

T.R.
GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NANOTECHNOLOGY

**COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF MXENE FAMILY
FOR DIFFERENT CO₂/H₂ MIXTURE ADSORPTION PROCESSES:
VSA, PSA, TSA, VTSA, AND PTSA**

MELİH DOĞANCI
A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF
MASTER OF SCIENCE
DEPARTMENT OF NANOSCIENCE AND NANOENGINEERING

GEBZE
2023

T.R.
GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NANOTECHNOLOGY

**COMPUTATIONAL INVESTIGATION
OF MXENE FAMILY FOR DIFFERENT
CO₂/H₂ MIXTURE ADSORPTION
PROCESSES: VSA, PSA, TSA, VTSA, AND
PTSA**

MELİH DOĞANCI
**A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF
MASTER OF SCIENCE
DEPARTMENT OF NANOSCIENCE AND
NANOENGINEERING**

THESIS SUPERVISOR
ASSISTANT PROFESSOR SADIYE VELİOĞLU

GEBZE
2023

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
NANOTEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ

MXENE AİLESİNİN FARKLI
ADSORPSİYON PROSESLERİNDE CO₂/H₂
KARIŞIMI AYRIMININ HESAPLAMALI
ARAŞTIRILMASI: VSA, PSA, TSA, VTSA VE
PTSA

MELİH DOĞANCI
YÜKSEK LİSANS TEZİ
NANOBİLİM VE NANOMÜHENDİSLİK ANABİLİM
DALI

DANIŞMANI
DR. ÖĞRETİM ÜYESİ SADIYE VELİOĞLU

GEBZE
2023

SUMMARY

The separation of CO₂ from H₂ is a crucial process in the field of petroleum refining and the production of hydrogen, methanol, or ammonia. Furthermore, CO₂ is classified as a greenhouse gas, and the accelerated accumulation of this compound within the Earth's atmosphere is responsible for the phenomenon of global warming. This escalating trend not only contributes to the occurrence of natural disasters but also poses a significant threat to various forms of life. Hence, it is imperative to eliminate CO₂ from industrial gas streams, including syngas, natural gas, and biomass. Various separation processes can be employed for this purpose; however, adsorption is predominantly favored owing to its reversible nature and superior separation capacity. The exceptional properties of MXene nanomaterials, starting with the discovery of the first member Ti₃C₂T_x in 2011, have generated significant interest in a wide range of applications. These materials have been acknowledged as highly promising candidates for applications in gas separation. In this study, our objective was to investigate the separation performances of the blooming MXene family, consisting of 730 members, through molecular simulations. The following list enumerates the top 10 MXene structures that have demonstrated exceptional performance in various adsorption processes. The most optimal MXenes for the CO₂/H₂ mixture primarily comprise chromium (Cr), molybdenum (Mo), and tungsten (W). When comparing the selectivities of CO₂/H₂ adsorption and %R, it is observed that the MXene family demonstrates superior performance compared to the COF family. Furthermore, a significant number of MXene structures within this family surpass the criteria of R%≥85% in comparison to the MOF family, under both PSA and VSA conditions. Finally, the performance of MXene adsorbents was affected by the alteration of both temperature and pressure, which enable them to be used in different adsorption processes. The findings derived from this thesis will play a crucial role in the application of the MXene family as a novel adsorbent material and will provide valuable insights into the advancement of experimental investigations.

Keywords: MXene Nanomaterials, Adsorption Processes, CO₂/H₂ Mixture Separation, Monte Carlo Simulations.

ÖZET

CO₂'nin H₂'den ayrılması, petrol arıtma ve hidrojen, metanol veya amonyak üretimi alanında çok önemli bir süreçtir. Ayrıca, CO₂ bir sera gazı olarak sınıflandırılır ve bu bileşiğin Dünya atmosferinde hızlandırılmış birikimi küresel ısınma olgusundan sorumludur. Artan bu eğilim, sadece doğal afetlerin ortaya çıkmasına katkıda bulunmakla kalmaz, aynı zamanda çeşitli yaşam biçimleri için önemli bir tehdit oluşturur. Bu nedenle, CO₂'in sentez gazı, doğal gaz ve biyokütle dahil olmak üzere endüstriyel gaz akışlarından uzaklaştırmak gereklidir. Bu amaçla çeşitli ayırma işlemleri kullanılabilir; ancak adsorpsiyon, tersine çevrilebilir doğası ve üstün ayırma kapasitesi nedeniyle ağırlıklı olarak tercih edilir. 2011 yılında ilk üye Ti₃C₂T_x'in keşfedilmesiyle başlayan MXenes'in üstün özellikleri, geniş uygulama yelpazesinde büyük ilgi uyandırdı. Bu malzemeler, gaz ayırma uygulamaları için oldukça umut verici adaylar olarak kabul edilmiştir. Bu çalışmada amacımız, 730 üyeden oluşan özgün Mxene ailesinin moleküler simülasyonlar yoluyla ayırma performanslarını araştırmaktır. CO₂/H₂ adsorpsiyonuna dayalı ayırmaya odaklanıldı. Çeşitli adsorpsiyon süreçlerinde olağanüstü performans sergileyen ilk 10 Mxene yapısına bakıldığında CO₂/H₂ karışımı için en uygun Mxene'ler başlıca krom (Cr), molibden (Mo) ve tungsten (W) içerir. CO₂/H₂ adsorpsiyon seçicilikleri ve %R karşılaştırıldığında, Mxene ailesinin COF ailesine göre üstün performans gösterdiği gözlemlenmiştir. Ayrıca, bu aile içindeki önemli sayıda Mxene yapısı, hem PSA hem de VSA koşulları altında MOF ailesine kıyasla R%≥%85 kriterlerini aşmaktadır. Son olarak, Mxene adsorbanlarının performansı hem sıcaklık hem de basınçtaki değişimden etkilenmektedir ki bu da çeşitli adsorpsiyon proseslerine uygunluğunu göstermektedir. Bu tezden elde edilen bulgular, Mxene ailesinin yeni bir adsorban malzemesi olarak uygulanmasında çok önemli bir rol oynayacak ve deneysel araştırmaların ilerlemesine ilişkin değerli bilgiler sağlayacaktır.

Anahtar Kelimeler: Mxene Nanomalzemesi, Adsorpsiyon Prosesleri, CO₂/H₂ Gaz Karışımı Ayırma, Monte Carlo Simülasyonu.

ACKNOWLEDGEMENTS

Since I started my master's degree at the Gebze Technical University Nanotechnology Institute, my tutor, Dr. Sadiye VELIOGLU, has been very helpful. I'd like to thank her very much. She helped me figure out how to study the molecular modeling in a very patient way. I think it was a chance thing that I met her.

To my loving mom, dad, sister, and brother, who helped me a lot when I started my master's degree.

I'd like to thank research assistant Tugba BAYSAL for all the help she's given me with my thesis from the start. I want to thank research assistant Mehmet Emre AKOZ for the technical help he gave me. I want to thank Sirin MASSOUMILARI for all the help and support she gave me with my thesis.

Last but not least, I'd like to thank my friends at MEM-CES for their help. I'd also like to thank Selin ADIGÜZEL, Nurseda AKGURSU, and Sueda AKSAN for helping with the exercises.

All of the math in this thesis was done at the TÜBİTAK ULAKBİM High Performance and Grid Computing Center using TRUBA tools. Technological Research Council of Turkey (TUBITAK, Grant No. 120M180) is acknowledged.

TABLE of CONTENTS

	<u>Page</u>
SUMMARY	v
ÖZET	vi
ACKNOWLEDGEMENTS	vii
TABLE of CONTENTS	viii
LIST of ABBREVIATIONS and ACRONYMS	x
LIST of FIGURES	xiii
LIST of TABLES	xv
1. INTRODUCTION	1
2. CO ₂ /H ₂ MIXTURE SEPARATION	5
2.1. Hydrogen Production	5
2.1.1. Steam Methane Reforming	5
2.1.2. Electrolysis	6
2.1.3. Thermochemical Water Splitting	8
2.2. Why is the CO ₂ /H ₂ Separation Important?	10
2.3. CO ₂ Capture	11
2.4. Adsorption Processes	12
2.4.1. Pressure Swing Adsorption	13
2.4.2. Vacuum Swing Adsorption	14
2.4.3. Temperature Swing Adsorption	15
2.4.4. Hybrid Swing Adsorption Processes	16
3. HIGH THROUGHPUT COMPUTATIONAL SCREENING	18
4. MXENE NANOMATERIALS	21
4.1. History of Mxene Family	21
4.2. Application of Mxene Nanomaterial	23
4.3 Mxene Family as Adsorbents	25
5. MOLECULAR SIMULATION TECHNIQUES	28
5.1. Molecular Dynamics Simulation	28
5.2. Monte Carlo Simulation	30
5.3. Force Field	30

5.4. Ensembles	32
6. SIMULATION METHODOLOGY	35
6.1. Compiling Mxene Database	35
6.2. Optimization and Charge Assignment	36
6.3. Molecular Simulation Details for Gas Adsorption	37
6.4. Adsorbent Selection Metrics	39
7. RESULTS AND DISCUSSION	42
7.1. Comparison of Mixture Adsorption Selectivity – Working Capacity Relation for Each Adsorption Process	42
7.2. Effect of R% and APS Performance on Each Adsorption Process	45
7.3. Promising 10 Mxenes for CO ₂ /H ₂ Mixture Separation	48
7.4. Effect of Temperature to Mxenes	52
8. CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	54
REFERENCES	56
BIOGRAPHY	68
APPENDIX A	69
APPENDIX B	79
APPENDIX C	100
APPENDIX D	121
APPENDIX E	142
APPENDIX F	163
APPENDIX G	184
APPENDIX H	206
APPENDIX I	228

LIST of ABBREVIATIONS and ACRONYMS

<u>Abbreviations and Acronyms</u>	<u>Explanations</u>
2D	: Two Dimensional
ABNR	: Adjusted Newton-Raphson
AC	: Activated Carbon
AFM	: Adsorbent Figure of Merit
APS	: Adsorbent Performance Score
C2DB	: Computational 2D Materials Database
CCS	: Carbon Capture Storage
COF	: Covalent Organic Framework
DDEC	: Density Derived Electrostatic and Chemical Charges
DFT	: Density Functional Theory
DFTB	: Density Functional-Based Tight-Binding
DND	: Double Numerical Plus-d function
DOE	: United States Department of Energy
EERE	: Energy Efficiency and Renewable Energy
ESP	: Electrostatic Potential
FTIR	: Fourier Transform Infrared Spectroscopy
GCMC	: Grand Canonical Monte Carlo
IPCC	: Intergovernmental Panel on Climate Change
LJ	: Lennard-Jones
MC	: Monte Carlo
MD	: Molecular Dynamics
MOF	: Metal Organic Framework
NMR	: Nuclear Magnetic Resonance
NPH	: Isoenthalpic-isobaric Ensemble
NPT	: Isothermal-Isobaric Ensemble
NVE	: Micro-Canonical ensemble
NVT	: Canonical Ensemble
PAF	: Porous Aromatic Frameworks
PCN	: Porous Coordination Networks

PEM	:	Proton Exchange Membrane
PSA	:	Pressure Swing Adsorption
PTSA	:	Pressure- Temperature Swing Adsorption
QEq	:	Charge Equilibration
R%	:	Percent Regenerability
RDF	:	Radial Distribution Function
SCC	:	Spearman Correlation Coefficient
SMR	:	Steam Methane Reforming
SOE	:	Solid Oxide Electrolysis
SRCC	:	Binary Spearman Correlation Coefficients
SSA	:	Specific Surface Area
SSP	:	Sorbent Selection Parameter
Syngas	:	Synthesis Gas
ToBaCCo	:	Topologically Based Crystal Constructor
TraPPE	:	Transferable Potentials for Phase Equilibria
TSA	:	Temperature Swing Adsorption
UFF	:	Universal Force Field
VSA	:	Vacuum Swing Adsorption
VTSA	:	Vacuum-Temperature Swing Adsorption
YSZ	:	Yttria-Stabilized Zirconia

LIST of FIGURES

<u>FigureNo:</u>	<u>Page</u>
3.1:	19
4.1:	22
4.2:	23
6.1:	36
6.2:	39
7.1	43
7.2:	44
7.3:	46
7.4:	47
7.5:	51
7.6:	52

7.7:	R % and APS of MXene adsorbents for the separation of CO ₂ /H ₂ :25/75, temperature (a) 250 °C and (c) 120 °C mixture at TSA, PTSA, and VTSA conditions.	53
------	--	----



LIST of TABLES

<u>TableNo:</u>		<u>Page</u>
5.1:	Common ensembles which are applicable to both MD and MC simulations.	33
6.1:	Set up parameters of MXene structures.	38
6.2:	Adsorption–desorption conditions of processes.	40
6.3:	Adsorbent metrics used in gas separation for MXene adsorbents.	41
7.1:	Promising 10 MXene adsorbents defined based on $R\% > 90\%$ and APS ranking at PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA processes for CO ₂ /H ₂ :25/75 mixture.	49

1. INTRODUCTION

Hydrogen (H_2) is a clean and versatile energy source that has gained significant attention due to its potential to decarbonize various sectors, such as transportation and industry [1]. H_2 energy is renewable, non-toxic, and emits only water as a byproduct, making it an attractive alternative to fossil fuels [2]. It can be produced using a variety of feedstocks, such as water and biomass, and has the potential to increase energy security and reduce dependence on the imported fuels. Its high energy density and versatility enable it to be used in various applications, including fuel cells, power generation, and heating [3]. However, the current state of H_2 energy is still in its early stages and facing various challenges, such as high production costs, infrastructure development, storage limitations, and production of CO_2 , depending on the synthesis approach [4]. Scaling up H_2 production and distribution infrastructure remains a challenge that requires significant investments and policy support. Despite these challenges, the growing interest and investment in H_2 energy suggest that it may play a crucial role in the global transition towards a more sustainable energy system [5].

H_2 is mainly produced by the steam methane reforming (SMR) process, which involves reacting natural gas with steam in the presence of a catalyst to produce H_2 and byproducts [6]. SMR is currently the most cost-effective method and has a high production capacity, but it relies on non-renewable natural gas and emits greenhouse gases [7]. Another method is water electrolysis, which uses electricity to split water into O_2 and H_2 . It uses renewable energy sources, such as wind or solar, to produce H_2 without emitting pollutants, but it is currently more expensive and has a lower production capacity [8]. Another promising method is for the H_2 production that adsorption of H_2 byproduct selectively from the output stream of chemical processes including different gas mixtures. However, this method is still in the research and development phase [9]. Overall, the choice of H_2 production method depends on various factors, such as cost, availability of resources, and environmental impact.

Reducing CO_2 emissions from H_2 production processes is a critical step towards achieving a sustainable energy future. Several processes have been developed to address this challenge of carbon capture and storage, including amine scrubbing, cryogenic distillation, membrane, and adsorption technologies. Carbon

capture and storage involves capturing CO₂ emissions from the H₂ production process and storing them underground, while membrane separation uses membranes to selectively separate H₂ from CO₂. The process of amine scrubbing has been observed to be efficacious in eliminating CO₂ from gas streams. However, it has been noted that this method is associated with certain limitations, including elevated energy consumption for solvent regeneration and the possibility of solvent degradation. These factors have the potential to result in escalated operational expenses and environmental apprehensions [10]. On the other hand, cryogenic distillation is capable of attaining elevated levels of purity. However, this method is linked to substantial capital and operational expenses due to the energy-intensive character of the process and the requirement for intricate cryogenic equipment [10]. Adsorption is a promising alternative, which involves using porous materials to selectively adsorb CO₂ from the H₂ production process. This technology has several advantages, such as low energy consumption, high selectivity, and cost-effectiveness, making it a promising process for reducing CO₂ emissions from the H₂ energy production processes. For CO₂ capture from H₂ streams via adsorption processes, several studies have investigated the use of various adsorbent materials such as activated carbon, zeolites, metal-organic frameworks (MOFs), and covalent organic frameworks (COFs) [14]. Overall, adsorption technology has the potential to play a significant role in reducing CO₂ emissions and promoting a sustainable H₂ economy [11].

Adsorption is a vital process in various fields, such as environmental remediation, chemical separation, and energy storage, due to its ability to selectively remove and retain target species from a mixture [12]. The efficiency of adsorption depends on the choice of the adsorbent material, which is governed by factors such as surface area, pore size distribution, and chemical functionality [13]. A broad spectrum of materials has been explored as adsorbents. The vast diversity of these materials offers the potential to tailor their properties to specific applications, which can lead to the enhanced adsorption performance. Consequently, the unique way is to explore new adsorbent materials for specific gas separation applications and understand their adsorption mechanisms to optimize their performance.

MXenes are a promising class of two-dimensional (2D) materials composed of transition metal carbides or nitrides with a general formula of $M_{n+1}X_nT_x$, where M is a transition metal, X represents carbon or nitrogen, and T_x stands for surface

functional groups, such as $-(OH)_2$, $-O_2$, or $-F_2$ [15]. Owing to their high surface area, tunable surface chemistry, and excellent electrical conductivity, Mxene nanomaterial family have garnered significant attention for various applications, including energy storage, catalysis, and environmental remediation [16]. Despite the growing interest in Mxene family, only a small fraction of their potential compositions has been investigated [17]. Therefore, in order to fully leverage their potentials in various gas separation applications, it is necessary to systematically investigate the adsorption properties of a large number of Mxene members.

