRE</b>	0.3613	0.3229	0.3698	0.3458		
<b>BSV</b>	0.3116		0.4093			0.3439
<b>CAN</b>	0.3630		0.3791			0.3791
<b>CAS</b>		0.3558	0.3361	0.3361		
<b>CDO</b>		0.3163		0.3972		
<b>CFI</b>	0.3657	0.3228	0.3885			
<b>CGF</b>	0.3420		0.3390	0.4001	0.3422	
<b>CGS</b>	0.3434		0.3683	0.3917	0.3879	
<b>CHA</b>	0.3398		0.4012	0.4490		
<b>-CHI</b>	0.3528	0.3893	0.3345		0.3583	
<b>-CLO</b>	0.3531		0.3824	0.4637		
<b>CON</b>	0.3281	0.3474	0.3473		0.4546	0.4536
<b>CSV</b>	0.3361	0.3326	0.3243	0.3980	0.4568	
<b>CZP</b>	0.3094			0.3007		0.3321
<b>DAC</b>	0.3500	0.3359		0.4336	0.3725	
<b>DDR</b>	0.3540	0.3059	0.4429	0.4429		
<b>DFO</b>	0.3274		0.3070	0.4165	0.4687	0.3761
<b>DFT</b>	0.3298		0.3650	0.3650		
<b>DOH</b>	0.3538	0.3275	0.3902			
<b>DON</b>	0.3253	0.3343	0.3553			
<b>EAB</b>	0.3492		0.3880	0.4270		
<b>EDI</b>	0.3719			0.4206		
<b>EEI</b>	0.3453	0.3043	0.3441	0.4215		
<b>EMT</b>	0.3301		0.3828			0.4900
<b>EON</b>	0.3325	0.3445	0.3882	0.3723		0.4406

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>EPI</b>	0.3745	0.3252			0.4008			
<b>ERI</b>	0.3554		0.3680		0.4233			
<b>ESV</b>	0.3443	0.3339	0.3627		0.4336			
<b>ETR</b>	0.3359		0.3617		0.3301			
<b>EUO</b>	0.3173	0.3158	0.3531				0.4497	
<b>-EWT</b>	0.3235	0.3179	0.3131	0.3142			0.4295	
<b>EZT</b>	0.3410		0.3211		0.3989			0.3864
<b>FAR</b>	0.3594		0.3843					
<b>FAU</b>	0.3355		0.3827					0.4902
<b>FER</b>		0.3294	0.3693		0.3933		0.3933	
<b>FRA</b>	0.3442		0.3457					
<b>GIS</b>	0.3400				0.4801			
<b>GIU</b>	0.3435		0.3712					
<b>GME</b>	0.3332		0.4058		0.4500			0.4724
<b>GON</b>	0.3306	0.3633	0.3720		0.3843			0.4523
<b>GOO</b>	0.3381		0.3480		0.3648			
<b>HEU</b>	0.3617	0.3496			0.3528		0.3528	
<b>IFO</b>	0.3389		0.3192					
<b>IFR</b>	0.3370	0.3596	0.3241					0.4539
<b>-IFU</b>	0.3343	0.3208	0.3959		0.3547			0.4856
<b>IFW</b>	0.3302	0.3243	0.3727		0.4102		0.4695	
<b>IFY</b>	0.3200		0.3254		0.3145			
<b>IHW</b>	0.3506	0.3341	0.3321		0.4073			
<b>IMF</b>	0.3187	0.3135	0.3088				0.4508	
<b>IRN</b>	0.3493	0.3289	0.3407	0.4079	0.4411			
<b>IRR</b>	0.3537	0.3209	0.4109					0.4817
<b>-IRY</b>	0.3239	0.3138	0.3928					
<b>ISV</b>	0.3295	0.3468	0.3840					0.4230
<b>ITE</b>	0.3153	0.3476	0.3491		0.3952			
<b>ITG</b>	0.3345	0.3328	0.3377				0.4389	0.4680
<b>ITH</b>	0.3427	0.3410	0.3679			0.4265	0.4497	
<b>-ITN</b>	0.3061	0.3256	0.3342				0.4629	0.4605

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>ITR</b>	0.3367	0.3476	0.3524			0.4253	0.4506	
<b>ITT</b>	0.3453	0.3146	0.3574				0.4802	
<b>-ITV</b>	0.3495		0.3448					
<b>ITW</b>	0.3490	0.3192	0.3929		0.3994			
<b>IWR</b>	0.2986	0.3939	0.3165				0.4587	0.4108
<b>IWS</b>	0.3002	0.3289	0.3508					0.4875
<b>IWV</b>	0.3262	0.3196	0.3643					0.4791
<b>IWW</b>	0.3347	0.3315	0.3486		0.3804		0.4486	0.4798
<b>JBW</b>	0.3660		0.3720		0.4313			
<b>JNT</b>	0.3007		0.3248		0.3454			
<b>JOZ</b>	0.3195				0.3787			
<b>JRY</b>	0.3472		0.4133				0.3982	
<b>JSN</b>	0.3476		0.3309		0.4138			
<b>JSR</b>	0.3476		0.3265					
<b>JST</b>			0.3982				0.4074	
<b>JSW</b>	0.3406		0.3552		0.3562			
<b>KFI</b>	0.3389		0.3962		0.4195			
<b>LAU</b>	0.3479		0.3278				0.4153	
<b>LEV</b>	0.3540		0.3835		0.4292			
<b>LIO</b>	0.3573		0.3841					
<b>-LIT</b>	0.3380		0.3618		0.3948		0.3138	
<b>LOS</b>	0.3570		0.3858					
<b>LOV</b>	0.3417		0.3678		0.3848	0.3934		
<b>LTA</b>	0.3685		0.3853		0.4678			
<b>LTF</b>	0.3337	0.3648	0.3613		0.3678			0.4311
<b>LTJ</b>	0.3669		0.3406		0.4112			
<b>LTL</b>	0.3455		0.3589		0.3280			0.5009
<b>LTN</b>	0.3484		0.3921		0.4369			
<b>MAR</b>	0.3591		0.3842					
<b>MAZ</b>	0.3342	0.3670	0.3889		0.3726			0.4977
<b>MEI</b>	0.3551	0.3358		0.4227				0.4692
<b>MEL</b>	0.3450	0.3296	0.3468		0.3468		0.4515	



<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>MEP</b>		0.3055	0.3944					
<b>MER</b>	0.3362				0.4134			
<b>MFI</b>	0.3374	0.3292	0.3334				0.4606	
<b>MFS</b>	0.3388	0.3433	0.3397		0.4079		0.4689	
<b>MON</b>	0.3646	0.3628			0.3800			
<b>MOR</b>	0.3467	0.3353			0.3804			0.4416
<b>MOZ</b>	0.3428		0.3607		0.3244			0.4264
<b>MRE</b>	0.3218	0.3333	0.3402				0.4623	
<b>MSE</b>	0.3289	0.3283	0.3591				0.4619	0.4619
<b>MSO</b>	0.3512		0.3408					
<b>MTF</b>	0.3503	0.3420	0.3382		0.4647			
<b>MTN</b>		0.3089	0.4085					
<b>MTT</b>		0.3268	0.3440				0.4644	
<b>MTW</b>	0.3546	0.3370	0.3295					0.3878
<b>MVY</b>	0.3115		0.3583				0.3803	
<b>MWF</b>	0.3323		0.4279		0.4023			
<b>MWW</b>	0.3567	0.3506	0.3408				0.4510	
<b>NAB</b>	0.3752				0.4503	0.4343		
<b>NAT</b>	0.3710				0.4072	0.3833		
<b>NES</b>	0.3499	0.3064	0.3697				0.4511	
<b>NON</b>	0.3608	0.3132	0.3487					
<b>NPO</b>			0.3622					0.4176
<b>NPT</b>	0.3745				0.4460			
<b>NSI</b>		0.3609	0.3524		0.3839			
<b>OBW</b>	0.3745				0.4283		0.4609	
<b>OFF</b>	0.3499		0.3680		0.4214			0.4214
<b>OKO</b>	0.3382	0.3044	0.3569				0.4645	0.4490
<b>OSI</b>	0.3400		0.3564					0.4659
<b>OSO</b>					0.4170			
<b>OWE</b>	0.3340		0.3337		0.3337			
<b>-PAR</b>	0.3485		0.3169		0.3119		0.4267	
<b>PAU</b>	0.3321		0.4277		0.4054			

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>PCR</b>		0.3191	0.3474		0.4065		0.4068	
<b>PHI</b>	0.3373				0.4063			
<b>PON</b>	0.3391		0.3293				0.3832	
<b>POS</b>	0.3080	0.3129	0.3830					0.4856
<b>PSI</b>	0.3450		0.3205		0.3540		0.4337	
<b>PUN</b>	0.3275				0.4042		0.4411	
<b>RHO</b>	0.3321		0.4275		0.4616			
<b>-RON</b>	0.3751		0.3329				0.4437	0.3356
<b>RRO</b>	0.3247	0.3629			0.4384		0.4483	
<b>RSN</b>	0.3450	0.3543	0.3652		0.3910	0.3955		
<b>RTE</b>	0.3241	0.3563	0.3641		0.4664			
<b>RTH</b>	0.3180	0.3471	0.3765		0.4678			
<b>RUT</b>	0.3442	0.3412	0.3471		0.4673			
<b>RWR</b>	0.3228	0.3362	0.3254		0.4303			
<b>RWY</b>					0.3872			0.4345
<b>SAF</b>	0.3441		0.3226					0.4787
<b>SAO</b>	0.3354		0.3384					0.4763
<b>SAS</b>	0.3450		0.3679		0.4673			
<b>SAT</b>	0.3573		0.3848		0.4055			
<b>SAV</b>	0.3294		0.3837		0.4256			
<b>SBE</b>	0.3469		0.3442		0.4006			0.4914
<b>SBN</b>	0.3736				0.4484			
<b>SBS</b>	0.3439		0.3731		0.3454			0.4759
<b>SBT</b>	0.3429		0.3612		0.3466			0.4761
<b>SEW</b>	0.3139	0.3487	0.3315				0.4587	0.4742
<b>SFE</b>	0.3486	0.3299	0.3689					0.4580
<b>SFF</b>	0.3367	0.3352	0.3241				0.4771	
<b>SFG</b>	0.3287	0.3365	0.3350	0.4074			0.4686	
<b>SFH</b>	0.3478	0.3159	0.3098					
<b>SFN</b>	0.3453	0.3325	0.3516					
<b>SFO</b>	0.3458		0.3627		0.4390			0.4877
<b>SFS</b>	0.3442	0.3253	0.3410				0.4488	0.4645

