

base atom	partner	atc	RF(Bondi)	RF(RT)	RF(Alvarez)	RF(average 2.5th %ile	97.5 %ile	no. structu	Dmean(Boi	SE(Dmean)(Bondi)	
Br	Br		1.05	1.15	1.02	1.07	0.98	1.19	8420	-0.009	0.003
Br	Br[-]		3.94	3.83	3.89	3.89	3.19	4.57	123	0.34	0.04
Br	C[sat]		0.37	0.73	0.59	0.56	0.33	0.78	7276	-0.065	0.002
Br	C[unsat]		0.59	0.88	0.76	0.75	0.57	0.91	8149	-0.089	0.003
Br	Cl		1.43	1.53	1.62	1.53	1.24	1.82	646	0.071	0.014
Br	Cl[-]		2.4	2.41	2.34	2.38	1.56	3.21	55	0.15	0.055
Br	F		1.36	1.26	1.26	1.3	1.05	1.59	486	0.046	0.016
Br	F[-]						0	0	1	0	0
Br	H[C]		1.29	0.83	1.16	1.09	0.8	1.32	8352	0.074	0.004
Br	H[polar]		0.61	0.47	0.58	0.56	0.36	0.73	3431	-0.021	0.003
Br	I		1.17	1.24	1.22	1.21	0.81	1.62	108	0.031	0.032
Br	I[-]		4.3	4.05	4.1	4.15	3	5.55	14	0.478	0.102
Br	N[acc]		1.67	1.85	1.84	1.79	1.48	2.03	2573	0.03	0.006
Br	N[nonacc]		0.33	0.48	0.51	0.44	0.22	0.64	4178	-0.018	0.001
Br	O		1.45	1.6	1.4	1.48	1.33	1.66	6888	0.048	0.004
Br	P		0.45	0.43	0.43	0.44	0.1	0.92	242	-0.02	0.008
Br	S		0.86	1.07	1.27	1.07	0.7	1.43	1462	-0.015	0.006
Br[-]	Br		1.63	1.87	1.68	1.73	1.18	2.36	123	0.085	0.034
Br[-]	Br[-]		0.01	0.01	0.01	0.01	0	0.03	1367	-0.135	0.003
Br[-]	C[sat]		0.01	0.08	0.03	0.04	0	0.12	1234	-0.102	0.003
Br[-]	C[unsat]		0.04	0.15	0.07	0.08	0.02	0.19	1238	-0.175	0.003
Br[-]	Cl		0.13	0.13	0.13	0.13	0	0.34	102	-0.108	0.014
Br[-]	Cl[-]						0	0	3	0.6	0.077
Br[-]	F		0	0	0	0	0	0	68	-0.123	0.011
Br[-]	F[-]						0	0	0	0	0
Br[-]	H[C]		1.04	1.29	1.12	1.15	0.98	1.38	1354	0.006	0.009
Br[-]	H[polar]		9.43	13.07	10.15	10.88	8.96	13.76	990	0.661	0.012
Br[-]	I		3.63	3.65	3.52	3.6	2.24	5.36	26	0.432	0.082
Br[-]	I[-]						0	0	0	0	0
Br[-]	N[acc]		0.06	0.05	0.06	0.06	0	0.2	322	-0.041	0.005
Br[-]	N[nonacc]		0.03	0.11	0.03	0.06	0	0.22	1195	-0.024	0.002
Br[-]	O		0.09	0.2	0.07	0.12	0.01	0.29	824	-0.077	0.004

Br[-]	P	1.09	1.84	1.17	1.36	0	3.7	175	-0.001	0.008
Br[-]	S	0.83	1.04	0.97	0.95	0.46	1.51	147	-0.016	0.023
C[sat]	Br	1.25	1.29	1.22	1.25	1.19	1.32	7167	0.059	0.004
C[sat]	Br[-]	1.02	1.16	0.98	1.05	0.91	1.23	1228	0.001	0.01
C[sat]	C[sat]	0.59	0.79	0.74	0.71	0.59	0.8	121463	-0.104	0.001
C[sat]	C[unsat]	0.87	1.02	0.95	0.95	0.86	1.03	116248	-0.05	0.001
C[sat]	Cl	1.34	1.36	1.39	1.36	1.32	1.41	13245	0.079	0.003
C[sat]	Cl[-]	1.06	1.33	1.1	1.16	1.01	1.37	2723	0.014	0.007
