

# Differences in Acetone

optS0

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	5.32e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	5.32e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.04e - 01	1.45e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-Ph	1.04e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.45e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	2.74e - 02	2.84e - 02
OMe-out	1.45e + 01	1.44e + 01	2.74e - 02	0.00e + 00	3.09e - 03
OMe-in	1.45e + 01	1.44e + 01	2.84e - 02	3.09e - 03	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.11e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.11e + 01	0.00e + 00	5.43e - 02	5.12e - 02
OMe-out	1.12e + 01	1.11e + 01	5.43e - 02	0.00e + 00	8.61e - 03
OMe-in	1.12e + 01	1.11e + 01	5.12e - 02	8.61e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	2.69e + 01	9.36e + 01	9.18e + 01	9.21e + 01
BDP-Ph	2.69e + 01	0.00e + 00	9.23e + 01	9.09e + 01	9.11e + 01
BDP-PPPh	9.36e + 01	9.23e + 01	0.00e + 00	3.84e + 01	3.21e + 01
OMe-out	9.18e + 01	9.09e + 01	3.84e + 01	0.00e + 00	2.22e + 01
OMe-in	9.21e + 01	9.11e + 01	3.21e + 01	2.22e + 01	0.00e + 00

optS1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	4.94e - 07
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	4.94e - 07	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.26e - 01	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-Ph	1.26e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.44e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	1.72e - 01	1.79e - 01
OMe-out	1.44e + 01	1.44e + 01	1.72e - 01	0.00e + 00	1.19e - 02
OMe-in	1.44e + 01	1.44e + 01	1.79e - 01	1.19e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.07e - 01	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-Ph	1.07e - 01	0.00e + 00	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-PPPh	1.10e + 01	1.10e + 01	0.00e + 00	1.10e - 01	1.10e - 01
OMe-out	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e - 01	0.00e + 00	7.57e - 03
OMe-in	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e - 01	7.57e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.55e + 01	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-Ph	1.55e + 01	0.00e + 00	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-PPPh	1.01e + 02	1.01e + 02	0.00e + 00	8.52e + 00	8.73e + 00
OMe-out	1.01e + 02	1.01e + 02	8.52e + 00	0.00e + 00	2.76e + 00
OMe-in	1.01e + 02	1.01e + 02	8.73e + 00	2.76e + 00	0.00e + 00

optR1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	3.69e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	3.69e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.20e - 01	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-Ph	1.20e - 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-PPPh	1.43e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	1.72e - 01	1.81e - 01
OMe-out	1.43e + 01	1.43e + 01	1.72e - 01	0.00e + 00	1.52e - 02
OMe-in	1.43e + 01	1.43e + 01	1.81e - 01	1.52e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.01e - 01	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-Ph	1.01e - 01	0.00e + 00	1.12e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.12e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.64e - 01
OMe-out	1.11e + 01	1.11e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	1.93e - 02
OMe-in	1.11e + 01	1.11e + 01	1.64e - 01	1.93e - 02	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.28e + 01	1.07e + 02	1.08e + 02	1.06e + 02
BDP-Ph	1.28e + 01	0.00e + 00	1.07e + 02	1.08e + 02	1.06e + 02
BDP-PPPh	1.07e + 02	1.07e + 02	0.00e + 00	3.32e + 01	3.07e + 01
OMe-out	1.08e + 02	1.08e + 02	3.32e + 01	0.00e + 00	1.05e + 01
OMe-in	1.06e + 02	1.06e + 02	3.07e + 01	1.05e + 01	0.00e + 00

# Differences in DiMethylFormamide

optS0

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	4.50e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	4.50e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.45e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.45e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	2.74e - 02	2.85e - 02
OMe-out	1.45e + 01	1.44e + 01	2.74e - 02	0.00e + 00	3.59e - 03
OMe-in	1.45e + 01	1.44e + 01	2.85e - 02	3.59e - 03	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.11e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.11e + 01	0.00e + 00	5.39e - 02	5.05e - 02
OMe-out	1.12e + 01	1.11e + 01	5.39e - 02	0.00e + 00	9.37e - 03
OMe-in	1.12e + 01	1.11e + 01	5.05e - 02	9.37e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	2.57e + 01	9.37e + 01	9.19e + 01	9.22e + 01
BDP-Ph	2.57e + 01	0.00e + 00	9.24e + 01	9.10e + 01	9.12e + 01
BDP-PPPh	9.37e + 01	9.24e + 01	0.00e + 00	3.76e + 01	3.15e + 01
OMe-out	9.19e + 01	9.10e + 01	3.76e + 01	0.00e + 00	2.26e + 01
OMe-in	9.22e + 01	9.12e + 01	3.15e + 01	2.26e + 01	0.00e + 00

