

Supporting Information

Table 4. Basin population⁵⁶, $\bar{N}$ standard deviation, σ^2 , relative fluctuation, λ , and other basin contributions

Basins	$\bar{N}$	σ^2	λ	Contribution analysis (%)
H₂C₂NHO 1a				
V(N,C)	1.88	1.03	0.56	V(C,H) 13.0; V(N,H) 18.2; V(C,C) 9.8
V1(C,C)	1.78	0.98	0.54	V(C,H) 16.8; V(N,C) 10.9; V2(C,C) 27.2
V2(C,C)	1.84	1.00	0.54	V(C,H) 16.6; V1(C,C) 26.4; V(N,C) 11.1
V(N,O)	1.31	0.93	0.66	V(N,H) 12.1; V1(O) 24.5; V(N,C) 12.8
V1(O)	2.96	1.12	0.42	V(N,O) 17.0; V2(O) 52.9
V2(O)	3.12	1.13	0.41	V1(O) 51.4
V(N,H)	2.18	0.89	0.36	V(N,C) 24.9; V(N,O) 13.2; V2(O) 8.3
H₄C₂NHO 4a				
V(N,C)	1.81	1.01	0.57	V(C,H) 12.0; V(N,H) 18.5; V(C,C) 9.8; V(N,C) 14.1; V(N,O) 10.2; V(O) 9.3
V(C,C)	1.82	0.98	0.54	V(C,H) 15.6; V(N,C) 10.5;
V(N,O)	1.25	0.91	0.67	V(N,H) 12.4; V(N,C) 12.7; V(O) 49.1
V(O)	6.11	1.10	0.18	V(N,H) 9.8; V(N,C) 8.1; V(N,O) 34.5
V(N,H)	2.19	0.90	0.37	V(N,C) 23.8; V(N,O) 12.8 V(O) 14.4
H₂C₂NH 7a				
V(N,C)	1.41	0.93	0.61	V(C,H) 13.6; V(N,H) 15.2; V1(C,C) 11.1; V(N) 26.4; V(N,C) 11.2; V2(C,C) 11.5
V1(C,C)	1.83	0.98	0.53	V(C,H) 16.4; V(N,C) 10.0; V2(C,C) 28.6
V2(C,C)	1.87	0.99	0.53	V(C,H) 16.4; V1(C,C) 28.1; V(N,C) 10.2;
V(N)	2.71	1.03	0.39	V(N,H) 28.7; V(N,C) 21.7;
V(N,H)	2.01	0.85	0.36	V(N,C) 18.0; V(N) 41.4;
H₄C₂NH 8a				
V(N,C)	1.50	0.94	0.60	V(C,H) 12.0; V(N,H) 15.8; V(C,C) 11.3; V(N,C) 12.0; V(N) 24.5
V(C,C)	1.85	0.98	0.52	V(C,H) 15.4; V(N,C) 10.4;
V(N)	2.52	1.01	0.41	V(N,H) 28.1; V(N,C) 21.5;
V(N,H)	1.98	0.86	0.38	V(N,C) 19.0; V(N) 38.6
H₂C₂NOH 3a				
V(N,C)	1.57	0.96	0.60	V(C,H) 14.1; V1(C,C) 10.8 V2(C,C) 11.0; V(N) 26.6; V(N,C)13.4
V1(C,C)	1.77	0.99	0.55	V(C,H) 16.3; V2(C,C) 26.4; V(N,C)10.5
V2(C,C)	1.75	0.99	0.55	V(C,H) 16.1; V2(C,C) 26.5; V(N,C)10.5