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>SFV</b>	0.3262	0.3266	0.3305		0.3213		0.4736	0.4608
<b>SFW</b>	0.3329		0.4027		0.4487			
<b>SGT</b>	0.3259	0.3332	0.3415					
<b>SIV</b>	0.3373				0.4056			
<b>SOD</b>	0.3680		0.3999					
<b>SOF</b>	0.3223	0.3096				0.4004		0.4276
<b>SOS</b>	0.3152		0.3149		0.3149			0.4488
<b>SSF</b>	0.3296	0.3553	0.3659					0.4767
<b>-SSO</b>	0.3506	0.3134	0.3492					
<b>SSY</b>	0.3444	0.3357	0.3555					0.4613
<b>STF</b>	0.3374	0.3315	0.3202				0.4711	
<b>STI</b>	0.3599	0.3389	0.4197		0.4075		0.4206	
<b>STO</b>	0.3289	0.3302	0.3462					0.4699
<b>STT</b>	0.3044	0.3261	0.3196	0.3988		0.4474		
<b>STW</b>	0.3415	0.3029			0.3860		0.4590	
<b>SVR</b>	0.3253	0.3193	0.3282				0.4512	
<b>SVV</b>	0.3426	0.3389	0.3460					
<b>SZR</b>	0.3507	0.3525	0.3611		0.4051		0.4587	
<b>TER</b>	0.3394	0.3440	0.3482				0.4275	
<b>THO</b>	0.3721				0.4244			
<b>TOL</b>	0.3464		0.3790					
<b>TON</b>		0.3602	0.3515				0.4595	
<b>TSC</b>	0.3284		0.3749		0.4140			
<b>TUN</b>	0.3266	0.3259	0.3171				0.4581	
<b>UEI</b>	0.3352		0.3328		0.4254			
<b>UFI</b>	0.3476	0.3433	0.3775		0.4686			
<b>UOS</b>	0.3502	0.3417	0.4061		0.3773		0.3773	
<b>UOV</b>	0.3278	0.3168	0.3295				0.4413	0.3696
<b>UOZ</b>	0.3629		0.3089		0.3463			
<b>USI</b>	0.3412		0.3267				0.4515	0.4494
<b>UTL</b>	0.3255	0.3069	0.3319					0.4632
<b>UWY</b>	0.3412	0.3200	0.3809				0.4456	0.4746

<b>Zeolite</b>	<b>4-Ring (nm)</b>	<b>5-Ring (nm)</b>	<b>6-Ring (nm)</b>	<b>7-Ring (nm)</b>	<b>8-Ring (nm)</b>	<b>9-Ring (nm)</b>	<b>10-Ring (nm)</b>	<b>12-Ring (nm)</b>
<b>VET</b>		0.3288	0.3752	0.3634	0.3842			0.4708
<b>VFI</b>	0.2935		0.3380					
<b>VNI</b>	0.3656	0.3504			0.3631			
<b>VSV</b>	0.3737	0.3545			0.3862	0.3910		
<b>WEI</b>	0.3465		0.3207		0.4538		0.4502	
<b>-WEN</b>	0.3507		0.3665		0.3833		0.3833	
<b>YUG</b>	0.3649	0.3541			0.4046			
<b>ZON</b>	0.3504		0.3317		0.3860			

**Table S5** Shortest non-adjacent O...O distances for different sizes of rings among 941 hypothetical zeolites. Unfeasible structures detected by the closest non-adjacent O...O pair criteria are underlined.

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8312971</u>	<u>0.2831</u>			0.3867		
PCOD8329332	0.2976		0.4103			
<u>PCOD8322921</u>	<u>0.2873</u>	0.3986	0.3890		0.4985	
PCOD8321585	0.2949		0.3991			
<u>PCOD8326122</u>	<u>0.2825</u>	0.3635	0.3653		0.4777	
<u>PCOD8330856</u>	<u>0.2727</u>		0.3481	0.3697		
<u>PCOD8200794</u>	<u>0.2786</u>		0.4064	0.3992		
<u>PCOD8329851</u>	<u>0.2829</u>	0.3351	0.3996	0.3984		
<u>PCOD8327563</u>	<u>0.2811</u>		0.3369	0.4239		
<u>PCOD8292630</u>	<u>0.2821</u>		0.4037	0.4414		0.4338
<u>PCOD8196363</u>	<u>0.2790</u>		0.4053	0.4208		
<u>PCOD8200851</u>	<u>0.2936</u>		0.4152	0.4019		
<u>PCOD8200684</u>	<u>0.2535</u>		0.4049	0.3960	0.4588	
<u>PCOD8313092</u>	<u>0.2693</u>	0.3282	0.3398	<u>0.2945</u>		
<u>PCOD8321996</u>	<u>0.2898</u>		0.3401			
<u>PCOD8320054</u>	<u>0.2878</u>	0.3560	0.3497	0.4425		
<u>PCOD8315654</u>	<u>0.2630</u>	0.3699	0.3322			
<u>PCOD8261270</u>	<u>0.2822</u>		0.4114	0.4474		
PCOD8319194	0.2971		0.3792	0.3791		
<u>PCOD8274922</u>	<u>0.2869</u>		0.3709	0.4448		0.4472
<u>PCOD8320524</u>	<u>0.2851</u>	0.3552	0.4400	0.4472		
<u>PCOD8292620</u>	<u>0.2800</u>		0.3891	0.4697	0.4214	0.4513
<u>PCOD8327293</u>	<u>0.2865</u>	0.4144	0.4073	0.3470		
<u>PCOD8322015</u>	<u>0.2794</u>	0.3374	0.3033			
PCOD8327476	0.2947	0.4068	0.3383	0.3931		
<u>PCOD8323834</u>	<u>0.2668</u>	0.3459		0.3587		
<u>PCOD8308288</u>	<u>0.2857</u>		0.3956	0.4528		
<u>PCOD8307691</u>	<u>0.2829</u>	0.3825	0.3985	0.4530		
PCOD8318323	0.2953	0.3568	0.4268			
PCOD8325055	0.2905	0.4052	0.3399	0.3926		
<u>PCOD8329781</u>	<u>0.2723</u>	0.3394	0.3020	0.3344		
<u>PCOD8307129</u>	<u>0.2853</u>	0.3825	0.3913	0.4534		
<u>PCOD8316367</u>	<u>0.2883</u>	0.3475	0.4089			0.4695
<u>PCOD8322022</u>	<u>0.2690</u>	<u>0.2750</u>	0.3974			
<u>PCOD8200818</u>	<u>0.2858</u>		0.4124	0.4033		
<u>PCOD8323191</u>	<u>0.2649</u>	0.3413	0.4180	0.4636		
<u>PCOD8301757</u>	<u>0.2748</u>		0.4072	0.4457	0.4451	
<u>PCOD8320103</u>	<u>0.2828</u>	0.3808		0.4534		
<u>PCOD8309325</u>	<u>0.2858</u>	0.3820		0.3505		
<u>PCOD8261275</u>	<u>0.2830</u>		0.3836	0.4578		0.4389
<u>PCOD8326900</u>	<u>0.2748</u>	0.3576	0.3351			
<u>PCOD8196364</u>	<u>0.2774</u>		0.4050	0.4203		
<u>PCOD8193831</u>	<u>0.2722</u>	0.3531	0.4137	0.4397		0.4306
<u>PCOD8196409</u>	<u>0.2714</u>		0.3854	0.4240		0.4199
<u>PCOD8307109</u>	<u>0.2620</u>		0.3085	0.2946		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8196416</u>	<u>0.2782</u>		0.4114	0.4263		
<u>PCOD8329412</u>	<u>0.2682</u>	0.3363	0.3387	0.4527		
<u>PCOD8312657</u>	<u>0.2652</u>	0.3863	0.3539	0.3810		
<u>PCOD8316869</u>	<u>0.2969</u>		0.4021	0.3968		
<u>PCOD8196412</u>	<u>0.2881</u>		0.3952	0.4350		
<u>PCOD8200870</u>	<u>0.2788</u>		0.4288	0.4568	0.4483	0.4483
<u>PCOD8200919</u>	<u>0.2874</u>		0.4099	0.4033		
<u>PCOD8200940</u>	<u>0.2804</u>		0.4177	0.4716	0.4309	0.4529
<u>PCOD8323349</u>	<u>0.2934</u>		0.4206	0.4449		
<u>PCOD8320017</u>	<u>0.2890</u>	0.3882	0.4102	0.3863		
<u>PCOD8196419</u>	<u>0.2870</u>		0.3908	0.4265		
<u>PCOD8328225</u>	<u>0.2901</u>	0.3916	0.3681	0.4650		
<u>PCOD8329775</u>	<u>0.2606</u>	0.3527	0.4067	0.4215		
<u>PCOD8196708</u>	<u>0.2705</u>		0.3916	0.4485		0.4221
<u>PCOD8315762</u>	<u>0.2841</u>	0.4048	0.3561	0.4178		
<u>PCOD8316868</u>	<u>0.2804</u>		0.4194	0.4668		0.4327
<u>PCOD8196446</u>	<u>0.2735</u>		0.3793	0.4218		
<u>PCOD8315708</u>	<u>0.2693</u>	0.3516	0.4382			
<u>PCOD8324447</u>	<u>0.2719</u>	0.3327	0.3180			
<u>PCOD8327278</u>	<u>0.2887</u>		0.4258	0.4587		0.4464
<u>PCOD8196712</u>	<u>0.2878</u>		0.4024	0.4236		
<u>PCOD8200941</u>	<u>0.2847</u>		0.4433	0.4056		
<u>PCOD8326718</u>	<u>0.2814</u>	0.3827	0.3279		0.4535	
<u>PCOD8292641</u>	<u>0.2802</u>	0.3676	0.4124	0.4689		0.4320
<u>PCOD8196417</u>	<u>0.2773</u>		0.4379	0.4266		
<u>PCOD8307383</u>	<u>0.2839</u>		0.4121	0.4309		
<u>PCOD8298138</u>	<u>0.2865</u>	0.4067	0.3362	0.3962		
<u>PCOD8265553</u>	<u>0.2461</u>		0.3965	0.4403	0.4073	
<u>PCOD8255421</u>	<u>0.2792</u>	0.3652	0.3884			0.4412
<u>PCOD8310673</u>	<u>0.2732</u>	0.3761	0.4075	0.4680		0.4392
<u>PCOD8307474</u>	<u>0.2768</u>		0.3505	0.4336		
<u>PCOD8255713</u>	<u>0.2722</u>		0.3853	0.3993		
<u>PCOD8312377</u>	<u>0.2852</u>		0.3555	0.4291		
<u>PCOD8265558</u>	<u>0.2892</u>	0.4056	0.3386	0.3917		
<u>PCOD8317669</u>	<u>0.2891</u>		0.3970	0.3956		
<u>PCOD8329746</u>	<u>0.2799</u>	0.3478	0.4309		0.4528	
<u>PCOD8288252</u>	<u>0.2719</u>		0.3819	0.3959		
<u>PCOD8292631</u>	<u>0.2779</u>	0.3738	0.4118	0.4689		0.4293
<u>PCOD8287200</u>	<u>0.2735</u>		0.4150	0.4115		
<u>PCOD8316033</u>	<u>0.2927</u>	0.3570	0.3252	0.4443		
<u>PCOD8313111</u>	<u>0.2540</u>		<u>0.2759</u>	0.4253		
<u>PCOD8196694</u>	<u>0.2693</u>	0.3110	0.3492	0.4208		0.4446
<u>PCOD8307137</u>	<u>0.2902</u>		0.3660	0.3090		
<u>PCOD8321916</u>	<u>0.2748</u>	0.3500	0.3828		0.4540	
<u>PCOD8196447</u>	<u>0.2887</u>		0.3975	0.4386		
<u>PCOD8316532</u>	<u>0.2742</u>	0.3215	0.3335	0.4353		
<u>PCOD8297460</u>	<u>0.2953</u>		0.3833			
<u>PCOD8316376</u>	<u>0.2731</u>	0.3759	0.4006	0.3110		0.4985