Given the vast number of Mxene compositions and the associated experimental challenges in synthesizing and characterizing each variant, molecular simulations offer a powerful and efficient means to explore their adsorption properties [18]. Molecular simulations are computational techniques that employ classical or quantum mechanical models to describe and predict the behavior of molecules and materials at the atomic level [19]. By conducting molecular simulations, researchers can gain insights into the adsorption mechanisms, energetics, and kinetics of the target species on Mxene nanomaterials, which in turn can guide the rational design and optimization of Mxene-based adsorbents [20]. Moreover, molecular simulations provide valuable information on the structure-property relationships of Mxene adsorbents, enabling the identification of key factors that govern their adsorption performance. In light of these advantages, molecular simulations are indispensable for the comprehensive understanding and development of Mxene nanomaterials as adsorbents in various applications.

In this thesis, all existing Mxene types reported in the experimental studies and suggested through theoretical investigations have been comprehensively collected and compiled into a Mxene library. Gas adsorption simulations were carried out for the gas mixture having a ratio of 75% H_2 and 25% CO_2 , as the most commonly obtained industrial product concentration generally contained 74% H_2 , 18% CO_2 , and 8% other gases [21]. The Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) simulation is widely used in simulating adsorption equilibria, as it directly provides the number of moles of molecules in the pores or channels. Therefore, the GCMC simulation method has been applied to investigate the gas adsorption performance of Mxene structures in a high-throughput screening manner. Adsorption measurements were conducted at three different pressures (0.1, 1, and 10 bar) and three different temperatures (35, 120, and 250°C). Based on calculated adsorption values, several

adsorption performance metrics were determined for Pressure Swing Adsorption (PSA), Vacuum Swing Adsorption (VSA), Temperature Swing Adsorption (TSA), Pressure-Temperature Swing Adsorption (PTSA), and Vacuum-Temperature Swing Adsorption (VTSA) processes, and the promising Mxene adsorbents were identified for each process.



2. CO₂/H₂ MIXTURE SEPARATION

2.1. Hydrogen Production

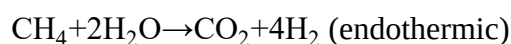
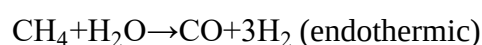
H₂ is a versatile energy carrier that can be produced from a variety of sources and used in a wide range of applications. There are several methods for producing H₂, but three main processes are steam methane reforming, electrolysis, and thermochemical water splitting [22]. The choice of method depends on factors such as the availability of feedstocks, the cost of production, and the intended use of the H₂ [23]. In this section, we will provide a detailed overview of these three main H₂ production processes.

2.1.1. Steam Methane Reforming

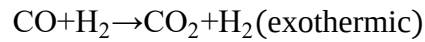
Steam methane reforming (SMR) is a well-established and commercially viable method for producing H₂ from natural gas. The process involves the reaction of methane with steam at high temperatures and pressures, in the presence of a catalyst, to produce H₂, CO, and CO₂ [24].

The SMR process can be divided into three main steps: (1) methane pre-treatment, (2) steam reforming, and (3) water-gas shift reaction.

- **Methane pre-treatment:** Natural gas, primarily composed of methane, is desulfurized and preheated before entering the reformer. This step is crucial to prevent catalyst poisoning and ensure efficient conversion.
- **Steam reforming:** The preheated methane reacts with steam at temperatures between 700-1100°C and pressures of 15-30 bar [25], in the presence of a nickel-based catalyst. The primary reactions occurring during this step are:



- **Water-gas shift reaction:** The carbon monoxide produced in the previous step reacts with steam to form CO₂ and additional H₂ [26]:



The utilization of SMR provides various benefits such as proficient H₂ production, established technological infrastructure, and the capacity to generate H₂ in significant quantities. The latest progressions in the discipline encompass the creation of innovative catalysts, streamlining of procedures, and amalgamation with carbon capture and storage (CCS) technologies with the aim of curtailing greenhouse gas emissions [27].

Although SMR offers benefits, it encounters obstacles such as elevated energy consumption, emissions of greenhouse gases, and dependence on fossil fuels. In order to tackle these concerns, scientists are currently investigating substitute feedstocks, such as biogas and waste-derived syngas, while also devising more effective catalysts and process designs [28]. Furthermore, the incorporation of sustainable energy sources and carbon sequestration technologies can augment the ecological viability of H₂ production based on SMR.

2.1.2. Electrolysis

The process of electrolysis has been widely accepted as a feasible and profitable technique to generate H₂ from H₂O, utilizing electricity as the primary source of energy. This process entails the breakdown of H₂O into H₂ and O₂ through the application of an electrical current. The phenomenon takes place within an electrolytic cell comprising of two electrodes, namely an anode and a cathode, which are immersed in an electrolyte solution [29]. Upon application of an electric current, the water molecules placed at the anode undergo oxidation, leading to the release of hydrogen ions (protons) and oxygen gas. Subsequently, the protons undergo migration via the electrolyte towards the cathode, where they undergo reduction to yield hydrogen gas. The electrolysis processes can be classified into three primary categories, namely alkaline electrolysis, proton exchange membrane (PEM) electrolysis, and solid oxide electrolysis.

The method of H₂ production through alkaline electrolysis is a well-established and extensively utilized approach. The utilization of an alkaline electrolyte, such as potassium hydroxide (KOH) or sodium hydroxide (NaOH), is common practice. This is due to the electrolyte's ability to offer elevated ionic conductivity and promote the movement of protons. Alkaline electrolysis is a highly advantageous process due to its cost-effectiveness, ease of use, and long-standing technological advancements. Notwithstanding its potential, this technology exhibits suboptimal efficiency and sluggish reaction kinetics, thereby constraining its scalability and compatibility with sustainable energy sources [31].

The field of electrolysis has seen a recent development known as Proton Exchange Membrane (PEM) electrolysis, which is also referred to as Polymer Electrolyte Membrane electrolysis. The utilization of a solid polymer electrolyte, such as Nafion, enables the achievement of higher current densities and enhanced efficiency in comparison to alkaline electrolysis. According to Carmo *et al.* [30], the compact design, high efficiency, and fast response time are among the primary benefits of PEM electrolysis, rendering it a suitable option for integration with intermittent renewable energy sources. Nevertheless, the utilization of precious metal catalysts, such as platinum, in the process can escalate the overall cost, rendering it more expensive [31].

The Solid Oxide Electrolysis (SOE) technology is a nascent innovation that functions at elevated temperatures ranging from 800 to 1000°C. It employs a solid oxide electrolyte, specifically yttria-stabilized zirconia (YSZ). According to Pandiyan *et al.* [32], the utilization of non-precious metal catalysts and enhanced reaction kinetics can be possible by the elevated operating temperature, leading to increased efficacy and reduced expenses in contrast to alternative electrolysis techniques. Nonetheless, the elevated temperature presents obstacles with regards to the durability of materials and effective thermal regulation, necessitating resolution for the prosperous implementation of the technology.

Notwithstanding its benefits, electrolysis encounters obstacles such as elevated energy consumption, substantial capital expenditures, and the requirement for water of high purity. In order to tackle these concerns, scientists are currently exploring novel electrolytes, such as solid oxide electrolytes, and aiming to enhance the efficiency and cost-effectiveness of electrolysis processes. Furthermore, the

incorporation of sustainable energy sources and energy storage mechanisms can enhance the ecological and financial feasibility of H₂ production through electrolysis.

2.1.3. Thermochemical Water Splitting

Thermochemical water splitting has garnered significant attention as a promising approach for H₂ production among the various available methods owing to its capacity for scalability and high efficiency [33]. Thermochemical water splitting is a chemical process that involves the utilization of heat, usually sourced from concentrated solar power or nuclear energy, to facilitate a sequence of chemical reactions that lead to the production of H₂ and O from H₂O [34]. It presents a number of benefits in comparison to traditional electrolysis, such as enhanced efficacy, reduced operational temperatures, and the possibility of hybrid usage with alternative energy frameworks.

Several thermochemical cycles have been suggested and examined for the purpose of H₂ production. Among these, the sulfur-iodine (SI), hybrid sulfur (HyS), and metal oxide-based cycles are the most notable [35, 36].

SI cycle has been extensively investigated and is operational within a temperature range of 850 to 950°C [37]. The process comprises three primary reactions that entail the generation of hydrogen iodide (HI), sulfur dioxide (SO₂), and H₂. The SI cycle has been highly studied owing to its remarkable theoretical efficiency, which has the potential to attain a maximum of 50% [38]. Notwithstanding the potential benefits of this cycle, the practical application thereof is impeded by the corrosive properties of the chemicals utilized, as well as the requirement for advanced materials capable of withstanding elevated temperatures and pressures.

HyS cycle is a promising thermochemical process that involves the combination of the thermochemical production of sulfuric acid (H₂SO₄) with the electrochemical reduction of H₂SO₄ to produce H₂. The present cycle functions at a decreased temperature of approximately 850°C in contrast to the SI cycle, thereby mitigating the material-related challenges [37]. The requirement for a proficient and long-lasting electrolysis system in the electrochemical stage persists as a crucial concern towards the commercialization of the HyS cycle.

Metal oxide-based cycles, specifically those utilizing cerium oxide (CeO_2) and ferrite (Fe_3O_4), have garnered significant interest due to their capacity to operate at lower temperatures (ranging from 700°C to 1400°C) and their utilization of non-corrosive materials [38]. The above-mentioned processes entail the conversion of metal oxides through reduction and oxidation reactions, resulting in the generation of H_2 and O , correspondingly. Although these cycles exhibit potential, additional investigation is required to enhance their effectiveness and create appropriate substances for widespread deployment [39].

Thermochemical water splitting presents a viable avenue for the sustainable generation of H_2 , boasting significant potential for both high efficiency and widespread deployment. Despite notable advancements in comprehending and enhancing diverse thermochemical cycles, obstacles persist with regards to the advancement of materials, integration of systems, and mitigation of expenses. Consequently, considering these challenges, alternative approaches to achieve optimal H_2 production are currently under investigation.

Consequently, upon examining the purity rates of these techniques in the context of H_2 production, according to the Energy Efficiency and Renewable Energy (EERE) organization, the process of SMR generally results in the production of H_2 with a purity ranging from 70% to 85%. Again, considering the data provided by the EERE [23], the process of electrolysis yields H_2 having a purity level of around 99.8% when utilizing alkaline electrolyzers. However, concerning PEM electrolyzers, fortunately the purity level of H_2 can reach up to 99.999%. Thermochemical Water Splitting yields H_2 purity levels that vary between 90% and 99% depending on the specific thermochemical cycle and operational parameters [23]. Adsorption techniques, namely PSA and TSA, are essential in enhancing the purity of H_2 in the presence of different impurity levels. By employing adsorption techniques, it is possible to enhance the purity of H_2 for SMR to a level of 99.9% [23]. Moreover, this approach can be further optimized for other production methods, thereby guaranteeing that the H_2 generated satisfies rigorous specifications for diverse applications. Adsorption process will be given in detail in the following section.

2.2. Why is the H₂/CO₂ Separation Important?

The rise in the concentration of greenhouse gases, specifically CO₂, within the atmosphere has resulted in noteworthy ecological predicaments, such as alterations in climate patterns and the acidification of oceans. The industrial sector is a substantial contributor to CO₂ emissions, with the manufacture of H₂ and the utilization of fossil fuels representing noteworthy sources. The separation of CO₂ from H₂ is a vital measure in mitigating the environmental concerns. Separation procedure facilitates the sequestration and containment of CO₂ and the generation of uncontaminated H₂, which can serve as a sustainable energy medium.

The emission of CO₂ has a multitude of detrimental impacts on the environment, such as the exacerbation of global warming, the acidification of oceans, and the contamination of the air. The Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) has identified CO₂ emissions as the principal contributor to climate change, resulting in the escalation of sea levels, occurrences of severe weather, and the depletion of biodiversity [40]. The process of CO₂ dissolution in seawater, known as ocean acidification, has deleterious impacts on marine ecosystems, specifically on shell-forming organisms and coral reefs. In order to address the negative consequences of CO₂ emissions, nations have implemented a range of strategies, such as the integration of sustainable energy sources, the establishment of carbon pricing mechanisms, and the deployment of carbon capture and storage technologies [41].

The process of Carbon Capture and Storage (CCS) entails the capturing of CO₂ emissions from industrial activities and subsequently storing them in geological formations or other designated storage sites. The separation of H₂/CO₂ is a crucial process in CCS since it facilitates the extraction of CO₂ from flue gases and other origins. The sequestered CO₂ can subsequently be deposited in appropriate geological structures, thereby mitigating its environmental impact. Therefore, CCS technologies possess the capability to substantially mitigate CO₂ emissions from power plants and other industrial sources, thereby making a valuable contribution to the worldwide endeavor to tackle climate change [42].

Adsorption-based techniques, namely pressure swing adsorption (PSA) and temperature swing adsorption (TSA), have exhibited potential in the separation of

H₂/CO₂ [43]. The above-mentioned techniques are predicated upon the discerning adsorption of CO₂ onto a solid adsorbent substrate, thereby facilitating the separation of H₂ and CO₂. The use of PSA and TSA processes presents numerous benefits in comparison to the alternative separation methodologies. These advantages encompass reduced energy consumption, elevated selectivity, and possibility of hybrid usage with additional processes [44]. Notwithstanding, there exist obstacles in the development of effective and economical adsorbent materials, along with the difficulties for widespread application.

2.3. CO₂ Capture

CO₂ is a major greenhouse gas that contributes significantly to global warming and climate change. It is crucial to develop a process or technology that can effectively capture CO₂ from various sources.

- **Post-combustion capture;** The process of post-combustion capture entails the capture of CO₂ from the flue gas of power plants subsequent to the combustion process. Typical techniques encompass the utilization of amine-based solvents for chemical absorption and chilled ammonia for physical absorption [47].
- **Pre-combustion capture;** The pre-combustion capture method involves the capture of CO₂ prior to the combustion process through the conversion of fuel into a H₂ and CO₂ mixture. Subsequently, the CO₂ is isolated and sequestered, whereas the H₂ is employed as an environmentally friendly source of energy [48].
- **Oxy-fuel combustion;** The process of oxy-fuel combustion entails the combustion of fuel in a blend of recycled flue gas and pure oxygen, leading to a significant concentration of CO₂ in the exhaust gas. This concentration facilitates the process of capturing and storing the CO₂ [49].

Despite the presence of diverse CO₂ capture technologies, there exist challenges that impede their extensive application. The aforementioned factors

encompass elevated energy demands, substantial expenses in both initial investment and ongoing operations, and a requisite for extensive infrastructure on a grand scale. Furthermore, certain techniques, such as chemical absorption, have the potential to produce detrimental secondary substances that necessitate additional processing [50].

Adsorption is a promising CO₂ capture technology that has gained significant attention in recent years. This technique involves the selective adsorption of CO₂ onto a solid adsorbent material, such as activated carbon, zeolites, or metal-organic frameworks (MOFs). Adsorption offers several proven advantages over other CO₂ capture methods, including lower energy requirements, fewer harmful byproducts, and the potential for regeneration and reuse of the adsorbent material. Wang *et al.* [51] successfully reviewed the effective capture of CO₂ through the utilization of a MOF family, whereas Lui *et al.* [52] exhibited the prospective application of activated carbon (AC) obtained from waste biomass for CO₂ adsorption. These studies evidently highlight the importance of adsorption-driven CO₂ separation research.

2.4. Adsorption Processes

Adsorption is a surface phenomenon that involves the sorption of molecules or atoms from a fluid, which can be either a gas or a liquid, to the surface of a solid material, which called as the adsorbent. The mechanism is propelled by the intermolecular forces of attraction that exist between the adsorbate, which refers to the substance undergoing adsorption, and the adsorbent. Adsorption is a highly versatile technique that finds extensive applications in various industries such as environmental, chemical, and pharmaceutical, among others [53].

There are numerous benefits associated with adsorption. Adsorption processes exhibit a high degree of selectivity, thereby enabling the separation of distinct constituents from complex mixtures. Furthermore, it is noteworthy that they frequently necessitate lower energy consumption in contrast to alternative separation methodologies, such as distillation or evaporation. Adsorption systems possess the capability to be conveniently adjusted in size for diverse applications, and the adsorbents utilized in these systems can frequently undergo regeneration and be reused, thereby minimizing waste generation, and decreasing expenses [54]. In

addition, the utilization of adsorption mechanisms plays a significant role in promoting environmental sustainability through the elimination of contaminants from both aqueous and gaseous media.

Adsorption is a process that finds extensive utilization in various fields such as water treatment, gas separation, pharmaceuticals, food industry, and environmental remediation. Adsorption is a widely employed technique in the domain of water treatment for the elimination of impurities, including but not limited to heavy metals, organic compounds, and pathogens, from water sources [55]. Adsorption process is also used in the pharmaceutical industry for the purpose of separation and purification of pharmaceutical compounds, as well as in the development of drug delivery systems [56]. Adsorption processes are commonly utilized in the food industry to eliminate unwanted elements, such as flavors, odors, and colors, from food products [57]. Finally, adsorption processes are very effective in gas separation as well for the purpose of separation and purification of various gases, including but not limited to air, natural gas, and H_2 .

The adsorption processes can be classified into five distinct processes, namely PSA, VSA, temperature swing adsorption (TSA), pressure and temperature swing adsorption (PTSA), and vacuum and temperature swing adsorption (VTSA). These processes entail manipulating the pressure or temperature to promote the adsorption and desorption of specific gases, thereby facilitating effective separation and refinement.

2.4.1. Pressure Swing Adsorption

PSA process is based on the differential adsorption of gas components onto a solid adsorbent material under varying pressure conditions. The procedure comprises of two primary stages, namely adsorption under high pressure and desorption under low pressure, especially atmospheric conditions. PSA is a significant technology employed in diverse industries such as air separation, H_2 production, and carbon capture. It enables the separation and purification of target gases through the selective adsorption of specific gas components, thereby facilitating the removal of impurities [58].

