

BDP-nitrophenyl solute

optS0

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.64e - 05	4.57e - 05	3.01e - 05	1.40e - 04
DMF	3.64e - 05	0.00e + 00	9.21e - 06	6.33e - 06	1.76e - 04
DMSO	4.57e - 05	9.21e - 06	0.00e + 00	1.55e - 05	1.86e - 04
Methanol	3.01e - 05	6.33e - 06	1.55e - 05	0.00e + 00	1.70e - 04
THF	1.40e - 04	1.76e - 04	1.86e - 04	1.70e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.93e - 03	9.94e - 03	6.54e - 03	3.01e - 02
DMF	7.93e - 03	0.00e + 00	2.02e - 03	1.40e - 03	3.81e - 02
DMSO	9.94e - 03	2.02e - 03	0.00e + 00	3.41e - 03	4.01e - 02
Methanol	6.54e - 03	1.40e - 03	3.41e - 03	0.00e + 00	3.67e - 02
THF	3.01e - 02	3.81e - 02	4.01e - 02	3.67e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.83e - 03	1.10e - 02	7.31e - 03	3.36e - 02
DMF	8.83e - 03	0.00e + 00	2.22e - 03	1.54e - 03	4.24e - 02
DMSO	1.10e - 02	2.22e - 03	0.00e + 00	3.74e - 03	4.46e - 02
Methanol	7.31e - 03	1.54e - 03	3.74e - 03	0.00e + 00	4.09e - 02
THF	3.36e - 02	4.24e - 02	4.46e - 02	4.09e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	2.88e + 00	3.99e + 00	2.36e + 00	7.89e + 00
DMF	2.88e + 00	0.00e + 00	1.37e + 00	5.90e - 01	9.75e + 00
DMSO	3.99e + 00	1.37e + 00	0.00e + 00	1.90e + 00	1.04e + 01
Methanol	2.36e + 00	5.90e - 01	1.90e + 00	0.00e + 00	9.42e + 00
THF	7.89e + 00	9.75e + 00	1.04e + 01	9.42e + 00	0.00e + 00

optS1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.97e - 05	8.74e - 05	5.76e - 05	2.65e - 04
DMF	6.97e - 05	0.00e + 00	1.77e - 05	1.21e - 05	3.35e - 04
DMSO	8.74e - 05	1.77e - 05	0.00e + 00	2.98e - 05	3.53e - 04
Methanol	5.76e - 05	1.21e - 05	2.98e - 05	0.00e + 00	3.23e - 04
THF	2.65e - 04	3.35e - 04	3.53e - 04	3.23e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	9.34e - 03	1.17e - 02	7.70e - 03	3.59e - 02
DMF	9.34e - 03	0.00e + 00	2.33e - 03	1.65e - 03	4.53e - 02
DMSO	1.17e - 02	2.33e - 03	0.00e + 00	3.97e - 03	4.76e - 02
Methanol	7.70e - 03	1.65e - 03	3.97e - 03	0.00e + 00	4.36e - 02
THF	3.59e - 02	4.53e - 02	4.76e - 02	4.36e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.08e - 02	1.35e - 02	8.93e - 03	4.24e - 02
DMF	1.08e - 02	0.00e + 00	2.69e - 03	1.89e - 03	5.31e - 02
DMSO	1.35e - 02	2.69e - 03	0.00e + 00	4.56e - 03	5.58e - 02
Methanol	8.93e - 03	1.89e - 03	4.56e - 03	0.00e + 00	5.13e - 02
THF	4.24e - 02	5.31e - 02	5.58e - 02	5.13e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.34e + 00	1.77e + 00	1.14e + 00	4.87e + 00
DMF	1.34e + 00	0.00e + 00	4.77e - 01	2.31e - 01	6.02e + 00
DMSO	1.77e + 00	4.77e - 01	0.00e + 00	6.52e - 01	6.39e + 00
Methanol	1.14e + 00	2.31e - 01	6.52e - 01	0.00e + 00	5.85e + 00
THF	4.87e + 00	6.02e + 00	6.39e + 00	5.85e + 00	0.00e + 00

