

## Electronic Supplementary Information for: Matching ROY Crystal Structures to High-Throughput PXRD

Grace M. Sparrow,<sup>1</sup> R. Alex Mayo,<sup>2</sup> and Erin R. Johnson<sup>1,3,4, a)</sup>

<sup>1)</sup>*Department of Chemistry, Dalhousie University, 6243 Alumni Crescent, Halifax, Nova Scotia, B3H 4R2, Canada*

<sup>2)</sup>*Department of Chemistry and Biomolecular Science, University of Ottawa, 10 Marie-Curie Private, Ottawa, Ontario, K1N 6N5, Canada*

<sup>3)</sup>*Department of Physics and Atmospheric Science, Dalhousie University, 6310 Coburg Rd, Halifax, Nova Scotia, B3H 4R2, Canada*

<sup>4)</sup>*Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, Cambridge, CB2 1EW, United Kingdom*

(Dated: 11 July 2024)

---

<sup>a)</sup>Electronic mail: erin.johnson@dal.ca

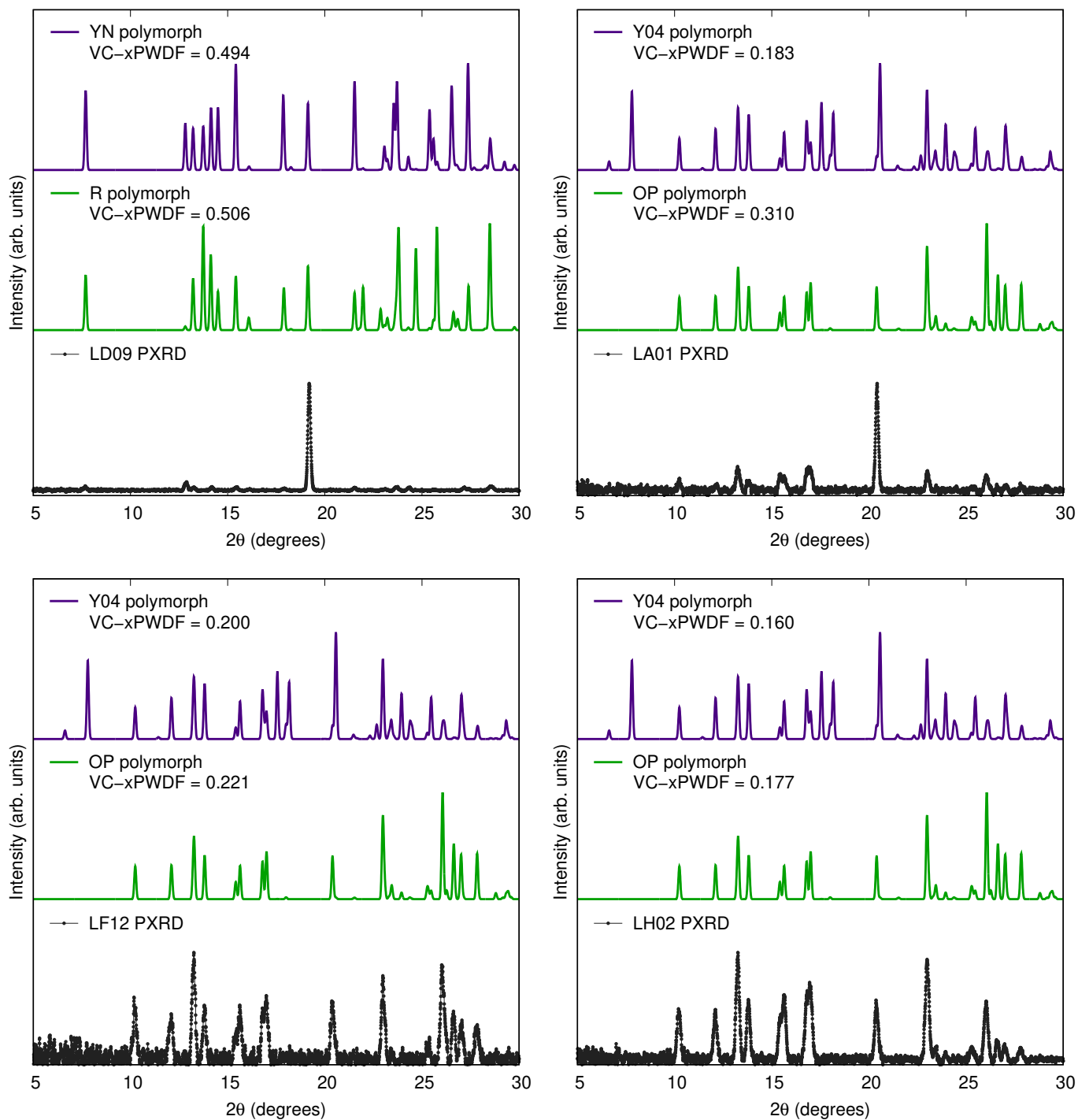


FIG. 1: The four experimental PXR D patterns (black) for which VC-xPWDF was not able to predict the correct structural match, due to either preferential orientation (top row) or excessive noise in the experimental diffractogram (bottom row). Also shown are the simulated PXR D patterns of the correct matching structure from the CSD (green) and the CSD structure that yielded the lowest VC-xPWDF score (purple).

TABLE I: VC-xPWDF scores from comparison of 75 experimental PXRD patterns with representative SC-XRD structures of each of the 12 known ROY polymorphs taken from the CSD.