PSA operates on the basic principle of selectively adsorbing gas components onto a solid adsorbent material. Adsorbents, including zeolites, AC, MOFs, COFs, exhibit distinctive pore structures and surface characteristics that facilitate their selective adsorption of particular gas types [54]. The performance of PSA processes is subject to various factors, such as primarily the selection of adsorbent material, and then the arrangement of adsorption columns, and the duration of the cycling process, etc. In PSA process, adsorption capacity of an adsorbent can be improved by altering the pressure, whereas reducing the pressure can expedite the desorption process.

The utilization of PSA in H₂ production is a common practice for the purification of H₂ from various H₂-rich gas streams, including steam methane reforming. This process has gained significant attention due to the increasing need for clean energy in various sectors, such as transportation and chemical production. PSA process has been investigated as a viable option for capturing CO₂ from flue gas emissions, which is crucial in addressing the pressing need for carbon capture and storage solutions to mitigate the effects of climate change [62].

2.4.2. Vacuum Swing Adsorption

The development of several adsorption-based processes has been driven by the growing need for gas separation techniques that are both cost-effective and efficient. VSA is a recurring adsorption process that functions under vacuum conditions. This method presents several benefits, including reduced energy consumption and increased selectivity in comparison to alternative adsorption processes. It operates based on pressure difference, similar as PSA but relies on the preferential adsorption of gas components onto an adsorbent at atmospheric conditions and desorption in a vacuum environment. More specifically, in the adsorption process, the gas mixture is introduced into the adsorption column, where the adsorbent material selectively adsorbs the target gas component. During the desorption process, the pressure within the column is decreased through the application of a vacuum. This process results in the separation of adsorbed gas from the adsorbent material, which is subsequently collected as the product gas. This procedure is subsequently reiterated in a cyclical fashion.

VSA has been employed in various applications such as air separation, H₂ purification, and CO₂ capture. Lee *et al.* [61] conducted a study wherein VSA was utilized to separate oxygen from air by a zeolite adsorbent. They have reported results indicating a significant air separation potential of VSA process, as evidenced by a reported oxygen purity of 97% and a recovery rate of 75%. In another study, a carbon molecular sieve was used as the adsorbent medium and methane purity of 98% along with an 83% recovery rate was attained [63]. Furthermore, the utilization of VSA has been successfully observed for capturing CO₂ from flue gas via a MOF adsorbent by Khurana *et al.* [64].

Current progress in VSA technology has centered on the development of innovative adsorbent materials, optimization of process parameters, and incorporation with additional separation methodologies. Zhou *et al.* [65] documented the production of a novel MOF substance that exhibits improved CO₂ adsorption potential and selectivity in VSA applications. Furthermore, Kim and colleagues [66] proposed a methodology to optimize VSA process, which yielded a reduction of 20% in energy consumption and an increase of 15% in product purity. Peramanu *et al.* [67] conducted a study on the hybrid use of VSA and membrane separation techniques to improve the process of H₂ purification. They suggested an enormous H₂ purity of 99.99% and a 90% recovery rate with this hybrid process design, thereby revealing its potential in separation applications. In general, the successful integration of VSA in diverse gas separation application and the latest progress in VSA technology underscore its prospective utilization in a broad spectrum of applications.

2.4.3. Temperature Swing Adsorption

Gas separation methodologies are of paramount importance in diverse industrial applications, such as natural gas treatment, air separation, and H₂ refinement. TSA approach is highly preferred due to the main benefit of enabling high selectivity. It is a highly promising gas separation technique that functions through the use of cyclic temperature conditions. In the adsorption process, the gas mixture is introduced into the adsorption column, where the adsorbent material selectively adsorbs the target gas component at a low temperature [68].

Subsequently, the gaseous constituents that have not undergone adsorption are extracted from the column. During the desorption phase, the temperature of the column is raised, leading to the release of the adsorbed gas from the adsorbent material. This released gas is then collected as the final product. Subsequently, the procedure is reiterated in a cyclical fashion.

The utilization of TSA has been observed in various industrial applications such as natural gas processing, air separation, and H₂ purification, which were demonstrated in several studies conducted by Chen *et al.* [69], Ntiamoah *et al.* [70] and Jiang *et al.* [71], respectively. Chen *et al.* [69] proposed that enhancing the inlet velocity and porosity of a self-designed TSA system utilizing zeolite 13X-APG could enhance its energy efficiency performance. This improvement was result in an increase in the CO₂ capture performance and a reduction in the specific energy consumption. Furthermore, Ntiamoh *et al.* [70] reported TSA process with a CO₂ purity of 96% and a recovery rate of 90.8%. Jiang *et al.* [71] designed a hybrid system including TSA and membrane units to improve the CO₂ capture.

2.4.4. Hybrid Swing Adsorption Processes

The PTSA process is a hybrid technique that integrates the fundamental principles of PSA and TSA to attain optimal gas separation. In recent years, the PTSA process has garnered noteworthy attention owing to its potential for energy conservation, decreased capital expenses, and reduced environmental footprint. The PTSA process encompasses a biphasic mechanism comprising of adsorption and desorption phases. The adsorption and desorption processes are manipulated by modifying the prevailing pressure and/or temperature conditions.

PTSA is a technology that has been studied for its potential use in various industrial processes. For example, Banaszkiewicz *et al.* [72] conducted a comparative analysis of cryogenic and PTSA technologies for oxygen production systems. They discovered that the implementation of PTSA can effectively enhance the energy efficiency of small and medium-sized oxygen production systems utilized in oxy-combustion processes. Additionally, the PTSA has been employed for the separation of H₂ from diverse gas mixtures. For instance, Hao *et al.* [73] conducted a study on the utilization of a PTSA process based on LaNi_{4.3}Al_{0.7} zeolite for the

purification of H_2 . They reported a H_2 purity of 99.99% and a recovery rate of 95% with the use of PTSA process.

Vacuum Temperature Swing Adsorption (VTSA) is a significant hybrid process that has garnered considerable attention in recent years as an advanced gas separation technique. This process has the potential to efficiently and economically separate various gas mixtures. The VTSA process integrates the fundamental concepts of PSA and TSA to enhance separation efficiency and diminish energy consumption associated with the process. The VTSA process operates through the utilization of the distinct adsorption capacities exhibited by different gas constituents on a solid adsorbent medium, which is subject to varying pressure and temperature conditions. The procedure generally encompasses four primary stages, namely adsorption, pressure equalization, desorption, and repressurization.

The VTSA technique has demonstrated successful implementation in diverse gas separation applications, such as air separation, hydrogen purification, and carbon dioxide capture. The utilization of VTSA has been observed in the realm of airborne CO_2 capture, resulting in a concentration of 95% and a CO_2 capture fraction exceeding 81% as Wilson *et al.* [74]. According to a previous investigation, the VTSA technique yielded a CO_2 recovery rate of 90% [75]. This statement elucidates that the aforementioned process necessitates a reduced energy demand in comparison to conventional techniques. Furthermore, it has been observed that VTSA exhibits a lower degree of flexibility in N_2/CO_2 separation as compared to VSA and TSA techniques. This highlights the potential of VTSA as a viable and energy-efficient option for post-combustion CO_2 capture through retrofitting of pre-existing power plants [76].

3. HIGH THROUGHPUT COMPUTATIONAL SCREENING

High throughput computational scanning refers to a technique used to predict the properties of a large number of molecules, materials, or biological systems. Screening investigations are of paramount importance in many applications, especially adsorption process, which is commonly utilized for the enhancement of diverse adsorption methodologies. Generally, computational screening of adsorbent materials was used to define the adsorption of a wide range of molecules, including but not limited to gases, pharmaceuticals, dyes, and heavy metals. Specifically for gas adsorption, there were several screening studies that investigate adsorption performance of various gas pairs. Adsorption capacity of CO₂, H₂, CH₄, N₂, and H₂S [77-82] are commonly identified by high throughput computational scanning. Furthermore, diverse materials have been subjected to screening studies in addition to different gas pairs. The MOF family has been extensively investigated, with numerous structures being evaluated. Other materials, including COFs, zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs), activated carbons (Acs), zeolites, and porous coordination networks (PCNs), have also undergone successful screening studies [83,85,86,87. Appendix A contains comprehensive details regarding these studies.

Considering the published literature on identification of CO₂/H₂ separation using adsorption processes via high throughput computational scanning approaches, MOF adsorbents were the highly investigated. Avci *et al.* [82] conducted a simulation study wherein they evaluated 3,857 MOF structures in the presence of both PSA and VSA conditions. They revealed that adsorption selectivity of MOF adsorbent in PSA and VSA processes ranged between 2.5-25,000 and 2.5-85,000, respectively. Li *et al.* [83] conducted a thorough investigation in another study on MOFs, analyzing a total of 13,512 MOF structures and specifically investigating the adsorption properties of 1,092 of these structures. The study revealed that MOFs featuring the lvtb topology and employing the organic linker 1,2,4,5-tetrazine demonstrated optimal performance in terms of displaying the highest degree of CO₂/H₂ adsorption separation. A comprehensive study was conducted by Aksu *et al.* [84] on hypothetical COFs, wherein 3,184 hypoCOFs were examined under PSA and VSA conditions for the purpose of CO₂/H₂ separation. The results indicated that the

selectivity ranged from 6.13 to 742 (6.39 to 954) for PSA (VSA) process, while the working capacities ranged from 0.07 to 8.68 mol/kg (0.01 to 3.92 mol/kg). These values were found to be higher than those observed in COFs that were synthesized experimentally. Yilmaz *et al.* [85] conducted a study in which they computed adsorption values for multiple gas pairs, such as CO₂/H₂, across 16 distinct ZIFs. Their findings revealed that ZIFs containing functional groups that possess robust electrostatic interactions with CO₂ demonstrated optimal efficacy for CO₂/H₂ adsorption selectivity. Ozturk *et al.* [86] performed simulations on a set of 20 PCNs and found that these materials displayed notable levels of CO₂/H₂ selectivity and working capacity, well-matching with experiments. They reported that PCN-9-Co and PCN-9-Mn exhibited remarkable characteristics [86]. In comparison to alternative materials, they demonstrated exceptional CO₂/H₂ selectivity, with values of reaching to approximately 2300 and 1660, respectively. Additionally, these structures exhibited a notable working capacity of 5.5 and 6.1 mol/kg. The rationale behind this phenomenon is that the PCNs exhibit a preferential adsorption of CO₂ over other components in the pore structure (Figure 3.1(a)), with H₂ being the least strongly adsorbed. The present analysis is grounded on the three-zone depiction of CO₂ in contrast to the solitary zone depiction of hydrogen, and the electrostatic interplays between CO₂ and PCN atoms that are absent in H₂.

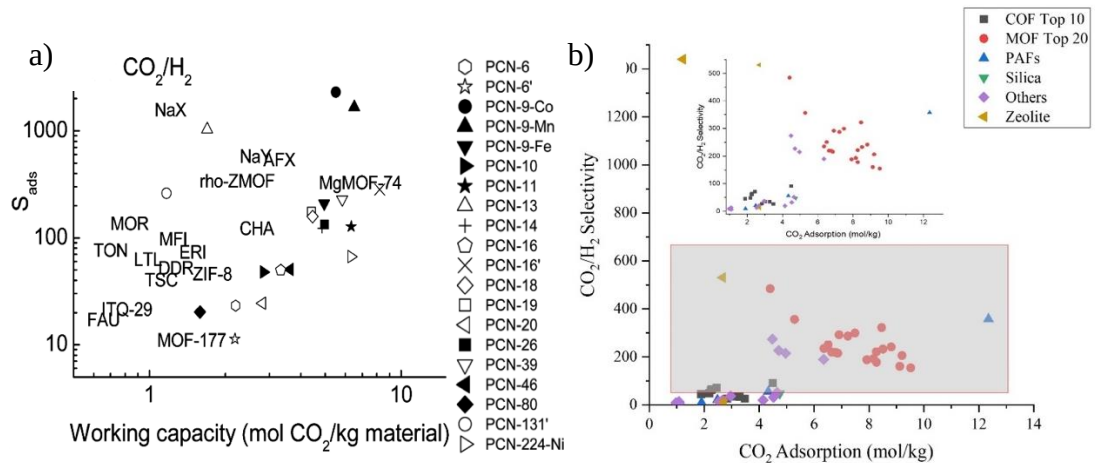


Figure 3.1: Comparison of CO₂/H₂ separation performance proposed by (a) Ozturk *et al.* [86] in terms of CO₂/H₂ selectivity and CO₂ working capacity and (b) Doganci and Velioglu [88] in terms of CO₂/H₂ selectivity and CO₂ adsorption.

On the other hand, we have also compiled CO₂/H₂ selectivity and CO₂ adsorption coefficients of several adsorbent materials (Figure 3.1(b)). Zeolite NaX

1257 has adsorption selectivity [89]. NaX cannot sufficiently adsorb CO₂. The best adsorbent has the upper right corner adsorption performance in Figure 3.1(b). The CO₂ adsorption ability and selectivity of MOFs is remarkable. Avci et al. [83] estimated the best adsorbent structures. DABWUA MOF is best for CO₂/H₂ separation with 8 mol/kg CO₂ uptake and 300 CO₂/H₂ selectivity. The small pore shape of the MOF adsorbent increases gas accessibility to the frame surface adsorption sites, explaining its excellent gas adsorption ability. PAF has almost the same adsorption selectivity as DABWUA and a substantially higher CO₂ uptake of 12.35 mol/kg. Babarao et al. [90] found that PAF adsorbed 32% more CO₂ than the MOF structure with maximum absorption. Functionalizing different groups (-NH₂, -OCH₃, -CH₂OCH₂), theoretically produced three PAF structures. The one functionalized with CH₂OCH₂ took the most CO₂. Functional groupings increased the CO₂ interaction energy. Experimentally, PAFs exhibit high surface areas, thermal and hydrothermal stability. Therefore, porous 2D materials such as PAFs and MOFs dominate adsorbent performance measurements. Therefore, experimenters should explore them in gas separation techniques. Furthermore, a multitude of materials can be conveniently evaluated through computational scanning studies for the target of gas pairs.

4. MXENE NANOMATERIALS

4.1. History of MXene Family

MXene is a class of two-dimensional (2D) materials that are categorized within the wider group of transition metal carbides and nitrides. The term "MXene" was introduced in 2011 by a research team headed by Prof. Yuri Gogotsi at Drexel University. It is used to denote a family of structures characterized by the general formula $M_{n+1}X_nT_x$ [91]. The MXene is produced from a three-dimensional material known as MAX phase. The MAX phase is represented by the formula $M_{n+1}AX_n$, where M represents early transition metals (including Sc, Y, Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, and Mn), n represents a value of 1, 2, 3, or 4, and A represents elements from the IIIA or IVA group such as Al, Ga, etc. and X in $M_{n+1}X_nT_x$ represents C or N, and the symbol T is used to represent surface terminations, which can be hydroxyl, hydrogen, oxygen, chloride, etc. The process of extracting A atoms from the MAX phase leads to the production of $M_{n+1}X_nT_x$ thin layers arranged horizontally. In the process of synthesizing MXene, it is a common practice to employ hydrofluoric acid (HF) for etching of A atoms. This is achieved by immersing the MAX phase in HF, which effectively disrupts the chemical bonds between the transition metals and A elements. The terminal layer of the $M_{n+1}X_nT_x$ structure consists of T_x groups, which depends on the synthesis procedure and conditions [92].

MXene structures can be categorized into different groups based on the quantity of functional groups or the configuration of transition metals they possess in specific proportions as given in Figure 4.1 [93]. MXene structures that possess the identical transition metal are classified as mono-transition metal MXene, while those containing two distinct transition metals are categorized as double transition Metal MXene. Two distinct transition metals can occupy specific sites within M layers, which can be characterized by either in-plane order or out-of-plane order. In the context of in-plane ordered MXene, the arrangement involves the alternate organization of two distinct transition metals within each atomic plane of the M layer. In contrast to MXene that exhibit out-of-plane structures, the transition metals in MXene with in-plane structures are arranged in distinct atomic planes. In the case

of solid solution MXene, the distribution of transition metals within all M layers and the orientation of carbon and nitrogen atoms within X layers are both random. In the realm of ordered vacancy MXene, the constituent elements primarily consist of mono-transition metals, namely Mo, W, and Cr. However, it is worth noting that only $\text{Mo}_{1.33}\text{C}$ and $\text{W}_{1.33}\text{C}$ have been successfully synthesized through experimental means, while the synthesis of $\text{Cr}_{1.33}\text{C}$ has thus far been limited to theoretical design. The atomic composition of the ordered vacancy structure is approximately 33% in the M layers [94].

