

Molecular Crystal Global Phase Diagrams:

II. Reference Lattices

by R. B. McClurg and J. B. Keith

Table 7: Neighbor Histogram

Neighbor distances scaled to the nearest neighbor distance
Red entries highlight large steps in the histogram

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	
Dimers	205c	FOJBUB02	1.000	1.329	1.329	1.329	1.329	1.329	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449
	c	monomer	1.000	1.329	1.329	1.329	1.329	1.329	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449	1.449
	a	dimer	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	205c	VADRAU	1.000	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377
	c	monomer	1.000	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377	1.377
	a	dimer	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	88f	LUFYEQ	1.000	1.331	1.331	1.563	1.568	1.573	1.573	1.582	1.582	1.582	1.597	1.650	1.650	1.650	1.650	1.650	1.650
	f	monomer	1.000	1.331	1.331	1.563	1.568	1.573	1.573	1.582	1.582	1.582	1.597	1.650	1.650	1.650	1.650	1.650	1.650
	e	dimer	1.000	1.126	1.126	1.270	1.270	1.270	1.482	1.482	1.482	1.562	1.562	1.562	1.562	1.562	1.562	1.562	1.562
	quatermer	a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600	1.600
	14e	CARBTC	1.000	1.060	1.060	1.114	1.114	1.207	1.207	1.231	1.231	1.245	1.245	1.264	1.438	1.438	1.632	1.688	1.727
	e	monomer	1.000	1.060	1.060	1.114	1.114	1.207	1.207	1.231	1.231	1.245	1.245	1.264	1.438	1.438	1.632	1.688	1.727
a	dimer	1.000	1.000	1.000	1.000	1.062	1.062	1.672	1.672	1.695	1.695	1.760	1.760	1.760	1.804	1.804	1.981	1.981	
Rods	137a	FUZTEZ	1.000	1.000	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422
	a	monomer	1.000	1.000	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.123	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422	1.422
	62c	GUTCED	1.000	1.000	1.106	1.106	1.174	1.174	1.218	1.218	1.218	1.321	1.321	1.321	1.539	1.539	1.680	1.680	1.697
	c	monomer	1.000	1.000	1.106	1.106	1.174	1.174	1.218	1.218	1.218	1.321	1.321	1.321	1.539	1.539	1.680	1.680	1.697
	62c	JEYSEL	1.000	1.000	1.125	1.125	1.203	1.203	1.353	1.353	1.430	1.430	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521
	c	monomer	1.000	1.000	1.125	1.125	1.203	1.203	1.353	1.353	1.430	1.430	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521
	62c	RIMMOP	1.000	1.042	1.042	1.042	1.171	1.171	1.210	1.210	1.255	1.255	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324
	c	monomer	1.000	1.042	1.042	1.042	1.171	1.171	1.210	1.210	1.255	1.255	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324	1.324
	15e	BOGMEP	1.000	1.000	1.105	1.105	1.117	1.117	1.151	1.151	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267
	e	monomer	1.000	1.000	1.105	1.105	1.117	1.117	1.151	1.151	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267	1.267
	15e	MSISUL10	1.000	1.000	1.191	1.191	1.463	1.463	1.473	1.473	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491
	e	monomer	1.000	1.000	1.191	1.191	1.463	1.463	1.473	1.473	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491	1.491