PXRD	Crystallinity	Y	YT04	R	OP	YN	Y04	R05	PO13	ON	ORP	R18	Y19
LA01	4.70	0.322	0.324	0.257	0.310	0.350	0.183	0.429	0.337	0.460	0.476	0.477	0.417
LC05	4.70	0.540	0.382	0.127	0.386	0.195	0.317	0.513	0.346	0.344	0.425	0.408	0.363
LC06	5.30	0.251	0.222	0.206	0.116	0.210	0.168	0.286	0.350	0.404	0.430	0.350	0.383
LC07	5.60	0.548	0.357	0.084	0.342	0.158	0.293	0.495	0.347	0.358	0.391	0.426	0.374
LC08	5.40	0.293	0.316	0.630	0.373	0.229	0.442	0.698	0.145	0.092	0.481	0.590	0.235
LC09	7.40	0.385	0.427	0.689	0.469	0.273	0.528	0.740	0.123	0.074	0.517	0.636	0.296
LC10	5.50	0.252	0.227	0.212	0.111	0.203	0.178	0.302	0.344	0.401	0.441	0.332	0.366
LC11	6.70	0.356	0.402	0.657	0.450	0.284	0.492	0.715	0.125	0.094	0.498	0.613	0.292
LC12	5.00	0.269	0.342	0.552	0.382	0.290	0.392	0.643	0.168	0.196	0.466	0.530	0.328
LD09	6.40	0.738	0.714	0.506	0.701	0.494	0.517	0.758	0.698	0.653	0.722	0.752	0.701
LD12	6.60	0.274	0.277	0.219	0.163	0.216	0.199	0.310	0.369	0.421	0.459	0.335	0.413
LE01	6.70	0.323	0.364	0.635	0.409	0.259	0.459	0.692	0.121	0.100	0.488	0.584	0.272
LE03	6.40	0.246	0.245	0.232	0.145	0.229	0.178	0.309	0.335	0.407	0.422	0.356	0.368
LE04	6.00	0.315	0.350	0.634	0.407	0.262	0.451	0.708	0.166	0.107	0.487	0.596	0.265
LE05	10.80	0.267	0.185	0.162	0.061	0.193	0.169	0.270	0.359	0.390	0.454	0.331	0.377
LE08	9.90	0.254	0.199	0.161	0.071	0.201	0.165	0.270	0.351	0.384	0.453	0.340	0.370
LE09	7.50	0.249	0.215	0.209	0.101	0.204	0.178	0.291	0.350	0.406	0.438	0.322	0.377
LF01	8.00	0.348	0.376	0.677	0.435	0.258	0.496	0.734	0.129	0.069	0.493	0.628	0.252
LF03	4.90	0.246	0.291	0.562	0.343	0.262	0.370	0.639	0.179	0.184	0.468	0.526	0.287
LF04	4.90	0.255	0.305	0.567	0.355	0.251	0.384	0.651	0.156	0.163	0.465	0.532	0.279
LF05	5.40	0.272	0.274	0.248	0.164	0.235	0.178	0.312	0.322	0.404	0.430	0.367	0.365
LF07	6.40	0.302	0.334	0.638	0.391	0.244	0.450	0.698	0.132	0.091	0.480	0.591	0.252
LF10	5.80	0.259	0.247	0.230	0.132	0.217	0.183	0.308	0.339	0.412	0.434	0.337	0.375
LF12	4.70	0.282	0.305	0.272	0.221	0.266	0.200	0.350	0.336	0.413	0.423	0.382	0.380
LG01	4.80	0.521	0.399	0.189	0.380	0.218	0.328	0.508	0.350	0.391	0.427	0.441	0.377