optR1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.79e - 05	7.26e - 05	4.78e - 05	2.20e - 04
DMF	5.79e - 05	0.00e + 00	1.47e - 05	1.01e - 05	2.78e - 04
DMSO	7.26e - 05	1.47e - 05	0.00e + 00	2.48e - 05	2.93e - 04
Methanol	4.78e - 05	1.01e - 05	2.48e - 05	0.00e + 00	2.68e - 04
THF	2.20e - 04	2.78e - 04	2.93e - 04	2.68e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.05e - 02	1.31e - 02	8.66e - 03	3.97e - 02
DMF	1.05e - 02	0.00e + 00	2.63e - 03	1.82e - 03	5.01e - 02
DMSO	1.31e - 02	2.63e - 03	0.00e + 00	4.45e - 03	5.27e - 02
Methanol	8.66e - 03	1.82e - 03	4.45e - 03	0.00e + 00	4.83e - 02
THF	3.97e - 02	5.01e - 02	5.27e - 02	4.83e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.35e - 02	1.68e - 02	1.12e - 02	5.19e - 02
DMF	1.35e - 02	0.00e + 00	3.38e - 03	2.31e - 03	6.54e - 02
DMSO	1.68e - 02	3.38e - 03	0.00e + 00	5.68e - 03	6.88e - 02
Methanol	1.12e - 02	2.31e - 03	5.68e - 03	0.00e + 00	6.31e - 02
THF	5.19e - 02	6.54e - 02	6.88e - 02	6.31e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.46e + 00	1.82e + 00	1.20e + 00	4.51e + 00
DMF	1.46e + 00	0.00e + 00	3.87e - 01	2.72e - 01	5.67e + 00
DMSO	1.82e + 00	3.87e - 01	0.00e + 00	6.54e - 01	5.96e + 00
Methanol	1.20e + 00	2.72e - 01	6.54e - 01	0.00e + 00	5.47e + 00
THF	4.51e + 00	5.67e + 00	5.96e + 00	5.47e + 00	0.00e + 00

BDP-phenyl solute

optS0

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.52e - 05	4.40e - 05	2.91e - 05	1.35e - 04
DMF	3.52e - 05	0.00e + 00	8.88e - 06	6.11e - 06	1.70e - 04
DMSO	4.40e - 05	8.88e - 06	0.00e + 00	1.50e - 05	1.79e - 04
Methanol	2.91e - 05	6.11e - 06	1.50e - 05	0.00e + 00	1.64e - 04
THF	1.35e - 04	1.70e - 04	1.79e - 04	1.64e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.97e - 03	9.97e - 03	6.55e - 03	3.01e - 02
DMF	7.97e - 03	0.00e + 00	2.01e - 03	1.42e - 03	3.81e - 02
DMSO	9.97e - 03	2.01e - 03	0.00e + 00	3.43e - 03	4.01e - 02
Methanol	6.55e - 03	1.42e - 03	3.43e - 03	0.00e + 00	3.67e - 02
THF	3.01e - 02	3.81e - 02	4.01e - 02	3.67e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.39e - 03	9.29e - 03	6.10e - 03	2.80e - 02
DMF	7.39e - 03	0.00e + 00	1.92e - 03	1.31e - 03	3.54e - 02
DMSO	9.29e - 03	1.92e - 03	0.00e + 00	3.21e - 03	3.73e - 02
Methanol	6.10e - 03	1.31e - 03	3.21e - 03	0.00e + 00	3.41e - 02
THF	2.80e - 02	3.54e - 02	3.73e - 02	3.41e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.39e + 00	1.68e + 00	1.19e + 00	5.23e + 00
DMF	1.39e + 00	0.00e + 00	3.31e - 01	2.34e - 01	6.28e + 00
DMSO	1.68e + 00	3.31e - 01	0.00e + 00	5.58e - 01	6.50e + 00
Methanol	1.19e + 00	2.34e - 01	5.58e - 01	0.00e + 00	6.13e + 00
THF	5.23e + 00	6.28e + 00	6.50e + 00	6.13e + 00	0.00e + 00