optS1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	8.35e - 07
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	8.35e - 07	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.25e - 01	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-Ph	1.25e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.44e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.80e - 01
OMe-out	1.44e + 01	1.44e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.18e - 02
OMe-in	1.44e + 01	1.44e + 01	1.80e - 01	1.18e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.07e - 01	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-Ph	1.07e - 01	0.00e + 00	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-PPPh	1.10e + 01	1.10e + 01	0.00e + 00	1.08e - 01	1.09e - 01
OMe-out	1.10e + 01	1.10e + 01	1.08e - 01	0.00e + 00	7.76e - 03
OMe-in	1.10e + 01	1.10e + 01	1.09e - 01	7.76e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.56e + 01	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-Ph	1.56e + 01	0.00e + 00	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-PPPh	1.01e + 02	1.01e + 02	0.00e + 00	8.36e + 00	8.56e + 00
OMe-out	1.01e + 02	1.01e + 02	8.36e + 00	0.00e + 00	2.84e + 00
OMe-in	1.01e + 02	1.01e + 02	8.56e + 00	2.84e + 00	0.00e + 00

optR1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	3.51e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	3.51e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.20e - 01	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-Ph	1.20e - 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-PPPh	1.43e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.82e - 01
OMe-out	1.43e + 01	1.43e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.54e - 02
OMe-in	1.43e + 01	1.43e + 01	1.82e - 01	1.54e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.00e - 01	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-Ph	1.00e - 01	0.00e + 00	1.12e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.12e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.64e - 01
OMe-out	1.11e + 01	1.11e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	2.00e - 02
OMe-in	1.11e + 01	1.11e + 01	1.64e - 01	2.00e - 02	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.26e + 01	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-Ph	1.26e + 01	0.00e + 00	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-PPPh	1.07e + 02	1.07e + 02	0.00e + 00	2.93e + 01	2.84e + 01
OMe-out	1.08e + 02	1.08e + 02	2.93e + 01	0.00e + 00	9.94e + 00
OMe-in	1.08e + 02	1.08e + 02	2.84e + 01	9.94e + 00	0.00e + 00

# Differences in DiMethylSulfoxide

optS0

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	4.29e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	4.29e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.45e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.45e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	2.73e - 02	2.85e - 02
OMe-out	1.45e + 01	1.44e + 01	2.73e - 02	0.00e + 00	3.65e - 03
OMe-in	1.45e + 01	1.44e + 01	2.85e - 02	3.65e - 03	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.11e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.11e + 01	0.00e + 00	5.39e - 02	5.04e - 02
OMe-out	1.12e + 01	1.11e + 01	5.39e - 02	0.00e + 00	9.55e - 03
OMe-in	1.12e + 01	1.11e + 01	5.04e - 02	9.55e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	2.55e + 01	9.37e + 01	9.19e + 01	9.22e + 01
BDP-Ph	2.55e + 01	0.00e + 00	9.24e + 01	9.10e + 01	9.12e + 01
BDP-PPPh	9.37e + 01	9.24e + 01	0.00e + 00	3.74e + 01	3.13e + 01
OMe-out	9.19e + 01	9.10e + 01	3.74e + 01	0.00e + 00	2.26e + 01
OMe-in	9.22e + 01	9.12e + 01	3.13e + 01	2.26e + 01	0.00e + 00

optS1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	9.23e - 07
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	9.23e - 07	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.24e - 01	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-Ph	1.24e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.44e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.80e - 01
OMe-out	1.44e + 01	1.44e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.19e - 02
OMe-in	1.44e + 01	1.44e + 01	1.80e - 01	1.19e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.06e - 01	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-Ph	1.06e - 01	0.00e + 00	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-PPPh	1.10e + 01	1.10e + 01	0.00e + 00	1.08e - 01	1.08e - 01
OMe-out	1.10e + 01	1.10e + 01	1.08e - 01	0.00e + 00	7.88e - 03
OMe-in	1.10e + 01	1.10e + 01	1.08e - 01	7.88e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.56e + 01	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-Ph	1.56e + 01	0.00e + 00	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-PPPh	1.01e + 02	1.01e + 02	0.00e + 00	8.32e + 00	8.51e + 00
OMe-out	1.01e + 02	1.01e + 02	8.32e + 00	0.00e + 00	2.86e + 00
OMe-in	1.01e + 02	1.01e + 02	8.51e + 00	2.86e + 00	0.00e + 00