LG02	7.90	0.253	0.221	0.174	0.093	0.213	0.160	0.277	0.336	0.376	0.445	0.357	0.355
LG03	10.90	0.257	0.156	0.165	0.043	0.176	0.172	0.289	0.381	0.410	0.452	0.290	0.391
LG04	12.70	0.253	0.172	0.165	0.043	0.186	0.170	0.284	0.371	0.412	0.465	0.307	0.391
LG05	6.70	0.326	0.348	0.663	0.405	0.245	0.478	0.722	0.138	0.074	0.498	0.613	0.244
LG06	15.90	0.375	0.350	0.757	0.435	0.226	0.552	0.808	0.177	0.016	0.528	0.699	0.182
LG08	18.20	0.545	0.326	0.032	0.349	0.149	0.263	0.495	0.323	0.303	0.393	0.356	0.321
LG09	14.20	0.262	0.146	0.159	0.046	0.178	0.189	0.256	0.386	0.425	0.460	0.302	0.411
LG10	17.80	0.314	0.189	0.209	0.058	0.203	0.194	0.328	0.370	0.448	0.481	0.340	0.401
LG11	9.10	0.082	0.492	0.347	0.360	0.295	0.174	0.514	0.427	0.415	0.383	0.366	0.412
LG12	5.70	0.280	0.224	0.212	0.118	0.201	0.175	0.302	0.329	0.401	0.429	0.336	0.362
LH01	7.40	0.135	0.415	0.275	0.323	0.231	0.132	0.441	0.385	0.367	0.318	0.378	0.373
LH02	6.50	0.245	0.281	0.218	0.177	0.281	0.160	0.278	0.308	0.360	0.461	0.429	0.331
LH03	5.40	0.234	0.263	0.565	0.339	0.253	0.360	0.649	0.202	0.183	0.461	0.534	0.262
LH04	11.90	0.534	0.457	0.095	0.363	0.154	0.282	0.488	0.297	0.309	0.444	0.383	0.341
LH05	16.10	0.028	0.531	0.374	0.393	0.311	0.203	0.515	0.446	0.419	0.350	0.428	0.447
LH06	18.50	0.302	0.143	0.144	0.025	0.177	0.181	0.283	0.420	0.411	0.496	0.281	0.418
LH08	5.40	0.267	0.265	0.239	0.157	0.231	0.175	0.311	0.335	0.403	0.431	0.365	0.372
LH09	8.90	0.054	0.482	0.348	0.363	0.299	0.205	0.492	0.430	0.394	0.342	0.413	0.416
LH10	10.80	0.256	0.208	0.177	0.079	0.180	0.183	0.254	0.371	0.414	0.477	0.301	0.412
LH11	6.50	0.255	0.206	0.199	0.094	0.202	0.177	0.298	0.353	0.394	0.422	0.322	0.377
LH12	8.60	0.330	0.268	0.200	0.171	0.296	0.177	0.372	0.390	0.497	0.525	0.384	0.475
SA02	7.90	0.232	0.213	0.174	0.078	0.211	0.168	0.287	0.368	0.380	0.458	0.336	0.372
SA03	5.67	0.140	0.429	0.325	0.328	0.292	0.245	0.513	0.397	0.402	0.370	0.379	0.368
SA04	4.52	0.252	0.289	0.572	0.357	0.277	0.354	0.652	0.202	0.214	0.486	0.528	0.304
SA06	7.47	0.340	0.351	0.686	0.414	0.237	0.496	0.743	0.143	0.057	0.501	0.637	0.219