optS1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.64e - 05	9.57e - 05	6.31e - 05	2.91e - 04
DMF	7.64e - 05	0.00e + 00	1.93e - 05	1.33e - 05	3.67e - 04
DMSO	9.57e - 05	1.93e - 05	0.00e + 00	3.26e - 05	3.86e - 04
Methanol	6.31e - 05	1.33e - 05	3.26e - 05	0.00e + 00	3.54e - 04
THF	2.91e - 04	3.67e - 04	3.86e - 04	3.54e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.87e - 03	1.11e - 02	7.29e - 03	3.43e - 02
DMF	8.87e - 03	0.00e + 00	2.26e - 03	1.58e - 03	4.32e - 02
DMSO	1.11e - 02	2.26e - 03	0.00e + 00	3.83e - 03	4.54e - 02
Methanol	7.29e - 03	1.58e - 03	3.83e - 03	0.00e + 00	4.16e - 02
THF	3.43e - 02	4.32e - 02	4.54e - 02	4.16e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.84e - 03	1.11e - 02	7.28e - 03	3.46e - 02
DMF	8.84e - 03	0.00e + 00	2.23e - 03	1.57e - 03	4.34e - 02
DMSO	1.11e - 02	2.23e - 03	0.00e + 00	3.79e - 03	4.56e - 02
Methanol	7.28e - 03	1.57e - 03	3.79e - 03	0.00e + 00	4.19e - 02
THF	3.46e - 02	4.34e - 02	4.56e - 02	4.19e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.95e + 00	9.23e + 00	8.57e + 00	1.19e + 01
DMF	8.95e + 00	0.00e + 00	1.55e + 00	1.79e + 00	1.52e + 01
DMSO	9.23e + 00	1.55e + 00	0.00e + 00	3.08e + 00	1.59e + 01
Methanol	8.57e + 00	1.79e + 00	3.08e + 00	0.00e + 00	1.46e + 01
THF	1.19e + 01	1.52e + 01	1.59e + 01	1.46e + 01	0.00e + 00

optR1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.07e - 05	7.61e - 05	5.01e - 05	2.30e - 04
DMF	6.07e - 05	0.00e + 00	1.54e - 05	1.06e - 05	2.91e - 04
DMSO	7.61e - 05	1.54e - 05	0.00e + 00	2.59e - 05	3.06e - 04
Methanol	5.01e - 05	1.06e - 05	2.59e - 05	0.00e + 00	2.80e - 04
THF	2.30e - 04	2.91e - 04	3.06e - 04	2.80e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.18e - 02	1.48e - 02	9.70e - 03	4.46e - 02
DMF	1.18e - 02	0.00e + 00	2.99e - 03	2.10e - 03	5.63e - 02
DMSO	1.48e - 02	2.99e - 03	0.00e + 00	5.08e - 03	5.93e - 02
Methanol	9.70e - 03	2.10e - 03	5.08e - 03	0.00e + 00	5.43e - 02
THF	4.46e - 02	5.63e - 02	5.93e - 02	5.43e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.33e - 02	1.67e - 02	1.10e - 02	5.13e - 02
DMF	1.33e - 02	0.00e + 00	3.38e - 03	2.27e - 03	6.45e - 02
DMSO	1.67e - 02	3.38e - 03	0.00e + 00	5.64e - 03	6.79e - 02
Methanol	1.10e - 02	2.27e - 03	5.64e - 03	0.00e + 00	6.23e - 02
THF	5.13e - 02	6.45e - 02	6.79e - 02	6.23e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.16e + 00	1.45e + 00	9.55e - 01	4.09e + 00
DMF	1.16e + 00	0.00e + 00	2.98e - 01	2.12e - 01	5.11e + 00
DMSO	1.45e + 00	2.98e - 01	0.00e + 00	5.07e - 01	5.37e + 00
Methanol	9.55e - 01	2.12e - 01	5.07e - 01	0.00e + 00	4.93e + 00
THF	4.09e + 00	5.11e + 00	5.37e + 00	4.93e + 00	0.00e + 00

