**Figure 1.** Computational workflow. Bu figürü dataları nasıl filtreledin, ne yaptın, kaç malzeme çıktı, hangi simülasyonları verdin…. Gibi gibi programlayacağız. En son düşüneceğimiz farklı ve original bir figür olması gerekiyor.

**Figure 2. 5li bir figür.** 1060 CoRE COFs (soluk siyah), 6872 hypoCOFs (soluk gri) ve 1500 Acylhydrazone (renk), Triazine (renk) , Azine (renk). A) CO2, b) CH4, c) H2, d) N2, e) O2. Uptake’ler y ekseninde olacak, x ekseninde pore volume, LCD ve Henrys constant dene, henry constant çizdiğin versiyonda x ekseninde logaritma olsun.

**Figür 3. 6lı bir figür**. 1060 CoRE COFs (soluk siyah), 6872 hypoCOFs (soluk gri) ve 1500 Acylhydrazone (renk), Triazine (renk) , Azine (renk). A) CO2/CH4, b) CO2/N2, C) CO2/H2, d) CH4/H2, e) CH4/N2, f) O2/N2. Selectivityler y ekseninde olacak, x ekseninde pore volume, LCD, surface area dene. Uygun olanı seçeriz.

**Figür 4-6. 5li figürler. ML-predicted vs simulated uptakes figürü. (a-e) CO2, CH4, H2, N2, O2.** Acylhydrazone (renk), Triazine (renk) , Azine (renk).

**Figür 7.** Figür 2 formatının aynısı olacak ama bu sefer her şey ML-predicted uptakes. 1060 CoRE COFs + 68724 hypoCOFs ve 8K acylhydrazone, 13K azine, 2366 triazine.

**Figür 8.** Figür3ün aynısı olacak.