SA08	6.45	0.314	0.350	0.642	0.401	0.247	0.458	0.706	0.126	0.089	0.485	0.595	0.252
SB01	5.80	0.263	0.233	0.218	0.127	0.212	0.180	0.317	0.347	0.404	0.421	0.330	0.378
SB02	4.89	0.241	0.253	0.614	0.325	0.220	0.402	0.687	0.183	0.118	0.474	0.576	0.214
SB03	7.93	0.341	0.340	0.704	0.411	0.228	0.509	0.763	0.153	0.042	0.507	0.657	0.201
SB06	8.35	0.331	0.328	0.698	0.401	0.219	0.497	0.757	0.151	0.041	0.505	0.645	0.197
SB08	7.33	0.293	0.302	0.651	0.371	0.222	0.449	0.717	0.146	0.075	0.495	0.606	0.216
SB09	6.17	0.293	0.302	0.651	0.371	0.222	0.449	0.717	0.146	0.075	0.495	0.606	0.216
SC01	6.58	0.314	0.307	0.681	0.383	0.210	0.477	0.744	0.157	0.049	0.505	0.636	0.196
SC02	8.08	0.338	0.347	0.692	0.412	0.232	0.500	0.752	0.150	0.052	0.497	0.647	0.211
SC03	8.82	0.333	0.345	0.687	0.408	0.233	0.496	0.746	0.142	0.054	0.498	0.637	0.216
SC05	6.70	0.297	0.278	0.674	0.368	0.197	0.456	0.739	0.160	0.055	0.498	0.630	0.177
SC06	10.50	0.339	0.322	0.716	0.402	0.213	0.509	0.772	0.161	0.032	0.513	0.660	0.180
SC09	4.64	0.259	0.283	0.603	0.343	0.223	0.402	0.678	0.165	0.123	0.477	0.562	0.235
SD02	4.58	0.263	0.309	0.579	0.358	0.249	0.394	0.655	0.156	0.158	0.469	0.538	0.274
SD03	8.08	0.346	0.374	0.690	0.430	0.254	0.509	0.745	0.138	0.060	0.497	0.639	0.238
SD04	5.45	0.286	0.291	0.653	0.357	0.210	0.446	0.715	0.153	0.074	0.494	0.600	0.205
SD05	4.97	0.250	0.263	0.604	0.333	0.224	0.393	0.671	0.171	0.133	0.479	0.562	0.231
SD11	4.71	0.250	0.268	0.593	0.336	0.218	0.390	0.673	0.171	0.131	0.474	0.554	0.225
SD12	6.98	0.254	0.210	0.200	0.100	0.203	0.168	0.290	0.350	0.379	0.432	0.325	0.374
SE03	5.55	0.160	0.425	0.321	0.317	0.295	0.250	0.514	0.381	0.406	0.384	0.356	0.359
SF03	4.56	0.188	0.439	0.347	0.330	0.313	0.279	0.546	0.412	0.429	0.417	0.378	0.376
SG01	4.97	0.256	0.265	0.619	0.338	0.216	0.406	0.688	0.163	0.110	0.477	0.574	0.212
SG03	9.75	0.382	0.419	0.702	0.464	0.280	0.538	0.756	0.142	0.074	0.504	0.656	0.263
SH02	9.93	0.282	0.205	0.712	0.346	0.225	0.460	0.798	0.314	0.093	0.531	0.697	0.118
SH12	5.24	0.320	0.358	0.628	0.400	0.257	0.455	0.691	0.133	0.105	0.490	0.586	0.267