BDP-PP-phenyl solute

optS0

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.05e - 05	3.82e - 05	2.52e - 05	1.17e - 04
DMF	3.05e - 05	0.00e + 00	7.70e - 06	5.30e - 06	1.48e - 04
DMSO	3.82e - 05	7.70e - 06	0.00e + 00	1.30e - 05	1.56e - 04
Methanol	2.52e - 05	5.30e - 06	1.30e - 05	0.00e + 00	1.43e - 04
THF	1.17e - 04	1.48e - 04	1.56e - 04	1.43e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.75e - 03	7.20e - 03	4.73e - 03	2.17e - 02
DMF	5.75e - 03	0.00e + 00	1.46e - 03	1.04e - 03	2.75e - 02
DMSO	7.20e - 03	1.46e - 03	0.00e + 00	2.48e - 03	2.89e - 02
Methanol	4.73e - 03	1.04e - 03	2.48e - 03	0.00e + 00	2.65e - 02
THF	2.17e - 02	2.75e - 02	2.89e - 02	2.65e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.29e - 03	6.62e - 03	4.35e - 03	2.01e - 02
DMF	5.29e - 03	0.00e + 00	1.34e - 03	9.64e - 04	2.54e - 02
DMSO	6.62e - 03	1.34e - 03	0.00e + 00	2.28e - 03	2.67e - 02
Methanol	4.35e - 03	9.64e - 04	2.28e - 03	0.00e + 00	2.45e - 02
THF	2.01e - 02	2.54e - 02	2.67e - 02	2.45e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.54e - 01	1.06e + 00	7.45e - 01	2.74e + 00
DMF	8.54e - 01	0.00e + 00	2.31e - 01	1.25e - 01	3.45e + 00
DMSO	1.06e + 00	2.31e - 01	0.00e + 00	3.43e - 01	3.62e + 00
Methanol	7.45e - 01	1.25e - 01	3.43e - 01	0.00e + 00	3.36e + 00
THF	2.74e + 00	3.45e + 00	3.62e + 00	3.36e + 00	0.00e + 00

optS1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.80e - 05	6.02e - 05	3.97e - 05	1.83e - 04
DMF	4.80e - 05	0.00e + 00	1.21e - 05	8.34e - 06	2.31e - 04
DMSO	6.02e - 05	1.21e - 05	0.00e + 00	2.05e - 05	2.44e - 04
Methanol	3.97e - 05	8.34e - 06	2.05e - 05	0.00e + 00	2.23e - 04
THF	1.83e - 04	2.31e - 04	2.44e - 04	2.23e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.10e - 03	7.65e - 03	5.08e - 03	2.32e - 02
DMF	6.10e - 03	0.00e + 00	1.56e - 03	1.03e - 03	2.93e - 02
DMSO	7.65e - 03	1.56e - 03	0.00e + 00	2.58e - 03	3.09e - 02
Methanol	5.08e - 03	1.03e - 03	2.58e - 03	0.00e + 00	2.83e - 02
THF	2.32e - 02	2.93e - 02	3.09e - 02	2.83e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.55e - 03	8.25e - 03	5.42e - 03	2.48e - 02
DMF	6.55e - 03	0.00e + 00	1.72e - 03	1.14e - 03	3.14e - 02
DMSO	8.25e - 03	1.72e - 03	0.00e + 00	2.84e - 03	3.31e - 02
Methanol	5.42e - 03	1.14e - 03	2.84e - 03	0.00e + 00	3.02e - 02
THF	2.48e - 02	3.14e - 02	3.31e - 02	3.02e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.63e + 00	2.77e + 00	1.54e + 00	6.27e + 00
DMF	1.63e + 00	0.00e + 00	1.59e + 00	1.84e - 01	7.31e + 00
DMSO	2.77e + 00	1.59e + 00	0.00e + 00	1.62e + 00	8.10e + 00
Methanol	1.54e + 00	1.84e - 01	1.62e + 00	0.00e + 00	7.23e + 00
THF	6.27e + 00	7.31e + 00	8.10e + 00	7.23e + 00	0.00e + 00

optR1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.28e - 05	5.36e - 05	3.53e - 05	1.64e - 04
DMF	4.28e - 05	0.00e + 00	1.08e - 05	7.43e - 06	2.06e - 04
DMSO	5.36e - 05	1.08e - 05	0.00e + 00	1.83e - 05	2.17e - 04
Methanol	3.53e - 05	7.43e - 06	1.83e - 05	0.00e + 00	1.99e - 04
THF	1.64e - 04	2.06e - 04	2.17e - 04	1.99e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	8.00e - 03	9.99e - 03	6.57e - 03	3.00e - 02
DMF	8.00e - 03	0.00e + 00	1.99e - 03	1.44e - 03	3.80e - 02
DMSO	9.99e - 03	1.99e - 03	0.00e + 00	3.42e - 03	3.99e - 02
Methanol	6.57e - 03	1.44e - 03	3.42e - 03	0.00e + 00	3.65e - 02
THF	3.00e - 02	3.80e - 02	3.99e - 02	3.66e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.89e - 03	9.88e - 03	6.53e - 03	3.01e - 02
DMF	7.89e - 03	0.00e + 00	2.00e - 03	1.38e - 03	3.80e - 02
DMSO	9.88e - 03	2.00e - 03	0.00e + 00	3.35e - 03	4.00e - 02
Methanol	6.53e - 03	1.38e - 03	3.35e - 03	0.00e + 00	3.66e - 02
THF	3.01e - 02	3.80e - 02	4.00e - 02	3.66e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.71e + 01	1.47e + 01	1.49e + 01	9.55e + 00
DMF	1.71e + 01	0.00e + 00	3.42e + 00	2.27e + 00	1.20e + 01
DMSO	1.47e + 01	3.42e + 00	0.00e + 00	4.95e + 00	1.26e + 01
Methanol	1.49e + 01	2.27e + 00	4.95e + 00	0.00e + 00	1.16e + 01
THF	9.55e + 00	1.20e + 01	1.26e + 01	1.16e + 01	0.00e + 00