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8326816</u>	<u>0.2773</u>	0.3401	0.3808		0.4668	
<u>PCOD8307682</u>	<u>0.2877</u>	0.3641	0.4125	0.4687		0.4165
<u>PCOD8303097</u>	<u>0.2886</u>		0.4099	0.4278		
<u>PCOD8316035</u>	<u>0.2914</u>		0.3947	0.4351		
<u>PCOD8313398</u>	<u>0.2753</u>		0.3552	0.4550		
<u>PCOD8319437</u>	<u>0.2706</u>	0.3500	0.3558			
<u>PCOD8196713</u>	<u>0.2865</u>		0.3910	0.4196		
<u>PCOD8329305</u>	<u>0.2723</u>		0.3666	0.4624		
<u>PCOD8317985</u>	<u>0.2834</u>		0.3810	0.4046		
<u>PCOD8196411</u>	<u>0.2892</u>		0.3928	0.4280		
<u>PCOD8316043</u>	<u>0.2827</u>	0.3315	0.4008	0.3804	0.4379	
<u>PCOD8312321</u>	<u>0.2751</u>	0.3723	0.3082	0.4523		
<u>PCOD8304708</u>	<u>0.2751</u>		0.3104		<u>0.3399</u>	
<u>PCOD8193833</u>	<u>0.2781</u>	0.3542	0.4140	0.4234		
<u>PCOD8292632</u>	<u>0.2762</u>		0.4196	0.4475	0.4368	0.4368
<u>PCOD8316036</u>	<u>0.2777</u>	0.3715	0.4426	0.4504		
<u>PCOD8328510</u>	<u>0.3104</u>	0.3333	0.4021	0.4227		
<u>PCOD8312314</u>	<u>0.2837</u>	0.3425	0.3223	0.3977	0.4639	
<u>PCOD8305122</u>	<u>0.2809</u>	0.3483	0.3741	0.3741		
<u>PCOD8322944</u>	<u>0.2581</u>	0.3370	0.4415	0.4632		
<u>PCOD8318338</u>	<u>0.2367</u>		0.4402		0.4498	
<u>PCOD8328255</u>	<u>0.2741</u>		0.4009	0.4113		
<u>PCOD8307972</u>	<u>0.3119</u>	0.3233	0.3298			
<u>PCOD8313826</u>	<u>0.2757</u>	0.3485	0.4130			0.4619
<u>PCOD8307105</u>	<u>0.2810</u>	0.3629	0.3818		0.4562	
<u>PCOD8328256</u>	<u>0.2878</u>		0.3899	0.4062		
<u>PCOD8297639</u>	<u>0.2924</u>		0.3933			
<u>PCOD8325006</u>	<u>0.2765</u>	0.3186	0.3779	0.4084		
<u>PCOD8116632</u>	<u>0.2615</u>	0.3785	0.4133	0.4314		
<u>PCOD8306633</u>	<u>0.2884</u>		0.3512	0.4572		
<u>PCOD8316365</u>	<u>0.2923</u>	0.3639	0.4081			
<u>PCOD8288096</u>	<u>0.2854</u>		0.3732	0.4003		
<u>PCOD8194776</u>	<u>0.2906</u>	0.3613	0.4022	0.4284		
<u>PCOD8317687</u>	<u>0.2772</u>	0.3537	0.3873			0.4641
<u>PCOD8324911</u>	<u>0.2829</u>		0.4105	0.4130		
<u>PCOD8196714</u>	<u>0.2881</u>		0.4005	0.4237		
<u>PCOD8196690</u>	<u>0.2848</u>	0.3363	0.4088	0.4217		
<u>PCOD8275019</u>	<u>0.2942</u>		0.4098	0.4601		
<u>PCOD8301771</u>	<u>0.2957</u>	0.3439		0.3717		0.4343
<u>PCOD8194775</u>	<u>0.2866</u>	0.3507	0.4119	0.4175		
<u>PCOD8201049</u>	<u>0.2833</u>		0.4092	0.4405		
<u>PCOD8287212</u>	<u>0.2734</u>	0.3528	0.3925	0.4155		
<u>PCOD8330297</u>	<u>0.2830</u>	0.4096	0.3799	0.4273		
<u>PCOD8287211</u>	<u>0.2735</u>	0.3516	0.3756	0.4040		
<u>PCOD8297228</u>	<u>0.2815</u>	0.3817	0.3265	0.3265		
<u>PCOD8200993</u>	<u>0.2802</u>		0.4206	0.4715	0.4276	0.4493
<u>PCOD8315647</u>	<u>0.2788</u>	0.3773	0.3427	0.4253		
<u>PCOD8297227</u>	<u>0.2920</u>	0.3832	0.3287	0.3287		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8301799</u>	<u>0.2838</u>	0.4020	0.4122	0.3443		
<u>PCOD8274967</u>	<u>0.2870</u>		0.4007	0.4398		0.4464
<u>PCOD8322792</u>	<u>0.2770</u>		0.3652	0.4188		
<u>PCOD8275427</u>	<u>0.2899</u>	0.3738	0.3233	0.3233		
<u>PCOD8307101</u>	<u>0.2756</u>	<u>0.2995</u>	0.3576			
<u>PCOD8255618</u>	<u>0.2736</u>		0.3741	0.4143		
<u>PCOD8274173</u>	<u>0.2894</u>	0.3476	0.3175	0.3405		
<u>PCOD8288100</u>	<u>0.2728</u>	0.3485	0.3830	0.3948		
<u>PCOD8312121</u>	<u>0.2775</u>	0.3713	0.3437	0.4116		
<u>PCOD8275276</u>	<u>0.2905</u>	0.3744	0.3122	0.3122		
<u>PCOD8297400</u>	<u>0.2896</u>	0.3778	0.3287	0.3287		
<u>PCOD8265260</u>	0.2905	0.3658	0.3293	0.3297		
<u>PCOD8297423</u>	<u>0.2776</u>	0.3502	<u>0.2957</u>	0.4414		
<u>PCOD8324833</u>	<u>0.2807</u>		0.3725	0.4005		
<u>PCOD8196413</u>	<u>0.2873</u>		0.3979	0.4280		
<u>PCOD8288108</u>	<u>0.2727</u>	0.3472	0.3989	0.3933		
<u>PCOD8298127</u>	<u>0.2900</u>	0.3792	0.3435	0.3175		
<u>PCOD8275748</u>	<u>0.2864</u>	0.3559	0.3191	0.4457		
<u>PCOD8299383</u>	<u>0.2851</u>		0.3485	0.4434		
<u>PCOD8275707</u>	<u>0.2879</u>	0.3567	0.3205	0.4457		
<u>PCOD8196698</u>	<u>0.2874</u>	0.3102	0.3490	0.4216		
<u>PCOD8316327</u>	<u>0.2887</u>	0.3808	0.3749	0.3885	0.4872	
<u>PCOD8321872</u>	<u>0.2848</u>	0.3824	0.4439	0.4012		
<u>PCOD8318347</u>	<u>0.2880</u>	0.3279	0.3950			0.4570
<u>PCOD8276280</u>	0.2970	0.3377		0.3486		
<u>PCOD8292926</u>	<u>0.2728</u>		0.3861	0.4017		
<u>PCOD8196448</u>	<u>0.2893</u>		0.3936	0.4266		
<u>PCOD8287203</u>	<u>0.2738</u>		0.3849	0.4095		
<u>PCOD8323380</u>	<u>0.2802</u>	0.3275	0.3307		0.4700	
<u>PCOD8277636</u>	<u>0.2824</u>		0.3620	0.4081		
<u>PCOD8255720</u>	<u>0.2733</u>		0.3960	0.4080		
<u>PCOD8193832</u>	<u>0.2762</u>	0.3546	0.4080	0.4270		0.4311
<u>PCOD8287166</u>	<u>0.2875</u>		0.3831	0.4280		
<u>PCOD8308290</u>	<u>0.2878</u>		0.4262	0.4005		
<u>PCOD8287156</u>	<u>0.2688</u>	0.3246	0.4042	0.3956	0.4447	
<u>PCOD8298160</u>	<u>0.2675</u>	0.3651	0.3533	0.4505	0.4409	
<u>PCOD8297421</u>	<u>0.2873</u>		0.3993	0.4281		
<u>PCOD8255661</u>	<u>0.2730</u>		0.3834	0.3976		
<u>PCOD8322639</u>	<u>0.2822</u>	0.3806	0.3492	0.4512		
<u>PCOD8200852</u>	0.2924		0.4164	0.4026		
<u>PCOD8316048</u>	<u>0.2841</u>	0.3201	0.3844	0.3955		
<u>PCOD8195611</u>	<u>0.2890</u>	0.3647	0.4115	0.4469		
<u>PCOD8323357</u>	<u>0.2797</u>	0.3730	0.3563	0.4269		
<u>PCOD8194009</u>	<u>0.2762</u>	0.3471	0.4129	0.4377		
<u>PCOD8288182</u>	<u>0.2743</u>	0.3466	0.3673	0.3832		
<u>PCOD8327491</u>	<u>0.2776</u>		0.3984	0.3852		
<u>PCOD8256582</u>	<u>0.2736</u>		0.3560	0.4033		
<u>PCOD8274203</u>	0.2906		0.3707	0.4022		



Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8056809</u>	<u>0.2616</u>	0.3169	0.3181	0.3480		
<u>PCOD8292736</u>	<u>0.2839</u>		0.4024	0.4389	0.4458	0.4458
<u>PCOD8323374</u>	<u>0.2857</u>	0.3737	0.4314	0.3719		
<u>PCOD8193824</u>	<u>0.2758</u>	0.3511	0.4106	0.4289		0.4515
<u>PCOD8275094</u>	<u>0.2771</u>	0.3904	0.4051		0.4611	
<u>PCOD8275711</u>	<u>0.2884</u>		0.3689	0.4123		
<u>PCOD8323375</u>	<u>0.2832</u>	0.3735	0.3691	0.3906		
<u>PCOD8256588</u>	<u>0.2745</u>		0.3591	0.4000		
<u>PCOD8193821</u>	<u>0.2811</u>	0.3576	0.3984	0.4546		
<u>PCOD8193996</u>	<u>0.2866</u>	0.3470	0.4095	0.4297		
<u>PCOD8327934</u>	<u>0.2683</u>		0.3685			
<u>PCOD8256627</u>	<u>0.2759</u>	0.3360	0.3777	0.3710		
<u>PCOD8275789</u>	<u>0.2826</u>		0.3636	0.3992		
<u>PCOD8317398</u>	<u>0.2885</u>		0.4182	0.4252		
<u>PCOD8307693</u>	<u>0.2830</u>	0.3565	0.4238	0.4654	0.4207	
<u>PCOD8314888</u>	<u>0.2853</u>	0.3475	0.4120	0.4516		0.4123
<u>PCOD8288254</u>	<u>0.2840</u>		0.3739	0.4106		
<u>PCOD8311099</u>	0.2922	0.3759	0.4347	0.4864	0.4179	
<u>PCOD8255716</u>	<u>0.2897</u>		0.3833			
<u>PCOD8167045</u>	<u>0.2649</u>	0.3424	0.3694	0.4312		
<u>PCOD8328373</u>	<u>0.2892</u>	0.3770	0.3670	0.4541		0.5094
<u>PCOD8194777</u>	<u>0.2843</u>	0.3511	0.4107	0.4019		
<u>PCOD8316639</u>	<u>0.2827</u>		0.3945	0.4472		
<u>PCOD8287229</u>	<u>0.2775</u>	<u>0.2985</u>	0.4011	0.4051	0.3960	
<u>PCOD8317982</u>	<u>0.2862</u>		0.4107	0.4223		
<u>PCOD8194963</u>	<u>0.2872</u>	0.3589	0.4106	0.4199		
<u>PCOD8292723</u>	<u>0.2828</u>	0.3623	0.3839		0.4418	0.4448
<u>PCOD8309987</u>	<u>0.2784</u>	0.3233	0.4368			
<u>PCOD8327305</u>	0.3010	0.3821	0.3873			0.4738
<u>PCOD8292725</u>	<u>0.2831</u>	0.3559	0.4131	0.4715	0.4080	
<u>PCOD8325399</u>	0.2996	0.3824	0.3856			0.4738
<u>PCOD8265609</u>	0.2959	0.3543	0.3745	0.4478		
<u>PCOD8275720</u>	<u>0.2831</u>		0.3600	0.3989		
<u>PCOD8255657</u>	0.2917	0.3465	0.3791	0.4309		
<u>PCOD8307183</u>	<u>0.2883</u>		0.3973	0.4252		
<u>PCOD8195612</u>	0.2911	0.3672	0.4121	0.4423		
<u>PCOD8289711</u>	<u>0.2853</u>		0.4375	0.4127		
<u>PCOD8286879</u>	<u>0.2729</u>	0.3674	0.4085	0.4669	0.4359	
<u>PCOD8288147</u>	0.2902		0.3427	0.4141		
<u>PCOD8322931</u>	<u>0.2857</u>		0.4040	0.3690		
<u>PCOD8330275</u>	0.2961	0.3786	0.4025			0.4629
<u>PCOD8297402</u>	<u>0.2861</u>		0.3927	0.4238		
<u>PCOD8196467</u>	<u>0.2852</u>	0.3241	0.3735	0.4160		
<u>PCOD8309151</u>	<u>0.2882</u>	0.3863	0.3721	0.4052		
<u>PCOD8194964</u>	<u>0.2872</u>	0.3458	0.4141	0.3981		
<u>PCOD8196422</u>	<u>0.2857</u>		0.3929	0.4243		
<u>PCOD8292735</u>	0.2980	0.3368	0.4125	0.4249	0.4429	0.4429
<u>PCOD8196428</u>	<u>0.2864</u>		0.3929	0.4234		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8193988	0.2928	0.3599	0.4119	0.4313		
PCOD8195613	0.2941	0.3528	0.4080	0.4518		
<u>PCOD8286925</u>	<u>0.2721</u>	0.3492	0.4098	0.4599	0.4473	
<u>PCOD8160775</u>	<u>0.2665</u>	0.3214	0.3583			
<u>PCOD8297424</u>	<u>0.2790</u>		0.3928	0.4430		
<u>PCOD8328266</u>	<u>0.2860</u>		0.3972	0.3655		
<u>PCOD8307692</u>	<u>0.2854</u>	0.3561	0.4108	0.4755	0.3956	
<u>PCOD8194772</u>	<u>0.2797</u>	0.3551	0.3979	0.4137		
<u>PCOD8320075</u>	<u>0.2778</u>	0.3273	0.3493	0.3691		
PCOD8287165	0.2953	0.3014	0.3819	0.4139		
<u>PCOD8330350</u>	<u>0.2623</u>	0.3347	0.4147	0.4313		
<u>PCOD8193825</u>	<u>0.2789</u>	0.3517	0.4200	0.4385		0.4423
<u>PCOD8292652</u>	<u>0.2868</u>		0.4005	0.4420		0.4494
<u>PCOD8331110</u>	<u>0.2695</u>	0.3694	0.2958	0.4096		0.4732
<u>PCOD8200942</u>	<u>0.2859</u>		0.4149	0.4031		
<u>PCOD8256583</u>	<u>0.2881</u>		0.3724	0.4285		
PCOD8265568	0.2939		0.3868	0.4463		
<u>PCOD8196461</u>	<u>0.2843</u>	0.3347	0.3946	0.4110		
PCOD8287111	0.2905	0.3509	0.3955			0.4290
<u>PCOD8207798</u>	<u>0.2834</u>	0.3257	0.3231	0.3981		
PCOD8256584	0.2910		0.4013	0.4091		
<u>PCOD8287218</u>	<u>0.2862</u>	0.3489	0.4038		0.4768	
PCOD8313426	0.2936	0.3068	0.3191			
PCOD8195610	0.2932	0.3547	0.4002	0.4438		
<u>PCOD8255656</u>	<u>0.2878</u>		0.3864	0.4272		
PCOD8265696	0.2939		0.4026	0.4099		
<u>PCOD8312122</u>	<u>0.2758</u>	0.3372	0.3316	0.4137		
<u>PCOD8320052</u>	<u>0.2874</u>	0.3597	0.3854	0.4721	0.4595	
PCOD8323836	0.2912		0.3347			0.4670
<u>PCOD8298162</u>	<u>0.2806</u>		0.3885	0.3934		
<u>PCOD8275115</u>	<u>0.2896</u>		0.4218	0.4052		
PCOD8194967	0.2923	0.3601	0.4127	0.4269		
<u>PCOD8193851</u>	<u>0.2749</u>	0.3547	0.4134	0.4341		0.4398
PCOD8298141	0.2902	0.3508	0.3724	0.3988		
PCOD8329329	0.2933		0.4198	0.3321		0.5144
<u>PCOD8194011</u>	<u>0.2860</u>	0.3500	0.4095	0.4285		
<u>PCOD8298135</u>	<u>0.2758</u>		0.3746	0.4016		
<u>PCOD8329327</u>	<u>0.2727</u>	0.3607	0.3723	0.3282		0.5017
<u>PCOD8308133</u>	<u>0.2832</u>		0.3700	0.4624		
PCOD8328231	0.2919	0.3788	0.3198	0.3198		0.5027
PCOD8274923	0.2906		0.4162	0.4025		
<u>PCOD8314793</u>	<u>0.2895</u>	<u>0.2902</u>	0.3611			
<u>PCOD8314890</u>	<u>0.2778</u>	0.3457	0.4162	0.4501		
<u>PCOD8269770</u>	<u>0.2862</u>		0.3942	0.4217		
PCOD8311295	0.2910	0.3065	0.3931			
<u>PCOD8288263</u>	<u>0.2857</u>	0.3347	0.4024	0.4027		
PCOD8303095	0.2911	0.3702	0.3284	0.4823		
<u>PCOD8288101</u>	<u>0.2869</u>		0.3699	0.4233		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8287396</u>	<u>0.2870</u>	0.3429	0.3711	0.3711		
<u>PCOD8060369</u>	<u>0.2755</u>	0.3626	0.3245			
<u>PCOD8328754</u>	<u>0.2790</u>		0.4084			
<u>PCOD8196703</u>	<u>0.2862</u>	0.3141	0.3489	0.4333		
<u>PCOD8197313</u>	<u>0.2884</u>	0.3220	0.3665	0.4273		
<u>PCOD8265550</u>	<u>0.2734</u>	<u>0.2988</u>	0.4069	0.3902	0.4254	
<u>PCOD8303406</u>	<u>0.2659</u>		0.3721	0.4198		
<u>PCOD8301801</u>	0.3060	0.3419	0.4193	0.3714		0.4611
<u>PCOD8256590</u>	<u>0.2857</u>		0.3654	0.4001		
<u>PCOD8195289</u>	<u>0.2830</u>	0.3630	0.4033	0.4293		
<u>PCOD8325423</u>	0.3241	0.3410	0.3663	0.4304		
<u>PCOD8265317</u>	<u>0.2777</u>	0.3149	0.3747		0.4709	
<u>PCOD8196488</u>	0.2943		0.3819	0.4429		
<u>PCOD8292270</u>	<u>0.2858</u>		0.3699	0.4040		
<u>PCOD8196716</u>	<u>0.2867</u>		0.3905	0.4200		
<u>PCOD8197302</u>	<u>0.2851</u>	0.3366	0.4210	0.4200		
<u>PCOD8265707</u>	<u>0.2747</u>	0.2917	0.3995	0.4243	0.4386	
<u>PCOD8326837</u>	0.3072	0.3309	0.3710			0.4763
<u>PCOD8328645</u>	<u>0.2743</u>		0.3712	0.3712		0.5016
<u>PCOD8317699</u>	<u>0.2742</u>	0.3587	0.3948			
<u>PCOD8275237</u>	0.2967	0.3191	0.3657		0.4578	
<u>PCOD8293227</u>	<u>0.2855</u>		0.3699	0.4126		
<u>PCOD8265151</u>	<u>0.2853</u>	0.3530	0.4077	0.3633		0.4829
<u>PCOD8275122</u>	0.2985	0.3370	0.4121	0.4331	0.4447	0.4447
<u>PCOD8196700</u>	<u>0.2852</u>	0.3310	0.3822	0.4200		
<u>PCOD8195290</u>	<u>0.2828</u>	0.3512	0.4018	0.4089		
<u>PCOD8323838</u>	0.3356		0.3715	0.3498		0.4776
<u>PCOD8298125</u>	0.2968		0.3571	0.4190		
<u>PCOD8267100</u>	<u>0.2898</u>		0.3515	0.4655		
<u>PCOD8315812</u>	<u>0.2584</u>		0.4121	0.4139		
<u>PCOD8256706</u>	<u>0.2807</u>		0.3535	0.4026		
<u>PCOD8275117</u>	<u>0.2898</u>		0.4206	0.4046		
<u>PCOD8297293</u>	0.2910	0.3155	0.4283	0.4510		
<u>PCOD8287179</u>	<u>0.2890</u>	0.3363	0.4058	0.3605	0.3605	
<u>PCOD8299421</u>	0.2985	0.3327	0.4121	0.4345		
<u>PCOD8265367</u>	<u>0.2736</u>	0.3280	0.4149		0.4220	
<u>PCOD8275293</u>	<u>0.2704</u>		0.3716			
<u>PCOD8328391</u>	<u>0.2763</u>	0.3744	0.3942	<u>0.2997</u>		
<u>PCOD8266160</u>	0.3018	<u>0.2910</u>	0.3681	0.3926		
<u>PCOD8269892</u>	0.2905		0.3925	0.4479		
<u>PCOD8319324</u>	<u>0.2869</u>	0.3499	0.4273	0.3684		
<u>PCOD8200214</u>	<u>0.2814</u>	0.3421	0.4034	0.4226		
<u>PCOD8328215</u>	0.3440		0.3615	0.3495		0.4130
<u>PCOD8256619</u>	<u>0.2826</u>		0.3503	0.4038		
<u>PCOD8328398</u>	<u>0.2893</u>		0.3780	0.4364	0.4613	0.4977
<u>PCOD8197948</u>	<u>0.2840</u>	0.3166	0.3663	0.4088		
<u>PCOD8224235</u>	<u>0.2633</u>	0.3273	0.3437			
<u>PCOD8329311</u>	<u>0.2898</u>		0.4042	0.4680		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8255636</u>	<u>0.2891</u>	0.3332	0.4118	0.4181	0.3589	
<u>PCOD8207198</u>	0.2903	0.3102	0.3506	0.3913		
<u>PCOD8287889</u>	0.3086	<u>0.2992</u>	0.3890	0.4202		
<u>PCOD8275434</u>	0.2970	0.3037	0.2871	0.4316		
<u>PCOD8328938</u>	<u>0.2791</u>		0.3543	0.4466		0.5092
<u>PCOD8256599</u>	<u>0.2888</u>	0.3310	0.4068	0.3566		
<u>PCOD8266000</u>	<u>0.2763</u>	0.3442	0.4147	0.4289		
<u>PCOD8267108</u>	<u>0.2863</u>	0.3520	0.3990	0.3939		
<u>PCOD8297653</u>	<u>0.2738</u>	0.3593	0.3812	0.4484		
<u>PCOD8298176</u>	<u>0.2730</u>	0.3624	0.3634	0.4485	0.4550	
<u>PCOD8297464</u>	0.2939		0.3690	0.4256		
<u>PCOD8330346</u>	0.2924		0.4051	0.4377		
<u>PCOD8195614</u>	0.2956		0.3975	0.4503		
<u>PCOD8275569</u>	<u>0.2823</u>	0.3386	0.3038	0.3275		
<u>PCOD8172248</u>	<u>0.2774</u>	0.3790	0.3898	0.3033		
<u>PCOD8217478</u>	<u>0.2615</u>	0.3379	0.3769			
<u>PCOD8265628</u>	<u>0.2837</u>	0.3146	0.3019	0.3019		
<u>PCOD8299431</u>	0.3011	0.3186	0.4169	0.3309		
<u>PCOD8255669</u>	<u>0.2890</u>	0.3357	0.4085	0.3605		
<u>PCOD8307695</u>	0.3140		0.3309	0.4336		0.4744
<u>PCOD8200326</u>	0.2913	0.3336	0.4101	0.4294		
<u>PCOD8059486</u>	<u>0.2778</u>		0.3514	0.4569		
<u>PCOD8293232</u>	<u>0.2891</u>	0.4142	0.3265	0.3534		
<u>PCOD8309154</u>	0.3354		0.3384			0.4811
<u>PCOD8275433</u>	<u>0.2852</u>	0.3226	0.4272	0.3712		
<u>PCOD8267700</u>	<u>0.2731</u>	0.3004	0.3711	0.3782	0.4030	
<u>PCOD8325760</u>	0.2902		0.3341			0.4975
<u>PCOD8297555</u>	0.2980	0.3226	0.3441	0.3449		
<u>PCOD8328689</u>	0.2924	0.3644	0.3941	0.4452		0.5145
<u>PCOD8312182</u>	0.3307	0.3151	0.3008	0.2935		
<u>PCOD8255541</u>	0.3056	0.3141	0.4185	0.4150		
<u>PCOD8271001</u>	<u>0.2888</u>	0.3504	0.4064	0.4406		
<u>PCOD8292946</u>	<u>0.2875</u>	0.3318	0.4019	0.3638		
<u>PCOD8268839</u>	<u>0.2879</u>	0.3485	0.3892	0.4438		
<u>PCOD8316520</u>	0.3232	0.3410	0.3671	0.4156		0.5006
<u>PCOD8256296</u>	0.2934	0.3222	0.4051	0.3744		
<u>PCOD8325449</u>	0.3399	<u>0.2870</u>	0.3431			
<u>PCOD8319320</u>	0.2906	0.3364	0.3817	0.4167		0.4404
<u>PCOD8287561</u>	<u>0.2795</u>	0.3062	0.3787	0.4029		
<u>PCOD8327295</u>	0.3299		0.3752	0.3236		0.4887
<u>PCOD8266162</u>	0.2971	0.3276	0.4114	0.4170		
<u>PCOD8314904</u>	<u>0.2762</u>	0.3333	0.3807	0.4192		0.4425
<u>PCOD8297297</u>	0.2985	0.3225	0.3975	0.3718		0.4197
<u>PCOD8275449</u>	0.2937	0.3202	0.3887	0.3335		
<u>PCOD8287401</u>	0.3107	0.3190	0.3359	0.4244		
<u>PCOD8297441</u>	0.2917	0.3204	0.4106	0.3412		
<u>PCOD8307496</u>	0.3080	0.3442	0.4176	0.4455		
<u>PCOD8323479</u>	<u>0.2748</u>		0.3326	0.4541		0.5023

