

AC descriptor relevance,  $\Delta E^\ddagger$  [%]

Nd-0\_FA\_AA  
LPocc-1\_FR\_AA  
qnat-1\_FA\_AA  
LPe-1\_FR\_AA  
Nd-0\_FS\_AA  
LPde-3\_MD\_AA  
qnat-0\_FA\_AA  
LPde-1\_FR\_AA  
Vnat-2\_MR\_AA  
qnat-3\_MD\_AA  
LPde-0\_FA\_AA  
qnat-1\_MS\_AA  
qnat-1\_MD\_AA  
Nd-0\_MA\_AA  
Nd-0\_MS\_AA  
LPocc-3\_FR\_AA  
LPd-3\_MA\_AA  
LPde-0\_FS\_AA  
LPe-0\_FA\_AA  
LPde-3\_MS\_AA

AA AC descriptors