BDP-PP-phenyl_OMes_backward solute

optS0

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.17e - 05	3.96e - 05	2.62e - 05	1.22e - 04
DMF	3.17e - 05	0.00e + 00	7.99e - 06	5.49e - 06	1.53e - 04
DMSO	3.96e - 05	7.99e - 06	0.00e + 00	1.35e - 05	1.61e - 04
Methanol	2.62e - 05	5.49e - 06	1.35e - 05	0.00e + 00	1.48e - 04
THF	1.22e - 04	1.53e - 04	1.61e - 04	1.48e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.78e - 03	7.25e - 03	4.77e - 03	2.21e - 02
DMF	5.78e - 03	0.00e + 00	1.48e - 03	1.03e - 03	2.79e - 02
DMSO	7.25e - 03	1.48e - 03	0.00e + 00	2.49e - 03	2.93e - 02
Methanol	4.77e - 03	1.03e - 03	2.49e - 03	0.00e + 00	2.69e - 02
THF	2.21e - 02	2.79e - 02	2.93e - 02	2.69e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.38e - 03	6.73e - 03	4.47e - 03	2.07e - 02
DMF	5.38e - 03	0.00e + 00	1.37e - 03	9.29e - 04	2.61e - 02
DMSO	6.73e - 03	1.37e - 03	0.00e + 00	2.28e - 03	2.74e - 02
Methanol	4.47e - 03	9.29e - 04	2.28e - 03	0.00e + 00	2.52e - 02
THF	2.07e - 02	2.61e - 02	2.74e - 02	2.52e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.26e + 00	1.57e + 00	1.08e + 00	4.17e + 00
DMF	1.26e + 00	0.00e + 00	3.49e - 01	2.06e - 01	5.21e + 00
DMSO	1.57e + 00	3.49e - 01	0.00e + 00	5.31e - 01	5.45e + 00
Methanol	1.08e + 00	2.06e - 01	5.31e - 01	0.00e + 00	5.06e + 00
THF	4.17e + 00	5.21e + 00	5.45e + 00	5.06e + 00	0.00e + 00

optS1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.63e - 05	5.80e - 05	3.82e - 05	1.77e - 04
DMF	4.63e - 05	0.00e + 00	1.17e - 05	8.04e - 06	2.23e - 04
DMSO	5.80e - 05	1.17e - 05	0.00e + 00	1.97e - 05	2.35e - 04
Methanol	3.82e - 05	8.04e - 06	1.97e - 05	0.00e + 00	2.15e - 04
THF	1.77e - 04	2.23e - 04	2.35e - 04	2.15e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.00e - 03	7.48e - 03	4.94e - 03	2.29e - 02
DMF	6.00e - 03	0.00e + 00	1.50e - 03	1.07e - 03	2.89e - 02
DMSO	7.48e - 03	1.50e - 03	0.00e + 00	2.55e - 03	3.04e - 02
Methanol	4.94e - 03	1.07e - 03	2.55e - 03	0.00e + 00	2.79e - 02
THF	2.29e - 02	2.89e - 02	3.04e - 02	2.79e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.30e - 03	7.85e - 03	5.17e - 03	2.41e - 02
DMF	6.30e - 03	0.00e + 00	1.56e - 03	1.16e - 03	3.04e - 02
DMSO	7.85e - 03	1.56e - 03	0.00e + 00	2.70e - 03	3.19e - 02
Methanol	5.17e - 03	1.16e - 03	2.70e - 03	0.00e + 00	2.93e - 02
THF	2.41e - 02	3.04e - 02	3.19e - 02	2.93e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.76e + 00	4.67e + 00	3.57e + 00	1.52e + 01
DMF	3.76e + 00	0.00e + 00	1.44e + 00	8.56e - 01	1.86e + 01
DMSO	4.67e + 00	1.44e + 00	0.00e + 00	1.74e + 00	1.76e + 01
Methanol	3.57e + 00	8.56e - 01	1.74e + 00	0.00e + 00	1.84e + 01
THF	1.52e + 01	1.86e + 01	1.76e + 01	1.84e + 01	0.00e + 00