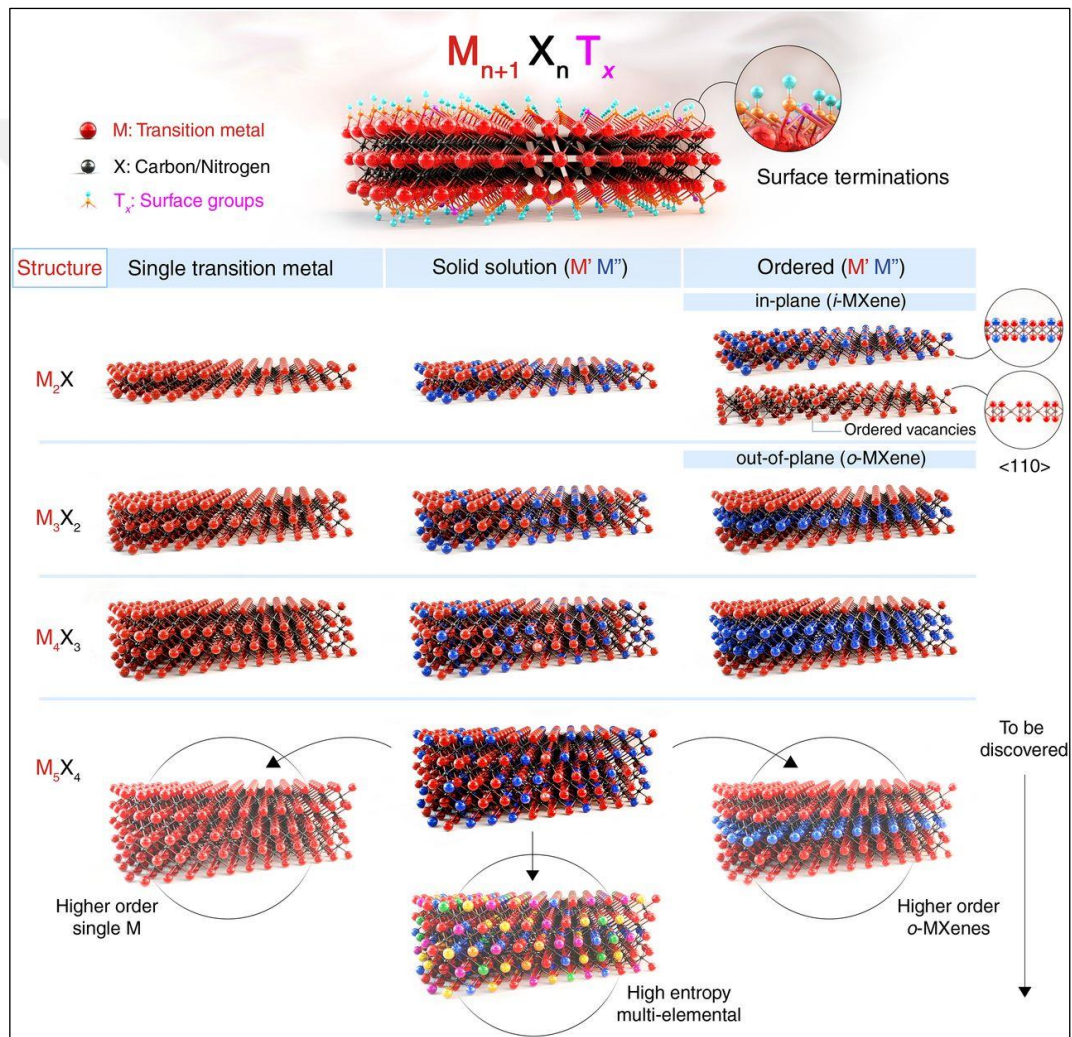


Figure 4.1: Schematic illustration of the MXene structures [93].

4.2. Application of MXene Nanomaterial

The hydrophilic nature of the surface MXene structure enables facile composite formation with carbonaceous materials, polymers, and metal oxides, thereby making MXene family feasible for diverse applications as summarized in Figure 4.2 [95].

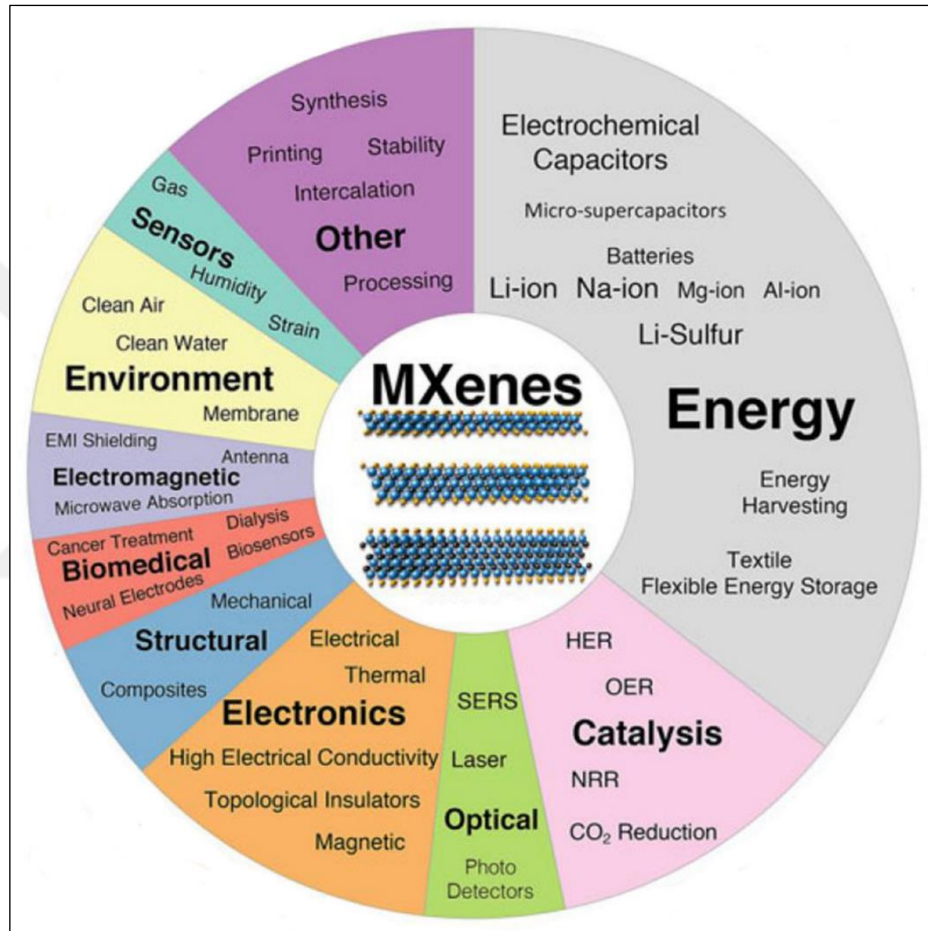


Figure 4.2: Application areas of MXene family [95].

The versatile and adjustable surface and bulk chemistry of MXene structures offer significant and unique characteristics that can be advantageous in various aspects of energy storage systems. Additionally, MXene family exhibits a wide range of functionalities in batteries and supercapacitors, encompassing double-layer and redox-type ion storage, ion transfer regulation, steric hindrance, ion redistribution, electrocatalysis, and electrodeposition substrates. For example, Chen et al. [96] effectively produced vertically aligned triple phosphate nickel/iron hybrids on

titanium carbide flakes (NiFeP/MXene) using a hydrothermal reaction and phosphating calcination procedure. The researchers unveiled that it has the capability to efficiently modify the electronic structure and density of the surface of the electrocatalyst in order to increase the energy level of the d-band center.

In addition to their applications in the realm of energy, MXene structures have garnered attention within the field of electronics. MXene structures have been identified as materials that can serve as conductive layers, transparent electrodes, and constituents for flexible and wearable electronics. The combination of their excellent electrical conductivity, mechanical flexibility, and transparency renders them highly suitable for a wide range of applications, including but not limited to transparent electrodes, touchscreens, electromagnetic shielding, and flexible circuits. Moreover, MXene family demonstrates distinctive optoelectronic characteristics that facilitate their application in photodetectors and light-emitting devices. The study conducted by Lee et al. [97] revealed that the application of a spin-coated polymer onto a transparent MXene electrode offers remarkable environmental stability. This stability is maintained even when the electrode is exposed to high temperatures and humidity levels for a duration exceeding 7 days. Importantly, this protective layer does not compromise the transparency of the electrode, thereby enabling the advancement of photoelectronic devices.

MXene family displays a notable catalytic efficacy owing to their substantial surface area and adjustable surface functionalities. Catalysts have been employed in a range of reactions, such as hydrogen evolution reactions, oxygen reduction reactions, and water purification processes. MXene structures have the potential to augment reaction rates, selectivity, and stability, rendering them highly advantageous catalysts in various environmental and industrial contexts [98].

The biocompatibility and surface functionalization capability of MXene family have rendered them as highly promising contenders within the realm of biomedicine. Their utilization in drug delivery systems has been the subject of extensive investigations due to their distinctive characteristics, which enable controlled and targeted release of therapeutic agents. Furthermore, the utilization of MXene materials in tissue-engineered scaffolds has been investigated due to their remarkable biocompatibility and ability to enhance cell adhesion, proliferation, and differentiation [99].

Application areas of MXene family are not limited with the above-mentioned fields. Due to their elevated thermal conductivity, these materials exhibit a favorable suitability for thermal management applications in electronic devices [100]. MXene structures have also been investigated for their potential use in gas detection sensors, strain sensing devices, and biosensing applications [101]. Moreover, their exceptional mechanical properties render them promising contenders for reinforcement applications in composites and coatings.

4.3. MXene Family as Adsorbents

The significance of MXene structures as materials for adsorption has been widely recognized in academic research due to their distinctive properties. These properties include their two-dimensional structure, which allows for a large surface area relative to their volume, their chemical stability in diverse environmental conditions, and their ability to adjust interlayer spacing.

Currently, there is a growing trend in the investigation of MXene family as adsorbents. MXene family is a class of nanomaterials that exhibit significant versatility in their composition, thereby enabling a wide range of applications across various domains from dye removal to gas separation. For instance, Hao et al. [102] synthesized a novel adsorbent, denoted as AA-alk-MXene, through the grafting of acrylic acid onto one or more layers of alkalized MXene nanolayers. The primary objective of this adsorbent was to effectively eliminate dyes from wastewater. The successful grafting of AA onto alkalized MXene nanolayers was confirmed through the analysis of XRD, XPS, TG and Raman spectroscopy. Another study, Hu et al. [103] conducted the synthesis of MXene as an adsorbent for the purpose of purifying heavy metal ions in wastewater. Their findings revealed that the synthesized MXene demonstrated a notable adsorption capacity for various types of mercury-containing ions. Similarly, Song et al. [104] conducted the synthesis of $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ embedded with zirconium cross-linked SA (MX-ZrSA) beads. They aimed to assess the performance of these beads in terms of phosphate adsorption under various conditions. The findings of the study indicated that the presence of Zr-O-P and Ti-O-P complexes played a crucial role in facilitating the high selectivity and affinity of the MX-ZrSA beads towards phosphate. The study conducted by Arifutzzaman et al. [105] targeted

to assess the efficacy of MXene materials in two different configurations, namely sandwich form with AC and embedded nanocomposite form, for the purpose of capturing CO₂. The researchers reported that the AC/MXene in the sandwich form demonstrated an exceptional regenerative performance, maintaining a consistent capacity for CO₂ adsorption throughout multiple regenerative cycles.

In addition to the experimental investigations, these adsorbents have been subject to the theoretical investigation and have served as a valuable reference for future research. Liu et al. [106] conducted a study to examine the adsorption characteristics of ammonia on a monolayer of V₂CT₂ (T = O, OH, and F). The research specifically investigated the influence of ammonia concentration and air humidity. They discovered that V₂CT₂ exhibited favorable characteristics for the identification and sequestration of NH₃ gas. In a separate investigation, Xu et al. [107] created a novel CuS-modified Ti₃C₂ adsorbent, known for its robust resistance against acid gases. The findings derived from DFT calculations have demonstrated the potential efficacy of CuS/Ti₃C₂ as a viable material for mitigating mercury emissions in coal-fired power plants. In another study, Liu et al. [108] designed an MXene-supported adsorbent with polyamine-based adsorbents. They showed that this stable and high mechanical stability adsorbent was a promising material for the CO₂ capture process. The adsorption of CH₄ on Nb₂CT_x (T = O, F, Cl, OH) has been investigated by Lv et al. [109]. The results indicated that the most effective CH₄ adsorption observed by Nb₂C(OH)₂, while Nb₂CO₂ exhibited the highest stability based on the calculations of binding energy and cohesion energy.

Studies on the investigation of the performance of MXene family on CO₂/H₂ separation or H₂ and CO₂ storage were very rare. In a study conducted by Liu et al. [110], the incorporation of Al atoms in Ti₂CT_x was investigated for hydrogen storage. The Ti₂CT_x material exhibited superior hydrogen adsorption capabilities compared to other materials, both at room and elevated temperatures of 20, 40, and 60°C. The results of this study align with the 10% target set by the United States Department of Energy (DOE) in 2020 [110]. The results obtained from NMR, FTIR, and DFT calculations indicated that the presence of –F₂ functional groups led to the reversible H₂ adsorption, primarily driven by weak chemical interactions. Conversely, the presence of –O₂ functional groups resulted in irreversible H₂ adsorption, primarily driven by significant physical interactions. This mentioned groundbreaking investigation is facilitating the development of MXene adsorbent

with enhanced gas adsorption capabilities, albeit necessitating further theoretical and experimental examinations.



5. MOLECULAR SIMULATIONS TECHNIQUES

Molecular simulations represent a computational methodology employed for comprehending and forecasting the dynamics of molecular systems. This methodology is utilized across diverse disciplines including chemistry, physics, biology, and material science. The investigation of separation and purification technologies that rely on adsorption frequently emphasizes the utilization of modeling approaches to elucidate the underlying adsorption mechanism. Although there exist multiple models for adsorption isotherms, these models do not incorporate any solid structure information. Nevertheless, the utilization of molecular simulation techniques can effectively employ the effect of adsorbent material to make accurate predictions regarding adsorption. Various materials can be scanned in order to ascertain the optimal performer for adsorption-based separation. Given the significant advancements in computer science by means of both hardware and software, the evaluation of adsorption and transport properties of nanoporous materials, especially inorganic nanomaterials, can now be readily accomplished at the nanoscale through the utilization of molecular simulation techniques. Molecular simulations are commonly performed using two primary methodologies: molecular dynamics (MD) and Monte Carlo (MC) simulations with the help of system-specific developed fields and various ensembles.

5.1. Molecular Dynamics Simulation

MD simulations serve as a computational technique employed to simulate the temporal evolution of atomic and molecular motion. The simulations in question employ Newton's laws of motion to compute the interactions among atoms and molecules, thereby enabling the prediction of temporal changes in a molecular system. Interactions among atoms and molecules are computed through the utilization of potential energy functions by ascertaining the initial coordinates and velocities of a given molecular system. The simulation iteratively updates the positions and velocities of atoms and molecules at discrete time intervals, performing this procedure multiple times. Every individual particle within this system engages in interactions with both other particles and the surrounding environment. The resultant

force exerted upon the system is determined by evaluating the following equation [111,112].

$$F_i(t) = m_i a_i(t) = m_i \frac{dV_i}{dt} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\nabla_i U(r_i) \quad i=1,2,3,\dots, N \quad (5.1)$$

The force, velocity, mass, acceleration, and position of the particle, i , are denoted as F_i , v_i , m_i , a_i , and r_i , correspondingly. The variables "U" and "t" are used to denote the potential energy of the system and the time, respectively. In the literature, various numerical integration algorithms have been devised to facilitate the integration of equations of motion. Notable examples include Verlet, Leapfrog, and Velocity Verlet methods.

Before MD simulations, macroscopic system settings are defined mainly. Micro-canonical, canonical, isothermal-isobaric, and grand-canonical ensembles are prevalent. In micro-canonical ensemble (NVE), energy, volume, and number of particles are constant, while in canonical ensemble (NVT), temperature, volume, and number are constant. In isothermal-isobaric ensemble (NPT), temperature, pressure, and number of particles are constant. The ensemble type we choose depends on our final system and problem. Considering the predefined initial velocities and configurations in MD simulation, all particles' interatomic interactions are computed by generating the time-dependent trajectories [113]. Consequently, the property of interest such as mean-squared displacement, heat, and mass transport, etc. can be calculated. MD simulations find extensive application across various disciplines, encompassing the investigation of thermodynamic and structural characteristics of molecular systems, elucidation of protein folding mechanisms, analysis of interactions relevant to drug design, and prediction of material properties. Nevertheless, these simulations often necessitate substantial computational resources and may be executed over prolonged durations.

5.2. Monte Carlo Simulation

MC simulation is employed in order to make use of random number generation and statistical methods. The fundamental steps of MC simulations encompass modeling, random number generation, computation, repositioning, and statistical analysis. Following the development of a mathematical model pertaining to the molecular system in question, stochastic variables are employed to compute the energy, position, and various other attributes associated with the molecular system. Due to its lack of time-dependency, the measurement of dynamic properties is rendered infeasible. Sampling bias can occur due to the unequal probabilities of different conformations that are formed during the random walk-in phase space. This is achieved by introducing random displacements to the internal degrees of freedom, such as bonds, angles, and torsions. Consequently, the resulting conformations do not have equal probabilities. For this purpose, various sampling methods have been suggested for MC simulations, including simple sampling, importance sampling, and Metropolis sampling, among others. To diversify the probabilities, state of the system at trajectory is altered depending on the MC moves such as translation, rotation, insertion, and deletion.

Monte Carlo methods are widely recognized as a highly effective computational technique for addressing problems characterized by inherent uncertainty, and their applicability spans across diverse domains. These methodologies offer valuable resources for resolving intricate mathematical problems through the utilization of random numbers and sampling techniques. MC methods find extensive application in the domains of financial risk analysis, physical or chemical system simulation, and statistical predictions.