C[sat]	F	1.51	1.54	1.48	1.51	1.45	1.56	8283	0.14	0.004
C[sat]	F[-]	0.7	1.18	0.64	0.84	0.35	1.65	47	-0.07	0.045
C[sat]	H[C]	1.15	0.95	1.1	1.06	0.94	1.15	121184	0.075	0.001
C[sat]	H[polar]	0.56	0.32	0.53	0.47	0.31	0.57	63400	-0.074	0.001
C[sat]	I	1.1	1.19	1.13	1.14	1.05	1.24	1969	0.017	0.008
C[sat]	I[-]	0.97	1.07	0.97	1	0.9	1.14	815	-0.004	0.012
C[sat]	N[acc]	1.01	1.24	1.14	1.13	0.99	1.26	43927	-0.014	0.001
C[sat]	N[nonacc]	0.55	0.61	0.69	0.61	0.53	0.7	70616	-0.039	0.001
C[sat]	O	1.16	1.45	1.15	1.25	1.14	1.46	105799	0.044	0.001
C[sat]	P	0.29	0.35	0.35	0.33	0.25	0.39	7670	-0.071	0.002
C[sat]	S	0.94	1.01	1.05	1	0.92	1.07	26913	-0.017	0.002
C[unsat]	Br	0.93	0.96	0.87	0.92	0.85	0.98	8125	-0.029	0.004
C[unsat]	Br[-]	0.61	0.72	0.59	0.64	0.55	0.77	1238	-0.137	0.009
C[unsat]	C[sat]	0.48	0.81	0.67	0.65	0.48	0.82	117103	-0.174	0.001
C[unsat]	C[unsat]	0.87	1.06	0.97	0.96	0.86	1.06	131842	-0.055	0.001
C[unsat]	Cl	0.98	0.97	1.02	0.99	0.96	1.04	15146	-0.023	0.003
C[unsat]	Cl[-]	0.63	0.65	0.65	0.64	0.6	0.68	2791	-0.119	0.006
C[unsat]	F	1	0.98	0.92	0.97	0.9	1.01	9306	-0.021	0.004
C[unsat]	F[-]	0.76	0.83	0.76	0.78	0.14	1.72	34	-0.091	0.053
C[unsat]	H[C]	1.41	1.19	1.33	1.31	1.18	1.42	130572	0.216	0.001
C[unsat]	H[polar]	0.35	0.28	0.33	0.32	0.27	0.36	69391	-0.163	0.001
C[unsat]	I	0.86	0.91	0.88	0.88	0.82	0.94	2411	-0.055	0.007
C[unsat]	I[-]	0.65	0.71	0.64	0.66	0.58	0.77	730	-0.121	0.012
C[unsat]	N[acc]	0.55	0.74	0.71	0.67	0.54	0.75	50708	-0.128	0.001
C[unsat]	N[nonacc]	0.56	0.69	0.79	0.68	0.55	0.81	78052	-0.076	0.001

C[unsat]	O	0.68	0.84	0.6	0.71	0.6	0.85	112500	-0.127	0.001
C[unsat]	P	0.16	0.25	0.21	0.2	0.14	0.27	7819	-0.149	0.002
C[unsat]	S	0.77	0.79	0.87	0.81	0.76	0.89	29508	-0.091	0.002
Cl	Br	1.37	1.69	1.33	1.46	1.17	1.88	644	0.061	0.014
Cl	Br[-]	0.31	0.5	0.3	0.37	0.1	0.82	102	-0.128	0.02
Cl	C[sat]	0.51	0.93	0.74	0.72	0.48	0.96	13425	-0.055	0.002
Cl	C[unsat]	0.6	0.97	0.76	0.78	0.58	0.99	15158	-0.1	0.002
Cl	Cl	0.97	1.02	1.06	1.02	0.95	1.08	15748	-0.022	0.002
Cl	Cl[-]	1	1.07	1.01	1.03	0.76	1.32	348	-0.015	0.017
Cl	F	1.38	1.37	1.21	1.32	1.07	1.52	932	0.066	0.012
Cl	F[-]					0	0	0	0	0
Cl	H[C]	1.57	1.05	1.38	1.33	1.03	1.59	15456	0.161	0.003
Cl	H[polar]	0.65	0.46	0.61	0.57	0.4	0.71	7837	-0.023	0.002