optR1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.26e - 05	5.34e - 05	3.52e - 05	1.63e - 04
DMF	4.26e - 05	0.00e + 00	1.08e - 05	7.40e - 06	2.06e - 04
DMSO	5.34e - 05	1.08e - 05	0.00e + 00	1.82e - 05	2.16e - 04
Methanol	3.52e - 05	7.40e - 06	1.82e - 05	0.00e + 00	1.98e - 04
THF	1.63e - 04	2.06e - 04	2.16e - 04	1.98e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.79e - 03	9.78e - 03	6.44e - 03	2.96e - 02
DMF	7.79e - 03	0.00e + 00	2.00e - 03	1.35e - 03	3.74e - 02
DMSO	9.78e - 03	2.00e - 03	0.00e + 00	3.35e - 03	3.94e - 02
Methanol	6.44e - 03	1.35e - 03	3.35e - 03	0.00e + 00	3.60e - 02
THF	2.96e - 02	3.74e - 02	3.94e - 02	3.60e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.88e - 03	9.90e - 03	6.55e - 03	3.02e - 02
DMF	7.88e - 03	0.00e + 00	2.03e - 03	1.35e - 03	3.81e - 02
DMSO	9.90e - 03	2.03e - 03	0.00e + 00	3.36e - 03	4.01e - 02
Methanol	6.55e - 03	1.35e - 03	3.36e - 03	0.00e + 00	3.68e - 02
THF	3.02e - 02	3.81e - 02	4.01e - 02	3.68e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	2.81e + 00	3.37e + 00	2.38e + 00	1.23e + 01
DMF	2.81e + 00	0.00e + 00	7.00e - 01	5.53e - 01	1.26e + 01
DMSO	3.37e + 00	7.00e - 01	0.00e + 00	1.17e + 00	1.27e + 01
Methanol	2.38e + 00	5.53e - 01	1.17e + 00	0.00e + 00	1.25e + 01
THF	1.23e + 01	1.26e + 01	1.27e + 01	1.25e + 01	0.00e + 00

BDP-PP-phenyl_OMes_forward solute

optS0

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	3.25e - 05	4.07e - 05	2.68e - 05	1.25e - 04
DMF	3.25e - 05	0.00e + 00	8.21e - 06	5.64e - 06	1.57e - 04
DMSO	4.07e - 05	8.21e - 06	0.00e + 00	1.38e - 05	1.65e - 04
Methanol	2.68e - 05	5.64e - 06	1.38e - 05	0.00e + 00	1.51e - 04
THF	1.25e - 04	1.57e - 04	1.65e - 04	1.51e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.14e - 03	7.70e - 03	5.06e - 03	2.33e - 02
DMF	6.14e - 03	0.00e + 00	1.57e - 03	1.09e - 03	2.95e - 02
DMSO	7.70e - 03	1.57e - 03	0.00e + 00	2.64e - 03	3.10e - 02
Methanol	5.06e - 03	1.09e - 03	2.64e - 03	0.00e + 00	2.84e - 02
THF	2.33e - 02	2.95e - 02	3.10e - 02	2.84e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	5.65e - 03	7.09e - 03	4.69e - 03	2.17e - 02
DMF	5.65e - 03	0.00e + 00	1.45e - 03	9.91e - 04	2.73e - 02
DMSO	7.09e - 03	1.45e - 03	0.00e + 00	2.41e - 03	2.88e - 02
Methanol	4.69e - 03	9.91e - 04	2.41e - 03	0.00e + 00	2.64e - 02
THF	2.17e - 02	2.73e - 02	2.88e - 02	2.64e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.96e + 00	2.44e + 00	1.62e + 00	5.32e + 00
DMF	1.96e + 00	0.00e + 00	5.76e - 01	4.14e - 01	6.58e + 00
DMSO	2.44e + 00	5.76e - 01	0.00e + 00	9.42e - 01	6.90e + 00
Methanol	1.62e + 00	4.14e - 01	9.42e - 01	0.00e + 00	6.36e + 00
THF	5.32e + 00	6.58e + 00	6.90e + 00	6.36e + 00	0.00e + 00