5.3. Force Field

The force field is a mathematical framework utilized to elucidate the intermolecular interactions occurring between atoms or molecules. The model encompasses a range of parameters, including molecular structures, bond lengths, bond angles, torsion angles, and non-bonding interactions. The utilization of force fields in both MD and MC molecular simulations involves the application of

potential energy functions and force calculations. The equation 5.2 presents a common formula for the force field. In this equation, the initial four terms pertain to intra-molecular interactions, specifically bond stretching, angle bending, dihedral, and improper torsions. Conversely, the final two terms correspond to inter-molecular interactions, namely van der Waals interactions utilizing a 12-6 Lennard-Jones potential, and Coulombic interactions [114].

$$U = \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_b (r - r_0)^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{1}{2} k_a (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\text{torsions}} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{\text{improper}} V_{\text{imp}} + \sum_{\text{LJ}} 4\epsilon_{ij} \left(\frac{\sigma_{ij}^{12}}{r_{ij}^{12}} - \frac{\sigma_{ij}^6}{r_{ij}^6} \right) + \sum_{\text{elec}} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (5.2)$$

The phenomenon of bond stretching is commonly illustrated using a simple harmonic function that governs the variation in length of covalent bonds. While trigonometric potential is often favored in certain scenarios, the bending of angles can also be described by a harmonic potential. In cases where the molecule consists of more than four atoms, it is necessary to incorporate dihedral or in other word, torsional terms. Torsional movements exhibit fewer constraint compared to bond stretching and are required to confer the appropriate level of molecular rigidity. Furthermore, it is imperative that they accurately replicate the significant conformational changes resulting from the rotations of the bond. The manifestation of torsional energy can be observed through the utilization of a cosine function, as described by equation 5.2. To ensure the planarity of certain groups, such as sp^2 hybridized carbons in carbonyl groups or aromatic rings, it is necessary to incorporate improper terms into the system's energy description. Finally, non-bonded terms account for the positive influence of out-of-plane motions on the overall energy of the system [115].

Various types of force fields are employed in molecular simulations, tailored to specific molecules and systems. Force fields can typically be classified into two main categories: classical force fields and force fields based on quantum mechanics. Classical force fields adopt a simplified representation of atoms as point particles and employ straightforward mathematical functions to characterize the interactions between these atoms. Classical force fields that were extensively utilized in MD and MC simulations are AMBER, CHARMM, and GROMOS. In contrast, force fields

rooted in quantum mechanics adopt a more intricate perspective on atomic interactions, employing quantum mechanical techniques to compute electronic structure. The force fields utilized in this study are derived from density functional theory (DFT) or quantum chemical calculations. Quantum mechanics-based force fields, such as AM1, PM3, and DFTB (density functional-based tight-binding), serve as notable illustrations. They can be customized based on the properties and objectives of the systems used in molecular simulations. For example, different force fields are available for proteins, nucleic acids, lipids, polymers, and inorganic compounds.

Among the numerous force fields that have been employed for a wide range of bio- and nano-materials, Universal Force Field (UFF) was frequently utilized in the computation of intermolecular energies pertaining to gas adsorption simulations of porous inorganic nanomaterials [116]. The UFF force field does not provide partial charges for atoms. Consequently, various alternative methods for assigning charges have been proposed in the literature. These methods include empirical approaches such as QEq, as well as quantum-mechanical calculations like Mulliken Population Analyses [117], Density Derived Electrostatic and Chemical charges (DDEC) [118], and ChelpG [119].

5.4. Ensembles

The term ensemble pertains to the statistical distribution of a collection of molecules or system states, which is determined by the initial conditions and objectives of a molecular simulation. The Ensemble feature facilitates the integration of diverse thermodynamic and statistical properties employed in molecular simulations. The prevalent ensembles in statistical mechanics include the micro-canonical, canonical, isothermal-isobaric, and grand canonical ensembles. The corresponding probability distributions for these ensembles can be found in Table 5.1 [120].

Table 5.1: Common ensembles which are applicable to both MD and MC simulations.

All States of	Probability Distribution
Microcanonical (NEV)	$\pi_i = \frac{1}{\Omega}$
Canonical (NVT)	$\pi(E_i) = \frac{1}{Q} e^{-\beta E_i}$
Isothermal-isobaric (NPT)	$\pi_i(E_i, V_i) = \frac{1}{\Delta} e^{-\beta(E_i + PV_i)}$
Grand Canonical (μ VT)	$\pi_i(E_i, N_i) = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta(E_i + \mu N_i)}$
Isoenthalpic-isobaric (NPH)	$\pi_i(E_i, V_i) = \frac{1}{\Delta} e^{-\beta(E_i + PV_i)} + \frac{1}{\Omega}$

The normalization constant of probability distribution functions, also known as partition functions, are denoted as Ω , Q , Δ , and Ξ for the microcanonical, canonical, isothermal-isobaric, and grand canonical ensembles, respectively. The partition function provides the statistical information regarding the thermodynamic equilibrium properties of our system. Various ensemble types can be employed in molecular simulations to represent distinct thermodynamic conditions and system behaviors depending on the system of interest. For instance, the NVT ensemble is employed in systems necessitating temperature regulation, whereas the NPT ensemble is utilized in systems requiring simultaneous control over temperature and pressure. The utilization of the grand canonical ensemble in MC simulations (GCMC) is advantageous and favored for the simulation of phase-equilibrium systems, such as adsorption phenomena. This preference stems from the incorporation of the fugacity coefficient and Gibbs free energy, which enhance the convenience and accuracy of the simulation process. This approach is employed for the examination of rigid porous materials due to the absence of substantial volume changes during the processes of adsorption and desorption of target molecules. In the case of flexible materials, specifically a subset of MOF family, it becomes necessary to employ more advanced simulation techniques such as Osmotic Ensemble or Gibbs Ensemble [121].

During simulation, the number and spatial arrangement of molecules undergo changes, resulting in the generation of a collection of microstates that collectively determine the average properties of the system. These microstates are designated as

trajectories, which serve as the primary outcome of the MC and MD simulations. By utilizing these trajectories, it is possible to readily compute the primary and secondary properties of the system. In the context of adsorption studies, the primary outcome of interest is the average quantity of molecules present within the investigated system. The GCMC simulation produces a mean density of adsorbed gas, corresponding to a given fugacity or chemical potential. Additionally, visual representations of the molecular-level adsorption process observed from GCMC simulations, including images, movies, and density maps provide further information about the adsorption mechanism. The utilization of visual representations facilitates the effective determination of vital information pertaining to adsorption, including the identification of specific binding sites and the distribution of molecules within the relevant structure.

6. SIMULATION METHODOLOGY

This section will elucidate the followed molecular simulation methodology employed in the thesis. Initially, the details about the MXene database compilation will be given. Subsequently, the methodology which was used for the optimization of the structure and partial charge assignment of MXene structures will be presented. Finally, the simulation method employed to ascertain the mixed gas adsorption capacities of the CO₂/H₂ mixture and the relevant process parameters will be provided.

6.1. Compiling MXene Database

A thorough examination of the existing literature has been undertaken in order to establish a comprehensive database encompassing a range of experimental and theoretical investigations pertaining to MXene. Therefore, the proposed MXene database consists of a comprehensive compilation of 730 distinct structures that have been identified from diverse geographical locations. Firstly, a comprehensive set of 123 MXene structures from the database established by the "Materials Theory and Simulations Group" (<http://anant.mrc.iisc.ac.in/>), and a comprehensive collection of 222 MXene structures from the Computational 2D Materials Database (C2DB), an initiative led by Professor Thygesen's esteemed research team are compiled. C2DB database encompasses a diverse array of 2D materials that extend beyond the scope of MXene structures and can be accessed at <https://cmrdb.fsyik.dtu.dk/c2db/>. In addition, the crystallographic data files for 88 out of the 730 MXene structures are acquired by accessing supporting information files from four distinct articles [122-126]. Finally, the compilation of the remaining 297 MXene structures is derived from multiple scholarly articles that lacked the inclusion of the corresponding crystallographic files. The atom types of the 297 MXene structures acquired from the existing literature are altered by employing the crystallographic files that were made available in the literature on MXene structures.

6.2. Optimization and Charge Assignment

The "Forcite module" of Material Studio 2017 is used to optimize all MXene structures. The geometry of structure is optimized a representation of the potential energy surface's minimal stat is determined for each MXene. The Material Studio software suggests a number of algorithms for geometry optimization, including steepest descent, conjugate gradient, Quasi-Newton, adjusted Newton-Raphson (ABNR), and Smart, which combines steepest descent, ABNR, and quasi-Newton approaches. After the Cartesian atomic coordinates are optimized, the lattice characteristics of the MXene structures are compared to those found in the literature. Figure 6.1 displays the percentage difference as a histogram. It indicates that the Bravais lattice parameter difference was mostly within %5. The sparse population of structures with a difference of more than 6% shows that the optimized structures can be employed for gas adsorption analysis with confidence.

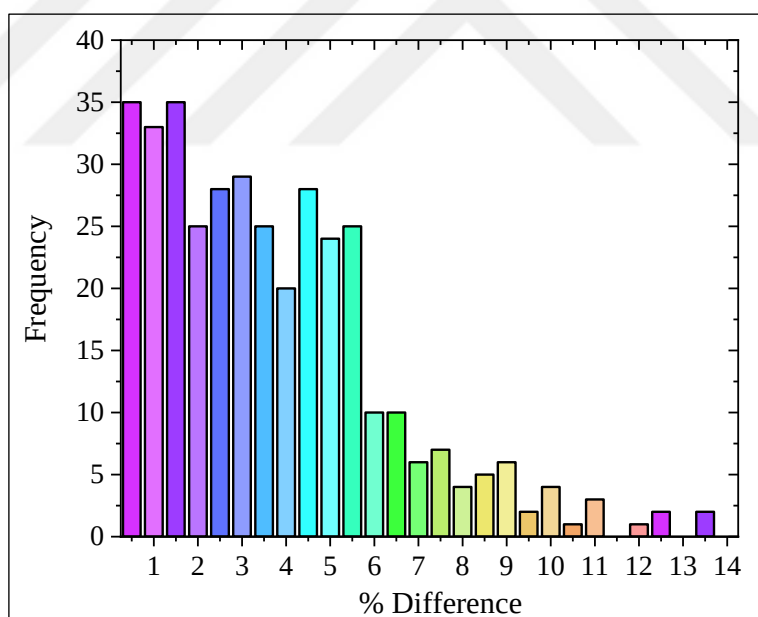


Figure 6.1: Population analyses of % difference in Bravais lattice parameters of MXene structures optimized within the thesis and reported in the literature.

The utilization of quantum mechanics is employed to the optimized MXene structures to assign partial atomic charges, as opposed to the use of QEq, due to the significance of atomic partial charges in the identification of interactions between MXene structures and gases. Density Functional Theory (DFT) is a widely employed

quantum mechanical method that offers an accurate means of modeling the electronic structures and energies of solids. The DMol3 module, a component of Materials Studio (version 2017), is employed for performing density functional theory (DFT) simulations in order to determine the partial charges associated with atoms within MXene structures. The DMol3 module is known for its ability to generate precise outcomes while maintaining computational efficiency as an ab initio approach. The B3LYP (Becke 3-parameter Lee Yang Parr) [127, 128] functional is selected as a nonlocal hybrid function in the DMol3 module. The basis set chosen for this study is the Double Numerical plus-d function (DND). This particular basis set guarantees a satisfactory level of accuracy for DFT simulations. Collectively, the calculation of electrostatic potential (ESP) charges is performed using the DND basis set Dmol3 module where DFT Coulomb potential is considered [163].

6.3. Monte Carlo Simulations for Gas Adsorption

The measurement of adsorption capacities for gas pairs consisting of CO₂ and H₂ is conducted through the utilization of GCMC simulations. A comprehensive set of 730 MXene structures, each possessing a consistent interlayer spacing of 3.5 Å, is employed for the purpose of conducting an adsorption analysis on a mixture of gases. The pairwise interactions are characterized by determining the partial atomic charges of MXene structure through the application of DFT approach. Additionally, the van der Waals interactions between atoms of MXene are derived from the LJ 12-6 potential, which is obtained from the UFF. The MXene structures remain in a fixed coordinates throughout the GCMC simulations, with the application of periodic boundary conditions. The Transferable Potentials for Phase Equilibria (TraPPE) rigid body model is commonly employed for CO₂ and H₂ molecules due to its ability to accurately depict the vapor-liquid and liquid-solid equilibria of CO₂. CO₂ is represented in models as a solid molecule consisting of three atomic centers, whereas H₂ is represented as a single atom within the LJ region. The carbon-oxygen (C-O) bond length in CO₂ is a constant value of 1.16 Å, while the angle between oxygen, carbon, and oxygen (O-C-O) is a fixed angle of 180°. The pairwise LJ interactions are computed utilizing the Lorentz-Berthelot mixing rules. The determination of the

cutoff for each MXene structure is based on half of the c-axis length (z) of the unit cell, as indicated in Table 6.1.

Table 6.1: Set up parameters of MXene structures.

Layers	C length (Å)	Cut-off (Å)	Enhancement
2	14	13.5	9×9×2
2*	17	16.5	10×10×2
3	15	14	10×10×2
4	18	17	12×12×2
5	20	19	13×13×2
6	21	20	14×14×2
7	23	22	15×15×2
8	25	24	17×17×2
9	28	13.5	9×9×1
10	30	14.9	10×10×1

The mixed adsorption capacities of MXene structures for CO₂ and H₂ are determined through GCMC simulations conducted with the RASPA simulation software (version 2.0.41) [174]. The equilibration and production cycles for gas mixture have been determined to be 50,000 and 250,000, respectively. In general, the predominant composition of the gas mixture results in a product concentration of approximately 74% H₂, 18% CO₂, and 8% other gases [130]. As a result, the utilized gaseous mixture demonstrates a composition comprising of 75% H₂ and 25% CO₂. The simulations are conducted individually at temperatures of 35, 120, and 250°C, as well as at pressures of 0.1, 1, and 10 bar to represent different adsorption processes. For instance, Figure 6.2 illustrates the input file that encompasses the parameters and RASPA commands for Ti₂CF₂ at a temperature of 250°C.

SimulationType	MonteCarlo
NumberOfCycles	250000
NumberOfInitializationCycles	50000
UseChargesFromCIFFile	yes
CutOff	13.5
Framework	0
FrameworkName	Ti2CF2
UnitCells	9 9 2
ExternalTemperature	523.0
ExternalPressure	10000.0 100000.0 1000000.0
Component 0 MoleculeName	CO2
MolFraction	0.25
TranslationProbability	0.5
RotationProbability	0.5
WidomProbability	1.0
RegrowProbability	0.5
IdentityChangeProbability	1.0
NumberOfIdentityChanges	2
IdentityChangesList	0 1
SwapProbability	1.0
CreateNumberOfMolecules	0
Component 1 MoleculeName	H2_unit
MolFraction	0.75
TranslationProbability	0.5
RotationProbability	0.5
WidomProbability	1.0
RegrowProbability	0.5
IdentityChangeProbability	1.0
NumberOfIdentityChanges	2
IdentityChangesList	0 1
SwapProbability	1.0
CreateNumberOfMolecules	0

Figure 6.2: Input file used for mixed gas GCMC simulations of Ti₂CF₂ at 250°C.

6.4. Adsorbent Selection Metrics

Several adsorption processes, including PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA, have been developed to facilitate the separation of CO₂ from H₂ by manipulating pressure or temperature during adsorption-desorption cycles. To represent each adsorption process, the relevant adsorption and desorption conditions are altered concerning the parameters tabulated in Table 6.2. Considering the adsorption selection metrics presented in Table 6.3, these adsorption-based separation processes are evaluated and compared. The selectivity of an adsorbent, as determined by the CO₂/H₂ ratio, provides insight into the adsorbent's affinity for strongly adsorbed gas (CO₂) relative to weakly adsorbed gas (H₂). The working capacity of an adsorbent is a crucial factor in cost-saving efforts through the reduction of regeneration cycles, as

it represents the disparity between adsorption and desorption capacities. The proposal of the adsorbent performance score (APS) aims to integrate the impact of two significant metrics in order to evaluate the effectiveness of adsorbents. The measure of regenerability, typically referred to as R%, is commonly used to assess the effectiveness of consecutive adsorption-desorption cycles, with a success rate of over 85% considered as satisfactory [131]. It is aimed in this thesis to establish universal screening metrics for adsorbent materials, incorporating widely accepted indicators. Hence, the adsorbent figure of merit (AFM) and the sorbent selection parameter (SSP) are proposed as comprehensive assessment criteria. The metrics for selecting adsorbents are calculated individually for each adsorption process.

Table 6.2: Adsorption–desorption conditions of processes

Process	Adsorption		Desorption		Ref.
	Temperature (°C)	Pressure (bar)	Temperature (°C)	Pressure (bar)	
PSA	35	10	35	1	[33]
VSA	35	1	35	0.1	[34]· [35]
TSA	35	1	250	1	[36]
PTSA	35	10	250	1	[37]· [38]
VTSA	35	1	250	0.1	[38]· [39]

Table 6.3: Adsorbent metrics used in gas separation for MXene adsorbents.