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8297785	0.2957	0.3260	0.4131	0.4219		
PCOD8288490	0.2930	0.3051	0.3842	0.3907	0.3949	
<u>PCOD8292952</u>	<u>0.2876</u>	0.3291	0.4012	0.3606		
<u>PCOD8297501</u>	<u>0.2861</u>	<u>0.2959</u>	0.3688	0.3372		
PCOD8323497	0.2918	0.3590	0.3818	0.4397		0.5105
PCOD8323427	0.2914	0.3577	0.3843		0.4510	
PCOD8330370	0.2925	0.3568	0.3841	0.4275	0.4515	
<u>PCOD8329430</u>	<u>0.2777</u>	0.3963	0.3172	0.4465		
PCOD8287380	0.2948		0.3709			
PCOD8330339	0.3030		0.3895			
PCOD8265454	0.2934	0.3518	0.3946			0.4231
<u>PCOD8287569</u>	<u>0.2729</u>	0.3266	0.3865	0.4574		
<u>PCOD8275130</u>	<u>0.2900</u>		0.4199	0.4040		
PCOD8329341	0.3095			0.4492		0.4935
<u>PCOD8167047</u>	<u>0.2722</u>	0.3242	0.3358			
<u>PCOD8330289</u>	<u>0.2710</u>		0.3338			0.4861
<u>PCOD8193855</u>	<u>0.2871</u>		0.3841	0.4194		0.4545
PCOD8258256	0.2935	0.3319	0.4125	0.4382	0.4112	
PCOD8314357	0.3000	0.3269	0.3539			0.4915
PCOD8327944	0.3074	0.3163	0.3636	0.3959		
<u>PCOD8292750</u>	<u>0.2831</u>		0.4020	0.4419	0.4499	0.4499
PCOD8084708	0.2973	0.3271	0.3229			0.4695
<u>PCOD8315717</u>	<u>0.2617</u>	0.3639	0.3289	0.4445		
PCOD8277571	0.2936	0.3059	0.3925	0.3408		
<u>PCOD8288185</u>	<u>0.2809</u>	<u>0.2873</u>	0.3208			
PCOD8322647	0.3282	0.3468	0.4108	0.4288		
<u>PCOD8255673</u>	<u>0.2745</u>	0.3716	0.3315			
PCOD8177390	0.2967		0.3914	0.4241		
<u>PCOD8275859</u>	<u>0.2822</u>	0.3061	0.3848	0.3647		
PCOD8250146	0.2954		0.3855	0.4231	0.3884	
PCOD8182441	0.2954		0.3874	0.4238		
PCOD8194789	0.2929	0.3521	0.3943	0.4079		
PCOD8321687	0.3374		0.3657			
<u>PCOD8177901</u>	<u>0.2863</u>		0.3938	0.4374		
PCOD8323210	0.3372		0.3636		0.4529	0.4899
<u>PCOD8195078</u>	<u>0.2878</u>		0.4029	0.4332		0.4688
<u>PCOD8275951</u>	<u>0.2820</u>	0.3219	<u>0.2667</u>	0.3799		
<u>PCOD8195292</u>	<u>0.2859</u>	0.3505	0.3982	0.3870		
<u>PCOD8267707</u>	<u>0.2806</u>	0.3392	0.3794	0.3862		
<u>PCOD8239101</u>	<u>0.2783</u>	0.3573	0.3183	0.4446		
PCOD8324829	0.3551	0.3358				0.4692
PCOD8287405	0.2951	0.3144	0.3482	0.3454		
<u>PCOD8270297</u>	<u>0.2870</u>	0.3189	0.3595	0.4106		
<u>PCOD8297791</u>	<u>0.2785</u>	0.3263	0.3715		0.3715	
PCOD8327297	0.3366		0.3611	0.4173		0.4200
PCOD8201211	0.3049		0.4099	0.4112		<u>0.3269</u>
PCOD8323974	0.3366		0.3613	0.4372		0.4194
<u>PCOD8059487</u>	<u>0.2775</u>		0.3517	0.4571		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8288184</u>	<u>0.2899</u>		0.3980	0.3649		
<u>PCOD8255854</u>	0.2945	0.3092	0.3302	0.3549		
<u>PCOD8078966</u>	<u>0.2691</u>		0.3059			
<u>PCOD8188014</u>	0.3002		0.3789	0.4145	0.4706	0.4330
<u>PCOD8316462</u>	0.3004	0.3180	0.3365	0.3130		
<u>PCOD8268335</u>	<u>0.2778</u>	0.3387	0.3747	0.3877		
<u>PCOD8206296</u>	0.3021		0.3772	0.4160		
<u>PCOD8174197</u>	0.2914	0.3664	0.3970			
<u>PCOD8318888</u>	<u>0.2790</u>	0.3359	0.3996	0.3744		
<u>PCOD8313047</u>	0.3424		0.3459	0.3299		0.4913
<u>PCOD8288548</u>	0.2904	0.3384	0.3666	0.3771		
<u>PCOD8292983</u>	<u>0.2891</u>	0.3123	0.3754	0.3369		
<u>PCOD8250245</u>	0.2904		0.3490	0.4010		
<u>PCOD8265597</u>	<u>0.2767</u>	0.3254	0.3439			
<u>PCOD8250160</u>	<u>0.2897</u>		0.3615	0.3891		
<u>PCOD8188016</u>	0.2901		0.3607	0.3883		
<u>PCOD8224441</u>	0.2998		0.3765	0.4263		
<u>PCOD8206321</u>	<u>0.2796</u>		0.3546	0.4262		
<u>PCOD8323436</u>	0.3226		0.3642			0.4822
<u>PCOD8330439</u>	0.3177	0.3964	0.3406	0.4060		
<u>PCOD8188445</u>	<u>0.2830</u>		0.3894	0.4212		
<u>PCOD8194773</u>	<u>0.2859</u>		0.3873	0.4236		0.4738
<u>PCOD8246232</u>	0.3072		0.3434	0.4560	0.4160	
<u>PCOD8068543</u>	<u>0.2869</u>		0.3817	0.4205		
<u>PCOD8268342</u>	<u>0.2794</u>	0.3336	0.3950	0.3748	0.4668	
<u>PCOD8235824</u>	<u>0.2887</u>		0.3700	0.3886	0.4157	
<u>PCOD8188450</u>	<u>0.2893</u>		0.3725	0.3871		
<u>PCOD8298585</u>	<u>0.2802</u>	0.3329	0.3736	0.3736		
<u>PCOD8321589</u>	<u>0.2799</u>	0.3315	0.4106	0.4289		0.5026
<u>PCOD8267763</u>	<u>0.2817</u>	0.3334	0.3579	0.3749		
<u>PCOD8298581</u>	<u>0.2780</u>	0.3324	0.3857	0.3712		
<u>PCOD8265036</u>	0.3063		0.3904	0.4538		
<u>PCOD8287551</u>	0.2919	0.3267	0.4100	0.4175		
<u>PCOD8194038</u>	0.2933	0.3514	0.4142	0.4265		
<u>PCOD8084804</u>	<u>0.2879</u>		0.3604	0.3892		
<u>PCOD8287407</u>	0.2925	0.3464	0.3855	0.3616		
<u>PCOD8191654</u>	<u>0.2880</u>		0.3411	0.3804		
<u>PCOD8191655</u>	<u>0.2879</u>		0.3669	0.3820		
<u>PCOD8275488</u>	0.3120	<u>0.2933</u>	<u>0.2749</u>	0.4201		
<u>PCOD8202737</u>	<u>0.2883</u>		0.3308	0.3779		
<u>PCOD8224778</u>	<u>0.2876</u>		0.3210	0.3819		
<u>PCOD8207674</u>	<u>0.2884</u>		0.3508	0.3850		
<u>PCOD8323005</u>	0.3091	<u>0.2684</u>	<u>0.2993</u>	0.4370		
<u>PCOD8235822</u>	0.2902		0.3470	0.3757		
<u>PCOD8327501</u>	<u>0.2760</u>	0.3319	0.3576	0.4712		0.5041
<u>PCOD8057587</u>	<u>0.2721</u>	0.3612	0.3462	0.4501	0.4466	
<u>PCOD8207815</u>	0.2954	0.3497	0.3660			
<u>PCOD8057582</u>	<u>0.2761</u>		0.3696	0.3755		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8270296</u>	<u>0.2823</u>	0.3260	0.3667	0.4042		
<u>PCOD8172547</u>	<u>0.2750</u>	0.3898	0.3236	0.4527		
<u>PCOD8246794</u>	0.2967		0.3079			
<u>PCOD8239268</u>	<u>0.2892</u>		0.3562	0.4055		
<u>PCOD8068618</u>	<u>0.2866</u>		0.3575	0.3999		
<u>PCOD8287233</u>	<u>0.2794</u>	0.3018	0.3343	0.4357	0.4102	
<u>PCOD8293075</u>	0.3091	<u>0.2917</u>	<u>0.2654</u>			
<u>PCOD8275312</u>	0.3251	<u>0.2986</u>	0.3309	0.4256		
<u>PCOD8069999</u>	<u>0.2820</u>		0.3593	0.3994		
<u>PCOD8298395</u>	<u>0.2804</u>	0.3289	0.3804	0.3644		
<u>PCOD8202721</u>	<u>0.2856</u>		0.3677	0.3689		
<u>PCOD8069998</u>	<u>0.2822</u>		0.3601	0.3960		
<u>PCOD8292231</u>	0.3187	0.3454	0.3726	0.4613	0.4214	0.4859
<u>PCOD8191641</u>	<u>0.2857</u>		0.3659	0.3678		
<u>PCOD8164664</u>	<u>0.2719</u>	0.3647	0.3098	0.4523		
<u>PCOD8265788</u>	<u>0.2892</u>	0.3144	0.3314	0.4493		0.4481
<u>PCOD8070119</u>	<u>0.2851</u>		0.3525	0.4080		
<u>PCOD8329212</u>	0.2916	0.3620	0.3500	0.3913		0.5074
<u>PCOD8266005</u>	<u>0.2816</u>	0.3527	0.4143	0.4394		
<u>PCOD8194995</u>	0.2920	0.3202	0.3502	0.3861		
<u>PCOD8266251</u>	0.2975	0.3544	0.3684	0.4163		
<u>PCOD8250254</u>	0.2925	0.3382	0.3809	0.4482	0.4459	
<u>PCOD8068380</u>	0.3025	0.3255	0.3572	0.4341		
<u>PCOD8323814</u>	0.2969		<u>0.2999</u>			0.3840
<u>PCOD8206142</u>	<u>0.2809</u>	0.3475	0.3690			
<u>PCOD8266271</u>	0.2960	0.3517	0.4004	0.4309		
<u>PCOD8206791</u>	0.3133	0.3098	0.3997	0.3532		0.4731
<u>PCOD8230635</u>	0.3008		0.3769	0.4182		
<u>PCOD8289850</u>	<u>0.2747</u>	<u>0.2891</u>	0.3620		0.4178	
<u>PCOD8057712</u>	<u>0.2848</u>	0.3381	0.4223	0.4460		
<u>PCOD8267340</u>	0.3076		0.3813	0.4344		0.4773
<u>PCOD8298578</u>	0.3255	0.3197	0.3505		0.4680	
<u>PCOD8207623</u>	0.2946		0.3470	0.3470		
<u>PCOD8196746</u>	0.2970		0.3959	0.4472		
<u>PCOD8230113</u>	0.2995		0.3705	0.4179	0.4516	
<u>PCOD8286942</u>	<u>0.2825</u>	0.3629	0.3958		0.4207	
<u>PCOD8295265</u>	0.2923	0.3036	0.3243			
<u>PCOD8323528</u>	0.3299		<u>0.2824</u>			0.4856
<u>PCOD8255844</u>	0.3025	0.3203	0.3587	0.4586		
<u>PCOD8079170</u>	0.2912	0.3328	0.3809	0.4330		
<u>PCOD8287412</u>	0.2921	0.3219	0.3403			
<u>PCOD8114602</u>	0.2945		0.3732	0.3732		
<u>PCOD8323410</u>	0.3235		0.3310	0.4383		0.5032
<u>PCOD8230242</u>	0.3161	0.3200	0.3697	0.4192		
<u>PCOD8194699</u>	0.2975		0.3661	0.3447		
<u>PCOD8256774</u>	<u>0.2877</u>	0.3840	0.4028	0.4134		
<u>PCOD8177285</u>	<u>0.2816</u>	0.3389	0.3907	0.4215		
<u>PCOD8070065</u>	<u>0.2801</u>		0.3732			