TABLE II: VC-xPWDF scores obtained from comparison of four experimental PXRD patterns with the *in silico* structures from the CSP landscape of ROY.

CSP cif	$\Delta E$ (kJ/mol)	VC-xPWDF scores			
		1G06	1G08	1G10	1H05
0	0.000	0.502	0.512	0.182	0.033
1	0.642	0.357	0.317	0.203	0.551
2	0.825	0.739	0.037	0.205	0.372
3	1.607	0.413	0.360	0.074	0.400
4	2.313	0.204	0.401	0.196	0.319
5	2.417	0.516	0.210	0.146	0.197
6	2.607	0.816	0.499	0.219	0.509
7	2.682	0.299	0.390	0.442	0.337
8	2.706	0.591	0.160	0.153	0.292
9	2.799	0.214	0.345	0.482	0.485
10	2.972	0.464	0.364	0.208	0.307
11	3.016	0.014	0.325	0.316	0.439
12	3.045	0.646	0.150	0.167	0.242
13	3.392	0.157	0.348	0.360	0.459
14	3.644	0.542	0.346	0.199	0.155
15	3.747	0.319	0.306	0.262	0.208
16	3.785	0.110	0.334	0.248	0.369
17	4.124	0.644	0.369	0.303	0.430
18	4.167	0.474	0.206	0.248	0.319
19	4.239	0.407	0.345	0.338	0.181
20	4.241	0.173	0.304	0.536	0.383
21	4.258	0.234	0.340	0.326	0.218
22	4.290	0.564	0.392	0.262	0.330
23	4.371	0.393	0.334	0.366	0.460
24	4.460	0.159	0.414	0.281	0.304
25	4.469	0.306	0.358	0.210	0.310
26	4.516	0.509	0.429	0.317	0.411
27	4.593	0.048	0.521	0.347	0.651
28	4.723	0.193	0.362	0.382	0.187
29	4.749	0.487	0.214	0.248	0.195
30	4.751	0.501	0.377	0.233	0.317
31	4.860	0.695	0.350	0.347	0.421
32	4.868	0.446	0.370	0.172	0.442
33	4.992	0.197	0.351	0.317	0.293
34	5.055	0.588	0.328	0.429	0.332
35	5.142	0.115	0.279	0.321	0.609
36	5.160	0.817	0.501	0.347	0.516
37	5.236	0.317	0.198	0.319	0.207
38	5.252	0.261	0.350	0.330	0.210
39	5.269	0.257	0.359	0.466	0.384
40	5.309	0.441	0.264	0.255	0.411
41	5.436	0.581	0.450	0.233	0.486
42	5.465	0.788	0.366	0.278	0.295
43	5.610	0.109	0.308	0.345	0.422
44	5.615	0.164	0.381	0.382	0.351
45	5.650	0.345	0.568	0.284	0.501
46	5.658	0.378	0.323	0.211	0.433
47	5.693	0.092	0.225	0.237	0.132
48	5.737	0.296	0.228	0.489	0.373
49	5.753	0.100	0.329	0.267	0.184
50	5.766	0.194	0.327	0.288	0.225
51	5.791	0.405	0.354	0.257	0.241
52	5.800	0.383	0.170	0.142	0.226
53	5.802	0.241	0.365	0.212	0.421
54	5.829	0.344	0.539	0.370	0.426
55	5.965	0.606	0.281	0.254	0.425
56	6.007	0.322	0.438	0.193	0.334
57	6.042	0.715	0.373	0.490	0.324
58	6.075	0.593	0.124	0.179	0.381
59	6.088	0.180	0.523	0.543	0.312
60	6.132	0.707	0.405	0.188	0.359
61	6.168	0.377	0.442	0.570	0.293
62	6.182	0.513	0.413	0.585	0.564