Metrics	Equation
Adsorption selectivity for gas mixture	$\alpha_{\text{ads., CO}_2/\text{H}_2}^{\text{Mixture}} = \frac{N_{\text{CO}_2}}{N_{\text{H}_2}} / \frac{y_{\text{CO}_2}}{y_{\text{H}_2}}$
Working Capacity	$\Delta N_A = N_{\text{ads.,A}} - N_{\text{des.,A}}$
Percent regenerability (R%)	$R\% = \frac{\Delta N_{\text{CO}_2}}{N_{\text{ads., CO}_2}} \times 100\%$
Adsorbent performance score (APS)	$\text{APS} = \alpha_{\text{ads., CO}_2/\text{H}_2} \times \Delta N_{\text{CO}_2}$
Adsorption figure of merit (AFM)	$\text{AFM} = \Delta N_{\text{CO}_2} \times \frac{(\alpha_{\text{ads., CO}_2/\text{H}_2})^2}{\alpha_{\text{des., CO}_2/\text{H}_2}}$
Sorbent selection parameter (SSP)	$\text{SSP} = \alpha_{\text{ads., CO}_2/\text{H}_2} \times \frac{\Delta N_{\text{CO}_2}}{\Delta N_{\text{H}_2}}$

N_{ads} : gas adsorption capacity, mol/kg
 N_{des} : gas desorption capacity, mol/kg
A: gas type, CO₂ or H₂
y: gas concentration of the feed stream

7. RESULTS AND DISCUSSION

7.1. Effect of Mixture Adsorption Selectivity and CO₂ Working Capacity on Each Adsorption Process

Recently, there has been a growing interest on the diversification of adsorption processes, which are mainly driven by variations in adsorption and desorption conditions. It is aimed to enhance the separation capability and regeneration ability of adsorbents. In addition to widely employed techniques such as PSA and VSA, researchers have also focused on leveraging temperature to enhance the separation performance. Specifically, the utilization of high temperatures has been investigated due to its potential to reduce the solubility of CO₂. As a result, a novel technique known as TSA has recently emerged in this field. Currently, hybrid adsorption processes, such as PTSA and VTSA, are widely employed in order to enhance process efficiency and minimize energy consumption. Following the methodology given in previous section of this thesis, gas adsorption performances of MXene structures are computed and presented in the Appendix C, along with the corresponding adsorption metrics. The comparison of CO₂ working capacities and CO₂/H₂ adsorption selectivities of MXene structures is depicted for each process in Figure 7.1 (for a more distinct and individualized representation, please refer to Figure 7.2 (a – e)). Evaluating these adsorption metrics, it can be observed that the majority of MXene structures exhibit better performance in PSA conditions compared to VSA. While the MXene family demonstrated comparable performance in terms of VSA, TSA, and VTSA conditions, the utilization of a hybrid process (PTSA) resulted in enhanced CO₂ working capacities of MXene adsorbents compared to the PSA process. The increase in temperature, which was accompanied by a decrease in pressure during the desorption process, led to a greater amount of CO₂ being released, thereby resulting in an increase in the CO₂ working capacity. An example of an MXene material with notable CO₂ working capacity under PSA conditions is Nb_{1.33}C, which exhibits a value of 1.34 mol/kg. The CO₂ working capacity under the condition of PTSA was observed to increase by nearly three times, reaching a value of 3.95 mol/kg. The PSA process showcases a range of

notable structures that also exhibit potential suitability in the PTSA process, accompanied by significantly higher CO₂ working capacity.

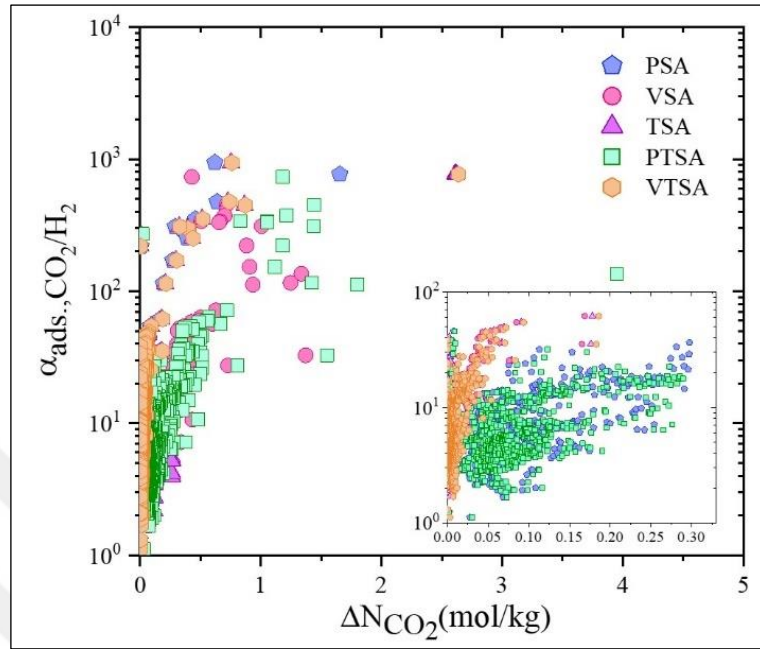


Figure 7.1: Relation between CO₂/H₂ adsorption selectivity and CO₂ working capacity of MXene adsorbents for the separation of CO₂/H₂:25/75 mixture at PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA conditions.

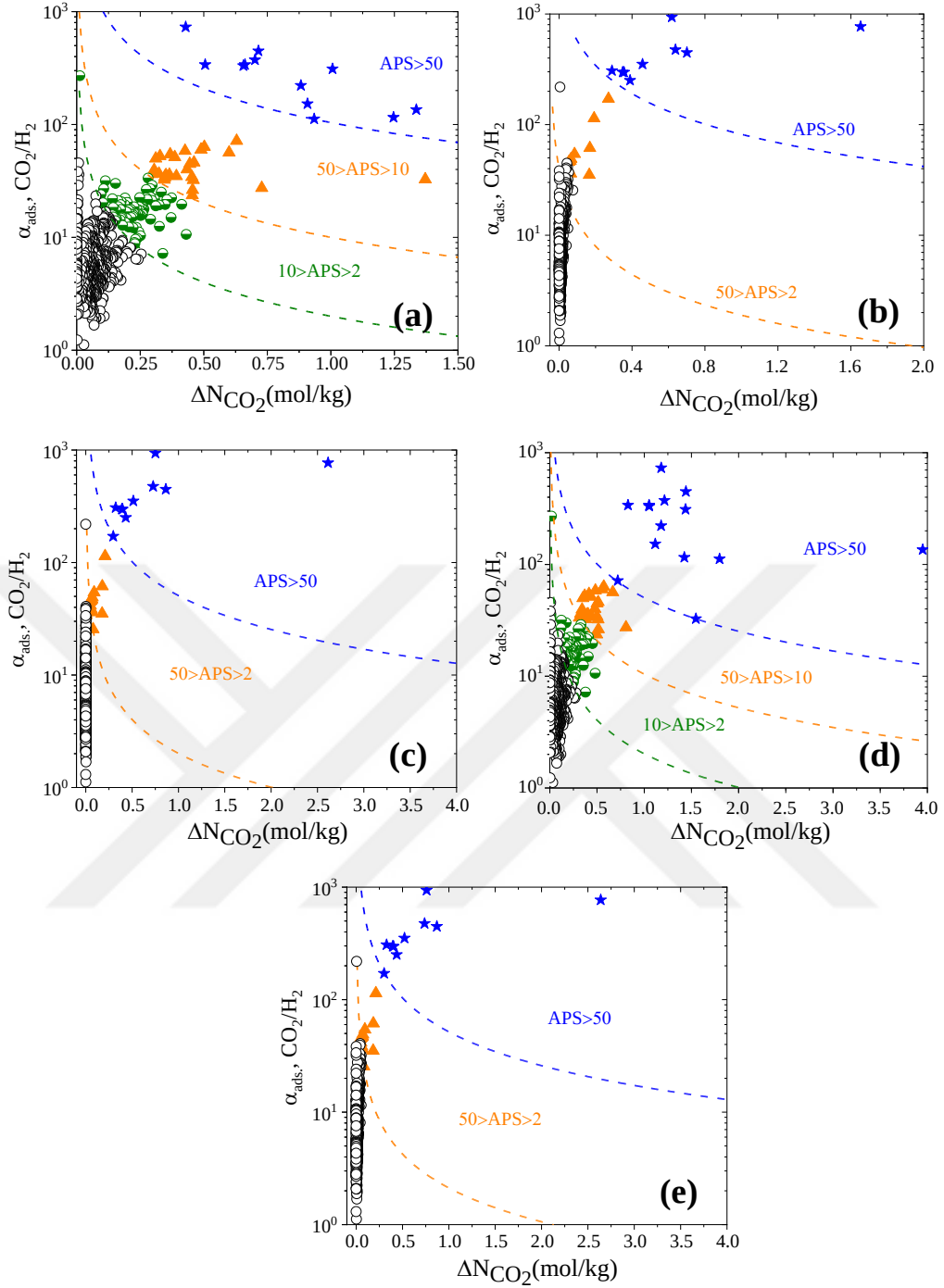


Figure 7.2: Relation between CO₂/H₂ adsorption selectivity, CO₂ working capacity, and APS of MXene adsorbent for CO₂/H₂:25/75 mixture at (a) PSA, (b) VSA, (c) TSA, (d) PTSA, and (e) VTSA conditions. APS range follows blue (star) > orange (triangle) > green (partial circle) > black (empty circle).

7.2 Effect of R% and APS on Each Adsorption Process

Considering the correlation between APS and R% of MXene adsorbents for each process as depicted in Figure 7.3 (for a more distinct and segregated illustration, please consult Figure 7.4 (a – e)), the highest R% values are 92.00, 91.14, and 99.1% for the PSA, VSA, and TSA conditions, respectively. Encouragingly, the utilization of hybrid processes resulted in significantly higher R% data, approaching nearly 100%. The MXene adsorbents with a relative abundance greater than 90% and between 85% and 90% account for 44.7% and 53.6% of the MXene family in the PSA dataset, 52.6% and 46.8% in the VSA dataset, and 17.3% and 25.1% in the TSA dataset, respectively. There is a scarcity of MXene structures exhibiting %R values below 85%, with only 13 and 4 structures observed for PSA and VSA, respectively. However, the number of such structures is significantly higher for TSA, amounting to 455. The regenerability criteria of %R>90% were employed to identify potential candidates for gas separation through adsorption. Nevertheless, the R% values observed for MXene structures with high APS (>100 mol/kg) exhibit a decrease to less than 90%. Specifically, in the case of PSA, the R% value drops to 34%, while in VSA, it decreases to 63%. Fortunately, the R% values of these MXene adsorbents exhibited a remarkably high APS, approaching 100%, in hybrid processes such as PTSA and VTSA. Specifically, with the exception of Mo₂CS₂, all MXene structures under PTSA and VTSA conditions surpassed the %R>90% criteria. Among these structures, NbCrN(NCS)₂ (R%=99.1%) and Nb_{1.33}C (R%=99.9%) exhibit the highest APS values of 864 and 2027 mol/kg, respectively. Hence, it is advisable to promote the adoption of hybrid methodologies in cases where MXene nanomaterials are employed as adsorbents for the purpose of separating CO₂/H₂ gas mixtures.

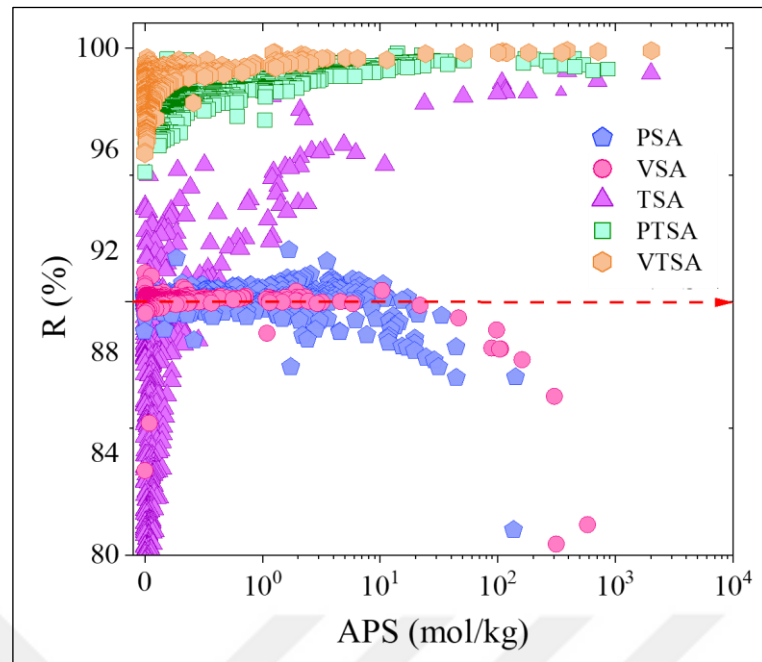


Figure 7.3: R % and APS of MXene adsorbents for the separation of CO₂/H₂:25/75 mixture at PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA conditions. Red dotted lines show the minimum desired R%=90%.

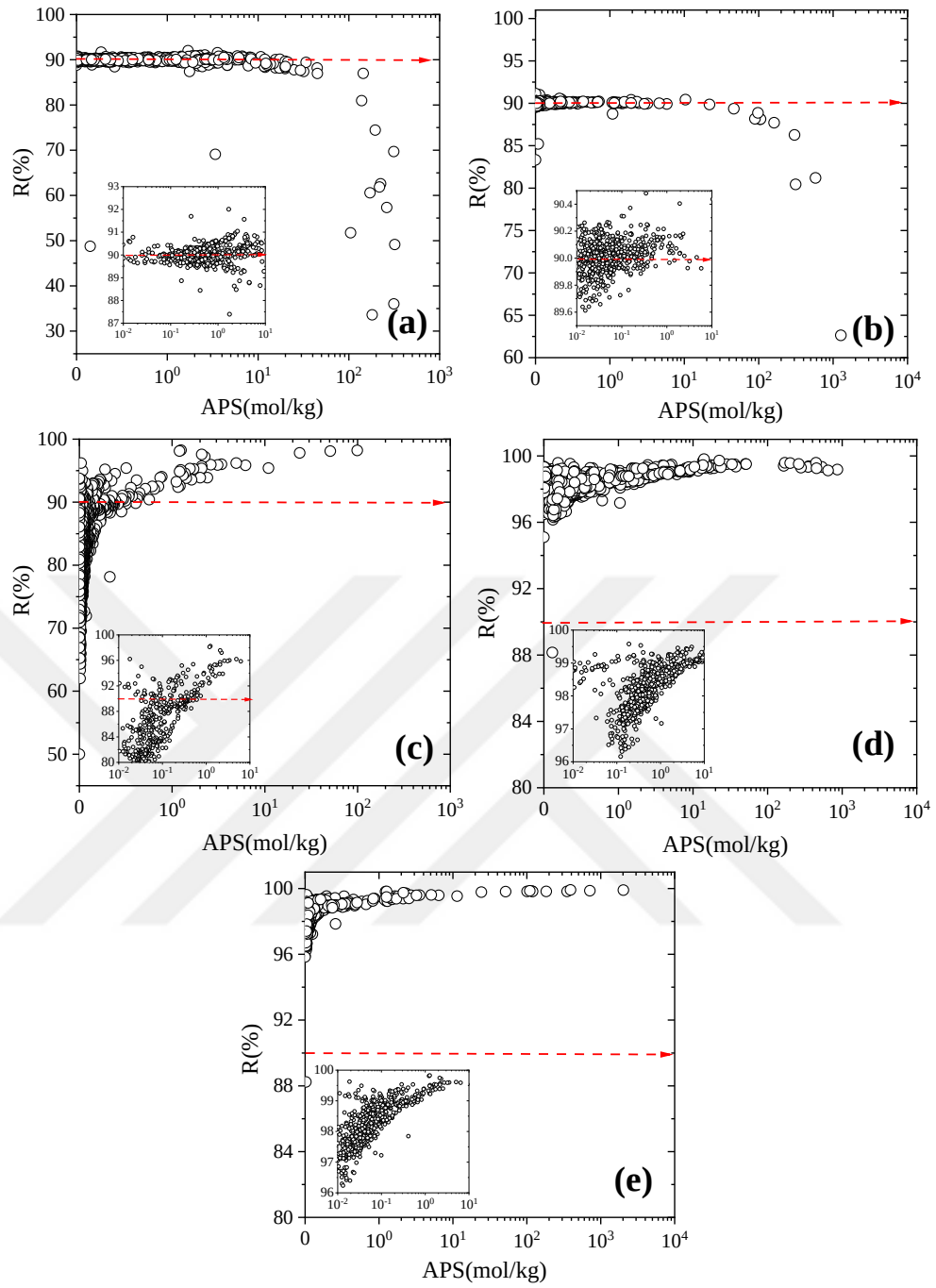


Figure 7.4: Relation between $R\%$ and APS at (a) PSA, (b) VSA, (c) TSA, (d) PTSA, and (e) VTSA processes for CO_2/H_2 :25/75 mixture. Red dotted lines show the minimum desired $R\% = 90\%$.

7.3. Promising 10 MXene Adsorbents for CO₂/H₂ Mixture Separation

The MXene structures that exhibit R% greater than 90% under various conditions such as PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA are evaluated based on APS. As a results of this evaluation, top 10 MXene adsorbents are defined and presented in Table 7.1. Instead of APS, they are also ranked based on AFM and SSP metrics (please refer to Appendix C). Upon comparing the notable structures observed in the PSA, VSA, and TSA conditions for the gas mixture, it is evident that there is a lack of shared structures among them. This finding aligns with the observation presented in Figure 7.3. This implies that the performance of MXene structures is influenced by variations in both temperature and pressure. The predominant MXene structures found in PSA consist of M₂XT_x configurations, which refer to mono or double transition metal MXene structures with two metal layers. Notably, these structures often incorporate the –Br₂ functional group. In the study of Oppenheim et al. [132], they conducted measurements to determine the adsorption capacities of CO, H₂, and C₂H₄ on a functionalized Ni₂X₂BTDD MOF. The MOF was modified with small functional groups such as hydroxyl (–OH), fluorine (–F), chlorine (–Cl), and bromine (–Br). The adsorbent that was functionalized with –Br exhibited superior adsorption performance for each gas at all pressures in comparison to adsorbents functionalized with other small groups, thereby corroborating our research findings. The MXene structure exhibited the highest ranking among the studied structures in terms of performance. It demonstrated a CO₂ uptake of 0.482 mol/kg and a CO₂/H₂ selectivity of 40. In the context of VSA, structures that incorporate bulky groups, particularly those featuring the –(SCN)₂ functional group, exhibit considerable potential. The MXene structure, which was identified as the top-ranked structure in terms of VSA, exhibits CO₂ uptake of 0.187 mol/kg and a CO₂/H₂ selectivity of 61.5. The MXene structure, specifically the Nb_{1.33}C type, demonstrated exceptional performance in terms of CO₂ uptake and CO₂/H₂ selectivity. It achieved a CO₂ uptake of 2.64 mol/kg and a selectivity of 768. Nb_{1.33}C MXene has been synthesized by various research groups for a range of applications, including catalysis and energy storage, among others [133,134]. Given the potential for synthesizing stable structures, it is plausible to consider them as viable candidates for CO₂/H₂ separation under TSA conditions.