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8250376	0.3298	0.3448	0.3486	0.4227		
PCOD8224299	<u>0.2770</u>	0.3400	0.3955	0.4171	0.4305	
PCOD8323613	0.3372		0.3780	0.4451		
PCOD8278736	0.2903	0.3539	0.3555			
PCOD8328559	0.3223	0.3286	0.3560	0.4106		0.5025
PCOD8255699	<u>0.2804</u>		0.3406	0.4333		
PCOD8202513	0.3153	0.3085	0.3185	0.3844		0.4953
PCOD8078965	0.3353	0.3239	<u>0.2784</u>	0.4123		
PCOD8287612	0.3036	0.3113	0.3380	0.3933		
PCOD8329960	0.2907	0.3265	0.4109	0.4063		0.4885
PCOD8256053	0.2972	0.3053				
PCOD8177530	<u>0.2897</u>	0.3461	0.3884	0.4194		0.4612
PCOD8079061	0.3255	0.3659	0.3608	0.4057		
PCOD8062906	<u>0.2753</u>	0.3211	0.3880			
PCOD8210685	0.2917		0.3891	0.3297		
PCOD8210396	0.3126	0.3054	0.3683	0.3612		0.4745
PCOD8084987	<u>0.2778</u>	0.3428	0.3892	0.4177		
PCOD8225818	<u>0.2752</u>	0.3203	0.3791			
PCOD8292985	0.3168	0.3173	0.3587	0.3658		
PCOD8328802	<u>0.2774</u>	0.3372	0.3169	0.4318		0.5003
PCOD8230406	0.3012	0.3157	0.3666	0.4369		
PCOD8206627	0.2990	0.3179	0.3553	0.3553		0.4900
PCOD8224431	0.2904	0.3322	0.3929	0.4296		
PCOD8177499	0.2905	0.3323	0.3916	0.4299		
PCOD8250241	0.2923		0.3774			
PCOD8210273	0.2945	0.3539	0.4059	0.3194		
PCOD8267131	0.3090	<u>0.2941</u>	0.3764	0.4146		
PCOD8267175	0.2971	0.3212	0.4135	0.3923		0.4830
PCOD8206619	0.3051		0.3957	0.4138		<u>0.3230</u>
PCOD8275162	<u>0.2812</u>		0.3991	0.4704	0.4638	0.4704
PCOD8191840	0.2911	0.3416	0.3243	0.3956		
PCOD8323492	0.3297		0.3428	0.3428		0.4402
PCOD8325695	0.3328	<u>0.2891</u>	0.3721	0.4390		
PCOD8275535	0.2967	0.3203	0.3741	0.3730		
PCOD8308140	<u>0.2776</u>		0.3606	0.4606		
PCOD8068222	<u>0.2743</u>		<u>0.2984</u>			
PCOD8230860	0.3107	0.3383	0.3142	0.4208		
PCOD8086151	0.3043	0.3169	0.3607	0.4118		
PCOD8240750	0.3029	0.3137	0.3581	0.4198		
PCOD8057974	<u>0.2815</u>	0.3391	0.4149	0.4645		0.4695
PCOD8207762	0.3190	<u>0.2932</u>	0.3376	0.3762		0.4807
PCOD8256732	0.3308		0.3500	0.3310		0.4807
PCOD8059987	0.3116	0.3318	0.3787	0.4256		
PCOD8208038	0.3270		0.3768	0.4154		0.4784
PCOD8207692	0.2994		0.3583	0.4300		0.3513
PCOD8241500	<u>0.2842</u>	0.3421	0.4074	0.4115		
PCOD8208037	0.3266	0.2952	0.3714	0.3762		0.4901
PCOD8217827	<u>0.2815</u>	0.3547	0.4142	0.4366		



Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
<u>PCOD8188235</u>	<u>0.2848</u>	0.3212	0.3817	0.3917		0.4012
PCOD8269333	0.2972	0.3431	0.3925	0.3286		
PCOD8235524	0.2971	0.3212	0.4138	0.3923		
<u>PCOD8230781</u>	0.3090	<u>0.2941</u>	0.3622	0.4146		
PCOD8193306	0.3208		0.3662	0.4284		0.4846
PCOD8255000	0.3208		0.3669	0.4057		0.4868
PCOD8095196	0.3434		0.3499	0.4358		0.4780
PCOD8058374	0.3274	0.3216	0.3703			0.4605
PCOD8328480	0.3237	0.3173	0.3259	0.4349		0.4320
PCOD8258299	0.3297		0.3451	0.4335		0.4788
PCOD8267808	0.3063		0.3780	0.4096		0.4766
PCOD8079227	0.2997	0.3275	0.4004			0.4446
PCOD8207879	0.2911	0.3582	0.3751	0.4070		
PCOD8178950	0.3001	0.3209	0.3846	0.4052		
PCOD8241484	0.3056	0.3466	0.3744	0.3872		
PCOD8206399	0.2960		0.3371	0.4168		0.4864
PCOD8274259	0.3091		0.3197	0.4412		
PCOD8086115	0.3479	0.3849	0.3063			0.4957
PCOD8327034	0.3484		0.3682	0.4204		
PCOD8321602	0.3554		0.3681	0.4233		
<u>PCOD8240361</u>	0.3027		<u>0.2929</u>	0.4342		
PCOD8061081	0.2991	0.3289	0.3059	0.3866		
PCOD8057904	0.3056		0.3971	0.4041		
PCOD8057902	0.3035	0.3455	0.3162	0.4110		
PCOD8196809	0.2947	0.3197	0.3641	0.3944		0.4700
PCOD8080521	0.3247	0.3212	0.4234	0.4042	0.3981	0.4449
PCOD8230494	0.3306	0.3094	0.3936			0.4469
<u>PCOD8195148</u>	<u>0.2856</u>		0.3899	0.4307	0.4660	0.4706
PCOD8039026		0.3158	0.3385			
PCOD8203076	0.3146	0.3067	0.3509	0.3733		0.4886
PCOD8092398	0.3174	0.3103	0.3876			0.4798
PCOD8323621	0.3523		0.3741	0.4199		
<u>PCOD8250952</u>	0.3063	<u>0.2981</u>	0.3775	0.4163		
PCOD8250953	0.3419	0.2895	0.3700	0.4206		
PCOD8084263	0.3112	0.3105	0.3623	0.4377	0.4421	
PCOD8278785	0.3138		0.3333	0.4235		0.4816
PCOD8208422	0.3360		0.3510	0.4070		0.4904
PCOD8191720	0.3120		0.3506	0.4076		0.4888
PCOD8322663	0.3461		0.3742	0.4159		
PCOD8172642	0.2961	0.3325	0.3532	0.3918		
PCOD8210381	0.2912	0.3516	0.3594	0.4444		
PCOD8321603	0.3467		0.3869	0.4105		
PCOD8182548	0.3029		0.3918	0.4131		
PCOD8060448	0.2962	0.3311	0.3192			
PCOD8235418	0.3061		0.3770	0.4026		
PCOD8327059	0.3451		0.3737	0.4147		
PCOD8278786	0.3129		0.3686	0.4282		0.4856
<u>PCOD8069007</u>	0.3333	0.3160	<u>0.2801</u>			