Continued

CSP cif	$\Delta E$ (kJ/mol)	VC-xPWFDF scores			
		1G06	1G08	1G10	1H05
63	6.238	0.345	0.327	0.462	0.291
64	6.286	0.502	0.389	0.527	0.590
65	6.322	0.153	0.266	0.345	0.520
66	6.497	0.472	0.314	0.251	0.362
67	6.501	0.465	0.398	0.164	0.175
68	6.516	0.052	0.505	0.351	0.412
69	6.591	0.647	0.108	0.213	0.242
70	6.604	0.296	0.273	0.351	0.470
71	6.606	0.167	0.311	0.435	0.505
72	6.654	0.128	0.341	0.455	0.503
73	6.662	0.523	0.393	0.374	0.277
74	6.736	0.511	0.572	0.272	0.070
75	6.745	0.354	0.324	0.197	0.229
76	6.797	0.241	0.442	0.339	0.216
77	6.805	0.376	0.579	0.476	0.184
78	6.815	0.374	0.264	0.292	0.232
79	6.829	0.760	0.315	0.190	0.101
80	6.853	0.283	0.354	0.291	0.367
81	6.871	0.211	0.269	0.384	0.324
82	6.895	0.289	0.220	0.203	0.386
83	6.901	0.520	0.417	0.350	0.371
84	6.916	0.642	0.355	0.252	0.310
85	6.919	0.304	0.355	0.308	0.385
86	6.955	0.559	0.228	0.248	0.140
87	6.957	0.728	0.204	0.203	0.557
88	6.958	0.634	0.168	0.359	0.481
89	6.986	0.324	0.257	0.178	0.234
90	6.990	0.648	0.304	0.276	0.421
91	6.995	0.561	0.351	0.565	0.351
92	7.038	0.232	0.345	0.351	0.214
93	7.110	0.337	0.439	0.377	0.404
94	7.147	0.107	0.392	0.364	0.217
95	7.153	0.235	0.317	0.191	0.340
96	7.162	0.704	0.114	0.166	0.283
97	7.201	0.547	0.337	0.311	0.389
98	7.231	0.568	0.325	0.311	0.339
99	7.279	0.530	0.341	0.252	0.365
100	7.362	0.165	0.295	0.534	0.495
101	7.492	0.496	0.273	0.284	0.339
102	7.532	0.470	0.272	0.232	0.250
103	7.579	0.180	0.228	0.367	0.268
104	7.586	0.411	0.285	0.250	0.311
105	7.605	0.133	0.353	0.321	0.674
106	7.609	0.191	0.336	0.344	0.200
107	7.627	0.856	0.307	0.585	0.601
108	7.765	0.639	0.284	0.392	0.343
109	7.784	0.331	0.321	0.137	0.415
110	7.790	0.359	0.361	0.174	0.425
111	7.803	0.766	0.339	0.360	0.461
112	7.813	0.475	0.304	0.363	0.367
113	7.853	0.241	0.397	0.450	0.385
114	7.900	0.242	0.225	0.360	0.402
115	7.948	0.253	0.305	0.306	0.305
116	8.069	0.634	0.484	0.178	0.519
117	8.069	0.444	0.193	0.219	0.224
118	8.073	0.303	0.425	0.373	0.203
119	8.134	0.112	0.416	0.354	0.279
120	8.152	0.266	0.451	0.260	0.326
121	8.163	0.548	0.441	0.303	0.402
122	8.166	0.549	0.404	0.389	0.251
123	8.169	0.383	0.335	0.171	0.403
124	8.211	0.312	0.643	0.308	0.662
125	8.216	0.690	0.397	0.349	0.269
126	8.239	0.476	0.622	0.488	0.302
127	8.272	0.834	0.306	0.335	0.351
128	8.285	0.757	0.287	0.354	0.312
129	8.295	0.566	0.406	0.285	0.311