15e	TMGEHS10	1.000	1.000	1.195	1.195	1.468	1.468	1.477	1.477	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	
e	monomer	1.000	1.000	1.195	1.195	1.468	1.468	1.477	1.477	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	1.499	
15e	TMSNHS10	1.000	1.000	1.213	1.213	1.497	1.497	1.513	1.513	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	
e	monomer	1.000	1.000	1.213	1.213	1.497	1.497	1.513	1.513	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	1.525	
14e	DOCNIS	1.000	1.030	1.102	1.102	1.125	1.125	1.161	1.161	1.222	1.222	1.224	1.224	1.247	1.247	1.247	1.247	1.247	
e	monomer	1.000	1.030	1.102	1.102	1.125	1.125	1.161	1.161	1.222	1.222	1.224	1.224	1.247	1.247	1.247	1.247	1.247	
14e	TMSIAD	1.000	1.036	1.238	1.238	1.248	1.277	1.347	1.347	1.392	1.392	1.470	1.470	1.496	1.496	1.919	1.919	1.955	
e	monomer	1.000	1.036	1.238	1.238	1.248	1.277	1.347	1.347	1.392	1.392	1.470	1.470	1.496	1.496	1.919	1.919	1.955	
2i	BASXOI	1.000	1.010	1.144	1.147	1.270	1.294	1.316	1.316	1.509	1.509	1.511	1.511	1.531	1.541	1.541	1.735	1.777	
i	monomer	1.000	1.010	1.144	1.147	1.270	1.294	1.316	1.316	1.509	1.509	1.511	1.511	1.531	1.541	1.541	1.735	1.777	
11e	MECKIO	1.000	1.000	1.022	1.022	1.122	1.122	1.152	1.152	1.188	1.188	1.206	1.206	1.329	1.329	1.624	1.624	1.647	
e	monomer	1.000	1.000	1.022	1.022	1.122	1.122	1.152	1.152	1.188	1.188	1.206	1.206	1.329	1.329	1.624	1.624	1.647	
13efg	RIMNAC	1.000	1.000	1.019	1.019	1.049	1.049	1.094	1.094	1.172	1.172	1.174	1.174	1.245	1.245	1.644	1.644	1.660	
e	monomer	1.000	1.000	1.019	1.019	1.049	1.049	1.094	1.094	1.172	1.172	1.174	1.174	1.245	1.245	1.644	1.644	1.660	
f	1.000	1.000	1.000	1.019	1.019	1.031	1.031	1.038	1.038	1.172	1.172	1.172	1.172	1.421	1.421	1.461	1.461	1.461	
g	1.000	1.000	1.007	1.038	1.038	1.041	1.045	1.056	1.102	1.172	1.172	1.182	1.207	1.254	1.431	1.471	1.629	1.655	
14ee	MXSNOX	1.000	1.003	1.043	1.155	1.384	1.473	1.483	1.483	1.484	1.492	1.492	1.492	1.566	1.566	1.582	1.604	1.758	
e	monomer	1.000	1.003	1.043	1.155	1.384	1.473	1.483	1.483	1.484	1.492	1.492	1.492	1.566	1.566	1.582	1.604	1.758	
e	1.000	1.000	1.003	1.043	1.058	1.384	1.420	1.473	1.484	1.524	1.540	1.566	1.566	1.582	1.582	1.767	1.805	1.805	
2i	XAGXAE	1.000	1.058	1.112	1.149	1.324	1.467	1.467	1.498	1.498	1.500	1.500	1.500	1.514	1.514	1.706	1.829	1.853	
i	monomer	1.000	1.058	1.112	1.149	1.324	1.467	1.467	1.498	1.498	1.500	1.500	1.500	1.514	1.514	1.706	1.829	1.853	
14e	QUGBOJ	1.000	1.010	1.014	1.014	1.099	1.099	1.109	1.109	1.258	1.266	1.286	1.286	1.464	1.464	1.488	1.488	1.679	
e	monomer	1.000	1.010	1.014	1.014	1.099	1.099	1.109	1.109	1.258	1.266	1.286	1.286	1.464	1.464	1.488	1.488	1.679	
Planes	19a	MZNMOX10	1.000	1.000	1.026	1.026	1.132	1.151	1.151	1.268	1.268	1.421	1.421	1.432	1.432	1.432	1.432	1.595	
	a	monomer	1.000	1.000	1.026	1.026	1.132	1.151	1.151	1.268	1.268	1.421	1.421	1.432	1.432	1.432	1.432	1.595	
	14e	CAMPOV	1.000	1.035	1.035	1.262	1.262	1.264	1.300	1.316	1.345	1.345	1.345	1.468	1.468	1.475	1.837	1.850	
e	monomer	1.000	1.035	1.035	1.262	1.262	1.264	1.300	1.316	1.345	1.345	1.345	1.468	1.468	1.475	1.837	1.837	1.850	