Conducting desorption at elevated temperatures, as opposed to operating under vacuum conditions, induces significant alterations in the working capacity of CO₂. Consequently, by augmenting the data for R%, this phenomenon results in the inclusion of MXene adsorbents with elevated CO₂ uptakes among the structures deemed promising. The dominant influence of temperature is observed in both PTSA and VTSA processes. The top 10 MXene structures identified in the TSA process are also found in both the PTSA and VTSA processes, albeit with some variations in their rankings within the PTSA process. The employment of elevated pressure during adsorption and elevated temperature during desorption within the PTSA system has brought about notable modifications to the CO₂ sorption-desorption mechanism, thereby yielding a substantial increase in CO₂ working capacity. The CO₂ adsorption capacity of the MXene material, which holds the top position in PTSA system, is measured to be 1.19 mol/kg. Additionally, the selectivity of CO₂ adsorption over H₂ for this MXene material is found to be 731.

Table 7.1: Promising 10 MXene adsorbents defined based on R% > 90% and APS ranking at PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA processes for CO₂/H₂:25/75 mixture.

PSA	VSA	TSA	PTSA	VTSA
NbCrNBr ₂	Cr ₂ CS ₂	Nb _{1.33} C	NbCrN(NCS) ₂	Nb _{1.33} C
Cr ₂ CBr ₂	VCrN(SCN) ₂	NbCrN(NCS) ₂	VCrN(NCS) ₂	NbCrN(NCS) ₂
VWNBBr ₂	NbMoN(SCN) ₂	W _{1.33} C	Nb _{1.33} C	W _{1.33} C
NbMoNBr ₂	VCrNBr ₂	VCrN(NCS) ₂	VMoN(NCS) ₂	VCrN(NCS) ₂
NbWNBBr ₂	Cr ₃ C ₂ O ₂	VMoN(NCS) ₂	Sc ₂ C(NCS) ₂	VMoN(NCS) ₂
Sc ₂ C(OCN) ₂	ScZrN(SCN) ₂	NbMoN(NCS) ₂	Mo ₂ C(NCS) ₂	NbMoN(NCS) ₂
YCrCBr ₂	Mo ₂ C(SCN) ₂	Mo ₂ C(NCS) ₂	NbMoN(NCS) ₂	Mo ₂ C(NCS) ₂
VMoNCl ₂	Ti _{1.2} Nb _{0.8} C	Sc ₂ C(NCS) ₂	NbWN(NCS) ₂	Sc ₂ C(NCS) ₂
Cr ₂ CCl ₂	Y ₂ C(NCS) ₂	NbWN(NCS) ₂	YCrC(NCS) ₂	NbWN(NCS) ₂
ScCrC(OCN) ₂	NbWN(SCN) ₂	YCrC(NCS) ₂	W _{1.33} C	YCrC(NCS) ₂

The evaluation based on the interaction energies between gas molecules and surface of top 10 MXene is given in Figure 7.5. The alteration of CO₂/H₂ separation performance of the leading MXene adsorbents at PSA exhibits a parallel relationship with the interaction energies. The total energy resulting from the interaction between MXene and gas primarily stems from the electrostatic energy, with variations

ranging from 0.2% to 1.7%. Hence, the adsorption of gas mixtures on the most efficient MXene structures is dictated by the van der Waals energy. In contrast, the group 6B transition metals (chromium, molybdenum, and tungsten) derived from the elements located in the d-block of the periodic table exhibit prominence in the composition of top MXenes at PSA. This finding aligns with the DFT study conducted by Jurado et al. [135], which examined the CO₂ binding energies and molecular dissociation capabilities of 27 MXene structures. The authors of the study have reported that MXenes incorporating elements such as titanium (Ti), hafnium (Hf), and zirconium (Zr) exhibited elevated activation energies. Consequently, this phenomenon will enhance the transformation of CO₂ into alternative molecular species, thereby rendering them viable for employment in catalytic contexts. In contrast, it has been reported that MXenes incorporating chromium (Cr), molybdenum (Mo), and tungsten (W) elements exhibit elevated binding energies with CO₂ at lower temperatures. Consequently, these MXenes hold promise as potential adsorbents for CO₂, as they can release CO₂ in a cost-effective manner through heating at approximately 200 °C. Furthermore, in a study conducted by Hu et al. [136], it was demonstrated that Cr-functionalized Porous aromatic frameworks (PAFs) exhibit enhanced efficiency in the separation of CO₂/H₂ when compared to PAFs functionalized with various alkaline earth metals (Be, Mg, and Ca) as well as first-row transition metals (Sc to Zn). In accordance with the aforementioned studies, it is worth noting that among the 50 MXene structures presented in Table 7.1, accounting for any duplications within each process, a mere 9 structures do not incorporate elements such as Cr, Mo, and W.

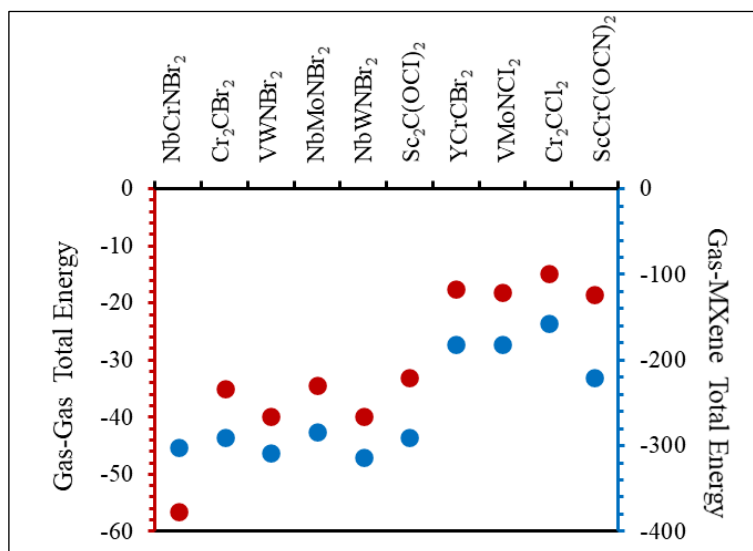


Figure 7.5: Total average interaction energies (kJ/mol) between gas molecules (left axis) and gas-MXene (right axis) for promising 10 MXene structures defined based on $R\% > 90\%$ and ranked considering APS for PSA process.

In order to examine the impact of metals on gas adsorption, the radial distribution functions (RDFs) of CO₂ and H₂ in the vicinity of metals and functional groups were computed specifically for Cr₂CBr₂ and Cr₂CS₂. These calculations are depicted in Figure 7.6 (a – b). The coordination preference of both gases is observed to be towards Cr elements rather than functional groups (such as –Br₂ and –S₂), as evidenced by the intensities of the RDF peaks. The variation in interaction energy and bond length among functional groups leads to discrepancies in the distances of gases surrounding Cr metals. The examination of the images presented in Figure 7.6 (c – e) reveals that the gases are positioned in proximity to the Cr element, specifically between two Br atoms or S atoms. Hence, the dominant factor influencing the adsorption of gas mixtures on MXene adsorbents, specifically on Cr metal, is the competition among gases for the same adsorption site. This competition results in an enhanced selectivity for CO₂/H₂ mixture adsorption, as evidenced by an increase in selectivity from 16.7 to 34.3 for Cr₂CBr₂ at PSA and from 55.6 to 61.5 for Cr₂CS₂ at VSA.

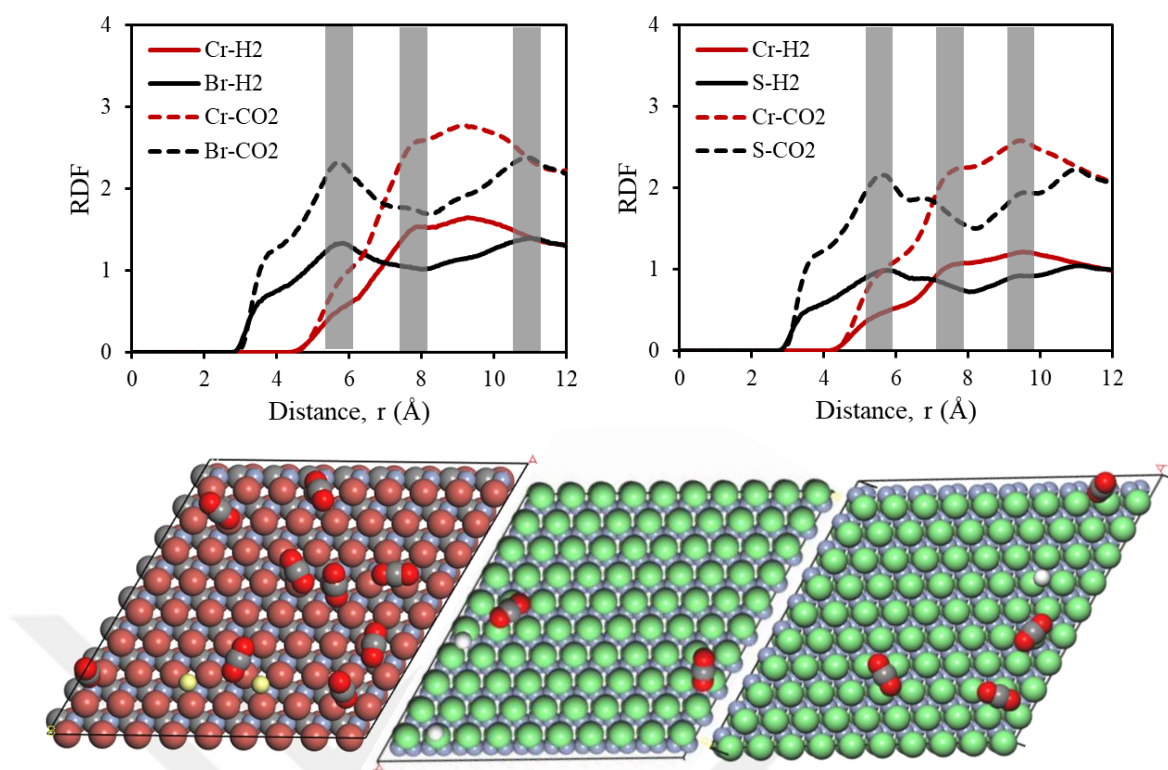


Figure 7.6: Radial distribution function (RDF) of CO₂/H₂:25/75 gas mixture around specific atoms of (a) Cr₂CBr₂ MXene and (b) Cr₂CS₂ MXene; coordination of CO₂ and H₂ molecules on the surface of (c) Cr₂CBr₂ and (d, e) Cr₂CS₂ MXene structures. Br, Cr, C, O, S, and H atoms are represented with brown, light blue, gray, red, green, and yellow colors in (c – e), respectively.

7.4. Effect of Temperature to MXenes

In order to observe the effect of temperature on MXenes and facilitate experimental studies, we conducted GCMC simulations of 730 MXene structures at 250 °C in line with experimental studies to demonstrate whether MXenes exhibit high performance at lower temperatures. Furthermore, a literature review revealed that hypothetical adsorption studies using nanomaterials such as MOFs and COFs commonly employed a temperature of 120 °C [84]. Therefore, by conducting our work at 120 °C using the same parameters, we were able to compare MXenes with other materials and also test MXenes at a significantly lower temperature compared to 250 °C.

The effects of temperature on three adsorption processes, TSA, PTSA, and VTSA, were compared for a 730 Mxene structure at high and low temperatures (namely, 250 and 120 °C). Firstly, important parameters for the adsorbents, APS and regenerability, were examined at 250 °C (Figure 7.7 (a)). When the same parameters

were examined at 120 °C (Figure 7.7 (c)), there was almost no decrease in APS for any MXene structure. However, regenerability showed a slight decrease at around 90-100 %R at compared to approximately 95-100 %R at under hybrid conditions at 250 °C. In the case of TSA conditions, regenerability decreased by 10%. Next, two general parameters, selectivity and working capacities, were examined for adsorption calculations. When the temperature was reduced from 250 °C (Figure 7.7 (b)) to 120 °C (Figure 7.7 (d)), there was almost no decrease in performance for any MXene structure in terms of both parameters. Considering all these results, it can be safely deduced that MXenes exhibit promising performance at low temperatures as well, as they do at high temperatures, making them potential materials for adsorption and separation of CO₂/H₂.

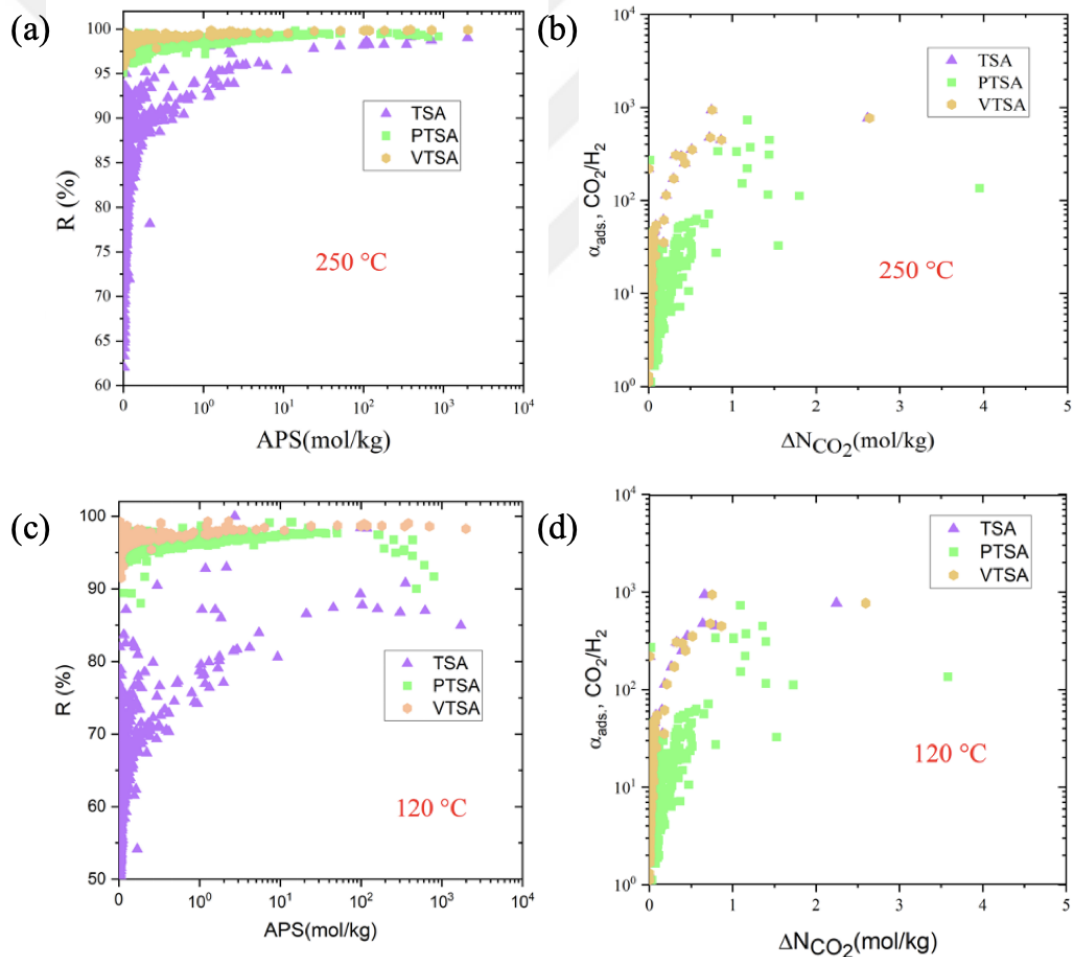


Figure 7.7: R % and APS of MXene adsorbents for the separation of CO₂/H₂:25/75, temperature (a) 250 °C and (c) 120 °C mixture at TSA, PTSA, and VTSA conditions.

Relation between CO₂/H₂ adsorption selectivity and CO₂ working capacity of MXene adsorbents for the separation of CO₂/H₂:25/75, (b) 250 °C and (d) 120 °C mixture at TSA, PTSA, and VTSA conditions.

8. CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS

In this thesis, a comprehensive collection of MXene structures was initially gathered from various sources. Subsequently, a systematic approach was employed to design and optimize MXene structures for which crystallographic data files were unavailable. Consequently, a comprehensive and extensive MXene database consisting of 730 members has been established in order to identify the most effective MXene adsorbents for CO₂/H₂ mixture separation using molecular simulation methodologies. The acquisition of knowledge pertaining to the structure-performance relationship of MXene adsorbents has the potential to facilitate the development of innovative adsorbents with superior performance characteristics that have not yet been uncovered. It is noteworthy that the proposed MXene structures, which exhibit superior performance, have been fabricated for the purpose of investigating their distinct physical properties or determined through first-principles calculations to ascertain their structural stabilities.