Continued

CSP cif	$\Delta E$ (kJ/mol)	VC-xPWFDF scores			
		1G06	1G08	1G10	1H05
130	8.459	0.436	0.427	0.285	0.353
131	8.468	0.740	0.183	0.189	0.490
132	8.527	0.091	0.167	0.209	0.320
133	8.556	0.411	0.388	0.151	0.463
134	8.578	0.582	0.306	0.300	0.441
135	8.595	0.551	0.292	0.346	0.246
136	8.704	0.589	0.421	0.249	0.294
137	8.721	0.634	0.146	0.174	0.437
138	8.760	0.214	0.367	0.288	0.224
139	8.771	0.573	0.439	0.232	0.391
140	8.801	0.297	0.315	0.304	0.469
141	8.819	0.619	0.429	0.409	0.462
142	8.831	0.118	0.394	0.320	0.287
143	8.860	0.466	0.476	0.215	0.183
144	8.909	0.306	0.203	0.250	0.327
145	8.925	0.460	0.274	0.267	0.284
146	8.938	0.418	0.259	0.408	0.287
147	8.943	0.170	0.209	0.143	0.386
148	8.995	0.254	0.400	0.487	0.425
149	9.006	0.612	0.313	0.529	0.241
150	9.041	0.234	0.506	0.330	0.297
151	9.043	0.465	0.539	0.525	0.525
152	9.084	0.131	0.454	0.279	0.299
153	9.173	0.354	0.447	0.389	0.268
154	9.246	0.540	0.323	0.400	0.340
155	9.269	0.514	0.301	0.317	0.284
156	9.299	0.213	0.322	0.296	0.220
157	9.335	0.109	0.441	0.346	0.250
158	9.357	0.395	0.453	0.169	0.407
159	9.418	0.346	0.213	0.155	0.120
160	9.463	0.661	0.376	0.330	0.384
161	9.470	0.440	0.437	0.311	0.208
162	9.474	0.559	0.437	0.343	0.378
163	9.570	0.691	0.226	0.257	0.192
164	9.592	0.490	0.231	0.314	0.413
165	9.688	0.374	0.217	0.328	0.416
166	9.732	0.315	0.386	0.179	0.408
167	9.813	0.494	0.249	0.304	0.226
168	9.816	0.565	0.359	0.516	0.299
169	9.825	0.308	0.312	0.259	0.180
170	9.859	0.334	0.435	0.329	0.583
171	9.917	0.679	0.243	0.133	0.459
172	9.979	0.678	0.317	0.197	0.121
173	9.991	0.651	0.214	0.200	0.431
174	10.029	0.339	0.382	0.254	0.403
175	10.040	0.245	0.418	0.374	0.312
176	10.064	0.600	0.383	0.340	0.281
177	10.072	0.295	0.415	0.312	0.329
178	10.111	0.219	0.376	0.254	0.198
179	10.115	0.431	0.344	0.352	0.274
180	10.149	0.242	0.371	0.193	0.357
181	10.204	0.332	0.218	0.270	0.319
182	10.215	0.317	0.477	0.490	0.317
183	10.242	0.374	0.304	0.435	0.418
184	10.263	0.079	0.433	0.318	0.411
185	10.284	0.549	0.332	0.511	0.361
186	10.303	0.398	0.368	0.190	0.341
187	10.331	0.446	0.382	0.282	0.423
188	10.467	0.638	0.559	0.331	0.530
189	10.487	0.357	0.496	0.195	0.424
190	10.521	0.876	0.374	0.364	0.412
191	10.551	0.527	0.277	0.329	0.261
192	10.551	0.142	0.423	0.349	0.191
193	10.608	0.351	0.449	0.382	0.529
194	10.672	0.509	0.456	0.191	0.319
195	10.694	0.392	0.420	0.182	0.473
196	10.712	0.549	0.658	0.587	0.319