Cl	I	1.03	1.19	1.16	1.13	0.8	1.45	223	-0.001	0.023
Cl	I[-]	1.57	1.58	1.62	1.59	1.04	2.16	54	0.118	0.052
Cl	N[acc]	0.73	0.99	0.94	0.89	0.66	1.07	6703	-0.031	0.003
Cl	N[nonacc]	0.34	0.6	0.6	0.51	0.28	0.67	9783	-0.023	0.001
Cl	O	0.95	1.14	0.81	0.97	0.78	1.17	13083	-0.018	0.003
Cl	P	0.19	0.34	0.32	0.28	0.1	0.47	1329	-0.056	0.003
Cl	S	0.89	0.95	1.07	0.97	0.81	1.16	3276	-0.01	0.004
Cl[-]	Br	0.66	0.9	0.67	0.75	0.13	1.64	55	-0.048	0.033
Cl[-]	Br[-]					0	0	3	0.559	0.08
Cl[-]	C[sat]	0.03	0.1	0.04	0.06	0.01	0.13	2736	-0.101	0.002
Cl[-]	C[unsat]	0.04	0.1	0.06	0.07	0.02	0.13	2797	-0.166	0.002
Cl[-]	Cl	0.18	0.26	0.22	0.22	0.08	0.39	348	-0.093	0.008
Cl[-]	Cl[-]	0.01	0.01	0.01	0.01	0	0.03	3119	-0.135	0.002
Cl[-]	F	0	0	0	0	0	0	161	-0.124	0.007
Cl[-]	F[-]					0	0	0	0	0
Cl[-]	H[C]	0.6	0.7	0.63	0.64	0.56	0.76	3071	-0.099	0.005
Cl[-]	H[polar]	7.73	10.72	8.48	8.98	7.5	11.05	2909	0.673	0.006
Cl[-]	I	2.73	3.05	2.96	2.91	1.72	4.35	39	0.336	0.071
Cl[-]	I[-]					0	0	1	-0.435	0
Cl[-]	N[acc]	0.06	0.12	0.07	0.08	0	0.29	834	-0.049	0.003

Cl[-]	N[nonacc]	0.03	0.13	0.07	0.08	0	0.2	2954	-0.03	0.001
Cl[-]	O	0.04	0.08	0.03	0.05	0.01	0.12	2268	-0.1	0.002
Cl[-]	P	1.71	1.63	1.75	1.69	0.55	3.08	174	0.011	0.013
Cl[-]	S	0.75	0.91	0.86	0.84	0.49	1.19	380	-0.026	0.012
F	Br	0.89	0.95	0.86	0.9	0.73	1.08	486	-0.038	0.015
F	Br[-]	0.19	0.12	0.1	0.14	0	0.45	68	-0.195	0.018
F	C[sat]	0.59	1.04	0.84	0.83	0.56	1.07	8425	-0.063	0.003
F	C[unsat]	0.55	0.9	0.73	0.72	0.53	0.91	9340	-0.15	0.003
F	Cl	1	1.1	1.18	1.1	0.9	1.28	931	-0.001	0.011
F	Cl[-]	0.07	0.08	0.16	0.1	0	0.27	161	-0.173	0.011
F	F	1.03	1.02	0.94	1	0.92	1.05	9778	-0.02	0.004
F	F[-]	0.19	0.19	0.19	0.19	0	0.52	15	-0.214	0.042
F	H[C]	1.87	1.55	1.8	1.74	1.52	1.89	9380	0.304	0.003
F	H[polar]	0.74	0.63	0.72	0.69	0.55	0.81	4518	-0.034	0.004
F	I	0.65	0.74	0.7	0.7	0.53	0.88	391	-0.101	0.016
F	I[-]	0.2	0.3	0.24	0.25	0	0.63	29	-0.198	0.038
F	N[acc]	0.22	0.36	0.35	0.31	0.19	0.41	3796	-0.103	0.003
F	N[nonacc]	0.38	0.65	0.65	0.56	0.32	0.72	5685	-0.034	0.002
F	O	0.4	0.53	0.33	0.42	0.31	0.55	7645	-0.129	0.003
F	P	0.14	0.31	0.29	0.25	0.07	0.43	1295	-0.064	0.003
F	S	0.61	0.69	0.76	0.69	0.55	0.83	2682	-0.061	0.004
F[-]	Br					0	0	1	-0.172	0
F[-]	Br[-]					0	0	0	0	0
F[-]	C[sat]	0	0.09	0	0.03	0	0.28	47	-0.1	0.012