V1(N,O)	0.80	0.77	0.75	V(N) 19.6; V1(O) 23.2; V2(O) 22.1; V(N,C) 7.9
V1(O)	2.57	1.07	0.44	V(H,O) 25.9; V(N) 6.6; V1(O,N) 12.2; V2(O) 35.3
V2(O)	2.43	1.05	0.45	V(H,O) 25.6 V(N) 6.4; V1(O,N) 12 V1(O) 36.5
V(N)	2.87	1.07	0.39	V(N,C) 21.8; V1(O,N) 10.4; V1(O) 6.6; V2(O) 6.3
H₄C₂NOH 6a				
V(N,C)	1.57	0.97	0.60	V(C,H) 12.1; V(C,C) 11.1; V(N) 24.8; V(N,C) 13.2
V(C,C)	1.81	0.99	0.54	V(C,H) 15.5; V(N,C) 10.5;
V(N,O)	0.87	0.80	0.72	V(H,O) 8.6; V(N) 18.5; V(N,C) 8.6; V1(O) 22.3; V2(O) 22.2
V1(O)	2.45	1.05	0.45	V(H,O) 25.3; V(N) 5.7; V(O,N) 12.6; V2(O) 34.5
V2(O)	2.45	1.05	0.45	V(H,O) 25.3; V(N) 5.7; V(O,N) 12.7; V1(O) 35.1
H₂C₂N(HO) 2a				
V(N,C)	1.75	1.00	0.57	V(C,H) 13.5; V1(C,C) 10.2; V(N,C) 13.5; V(N,O) 8.1; V(N) 20.9; V2(C,C) 10.4
V1(C,C)	1.70	0.98	0.56	V(C,H) 16.5; V(N,C) 10.8; V2(C,C) 26.7
V2(C,C)	1.80	0.99	0.55	V(C,H) 16.6; V1(C,C) 26.0; V(N,C) 10.8;
V(N,O)	0.95	0.83	0.72	V1(O) 23.5; V2(O) 23.4; V(N,C) 11.9; V(N) 13.8
V1(O)	3.11	1.13	0.41	V2(O) 51.4; V(N,O) 12.7
V2(O)	3.10	1.13	0.41	V1(O) 51.3; V(N,O) 12.7; V(N) 6.0
V(N)	2.12	1.05	0.52	V(N,H) 19.4; V1(O) 6.9; V2(O) 7.0; V(N,C) 19.3 ;V(N,O) 8.7
V(N,H)	0.62	0.68	0.76	V1(O) 16.3; V2(O) 16.9; V(N,O) 6.0; V(N) 45.6
H₄C₂N(HO) 5a				
V(N,C)	1.74	1.00	0.57	V(C,H) 11.6; V(C,C) 10.4; V(N) 19.8; V(N,C) 13.2; V(N,O) 8.0
V(C,C)	1.79	0.99	0.55	V(C,H) 15.5; V(N,C) 10.7;
V(N,O)	0.84	0.80	0.75	V(N,H) 7.9; V(N) 10.3; V(N,C) 12.7; V1(O) 22.6; V2(O) 22.1
V1(O)	3.17	1.13	0.40	V(N,H) 7.3; V(N,O) 11.3; V2(O) 51.9
V2(O)	3.10	1.12	0.40	V(N,H) 7.2; V1(O) 52.6; V(N,O) 11.2
V(N)	1.90	1.03	0.55	V(N,H) 22.7; V(N,C) 18.9; V1(O) 6.1; V(N,O) 6.2; V2(O) 5.9
V(N,H)	0.80	0.76	0.72	V(N) 41.5; V1(O) 16.1; V(N,O) 8.7; V2(O) 15.6