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8251564	0.3139	0.3353	0.3949	0.4377		0.4660
PCOD8327031	0.3496		0.3895	0.4142		
PCOD8312438	0.3333		0.3487	0.3927		
PCOD8097531	0.2996	0.3310	0.3849	0.3772		
PCOD8321601	0.3456		0.3795	0.4150		
PCOD8236883	0.3358	0.3327	0.3313		0.4145	0.4597
PCOD8082880	0.3642	0.3221	0.3458	0.4230		0.4537
PCOD8321883	0.3445		0.3971	0.4111		
PCOD8098851	0.2992	0.3509	0.3693			
PCOD8095713	0.3017	0.3221	0.3513	0.4012		
PCOD8322681	0.3440		0.3884	0.4030		
PCOD8098730	0.2909	0.3443	0.3802	0.4235		
<u>PCOD8202351</u>	<u>0.2709</u>	0.3326	0.3735	0.3839		0.4786
<u>PCOD8081675</u>	<u>0.2825</u>	0.3469	0.4156	0.4365		0.4724
PCOD8318576	0.3379	0.3336		0.3159		
PCOD8089713	0.3128	0.3568	0.3681	0.4618		0.4819
PCOD8080398	0.3040	0.3091	0.4072	0.4243		
PCOD8323706	0.3469		0.3901	0.4010		
PCOD8085501	0.2961		0.4018			
PCOD8070627	0.3400	0.3063	0.3498			
<u>PCOD8211431</u>	<u>0.2892</u>	0.3254	0.3547	0.3016		
<u>PCOD8060446</u>	<u>0.2801</u>	0.3415	0.3776	0.3859		
PCOD8290013	0.3038		0.3092	0.4153		
<u>PCOD8060562</u>	<u>0.2805</u>	0.3449	0.3658	0.3862		
PCOD8257504	0.3265	0.3515	0.3202			
PCOD8067544	0.3228	0.3355	0.3848	0.4092		0.4733
<u>PCOD8085973</u>	0.3348	<u>0.2930</u>	<u>0.2774</u>			
PCOD8323672	0.3455		0.3874			
PCOD8307622	0.3374		0.3458	0.3872		
PCOD8207078	0.3197	0.3154	0.3816	0.3835		
<u>PCOD8085277</u>	<u>0.2897</u>		0.3825	0.4068		
PCOD8321848	0.3504		0.3824	0.3942		0.4265
PCOD8070958	0.3071	0.2930	0.3641	0.4047		
PCOD8323709	0.3464		0.3815	0.3924		
PCOD8323711	0.3458		0.3853	0.3929		
PCOD8323707	0.3423		0.3775	0.3911		
PCOD8268895	0.3039	0.3449	0.3923	0.4301		0.3925
PCOD8327151	0.3442		0.3827	0.3921		
PCOD8327150	0.3417		0.3921	0.3892		
<u>PCOD8059902</u>	<u>0.2750</u>	0.3570	0.3724	0.3780	0.3845	
PCOD8178240	0.3085	0.2806	0.3255	0.3833		
PCOD8080986	0.3075		0.3875	0.4160		0.4540
<u>PCOD8242436</u>	<u>0.2885</u>	0.3492	0.3593	0.4074		
PCOD8272108	0.3369	0.4009	0.3936	0.3639		
PCOD8321849	0.3374		0.3859	0.3905	0.4592	
<u>PCOD8271074</u>	<u>0.2834</u>	0.3367	0.3691			0.3942
PCOD8330616	0.3136	0.3170	0.3771	0.3794		
<u>PCOD8241081</u>	0.3378	0.3040	<u>0.2835</u>			

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8280633	0.3244		0.3944	0.3341		0.4795
PCOD8236886	0.3389		0.3192			
PCOD8209586	0.3003	0.3478	0.3587	0.4229		0.4829
PCOD8168221	0.3153	0.3465	0.3594	0.4178		0.4841
<u>PCOD8240622</u>	0.3166		<u>0.2962</u>	0.4135		0.4756
PCOD8313199	0.2918		0.3997	0.4010		0.3991
PCOD8330413	0.3313	0.3061	0.3165	0.4515		0.4923
PCOD8313976	0.2977	0.3438	0.3851	0.4137		
<u>PCOD8183502</u>	0.3298	<u>0.2855</u>	0.3644			
PCOD8088327	0.3226	0.3000	0.3762	0.4092		0.4844
<u>PCOD8065963</u>	0.3004	<u>0.2886</u>	0.3790	0.3790		
PCOD8107740	0.3064	0.3375	0.3750	0.4071		0.4597
<u>PCOD8179034</u>	0.3593	<u>0.2832</u>	0.3440			
PCOD8275742	0.2906	0.3508	0.3796	0.4264		0.3226
PCOD8270138	0.3393		0.3458	0.3566		0.4851
PCOD8070315	0.3209	0.3343	0.3760	0.3958		0.4751
<u>PCOD8318118</u>	<u>0.2798</u>	0.3371	0.3914			0.4854
PCOD8268116	0.2947		0.3421	0.4032	0.4667	0.4924
PCOD8081812	0.3061		0.3863	0.4003		0.4471
PCOD8183073	0.3059		0.3535			0.4939
PCOD8285178	0.3484	0.3398	0.3315	0.3890		0.4789
PCOD8244280	0.3387	0.3487	0.3493		0.4059	
PCOD8178224	0.3193		0.3408	0.4083		
<u>PCOD8070185</u>	<u>0.2898</u>		0.3843			
PCOD8086466	0.3533		0.3129	0.4185		0.4640
PCOD8070992	0.3467	0.3316	0.3861	0.3866		0.4701
PCOD8251680	0.3312	0.3197	0.3709	0.3751		0.4525
<u>PCOD8060522</u>	<u>0.2823</u>	0.3304	0.3678	0.3693		
PCOD8166716	0.3305	0.3249	0.3534	0.4042		0.4604
PCOD8059969	0.3382		0.3243	0.4473	0.4494	
PCOD8198870	0.2938	0.3325	0.3672	0.4078		
<u>PCOD8290879</u>	<u>0.2841</u>	0.3107	0.3622	0.3867		
<u>PCOD8257779</u>	0.3085	0.3193	0.3757	<u>0.2858</u>		
PCOD8217837	0.2964	0.3103	0.3530			
PCOD8206946	0.3262	0.3214	0.4058	0.3519		0.3449
PCOD8290182	0.3322	0.3667	0.3636	0.4333		
PCOD8198644	0.2993	0.3639	0.3675	0.3991		
PCOD8186345	0.3458	0.3763		0.3695		
PCOD8309700	0.3325	0.3455	0.3418			
PCOD8186339	0.3071	0.3586	0.3763	0.4288		
PCOD8179872	0.3341		0.3090	0.4161		0.4677
PCOD8290045	0.3051	0.3124	0.3531	0.4004		0.3778
PCOD8087069	0.3315	0.3389	0.4120	0.3974		
PCOD8095286	0.3209		0.3171	0.4069		0.4556
PCOD8231237	0.3246	0.3460	0.4002	0.3218		0.4714
PCOD8178144	0.3337		0.3322	0.4219		0.4776
PCOD8088442	0.3160	0.3564		0.4392		
PCOD8243411	0.3183	0.3773	0.3575	0.3796		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8070036	0.3344		0.3258	0.4161		0.4606
PCOD8211480	0.2990	0.3466	0.3720	0.4393		0.4910
PCOD8240405	0.3337		0.3258	0.4162		0.4522
PCOD8315377	0.3331	0.3421	0.3444	0.4537		
PCOD8330788	0.3437		0.3884	0.3370		
PCOD8231670	0.3200	0.3123	0.3335	0.4074		0.3953
PCOD8294496	0.3360	0.3232	0.2856	0.2673		
PCOD8178875	0.3343		0.3270	0.4084		0.4683
PCOD8254984	0.3090	0.3052	0.3464	0.4363		
<u>PCOD8066215</u>	0.3237	<u>0.2949</u>	0.3268			0.4700
PCOD8086461	0.3044		0.3588	0.4072		0.4322
PCOD8028858	0.3199	0.3459	0.2979	0.4382		0.4382
PCOD8096832	0.3114		0.4123	0.4385		
PCOD8061492	0.3418	0.3165	0.4224	0.4277		
PCOD8074541	0.3327	0.3270	0.3604	0.4694		
PCOD8235604	0.3284	0.3418	0.3632			
<u>PCOD8267927</u>	<u>0.2880</u>	0.3540	0.3748	0.4479		0.4055
PCOD8073415	0.3411		0.4130	0.4092	0.4179	
PCOD8198046	0.2956	0.3577	0.3778	0.4156		
<u>PCOD8331133</u>	0.3425	<u>0.2893</u>	0.3139	0.4320		0.4783
PCOD8225116	0.3091	0.3589	0.4129	0.3268		0.4496
PCOD8237027	0.3164		0.3311	0.4142	0.4145	
PCOD8070936	0.3220		0.3257	0.3979		0.4617
PCOD8315376	0.3304	0.3386	0.3429			
PCOD8095289	0.3357		0.3266	0.3628		0.4803
PCOD8209245	0.3113	0.3360	0.3997	0.3181		0.4717
PCOD8188707	0.3222	0.3099	0.3618	0.3720		0.4367
PCOD8307665	0.3342		0.4093	0.4093		
PCOD8279136	0.3161	0.3466	0.4107	0.3388		0.4570
PCOD8243507	0.3034	0.3524	0.3844	0.4126		0.4605
PCOD8179173	0.3362		0.3513	0.4112		
PCOD8063144	0.3552		0.3148	0.3978		0.4716
PCOD8257777	0.3575	0.3489	0.3613	0.3926	0.4112	0.4686
PCOD8063232	0.3349		0.3134	0.4084		0.4815
PCOD8103956	0.3347	0.3598	0.3031	0.4225		
PCOD8213046	0.3430		0.3068	0.3956		0.4643
PCOD8182998	0.3274		0.3244	0.3908		0.4619
PCOD8320305	0.2915	0.3302	0.3846	0.3819		0.4766
PCOD8243020	0.3278	0.3447	0.3937	0.3236		0.4703
PCOD8219153	0.3260	0.3450	0.3945	0.4000		
PCOD8088115	0.3291	0.3460	0.3629	0.4167	0.4206	
PCOD8189533	0.3340		0.3989	0.4111		
PCOD8073438	0.3369		0.3926	0.4140	0.4014	
PCOD8225131	0.3322	0.3319	0.3883	0.4089		
PCOD8209392	0.3052	0.3520	0.3768		0.4517	0.4741
PCOD8258339	0.3360		0.3570	0.3490		
PCOD8099688	0.3380	0.3356	0.3737	0.3112		0.4660
PCOD8262315	0.3350	0.3442	0.4032	0.3652		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8072345	0.3376	0.3269	0.3733	0.4026	0.4064	
PCOD8209934	0.3144	0.3252	0.3494	0.4170	0.4517	0.4824
PCOD8110532	0.3429	0.3212		0.4318		
PCOD8243266	0.3379		0.4018	0.3783	0.4464	
PCOD8073440	0.3368		0.3868	0.4053		
PCOD8098327	0.3103	0.3481	0.3494	0.4087		
PCOD8210062	0.2903	0.3689	0.3419	0.4060	0.4127	
PCOD8325566	0.3284	0.3300	0.3660	0.4469		0.4917
PCOD8073500	0.3269		0.3995	0.4090		
PCOD8300086	0.3125	0.3404	0.3498	0.4186		
PCOD8273328	0.3050	0.3203	0.3510	0.3924		0.4769
<u>PCOD8273359</u>	<u>0.2642</u>	0.3328	0.3504	0.3914	0.4366	0.4373
PCOD8073258	0.3357	0.3314	0.4051	0.4548	0.4012	
PCOD8242749	0.3417		0.3420	0.3481	0.4134	
<u>PCOD8276325</u>	0.3414		0.3475	<u>0.2985</u>		0.4885
<u>PCOD8052423</u>	<u>0.2392</u>		0.3924	0.3861		
PCOD8166818	0.3392		0.3926	0.3855		
PCOD8319635	0.3479		0.3286	0.3560		
PCOD8236328	0.3383	0.3287	0.3906	0.4066		
PCOD8211717	0.3368		0.3295			
PCOD8186416	0.2977	0.3753	0.3605		0.4572	
PCOD8232428	0.3335		0.3731	0.3888		
PCOD8074064	0.3286		0.3842	0.4038		
PCOD8073543	0.3412		0.3585	0.3903		
PCOD8090218	0.3053	0.3406	0.3863	0.4015	0.4113	
PCOD8300489	0.3241	0.3670	0.3623	0.4136		
PCOD8098002	0.3449		0.3665	0.3890	0.3772	
PCOD8183105	0.3252	0.3422	0.3750	0.3151		0.4645
PCOD8087731	0.3290		0.3139	0.3770		0.4720
PCOD8326815	0.3365	0.3266	0.3546			
PCOD8262847	0.3248		0.4076	0.3863	0.4010	
PCOD8241793	0.3247	0.3164	0.3585	0.4321		
PCOD8182952	0.3367		0.3168	0.3696		0.4747
PCOD8106072	0.3383		0.3885	0.3761		
PCOD8225456	0.3170	0.3392	0.3864	0.4024		
PCOD8259991	0.3370		0.3904	0.3885		
PCOD8290468	0.3039					0.4753
PCOD8243564	0.3239	0.3371	0.3945	0.3665	0.4683	
PCOD8246643	0.3404	0.3340	0.4080	0.3931		
PCOD8258969	0.3315		0.3650	0.3817		
PCOD8325644	0.3237	0.3503	0.3719			0.4962
PCOD8088193	0.3050	0.3348	0.3828			0.4174
<u>PCOD8211701</u>	<u>0.2789</u>	0.3252	0.3637		0.4438	0.4926
<u>PCOD8219945</u>	<u>0.2869</u>	0.3440	0.3865	0.3615	0.4358	
PCOD8327844	0.3675		0.3476	0.3651		0.4913
PCOD8198832	0.3052	0.3681	0.3524	0.4256		
PCOD8097783	0.3274		0.3014	0.3960		
PCOD8072054	0.3298	0.3343	0.3885	0.4235		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8088719	0.3206	0.3490	0.3957	0.3893		
PCOD8259023	0.3460	0.3213	0.3814	0.4034	0.4346	
PCOD8173427	0.3247		0.3294	0.3986		
PCOD8259711	0.2956	0.3446	0.3402	0.3930		
PCOD8189576	0.3394	0.3250	0.3485	0.4027	0.4100	
PCOD8092706	0.3309	0.3439	0.3737	0.3648		
PCOD8103054	0.2984	0.3388	0.3442	0.3792		
PCOD8065409	0.3159	0.3326		0.4148		
PCOD8232239	0.3427		0.3632	0.3578		
PCOD8064289	0.3242	0.3349	0.3205	0.3206		0.4188
PCOD8099355	0.3233		0.3819	0.3818		
PCOD8074749	0.3500	0.3091	0.3691	0.4012		
PCOD8243691	0.3338					
<u>PCOD8263681</u>	<u>0.2898</u>	0.3633	0.3450	0.3814	0.4653	
PCOD8260013	0.3289		0.3813	0.4165	0.4338	
PCOD8073501	0.3301		0.3978	0.3761		
PCOD8219361	0.3396		0.3769	0.3185		
PCOD8213334	0.3312		0.3724	0.4122		
PCOD8075380	0.3234	0.3455	0.4074	0.4241	0.4506	
<u>PCOD8259425</u>	<u>0.2881</u>	0.3631	0.3411	0.3724	0.4315	
PCOD8189960	0.3413		0.3576	0.3666	0.4025	
PCOD8252799	0.3269					
PCOD8103186	0.3375	0.3259	0.3658	0.3834	0.4631	
PCOD8141547	0.3492	0.3214	0.3385			0.4570
PCOD8064489	0.3194	0.3296	0.3564	0.3866		
PCOD8159596	0.3434	0.3253		0.3858		
PCOD8264773	0.3396	0.3687	0.3608	0.4432		
PCOD8245244	0.3252		0.3808	0.4015		
PCOD8104545	0.3324	0.3530	0.3387	0.4187		
PCOD8101405	0.3408	0.3296	0.3655	0.3717		
PCOD8232833	0.3362		0.3696	0.4360	0.4395	
PCOD8238549	0.3350	0.3156	0.3952	0.4606		
PCOD8223545	0.3430	0.3218	0.4330	0.4518		
PCOD8308701	0.3401		0.3781	0.3779		
PCOD8175779	0.3421		0.3770	0.4090		
PCOD8167566	0.3707		0.3805	0.3995		
PCOD8166844	0.3510		0.3834	0.3949		
PCOD8273381	0.3072		0.3672	0.3912	0.4155	
PCOD8099864	0.3410	0.3190	0.3314	0.4280		
PCOD8073265	0.3334	0.3275	0.3517	0.3854	0.4014	
PCOD8102090	0.3135	0.3559	0.3509	0.3941		
PCOD8142649	0.3267	0.3340	0.3274			
<u>PCOD8280240</u>	<u>0.2729</u>	0.3751	0.3615	0.3650	0.4751	
PCOD8049981	0.3265	0.3337	0.3275			
PCOD8212629	0.3293	0.3606	0.3336			
PCOD8263321	0.2981	0.3549	0.3377			
PCOD8279905	0.3279		0.3355	0.4036		
PCOD8166947	0.3521		0.3699	0.4099		