Continued

CSP cif	$\Delta E$ (kJ/mol)	VC-xPWFDF scores			
		1G06	1G08	1G10	1H05
197	10.733	0.331	0.345	0.414	0.183
198	10.737	0.706	0.303	0.275	0.236
199	10.768	0.186	0.456	0.542	0.336
200	10.783	0.180	0.371	0.312	0.333
201	10.789	0.589	0.301	0.282	0.256
202	10.828	0.341	0.328	0.218	0.373
203	10.832	0.438	0.449	0.184	0.179
204	10.848	0.569	0.371	0.445	0.267
205	10.899	0.702	0.472	0.395	0.420
206	10.925	0.535	0.242	0.309	0.315
207	10.938	0.301	0.345	0.150	0.267
208	10.975	0.531	0.341	0.539	0.488
209	11.023	0.279	0.295	0.218	0.145
210	11.025	0.527	0.380	0.603	0.541
211	11.131	0.705	0.233	0.297	0.383
212	11.190	0.246	0.197	0.345	0.318
213	11.278	0.783	0.527	0.446	0.587
214	11.329	0.443	0.392	0.196	0.230
215	11.419	0.435	0.447	0.278	0.536
216	11.436	0.852	0.273	0.463	0.537
217	11.445	0.714	0.350	0.412	0.581
218	11.542	0.588	0.291	0.303	0.249
219	11.588	0.716	0.344	0.223	0.300
220	11.623	0.757	0.349	0.369	0.280
221	11.638	0.469	0.432	0.363	0.544
222	11.664	0.592	0.308	0.273	0.360
223	11.775	0.589	0.284	0.207	0.450
224	11.941	0.356	0.298	0.210	0.457
225	11.985	0.616	0.369	0.408	0.375
226	12.180	0.511	0.317	0.239	0.418
227	12.215	0.570	0.194	0.188	0.259
228	12.286	0.545	0.220	0.171	0.234
229	12.349	0.526	0.403	0.339	0.479
230	12.532	0.782	0.327	0.296	0.492
231	12.560	0.257	0.475	0.254	0.254
232	12.634	0.713	0.545	0.236	0.613
233	12.634	0.789	0.316	0.351	0.468
234	12.677	0.369	0.144	0.170	0.244
235	12.692	0.857	0.584	0.452	0.495
236	12.702	0.768	0.330	0.265	0.522
237	12.757	0.815	0.315	0.400	0.497
238	12.860	0.847	0.570	0.354	0.601
239	12.886	0.829	0.534	0.216	0.584
240	12.943	0.646	0.485	0.275	0.613
241	13.071	0.358	0.275	0.377	0.319
242	13.138	0.843	0.359	0.353	0.503
243	13.165	0.802	0.257	0.295	0.467
244	13.275	0.441	0.557	0.397	0.480
245	13.354	0.537	0.404	0.364	0.356
246	13.409	0.514	0.585	0.341	0.348
247	13.426	0.640	0.389	0.267	0.407
248	13.530	0.802	0.468	0.423	0.545
249	13.567	0.397	0.404	0.206	0.389
250	13.784	0.483	0.341	0.292	0.413
251	13.823	0.626	0.340	0.408	0.391
252	13.873	0.585	0.319	0.266	0.480
253	14.219	0.661	0.404	0.347	0.271
254	14.286	0.455	0.392	0.360	0.452
255	14.402	0.460	0.255	0.229	0.254
256	14.524	0.657	0.471	0.314	0.434
257	14.938	0.591	0.300	0.340	0.413
258	15.242	0.488	0.290	0.302	0.310
259	15.817	0.762	0.321	0.398	0.415
260	16.133	0.481	0.383	0.200	0.458
261	16.592	0.663	0.445	0.258	0.583
262	16.748	0.661	0.467	0.329	0.555
263	17.512	0.342	0.535	0.373	0.558