F[-]	C[unsat]	0.45	0.38	0.41	0.41	0	1.06	34	-0.085	0.047
F[-]	Cl					0	0	0	0	0
F[-]	Cl[-]					0	0	0	0	0
F[-]	F	0.27	0.26	0	0.18	0	0.89	15	-0.156	0.057
F[-]	F[-]	0	0	0	0	0	0	52	-0.082	0.011
F[-]	H[C]	0.42	0.54	0.47	0.48	0.2	0.89	52	-0.152	0.028
F[-]	H[polar]	6.06	8.29	6.35	6.9	5.07	10.03	45	0.575	0.055
F[-]	I					0	0	1	0.667	0
F[-]	I[-]					0	0	0	0	0

F[-]	N[acc]					0	0	9	0.173	0.143
F[-]	N[nonacc]	0	0	0	0	0	0	48	-0.033	0.008
F[-]	O	0.2	0	0.21	0.14	0	0.74	30	-0.085	0.035
F[-]	P					0	0	5	0.155	0.195
F[-]	S					0	0	5	-0.019	0.019
H[C]	Br	1.5	1.48	1.45	1.48	1.43	1.52	8352	0.213	0.003
H[C]	Br[-]	2.79	2.71	2.7	2.73	2.65	2.85	1354	0.506	0.006
H[C]	C[sat]	0.53	0.77	0.7	0.67	0.52	0.78	122313	-0.216	0.001
H[C]	C[unsat]	0.89	0.98	0.97	0.95	0.89	0.99	130886	-0.095	0.001
H[C]	Cl	1.56	1.52	1.58	1.55	1.51	1.59	15469	0.224	0.003
H[C]	Cl[-]	2.6	2.52	2.55	2.56	2.48	2.64	3069	0.458	0.005
H[C]	F	1.86	1.79	1.82	1.82	1.77	1.88	9384	0.342	0.003
H[C]	F[-]	1.83	1.71	1.76	1.77	1.32	2.24	52	0.222	0.057
H[C]	H[C]	0.89	0.7	0.82	0.8	0.69	0.9	136028	-0.121	0.001
H[C]	H[polar]	0.32	0.15	0.3	0.25	0.14	0.32	71634	-0.204	0.001
H[C]	I	1.38	1.41	1.39	1.39	1.35	1.44	2557	0.127	0.007
H[C]	I[-]	2.71	2.7	2.67	2.69	2.61	2.77	869	0.505	0.008
H[C]	N[acc]	1.73	1.78	1.81	1.77	1.71	1.82	51320	0.139	0.002
H[C]	N[nonacc]	0.46	0.54	0.59	0.53	0.45	0.6	79177	-0.113	0.001
H[C]	O	1.99	1.95	1.97	1.97	1.95	1.99	115779	0.396	0.001
H[C]	P	0.4	0.54	0.51	0.48	0.37	0.57	8873	-0.159	0.002
H[C]	S	1.26	1.28	1.33	1.29	1.25	1.34	30362	0.033	0.002
H[polar]	Br	0.44	0.41	0.42	0.42	0.37	0.49	3394	-0.087	0.004
H[polar]	Br[-]	4.86	4.65	4.77	4.76	4.47	5.05	970	0.68	0.007
H[polar]	C[sat]	0.11	0.14	0.14	0.13	0.11	0.15	63027	-0.133	0.001
H[polar]	C[unsat]	0.21	0.2	0.21	0.21	0.2	0.22	68593	-0.194	0.001
H[polar]	Cl	0.37	0.34	0.36	0.36	0.31	0.41	7729	-0.1	0.003
H[polar]	Cl[-]	5.11	4.93	4.78	4.94	4.67	5.24	2834	0.697	0.004
H[polar]	F	0.41	0.4	0.42	0.41	0.36	0.46	4465	-0.103	0.003
H[polar]	F[-]	7.76	7.7	7.8	7.76	6.34	9.78	45	0.713	0.025
H[polar]	H[C]	0.21	0.15	0.2	0.19	0.15	0.21	70657	-0.225	0.001
H[polar]	H[polar]	0.25	0.29	0.26	0.26	0.24	0.3	71427	-0.087	0.001
H[polar]	I	0.58	0.55	0.55	0.56	0.45	0.68	807	-0.109	0.009

H[polar]	I[-]	3.87	3.68	3.71	3.75	3.45	4.14	358	0.572	0.016