optR1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	3.46e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	3.46e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.20e - 01	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-Ph	1.20e - 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-PPPh	1.43e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.82e - 01
OMe-out	1.43e + 01	1.43e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.55e - 02
OMe-in	1.43e + 01	1.43e + 01	1.82e - 01	1.55e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	9.99e - 02	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-Ph	9.99e - 02	0.00e + 00	1.12e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.12e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.64e - 01
OMe-out	1.11e + 01	1.11e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	2.02e - 02
OMe-in	1.11e + 01	1.11e + 01	1.64e - 01	2.02e - 02	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.26e + 01	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-Ph	1.26e + 01	0.00e + 00	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-PPPh	1.07e + 02	1.07e + 02	0.00e + 00	2.86e + 01	2.79e + 01
OMe-out	1.08e + 02	1.08e + 02	2.86e + 01	0.00e + 00	9.85e + 00
OMe-in	1.08e + 02	1.08e + 02	2.79e + 01	9.85e + 00	0.00e + 00

# Differences in Methanol

optS0

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	4.65e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	4.65e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.45e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.45e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	2.73e - 02	2.85e - 02
OMe-out	1.45e + 01	1.44e + 01	2.73e - 02	0.00e + 00	3.49e - 03
OMe-in	1.45e + 01	1.44e + 01	2.85e - 02	3.49e - 03	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.11e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.11e + 01	0.00e + 00	5.40e - 02	5.06e - 02
OMe-out	1.12e + 01	1.11e + 01	5.40e - 02	0.00e + 00	9.26e - 03
OMe-in	1.12e + 01	1.11e + 01	5.06e - 02	9.26e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	2.59e + 01	9.37e + 01	9.19e + 01	9.22e + 01
BDP-Ph	2.59e + 01	0.00e + 00	9.24e + 01	9.10e + 01	9.12e + 01
BDP-PPPh	9.37e + 01	9.24e + 01	0.00e + 00	3.77e + 01	3.16e + 01
OMe-out	9.19e + 01	9.10e + 01	3.77e + 01	0.00e + 00	2.25e + 01
OMe-in	9.22e + 01	9.12e + 01	3.16e + 01	2.25e + 01	0.00e + 00

optS1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	7.79e - 07
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	7.79e - 07	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.25e - 01	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-Ph	1.25e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.44e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.80e - 01
OMe-out	1.44e + 01	1.44e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.18e - 02
OMe-in	1.44e + 01	1.44e + 01	1.80e - 01	1.18e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.07e - 01	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-Ph	1.07e - 01	0.00e + 00	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-PPPh	1.10e + 01	1.10e + 01	0.00e + 00	1.08e - 01	1.09e - 01
OMe-out	1.10e + 01	1.10e + 01	1.08e - 01	0.00e + 00	7.82e - 03
OMe-in	1.10e + 01	1.10e + 01	1.09e - 01	7.82e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.56e + 01	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-Ph	1.56e + 01	0.00e + 00	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-PPPh	1.01e + 02	1.01e + 02	0.00e + 00	8.37e + 00	8.58e + 00
OMe-out	1.01e + 02	1.01e + 02	8.37e + 00	0.00e + 00	2.82e + 00
OMe-in	1.01e + 02	1.01e + 02	8.58e + 00	2.82e + 00	0.00e + 00

optR1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	3.54e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	3.54e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.20e - 01	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-Ph	1.20e - 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-PPPh	1.43e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	1.73e - 01	1.81e - 01
OMe-out	1.43e + 01	1.43e + 01	1.73e - 01	0.00e + 00	1.54e - 02
OMe-in	1.43e + 01	1.43e + 01	1.81e - 01	1.54e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.00e - 01	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-Ph	1.00e - 01	0.00e + 00	1.12e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.11e + 01	1.12e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.64e - 01
OMe-out	1.11e + 01	1.11e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	1.99e - 02
OMe-in	1.11e + 01	1.11e + 01	1.64e - 01	1.99e - 02	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.26e + 01	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-Ph	1.26e + 01	0.00e + 00	1.07e + 02	1.08e + 02	1.08e + 02
BDP-PPPh	1.07e + 02	1.07e + 02	0.00e + 00	2.97e + 01	2.87e + 01
OMe-out	1.08e + 02	1.08e + 02	2.97e + 01	0.00e + 00	1.01e + 01
OMe-in	1.08e + 02	1.08e + 02	2.87e + 01	1.01e + 01	0.00e + 00