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8299839	0.3315	0.3630	0.3654	0.3958		
PCOD8074186	0.3423	0.3690	0.3949	0.3770	0.4514	
PCOD8203264	0.3054	0.3446	0.3725	0.3361		0.4647
PCOD8263142	0.3389		0.3250	0.4307	0.3834	
PCOD8184109	0.3445		0.3505	0.3505		
PCOD8244420	0.3570	0.3267	0.3802	0.3753		
PCOD8212659	0.3124	0.3622	0.3453	0.3950	0.4431	
PCOD8030566	0.3594	0.3168	0.3526	0.4468		
PCOD8092485	0.3282	0.3852	0.3098	0.4125	0.4283	
PCOD8226345	0.3352		0.3472	0.3647		
PCOD8226678	0.3499		0.3757	0.4370		
PCOD8064814	0.3080		0.3483	0.4170		
PCOD8253793	0.3455		0.3461	0.3779		
PCOD8106914	0.3463		0.3422			
PCOD8100187	0.3036	0.3439	0.3501	0.3896		
PCOD8126287	0.3407		0.3781	0.4074		
<u>PCOD8108172</u>	<u>0.2881</u>	0.3799	0.3608		0.4764	
PCOD8053556	0.3415	0.3563	0.3709	0.3887		
PCOD8262533	0.3109	0.3220	0.3631	0.4242		
PCOD8107265	0.3492		0.3656	0.3716	0.4373	
PCOD8238333	0.2951	0.3421	0.4156	0.4026		
PCOD8252568	0.3441	0.3543	0.3929	0.4034	0.4629	
PCOD8204154	0.3318		0.3330	0.3944		
PCOD8263726	0.3138		0.3805	0.4025	0.4559	
PCOD8259339	0.3376	0.3511	0.3683	0.3417	0.4301	
PCOD8280218	0.3360	0.3271	0.3214	0.3073		0.4604
PCOD8186502	0.2979	0.3564	0.3422	0.3477		
PCOD8066265	0.3333	0.3365	0.4068	0.3715		
PCOD8106085	0.3199		0.3792	0.4329		
PCOD8190086	0.3277		0.3883	0.3838		
PCOD8053512	0.3282	0.3337	0.3229		0.4148	
PCOD8074925	0.3106		0.3233	0.3822		
PCOD8063798	0.3285		0.3294	0.3699		
<u>PCOD8066118</u>	<u>0.2886</u>	<u>0.2946</u>	0.3435			0.3643
PCOD8101543	0.3276	0.3165	0.3260	0.3784	0.4522	
PCOD8103191	0.3125	0.3390	0.3288			
PCOD8253792	0.3500		0.3645	0.3676		
PCOD8065512	0.3118	0.3524	0.3628	0.3887		
PCOD8108886	0.3367	0.3447	0.4060	0.3977		
PCOD8260200	0.3080		0.3689	0.4067		
PCOD8175660	0.3235		0.3852	0.4179		
PCOD8100640	0.3287	0.3535	0.3128	0.3876		
PCOD8106132	0.3090		0.3860	0.4280		
PCOD8101754	0.3371	0.3378	0.4224	0.3568		
PCOD8106011	0.3168		0.3764	0.4166		
PCOD8253230	0.3146		0.3650	0.4107		
PCOD8076067	0.3176		0.3862	0.3862		
PCOD8212295	0.3310	0.3319	0.3606	0.3658	0.4431	

Structure code	4-Ring (nm)	5-Ring (nm)	6-Ring (nm)	8-Ring (nm)	10-Ring (nm)	12-Ring (nm)
PCOD8106010	0.3191		0.3768	0.4531		
PCOD8074911	0.3036	0.3580	0.3384	0.3809		
PCOD8071734	0.3127	0.3238	0.3676	0.3860		
PCOD8170247	0.3187		0.3767	0.4204		
PCOD8102052	0.3285	0.3626	0.3372	0.3833	0.4143	
PCOD8189478	0.3383	0.3220	0.3611	0.3697		
PCOD8189713	0.3446	0.3333		0.3577		
PCOD8103161	0.3053		0.3448	0.3909		
PCOD8238064	0.3135		0.3801	0.4232		
PCOD8100218	0.3419		0.3667	0.3829		
PCOD8253969	0.3166		0.3663	0.4215		
PCOD8108406	0.3493	0.3545	0.3944	0.3873		
PCOD8049791	0.3474	0.3194	0.3751	0.4055		
PCOD8237350	0.3412	0.3448	0.3147	0.3963		
PCOD8180088	0.3460		0.3711	0.3985	0.4396	
PCOD8220674	0.3192	0.3735	0.3792	0.3971	0.4281	
PCOD8233108	0.3170	0.3738	0.3506	0.3813		
PCOD8109096	0.3626		0.3633	0.3780		
PCOD8330772	0.2985		0.3815	0.3733		0.4810
PCOD8062708		0.3599	0.3123	0.3975		
PCOD8213655	0.3245		0.3490	0.3876		
PCOD8210118	0.3243		0.3210	0.3734		
PCOD8173853	0.3360		0.3667	0.3667		
PCOD8107094	0.3259		0.3624	0.4315		
PCOD8065286	0.3197		0.3275	0.3275	0.3788	
PCOD8280920		0.3576	0.3343	0.3781		
PCOD8075297		0.3600	0.3504	0.4011	0.4381	
PCOD8254037	0.3120	0.3660	0.3540	0.3577		
PCOD8308388	0.3396		0.3625	0.4160		
PCOD8154046		0.3224	0.3456			
PCOD8260399	0.2982	0.3464	0.3751	0.4054		
PCOD8273476	0.3194		0.3579	0.3865		