H[polar]	N[acc]	4.36	3.88	3.92	4.05	3.81	4.43	28631	0.325	0.003
H[polar]	N[nonacc]	0.26	0.2	0.23	0.23	0.19	0.28	51654	-0.051	0.001
H[polar]	O	3.83	3.45	4.12	3.8	3.43	4.14	66083	0.497	0.002
H[polar]	P	0.19	0.18	0.16	0.17	0.11	0.24	3589	-0.048	0.002
H[polar]	S	1.66	1.71	1.53	1.64	1.48	1.77	13829	0.042	0.003
I	Br	1.26	1.25	1.11	1.21	0.69	1.75	108	0.033	0.034
I	Br[-]	8.62	8.32	8.62	8.52	5.96	11.47	26	0.743	0.064
I	C[sat]	0.24	0.45	0.38	0.36	0.19	0.51	2000	-0.092	0.004
I	C[unsat]	0.53	0.68	0.59	0.6	0.48	0.73	2418	-0.102	0.005
I	Cl	0.98	0.96	1.01	0.98	0.71	1.27	224	0.013	0.021
I	Cl[-]	6.09	5.9	5.82	5.93	3.89	8.48	39	0.561	0.064
I	F	0.54	0.54	0.51	0.53	0.37	0.69	391	-0.082	0.013
I	F[-]					0	0	1	0.997	0
I	H[C]	0.96	0.75	0.88	0.86	0.69	1.02	2557	-0.036	0.006
I	H[polar]	1.23	1.26	1.22	1.24	0.91	1.64	824	-0.009	0.008
I	I	0.79	0.85	0.82	0.82	0.74	0.91	2602	-0.048	0.006
I	I[-]	3.89	3.66	3.7	3.75	2.92	4.75	102	0.429	0.042
I	N[acc]	5.68	5.29	5.31	5.43	4.75	6.31	817	0.283	0.016
I	N[nonacc]	0.37	0.57	0.52	0.49	0.19	0.79	1244	-0.019	0.003
I	O	2.8	2.75	2.96	2.84	2.59	3.15	1668	0.208	0.011
I	P	1.13	1.66	1.46	1.42	0.38	2.66	182	-0.004	0.013
I	S	1.39	1.5	1.53	1.47	1.17	1.76	574	0.039	0.014
I[-]	Br	1.81	2.68	1.86	2.11	0.41	4.87	14	0.119	0.113
I[-]	Br[-]					0	0	0	0	0
I[-]	C[sat]	0.02	0.15	0.04	0.07	0	0.22	818	-0.109	0.003
I[-]	C[unsat]	0.08	0.36	0.19	0.21	0.04	0.43	733	-0.163	0.005
I[-]	Cl	0.12	0.97	0.35	0.48	0	1.58	54	-0.1	0.018
I[-]	Cl[-]					0	0	1	-0.234	0
I[-]	F	0.2	0	0	0.07	0	0.7	29	-0.121	0.034
I[-]	F[-]					0	0	0	0	0
I[-]	H[C]	1.59	1.9	1.67	1.72	1.51	2.01	869	0.146	0.011
I[-]	H[polar]	9.08	12.55	9.99	10.54	8.22	13.89	373	0.57	0.023

I[-]	I	2.78	2.78	2.75	2.77	2.18	3.44	102	0.347	0.04
I[-]	I[-]	0.01	0	0.01	0.01	0	0.02	876	-0.153	0.003
I[-]	N[acc]	0	0	0	0	0	0	238	-0.041	0.004
I[-]	N[nonacc]	0	0.15	0.06	0.07	0	0.35	751	-0.019	0.002
I[-]	O	0.12	0.18	0.1	0.13	0	0.35	417	-0.064	0.006
I[-]	P	0.86	1.45	1.54	1.28	0	2.94	133	-0.004	0.013
I[-]	S	0.46	1.01	1.03	0.83	0.15	1.53	97	-0.053	0.022
N[acc]	Br	0.88	0.93	0.86	0.89	0.78	1.01	2493	-0.025	0.006
N[acc]	Br[-]	0.61	0.59	0.55	0.58	0.37	0.82	307	-0.055	0.016
N[acc]	C[sat]	0.31	0.59	0.44	0.45	0.29	0.6	42312	-0.085	0.001
N[acc]	C[unsat]	0.46	0.66	0.53	0.55	0.45	0.67	48857	-0.134	0.001