Table 4. (cont.)

Basins	$\bar{N}$	σ^2	λ	Contribution analysis (%)
H₂C₂PHO 1b				
V(P,C)	2.26	1.06	0.49	V(C,H) 18.0; V(P,H) 10.0; V(C,C) 27.0; V(P,C) 13.4
V(C,C)	3.00	1.17	0.46	V(C,H) 18.0; V(P,C) 21.8
V1(P,O)	0.69	0.74	0.79	V(P,H) 6.8; V(P,C) 6.6; V1(O) 26.3; V2(P,O) 21.3 V2(O) 25.2
V2(P,O)	1.19	0.93	0.72	V(P,C) 7.1; V1(O) 33.6; V1(P,O) 13.79; V2(O) 22.6
V1(O)	3.38	1.19	0.42	V1(P,O) 10.2; V2(P,O) 20.3; V2(O) 43.0
V2(O)	2.44	1.10	0.49	V1(O) 50.9; V1(P,O) 11.6; V2(P,O) 16.2
V(P,H)	2.08	0.77	0.28	V(P,C) 19.1; V1(O) 8.7; V1(P,O) 6.4; V2(P,O) 7.2; V2(O) 8.5
H₄C₂PHO 4b				
V(P,C)	1.95	1.01	0.52	V(C,H) 17.4; V(P,H) 10.8; V(C,C) 13.0; V(P,C) 9.8; V(O) 6.7
V(C,C)	1.66	0.97	0.57	V(C,H) 14.5; V(P,C) 14.1 ;
V1(P,O)	0.73	0.76	0.79	V(P,C) 6.0; V2(P,O) 18.4 ; V(O) 51.9
V2(P,O)	1.02	0.88	0.76	V(P,H) 8.3; V1(P,O) 13.6 ; V(O) 54.8
V3(P,O)	0.07	0.26	0.97	V1(P,O) 17.3; V2(P,O) 22.0 ; V(O) 38.5
V(O)	5.84	1.18	0.24	V1(P,O) 21.7; V2(P,O) 30.8
V(P,H)	2.07	0.77	0.28	V(P,C) 19.0; V2(P,O) 11.0; V(O) 15.8
H₂C₂PH 7b				
V(P,C)	1.80	0.99	0.55	V(C,H) 17.0; V(P,H) 9.8; V(P,C) 11.3; V1(C,C) 14.0; V(P) 18.9; V2(C,C) 13.7
V1(C,C)	1.79	0.99	0.55	V(C,H) 14.8; V(P,C) 14.0; V2(C,C) 26.1
V2(C,C)	1.67	0.97	0.56	V(C,H) 14.4; V(P,C) 14.4; V1(C,C) 27.3
V(P)	2.28	0.96	0.40	V(P,H) 23.0; V(P,C) 21.0;
V(P,H)	2.03	0.75	0.28	V(P,C) 17.3 ; V(P) 36.7
H₄C₂PH 8b				
V(P,C)	1.55	0.95	0.58	V(C,H) 15.8; V(P,H) 10.9 ; V(P,C) 8.9 V(C,C) 14.4; V(P) 20.1
V(C,C)	1.95	1.01	0.53	V(C,H) 14.6; V(P,C) 12.7
V(P)	2.36	0.97	0.40	V(P,H) 22.9; V(P,C) 19.6;
V(P,H)	2.02	0.77	0.29	V(P,C) 16.9; V(P) 36.3
H₂C₂POH 3b				
V(P,C)	2.00	1.04	0.54	V(C,H) 17.7; V1(C,C) 13.3; V(P,C) 12.0; V(P) 18.2; V2(C,C) 13.6
V1(C,C)	1.51	0.95	0.60	V(C,H) 13.5; V(P,C) 16.0; V2(C,C) 25.7
V2(C,C)	1.65	0.98	0.58	V(C,H) 14.3; V1(C,C) 24.2; V(P,C) 15.4;
V(P,O)	1.30	0.92	0.65	V(O,H) 11.8; V(P) 12; V1(O) 27.3; V2(O) 27.1
V1(O)	2.40	1.07	0.47	V(O,H) 24.0; V(P,O) 20.2; V2(O) 34.5
V2(O)	2.38	1.07	0.48	V(O,H) 23.9; V(P,O) 20.1; V1(O) 34.6
V(P)	2.40	1.01	0.43	V(P,C) 20.0; V(P,O) 10.3; V1(O) 6.0; V2(O) 6
H₄C₂POH 6b				
V(P,C)	1.65	0.98	0.58	V(C,H) 16.0; V(C,C) 13.7; V(P) 19.6; V(P,C) 9.3
V(C,C)	1.86	1.01	0.55	V(C,H) 14.7; V(P,C) 13.14;
V(P,O)	1.26	0.91	0.66	V(O,H) 11.4; V(P) 12.0; V1(O) 26.1; V2(O) 28.3
V1(O)	3.15	1.35	0.58	V(O,H) 14.5; V(P,O) 12.0; V2(O) 21.7
V2(O)	2.56	1.09	0.47	V(O,H) 24.3; V(P,O) 19.7; V1(O) 32.9
V(P)	2.46	1.03	0.43	V(P,C) 18.9; V(P,O) 9.9; V1(O) 8.7; V2(O) 5.9
H₂C₂P(HO) 2b				
V(P,C)	2.23	1.07	0.51	V(C,H) 17.6; V(C,C) 26.2; V(P,C) 13.1; V(P) 11.7; V(O) 6.5
V(C,C)	3.00	1.17	0.46	V(C,H) 17.9; V(P,C) 21.8;
V(P,O)	1.63	1.00	0.61	V(P, H) 6.9; V(O) 61.3; V(P,C) 5.5;
V(O)	5.62	1.21	0.26	V(P,H) 13.6; V(P) 9.5; V(P,O) 42.3
V(P)	1.55	0.95	0.59	V(P,H) 28.2; V(P,C) 14.7; V(O) 15.3
V(P,H)	1.03	0.79	0.61	V(P) 40.6; V(P,O) 11.0; V(O) 31.4
H₄C₂P(HO) 5b				
V(P,C)	1.89	1.01	0.54	V(C,H) 16.5; V(C,C) 13.0; V(P,C) 9.5; V(P) 12.0
V(C,C)	1.72	0.99	0.56	V(C,H) 14.4; V(P,C) 13.9;
V(P,O)	1.45	0.97	0.64	V(P,H) 7.3; V1(O) 31.7; V2(O) 29.8
V1(O)	3.04	1.16	0.45	V(P,H) 7.8; V2(O) 43.7; V(P,O) 21.9
V2(O)	2.80	1.14	0.46	V(P,H) 7.3; V1(O) 45.6; V(P,O) 21.4
V(P)	1.44	0.93	0.60	V(P,H) 29.6; V1(O) 8.2; V2(O) 7.4; V(P,C) 14.2;
V(P,H)	1.10	0.81	0.60	V1(O) 16.1; V2(O) 14.5; V(P,O) 10.4; V(P) 39.3