optS1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.66e - 05	5.84e - 05	3.85e - 05	1.78e - 04
DMF	4.66e - 05	0.00e + 00	1.18e - 05	8.10e - 06	2.25e - 04
DMSO	5.84e - 05	1.18e - 05	0.00e + 00	1.99e - 05	2.36e - 04
Methanol	3.85e - 05	8.10e - 06	1.99e - 05	0.00e + 00	2.17e - 04
THF	1.78e - 04	2.25e - 04	2.36e - 04	2.17e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.20e - 03	7.78e - 03	5.12e - 03	2.37e - 02
DMF	6.20e - 03	0.00e + 00	1.59e - 03	1.10e - 03	2.99e - 02
DMSO	7.78e - 03	1.59e - 03	0.00e + 00	2.67e - 03	3.15e - 02
Methanol	5.12e - 03	1.10e - 03	2.67e - 03	0.00e + 00	2.89e - 02
THF	2.37e - 02	2.99e - 02	3.15e - 02	2.89e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	6.37e - 03	7.97e - 03	5.26e - 03	2.45e - 02
DMF	6.37e - 03	0.00e + 00	1.61e - 03	1.12e - 03	3.09e - 02
DMSO	7.97e - 03	1.61e - 03	0.00e + 00	2.71e - 03	3.25e - 02
Methanol	5.26e - 03	1.12e - 03	2.71e - 03	0.00e + 00	2.98e - 02
THF	2.45e - 02	3.09e - 02	3.25e - 02	2.98e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	2.95e + 00	3.82e + 00	2.78e + 00	9.99e + 00
DMF	2.95e + 00	0.00e + 00	1.18e + 00	3.83e - 01	1.15e + 01
DMSO	3.82e + 00	1.18e + 00	0.00e + 00	1.36e + 00	1.20e + 01
Methanol	2.78e + 00	3.83e - 01	1.36e + 00	0.00e + 00	1.14e + 01
THF	9.99e + 00	1.15e + 01	1.20e + 01	1.14e + 01	0.00e + 00

optR1

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	4.28e - 05	5.36e - 05	3.54e - 05	1.64e - 04
DMF	4.28e - 05	0.00e + 00	1.08e - 05	7.44e - 06	2.06e - 04
DMSO	5.36e - 05	1.08e - 05	0.00e + 00	1.83e - 05	2.17e - 04
Methanol	3.54e - 05	7.44e - 06	1.83e - 05	0.00e + 00	1.99e - 04
THF	1.64e - 04	2.06e - 04	2.17e - 04	1.99e - 04	0.00e + 00

RMS R

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.89e - 03	9.85e - 03	6.49e - 03	2.97e - 02
DMF	7.89e - 03	0.00e + 00	1.97e - 03	1.41e - 03	3.76e - 02
DMSO	9.85e - 03	1.97e - 03	0.00e + 00	3.37e - 03	3.96e - 02
Methanol	6.49e - 03	1.41e - 03	3.37e - 03	0.00e + 00	3.62e - 02
THF	2.97e - 02	3.76e - 02	3.96e - 02	3.62e - 02	0.00e + 00

RMS A

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	7.81e - 03	9.80e - 03	6.45e - 03	2.98e - 02
DMF	7.81e - 03	0.00e + 00	2.00e - 03	1.38e - 03	3.76e - 02
DMSO	9.80e - 03	2.00e - 03	0.00e + 00	3.36e - 03	3.96e - 02
Methanol	6.45e - 03	1.38e - 03	3.36e - 03	0.00e + 00	3.62e - 02
THF	2.98e - 02	3.76e - 02	3.96e - 02	3.62e - 02	0.00e + 00

RMS D

	Acetone	DMF	DMSO	Methanol	THF
Acetone	0.00e + 00	1.82e + 00	2.23e + 00	1.54e + 00	7.50e + 00
DMF	1.82e + 00	0.00e + 00	4.72e - 01	3.42e - 01	8.48e + 00
DMSO	2.23e + 00	4.72e - 01	0.00e + 00	7.76e - 01	8.71e + 00
Methanol	1.54e + 00	3.42e - 01	7.76e - 01	0.00e + 00	8.32e + 00
THF	7.50e + 00	8.48e + 00	8.71e + 00	8.32e + 00	0.00e + 00