N[acc]	Cl	0.68	0.69	0.7	0.69	0.64	0.74	6530	-0.062	0.003
N[acc]	Cl[-]	0.68	0.68	0.67	0.68	0.55	0.82	804	-0.058	0.01
N[acc]	F	0.44	0.42	0.4	0.42	0.36	0.48	3617	-0.109	0.004
N[acc]	F[-]					0	0	8	0.538	0.173
N[acc]	H[C]	1.65	1.74	1.66	1.69	1.64	1.75	49279	0.177	0.002
N[acc]	H[polar]	4.96	6.79	5.37	5.71	4.87	6.91	28066	0.341	0.003
N[acc]	I	1.87	1.83	1.83	1.84	1.66	2.05	793	0.176	0.015
N[acc]	I[-]	0.7	0.72	0.7	0.71	0.45	0.98	217	-0.08	0.02
N[acc]	N[acc]	0.18	0.25	0.24	0.22	0.17	0.27	50064	-0.084	0.001
N[acc]	N[nonacc]	0.42	0.57	0.58	0.52	0.39	0.61	33448	-0.03	0.001
N[acc]	O	0.33	0.41	0.3	0.35	0.29	0.42	38842	-0.097	0.001
N[acc]	P	0.07	0.13	0.13	0.11	0.03	0.2	2439	-0.046	0.002
N[acc]	S	0.76	0.79	0.84	0.8	0.71	0.88	11740	-0.043	0.002
N[nonacc]	Br	1.15	1.1	1.08	1.11	1	1.22	3695	0.01	0.005
N[nonacc]	Br[-]	1.73	1.62	1.65	1.67	1.5	1.86	869	0.143	0.014
N[nonacc]	C[sat]	0.49	0.69	0.61	0.6	0.47	0.71	62754	-0.064	0.001
N[nonacc]	C[unsat]	1.13	1.13	1.15	1.14	1.12	1.16	70121	0.022	0.001
N[nonacc]	Cl	1.12	1.07	1.11	1.1	1.02	1.17	8791	0.01	0.004
N[nonacc]	Cl[-]	1.32	1.24	1.23	1.26	1.16	1.4	2320	0.052	0.008
N[nonacc]	F	1.19	1.17	1.17	1.18	1.11	1.25	4968	0.016	0.005
N[nonacc]	F[-]	0.79	0.52	0.64	0.65	0	1.64	38	-0.016	0.049
N[nonacc]	H[C]	1	0.89	0.96	0.95	0.88	1.01	70659	-0.001	0.001

N[nonacc]	H[polar]	0.59	0.51	0.56	0.55	0.48	0.61	48073	-0.042	0.001
N[nonacc]	I	1.27	1.26	1.25	1.26	1.14	1.38	1050	0.034	0.011
N[nonacc]	I[-]	2.01	1.88	1.96	1.95	1.71	2.21	534	0.19	0.018
N[nonacc]	N[acc]	0.96	1.03	1.07	1.02	0.93	1.1	32031	-0.008	0.001
N[nonacc]	N[nonacc]	0.7	0.84	0.89	0.81	0.67	0.92	71413	-0.02	0.001
N[nonacc]	O	1.23	1.29	1.19	1.24	1.18	1.3	62522	0.024	0.001
N[nonacc]	P	0.24	0.26	0.26	0.25	0.15	0.34	3477	-0.03	0.002
N[nonacc]	S	0.95	0.94	1.01	0.97	0.9	1.05	17366	-0.009	0.002
O	Br	0.71	0.78	0.69	0.73	0.66	0.82	6880	-0.063	0.004
O	Br[-]	0.3	0.28	0.28	0.29	0.21	0.37	824	-0.137	0.008
O	C[sat]	0.34	0.65	0.48	0.49	0.33	0.66	106469	-0.141	0.001
O	C[unsat]	0.31	0.53	0.38	0.41	0.3	0.54	112616	-0.214	0.001
O	Cl	0.59	0.63	0.62	0.61	0.57	0.65	13074	-0.096	0.002
O	Cl[-]	0.17	0.19	0.19	0.18	0.14	0.23	2266	-0.161	0.004
O	F	0.39	0.39	0.35	0.38	0.33	0.41	7633	-0.143	0.002
O	F[-]	0	0	0	0	0	0	30	-0.168	0.018