# Differences in TetraHydroFuran

optS0

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	8.19e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	8.19e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.02e - 01	1.45e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-Ph	1.02e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.45e + 01	1.45e + 01
BDP-PPPh	1.45e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	2.75e - 02	2.79e - 02
OMe-out	1.45e + 01	1.45e + 01	2.75e - 02	0.00e + 00	2.26e - 03
OMe-in	1.45e + 01	1.45e + 01	2.79e - 02	2.26e - 03	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.05e - 01	1.12e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.05e - 01	0.00e + 00	1.11e + 01	1.11e + 01	1.11e + 01
BDP-PPPh	1.12e + 01	1.11e + 01	0.00e + 00	5.60e - 02	5.47e - 02
OMe-out	1.12e + 01	1.11e + 01	5.60e - 02	0.00e + 00	7.26e - 03
OMe-in	1.12e + 01	1.11e + 01	5.47e - 02	7.26e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	3.11e + 01	9.82e + 01	9.66e + 01	9.67e + 01
BDP-Ph	3.11e + 01	0.00e + 00	9.20e + 01	9.08e + 01	9.09e + 01
BDP-PPPh	9.82e + 01	9.20e + 01	0.00e + 00	4.16e + 01	3.54e + 01
OMe-out	9.66e + 01	9.08e + 01	4.16e + 01	0.00e + 00	2.16e + 01
OMe-in	9.67e + 01	9.09e + 01	3.54e + 01	2.16e + 01	0.00e + 00

optS1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	7.06e - 07
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	7.06e - 07	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.31e - 01	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-Ph	1.31e - 01	0.00e + 00	1.44e + 01	1.44e + 01	1.44e + 01
BDP-PPPh	1.44e + 01	1.44e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.77e - 01
OMe-out	1.44e + 01	1.44e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	1.21e - 02
OMe-in	1.44e + 01	1.44e + 01	1.77e - 01	1.21e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.11e - 01	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-Ph	1.11e - 01	0.00e + 00	1.10e + 01	1.10e + 01	1.10e + 01
BDP-PPPh	1.10e + 01	1.10e + 01	0.00e + 00	1.16e - 01	1.14e - 01
OMe-out	1.10e + 01	1.10e + 01	1.16e - 01	0.00e + 00	7.92e - 03
OMe-in	1.10e + 01	1.10e + 01	1.14e - 01	7.92e - 03	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.54e + 01	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-Ph	1.54e + 01	0.00e + 00	1.01e + 02	1.01e + 02	1.01e + 02
BDP-PPPh	1.01e + 02	1.01e + 02	0.00e + 00	9.27e + 00	9.48e + 00
OMe-out	1.01e + 02	1.01e + 02	9.27e + 00	0.00e + 00	2.60e + 00
OMe-in	1.01e + 02	1.01e + 02	9.48e + 00	2.60e + 00	0.00e + 00

optR1

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.83e + 01	1.87e + 01	3.03e + 01	3.03e + 01
BDP-Ph	1.83e + 01	0.00e + 00	3.36e + 01	4.31e + 01	4.31e + 01
BDP-PPPh	1.87e + 01	3.36e + 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01
OMe-out	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	4.35e - 06
OMe-in	3.03e + 01	4.31e + 01	1.43e + 01	4.35e - 06	0.00e + 00

RMS R

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.19e - 01	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-Ph	1.19e - 01	0.00e + 00	1.43e + 01	1.43e + 01	1.43e + 01
BDP-PPPh	1.43e + 01	1.43e + 01	0.00e + 00	1.70e - 01	1.78e - 01
OMe-out	1.43e + 01	1.43e + 01	1.70e - 01	0.00e + 00	1.44e - 02
OMe-in	1.43e + 01	1.43e + 01	1.78e - 01	1.44e - 02	0.00e + 00

RMS A

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.03e - 01	1.12e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-Ph	1.03e - 01	0.00e + 00	1.12e + 01	1.12e + 01	1.12e + 01
BDP-PPPh	1.12e + 01	1.12e + 01	0.00e + 00	1.71e - 01	1.65e - 01
OMe-out	1.12e + 01	1.12e + 01	1.71e - 01	0.00e + 00	1.70e - 02
OMe-in	1.12e + 01	1.12e + 01	1.65e - 01	1.70e - 02	0.00e + 00

RMS D

	BDP-NPh	BDP-Ph	BDP-PPPh	OMe-out	OMe-in
BDP-NPh	0.00e + 00	1.35e + 01	1.07e + 02	1.06e + 02	1.06e + 02
BDP-Ph	1.35e + 01	0.00e + 00	1.07e + 02	1.06e + 02	1.06e + 02
BDP-PPPh	1.07e + 02	1.07e + 02	0.00e + 00	3.03e + 01	3.55e + 01
OMe-out	1.06e + 02	1.06e + 02	3.03e + 01	0.00e + 00	1.78e + 01
OMe-in	1.06e + 02	1.06e + 02	3.55e + 01	1.78e + 01	0.00e + 00