14e	VAVYAS	1.000	1.038	1.038	1.266	1.290	1.290	1.290	1.303	1.375	1.392	1.392	1.526	1.526	1.539	1.852	1.873
14ee	CANFIG	1.000	1.044	1.055	1.275	1.521	1.521	1.521	1.590	1.633	1.633	1.690	1.707	1.707	1.744	1.893	1.936
e	1.000	1.044	1.055	1.302	1.395	1.521	1.521	1.521	1.590	1.690	1.744	1.773	1.773	1.818	1.853	1.893	
2liii	CANFOM	1.000	1.056	1.072	1.264	1.523	1.523	1.523	1.604	1.614	1.676	1.679	1.695	1.721	1.723	1.913	1.961
i	1.000	1.071	1.073	1.293	1.449	1.547	1.547	1.547	1.631	1.639	1.702	1.721	1.739	1.750	1.814	1.870	1.960
i	1.000	1.054	1.066	1.333	1.363	1.523	1.523	1.523	1.606	1.712	1.721	1.752	1.781	1.789	1.815	1.824	1.854
i	1.000	1.073	1.089	1.315	1.449	1.547	1.547	1.547	1.629	1.705	1.780	1.809	1.814	1.817	1.843	1.852	1.852
Sphere Packings																	
227a	ZNOXAC01	1.000	1.000	1.000	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.633	1.915
a	DEQPAQ	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	HMSIPA	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	HXMTAM07	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	KELREY	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	MESAD	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	MPHTOT01	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	NIWMIP	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	POSLOY10	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	TMEPTC	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a	YEYQAU	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
217a*	HMGETP	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
215a	FOHCJA	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.155	1.633	1.633
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414
215a	FUZVOL	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414
215a*	JUFWUC	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414	1.414
176h	CUCZUV	1.000	1.000	1.000	1.000	1.067	1.067	1.067	1.067	1.137	1.137	1.140	1.140	1.492	1.492	1.492	1.562
h	1.000	1.000	1.022	1.022	1.067	1.067	1.067	1.067	1.067	1.137	1.137	1.140	1.140	1.492	1.492	1.492	1.562
165d	DILWIE01	1.000	1.000	1.000	1.035	1.035	1.035	1.035	1.059	1.059	1.059	1.059	1.059	1.456	1.456	1.481	1.481
d	1.000	1.000	1.000	1.035	1.035	1.035	1.035	1.035	1.059	1.059	1.059	1.059	1.059	1.456	1.456	1.481	1.481
165d	ZEYHIU	1.000	1.000	1.000	1.091	1.091	1.091	1.091	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094	1.482	1.482	1.545	1.545
d	1.000	1.000	1.000	1.091	1.091	1.091	1.091	1.091	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094	1.482	1.482	1.545	1.545
161a	TCYMET	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.167	1.167	1.624	1.624
a	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.167	1.167	1.624	1.624
147d	ZIZHIZ	1.000	1.000	1.000	1.010	1.010	1.010	1.010	1.055	1.055	1.055	1.055	1.055	1.454	1.454	1.461	1.461
d	1.000	1.000	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.055	1.055	1.055	1.055	1.055	1.454	1.454	1.461	1.461
152b	MTRETC10	1.000	1.000	1.000	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.071	1.071	1.071	1.071	1.421	1.421	1.421	1.521
b	1.000	1.000	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.010	1.071	1.071	1.071	1.071	1.421	1.421	1.421	1.521
141a	FUZLUH	1.000	1.000	1.000	1.358	1.358	1.358	1.358	1.386	1.386	1.386	1.386	1.386	1.493	1.493	1.493	1.493
a	1.000	1.000	1.000	1.358	1.358	1.358	1.358	1.358	1.386	1.386	1.386	1.386	1.386	1.493	1.493	1.493	1.493
141a	VAFWAA	1.000	1.000	1.000	1.351	1.351	1.351	1.351	1.383	1.383	1.383	1.383	1.383	1.493	1.493	1.493	1.493
a	1.000	1.000	1.000	1.351	1.351	1.351	1.351	1.351	1.383	1.383	1.383	1.383	1.383	1.493	1.493	1.493	1.493
121a	ZZZKDW01	1.000	1.000	1.000	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.414	1.414	1.414	1.491
a	1.000	1.000	1.000	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.414	1.414	1.414	1.491
142a	KUJSIR	1.000	1.000	1.000	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.028	1.414	1.414	1.414	1.491