O	H[C]	1.64	1.74	1.67	1.68	1.64	1.75	115635	0.274	0.001
O	H[polar]	5.13	6.88	5.31	5.77	5.09	6.93	66903	0.529	0.002
O	I	1.22	1.28	1.23	1.24	1.14	1.36	1664	0.042	0.009
O	I[-]	0.12	0.17	0.14	0.14	0.06	0.25	417	-0.167	0.008
O	N[acc]	0.2	0.29	0.26	0.25	0.18	0.3	40493	-0.088	0.001
O	N[nonacc]	0.45	0.76	0.69	0.63	0.43	0.78	69771	-0.042	0.001
O	O	0.2	0.27	0.17	0.21	0.16	0.27	116469	-0.198	0.001
O	P	0.16	0.22	0.18	0.19	0.12	0.28	6291	-0.056	0.001
O	S	0.42	0.5	0.48	0.47	0.4	0.52	24649	-0.078	0.001
P	Br	1.03	0.93	0.99	0.98	0.63	1.38	175	0.008	0.024
P	Br[-]	4.03	3.55	3.55	3.71	2.68	5.03	98	0.334	0.046
P	C[sat]	0.54	0.83	0.71	0.69	0.49	0.88	5824	-0.05	0.003
P	C[unsat]	0.5	0.71	0.59	0.6	0.47	0.74	5785	-0.101	0.003
P	Cl	1.03	1.03	1.05	1.04	0.94	1.14	1046	-0.001	0.01
P	Cl[-]	2.94	2.51	2.5	2.65	1.75	3.86	109	0.155	0.04
P	F	0.86	0.7	0.7	0.75	0.6	0.96	833	-0.04	0.011
P	F[-]					0	0	4	0.05	0.217



P	H[C]	1.54	1.56	1.55	1.55	1.51	1.59	6642	0.144	0.004
P	H[polar]	0.54	0.5	0.57	0.54	0.41	0.66	2835	-0.041	0.004
P	I	1.54	1.37	1.43	1.45	1	1.98	94	0.077	0.039
P	I[-]	3.72	3.28	3.28	3.43	2.63	4.45	82	0.324	0.049
P	N[acc]	0.59	0.64	0.59	0.61	0.48	0.75	2070	-0.028	0.004
P	N[nonacc]	0.64	0.8	0.78	0.74	0.48	0.96	3376	-0.01	0.002
P	O	0.96	0.97	0.79	0.91	0.73	1.03	4721	-0.009	0.004
P	P	0.61	0.83	0.78	0.74	0.52	0.94	6724	-0.02	0.002
P	S	0.71	0.69	0.73	0.71	0.58	0.85	1411	-0.033	0.006
S	Br	1.14	1.17	1.06	1.12	0.93	1.31	1412	0.009	0.009
S	Br[-]	2.04	1.89	1.86	1.93	1.44	2.53	147	0.193	0.035
S	C[sat]	0.45	0.77	0.59	0.6	0.43	0.79	26468	-0.061	0.001
S	C[unsat]	0.6	0.88	0.69	0.72	0.58	0.89	28877	-0.091	0.002
S	Cl	0.86	0.88	0.93	0.89	0.79	1	3210	-0.02	0.005
S	Cl[-]	1.9	1.76	1.8	1.82	1.44	2.24	370	0.078	0.021
S	F	0.78	0.73	0.68	0.73	0.62	0.85	2605	-0.036	0.006
S	F[-]					0	0	5	0.135	0.195
S	H[C]	1.44	1.21	1.38	1.34	1.19	1.45	29665	0.121	0.002
S	H[polar]	2.57	3.27	2.77	2.87	2.47	3.41	13640	0.097	0.003
S	I	1.1	1.18	1.12	1.13	0.98	1.31	561	0.032	0.015
S	I[-]	1.22	1.2	1.19	1.21	0.84	1.64	97	0.056	0.038
S	N[acc]	0.9	1.06	1.01	0.99	0.84	1.12	11827	-0.018	0.002
S	N[nonacc]	0.41	0.6	0.62	0.54	0.36	0.67	19107	-0.019	0.001
S	O	0.83	0.93	0.7	0.82	0.67	0.95	23991	-0.033	0.002
S	P	0.26	0.37	0.31	0.31	0.15	0.51	1987	-0.023	0.002
S	S	0.94	0.99	1.06	0.99	0.91	1.09	30028	-0.029	0.001