Gas adsorption capabilities of MXene adsorbents are evaluated under various operational parameters, including PSA, VSA, TSA, PTSA, and VTSA, using mixed gas simulations. The top MXene structures in mixed gas adsorption for PSA and VSA conditions are derived from transition metals belonging to the 6B group in the d-block of the periodic table, namely Cr, Mo, and W. Nevertheless, in the context of TSA, PTSA, and VTSA conditions, MXene adsorbents that have been functionalized with voluminous $-(\text{NCS})_2$ groups and exhibit in-plane ordered vacancy structures, such as Nb_{1.33}C and W_{1.33}C, are considered to be highly promising structures with a strong correlation to these processes.

In order to facilitate further academic pursuits, the following recommendations are proposed:

- By utilizing a sophisticated deep learning model, it becomes possible to accurately estimate parameters that are highly correlated with both simulation outcomes and experimental findings. This model enables the exploration of numerous hypothetical MXenes, thereby circumventing the time and energy expended in conducting simulations.

- The identification of optimal MXene membranes can be achieved through the utilization of diffusion calculations conducted via Molecular Dynamics, employing the MXene database provided in this study. Furthermore, the gas separation efficiency can be significantly enhanced by incorporating high polymer content into Mixed Matrix Membranes for Mxenes-based gas separation applications.



REFERENCES

- [1] Galvis Escobar, A. R. (2018). "TiMn₂ Based Metal Hydrides for Hydrogen Compression Applications: Numerical and Experimental Approach."
- [2] IPCC, S. "2018: Global Warming of 1.5° C. An IPCC Special Report on the Impacts of Global Warming of 1.5° C above Pre-Industrial Levels and Related Global Greenhouse Gas Emission Pathways, in the Context of Strengthening the Global Response to the Threat of Climate Change, Sustainable Development, and Efforts to Eradicate Poverty." Sustainable Development, and Efforts to Eradicate Poverty [V. Masson-Delmotte, P. Zhai, HO Pörtner, D. Roberts, J. Skea, PR Shukla, A. Pirani, W. Moufouma-Okia, C. Péan, R. Pidcock, S. Connors, JBR Matthews, Y. Chen, X. Zhou, MI Gomis, E. Lonnoy, T. Maycock, M. Tignor, T. Waterfield (eds.)]. <http://www.ipcc.ch/report/sr15>.
- [3] Scalia, A., Bella, F., Lamberti, A., Gerbaldi, C. and Tresso, E. (2019) 'Innovative multipolymer electrolyte membrane designed by oxygen inhibited UV-crosslinking enables solid-state in plane integration of energy conversion and storage devices', *Energy*, 166, 789-795.
- [4] Zheng, C., Wu, W.-Z., Xie, W., Li, Q. and Zhang, T. (2021) 'Forecasting the hydroelectricity consumption of China by using a novel unbiased nonlinear grey Bernoulli model', *Journal of Cleaner Production*, 278, 123903.
- [5] Lopez-Urionabarrenechea, A., Gastelu, N., Acha, E., Caballero, B., Orue, A., Jiménez-Suárez, A., Prolongo, S. and De Marco, I. (2020) 'Reclamation of carbon fibers and added-value gases in a pyrolysis-based composites recycling process', *Journal of cleaner production*, 273, 123173.
- [6] Kumagai, S. and Yoshioka, T. (2021) 'Chemical feedstock recovery from hard-to-recycle plastics through pyrolysis-based approaches and pyrolysis-gas chromatography', *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 94(10), 2370-2380.
- [7] Nimkar, S. C., Mewada, R. K. and Rosen, M. A. (2017) 'Exergy and exergoeconomic analyses of thermally coupled reactors for methanol synthesis', *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(47), 28113-28127.
- [8] Debe, M. K. (2012) 'Electrocatalyst approaches and challenges for automotive fuel cells', *Nature*, 486(7401), 43-51.
- [9] Zhu, X., Li, S., Shi, Y. and Cai, N. (2019) 'Recent advances in elevated-temperature pressure swing adsorption for carbon capture and hydrogen production', *Progress in Energy and Combustion Science*, 75, 100784.
- [10] Wang, D., Meng, W., Zhou, H., Yang, Y., Xie, J., Yang, S. and Li, G. (2022) 'Novel coal-to-methanol process with near-zero carbon emission: Pulverized coal gasification-integrated green hydrogen process', *Journal of Cleaner Production*, 339, 130500.

- [11] Voldsund, M., Jordal, K. and Anantharaman, R. (2016) 'Hydrogen production with CO₂ capture', *International Journal of hydrogen energy*, 41(9), 4969-4992.
- [12] Foo, K. Y. and Hameed, B. H. (2010) 'Insights into the modeling of adsorption isotherm systems', *Chemical engineering journal*, 156(1), 2-10.
- [13] Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J. and Sing, K. S. (2015) 'Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report)', *Pure and applied chemistry*, 87(9-10), 1051-1069.
- [14] Choi, S., Drese, J. H. and Jones, C. W. (2009) 'Adsorbent materials for carbon dioxide capture from large anthropogenic point sources', *ChemSusChem: Chemistry & Sustainability Energy & Materials*, 2(9), 796-854.
- [15] Naguib, M., Kurtoglu, M., Presser, V., Lu, J., Niu, J., Heon, M., Hultman, L., Gogotsi, Y. and Barsoum, M. W. (2011) 'Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti₃AlC₂', *Advanced materials*, 23(37), 4248-4253.
- [16] Anasori, B., Lukatskaya, M. R. and Gogotsi, Y. (2017) '2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage', *Nature Reviews Materials*, 2(2), 1-17.
- [17] Gogotsi, Y. and Anasori, B. (2019). *The rise of MXenes*. ACS Publications.
- [18] Guo, X., Zhang, X., Zhao, S., Huang, Q. and Xue, J. (2016) 'High adsorption capacity of heavy metals on two-dimensional MXenes: an ab initio study with molecular dynamics simulation', *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(1), 228-233.
- [19] Allen, M. P. and Tildesley, D. J. (2017) *Computer simulation of liquids*. Oxford university press.
- [20] Dubbeldam, D. and Snurr, R. (2007) 'Recent developments in the molecular modeling of diffusion in nanoporous materials', *Molecular Simulation*, 33(4-5), 305-325.
- [21] Rule, P. 'Technical Support Document For Hydrogen Production: Proposed Rule For Mandatory Reporting Of Greenhouse Gases'.
- [22] Ball, M. and Wietschel, M. (2009) 'The future of hydrogen—opportunities and challenges', *International journal of hydrogen energy*, 34(2), 615-627.
- [23] Goswami, D. Y. and Kreith, F. (2007) *Handbook of energy efficiency and renewable energy*. Crc Press.

- [24] Zhang, H., Sun, Z. and Hu, Y. H. (2021) 'Steam reforming of methane: Current states of catalyst design and process upgrading', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 149, 111330.
- [25] Abbas, S. Z., Dupont, V. and Mahmud, T. (2017) 'Kinetics study and modelling of steam methane reforming process over a NiO/Al₂O₃ catalyst in an adiabatic packed bed reactor', *International journal of hydrogen Energy*, 42(5), 2889-2903.
- [26] Smith RJ, B., Loganathan, M. and Shantha, M. S. (2010) 'A review of the water gas shift reaction kinetics', *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 8(1).
- [27] Boot-Handford, M. E., Abanades, J. C., Anthony, E. J., Blunt, M. J., Brandani, S., Mac Dowell, N., Fernández, J. R., Ferrari, M.-C., Gross, R. and Hallett, J. P. (2014) 'Carbon capture and storage update', *Energy & Environmental Science*, 7(1), 130-189.
- [28] Rostrup-Nielsen, J. R. (1984) *Catalytic steam reforming*. Springer.
- [29] Zoulias, E. and Lymberopoulos, N. (2007) 'Techno-economic analysis of the integration of hydrogen energy technologies in renewable energy-based stand-alone power systems', *Renewable energy*, 32(4), 680-696.
- [30] Carmo, M., Fritz, D. L., Mergel, J. and Stolten, D. (2013) 'A comprehensive review on PEM water electrolysis', *International journal of hydrogen energy*, 38(12), 4901-4934.
- [31] Ursua, A., Gandia, L. M. and Sanchis, P. (2011) 'Hydrogen production from water electrolysis: current status and future trends', *Proceedings of the IEEE*, 100(2), 410-426.
- [32] Pandiyan, A., Uthayakumar, A., Subrayan, R., Cha, S. W. and Krishna Moorthy, S. B. (2019) 'Review of solid oxide electrolysis cells: a clean energy strategy for hydrogen generation', *Nanomaterials and Energy*, 8(1), 2-22.
- [33] Kodama, T., Kondoh, Y., Yamamoto, R., Andou, H. and Satou, N. (2005) 'Thermochemical hydrogen production by a redox system of ZrO₂-supported Co (II)-ferrite', *Solar Energy*, 78(5), 623-631.
- [34] Steinfeld, A. and Palumbo, R. (2001) 'Solar thermochemical process technology', *Encyclopedia of physical science and technology*, 15(1), 237-56.
- [35] Gorenssek, M. B. and Summers, W. A. (2009) 'Hybrid sulfur flowsheets using PEM electrolysis and a bayonet decomposition reactor', *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(9), 4097-4114.
- [36] Chueh, W. C. and Haile, S. M. (2010) 'A thermochemical study of ceria: exploiting an old material for new modes of energy conversion and CO₂

- mitigation', *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 368(1923), 3269-3294.
- [37] Vitart, X., Le Duigou, A. and Carles, P. (2006) 'Hydrogen production using the sulfur–iodine cycle coupled to a VHTR: an overview', *Energy conversion and management*, 47(17), 2740-2747.
 - [38] Abanades, S. and Flamant, G. (2006) 'Thermochemical hydrogen production from a two-step solar-driven water-splitting cycle based on cerium oxides', *Solar energy*, 80(12), 1611-1623.
 - [39] Roeb, M., Sattler, C., Klüser, R., Monnerie, N., de Oliveira, L., Konstandopoulos, A. G., Agrafiotis, C., Zaspalis, V., Nalbandian, L. and Steele, A. (2006) 'Solar hydrogen production by a two-step cycle based on mixed iron oxides'.
 - [40] Pachauri, R. K., Allen, M. R., Barros, V. R., Broome, J., Cramer, W., Christ, R., Church, J. A., Clarke, L., Dahe, Q. and Dasgupta, P. (2014) *Climate change 2014: synthesis report. Contribution of Working Groups I, II and III to the fifth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ipcc.
 - [41] Edenhofer, O. (2014) 'Technical Summary In: Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Technical Report'.
 - [42] Benson, S. M. and Cole, D. R. (2008) 'CO₂ sequestration in deep sedimentary formations', *Elements*, 4(5), 325-331.
 - [43] Yang, R. T. (1997) *Gas separation by adsorption processes*. World Scientific.
 - [44] Kennedy, D. A., Mujcin, M., Trudeau, E. and Tezel, F. H. (2016) 'Pure and binary adsorption equilibria of methane and nitrogen on activated carbons, desiccants, and zeolites at different pressures', *Journal of Chemical & Engineering Data*, 61(9), 3163-3176.
 - [45] Boot-Handford, M. E., Abanades, J. C., Anthony, E. J., Blunt, M. J., Brandani, S., Mac Dowell, N., Fernández, J. R., Ferrari, M.-C., Gross, R. and Hallett, J. P. (2014) 'Carbon capture and storage update', *Energy & Environmental Science*, 7(1), 130-189.
 - [46] Doney, S. C., Fabry, V. J., Feely, R. A. and Kleypas, J. A. (2009) 'Ocean acidification: the other CO₂ problem', *Annual review of marine science*, 1, 169-192.
 - [47] Rao, A. B. and Rubin, E. S. (2002) 'A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control', *Environmental science & technology*, 36(20), 4467-4475.

- [48] Herzog, H. J. (2011) 'Scaling up carbon dioxide capture and storage: From megatons to gigatons', *Energy Economics*, 33(4), 597-604.
- [49] Wall, T., Liu, Y., Spero, C., Elliott, L., Khare, S., Rathnam, R., Zeenathal, F., Moghtaderi, B., Buhre, B. and Sheng, C. (2009) 'An overview on oxyfuel coal combustion—State of the art research and technology development', *Chemical engineering research and design*, 87(8), 1003-1016.
- [50] Rochelle, G. T. (2009) 'Amine scrubbing for CO₂ capture', *Science*, 325(5948), 1652-1654.
- [51] Wang, Y., Zhao, L., Otto, A., Robinius, M. and Stolten, D. (2017) 'A review of post-combustion CO₂ capture technologies from coal-fired power plants', *Energy Procedia*, 114, 650-665.
- [52] Liu, Y., Yang, Y., Sun, Q., Wang, Z., Huang, B., Dai, Y., Qin, X. and Zhang, X. (2013) 'Chemical adsorption enhanced CO₂ capture and photoreduction over a copper porphyrin based metal organic framework', *ACS applied materials & interfaces*, 5(15), 7654-7658.
- [53] Dąbrowski, A. (2001) 'Adsorption—from theory to practice', *Advances in colloid and interface science*, 93(1-3), 135-224.
- [54] Ruthven, D. M. (1984) *Principles of adsorption and adsorption processes*. John Wiley & Sons.
- [55] Crittenden, J. C., Trussell, R. R., Hand, D. W., Howe, K. J. and Tchobanoglous, G. (2012) *MWH's water treatment: principles and design*. John Wiley & Sons.
- [56] Rouquerol, J., Rouquerol, F., Llewellyn, P., Maurin, G. and Sing, K. S. (2013) *Adsorption by powders and porous solids: principles, methodology and applications*. Academic press.
- [57] Bhatnagar, A., Sillanpää, M. and Witek-Krowiak, A. (2015) 'Agricultural waste peels as versatile biomass for water purification—A review', *Chemical engineering journal*, 270, 244-271.
- [58] Sircar, S. (2002) 'Pressure swing adsorption', *Industrial & engineering chemistry research*, 41(6), 1389-1392.
- [59] Yang, J.-E., Han, S.-H., Park, J.-H. and An, Y.-H. (1997) 'Analytic method to break logical loops automatically in PSA', *Reliability engineering & system safety*, 56(2), 101-105.
- [60] Plaza, M., Pevida, C., Arias, B., Feroso, J., Arenillas, A., Rubiera, F. and Pis, J. (2008) 'Application of thermogravimetric analysis to the evaluation of aminated solid sorbents for CO₂ capture', *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 92(2), 601-606.

- [61] Lee, S.-J., Jung, J.-H., Moon, J.-H., Jee, J.-G. and Lee, C.-H. (2007) 'Parametric study of the three-bed pressure– vacuum swing adsorption process for high purity O₂ generation from ambient air', *Industrial & engineering chemistry research*, 46(11), 3720-3728.
- [62] Shen, Y., Niu, Z., Zhang, R. and Zhang, D. (2021) 'Vacuum pressure swing adsorption process with carbon molecular sieve for CO₂ separation from biogas', *Journal of CO₂ Utilization*, 54, 101764.
- [63] Zhou, C., He, K., Lv, W., Chen, Y., Tang, S., Liu, C., Yue, H. and Liang, B. (2018) 'Energy and economic analysis for post-combustion CO₂ capture using amine-functionalized adsorbents in a temperature vacuum swing process', *Energy & Fuels*, 33(3), 1774-1784.
- [64] Khurana, M. and Farooq, S. (2016) 'Simulation and optimization of a 6-step dual-reflux VSA cycle for post-combustion CO₂ capture', *Chemical Engineering Science*, 152, 507-515.
- [65] Nikolic, D., Giovanoglou, A., Georgiadis, M. C. and Kikkinides, E. S. (2008) 'Generic modeling framework for gas separations using multibed pressure swing adsorption processes', *Industrial & engineering chemistry research*, 47(9), 3156-3169.
- [66] Kim, Y. H., Kim, J. J. and Lee, C. H. (2017) 'Adsorptive cyclic purification process for CO₂ mixtures captured from coal power plants', *AIChE Journal*, 63(3), 1051-1063.
- [67] Peramanu, S., Cox, B. and Pruden, B. (1999) 'Economics of hydrogen recovery processes for the purification of hydroprocessor purge and off-gases', *International Journal of Hydrogen Energy*, 24(5), 405-424.
- [68] Chung, T.-S., Jiang, L. Y., Li, Y. and Kulprathipanja, S. (2007) 'Mixed matrix membranes (MMMs) comprising organic polymers with dispersed inorganic fillers for gas separation', *Progress in polymer science*, 32(4), 483-507.
- [69] Chen, L., Deng, S., Zhao, R., Zhu, Y., Zhao, L. and Li, S. (2021) 'Temperature swing adsorption for CO₂ capture: Thermal design and management on adsorption bed with single-tube/three-tube internal heat exchanger', *Applied Thermal Engineering*, 199, 117538.
- [70] Ntiamoah, A., Ling, J., Xiao, P., Webley, P. A. and Zhai, Y. (2016) 'CO₂ capture by temperature swing adsorption: use of hot CO₂-rich gas for regeneration', *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(3), 703-713.
- [71] Jiang, N., Shen, Y., Liu, B., Zhang, D., Tang, Z., Li, G. and Fu, B. (2020) 'CO₂ capture from dry flue gas by means of VPSA, TSA and TVSA', *Journal of CO₂ Utilization*, 35, 153-168.

- [72] Banaszkiewicz, T., Chorowski, M. and Gizicki, W. 'Comparative analysis of cryogenic and PTSA technologies for systems of oxygen production'. AIP conference Proceedings: American Institute of Physics, 1373-1378.
- [73] Hao, P., Shi, Y. and Cai, N. (2021) 'Elevated temperature pressure swing adsorption using $\text{LaNi}_{4.3}\text{Al}_{0.7}$ for efficient hydrogen separation', International Journal of Hydrogen Energy, 46(1), 697-708.
- [74] Wilson, S. M. and Tezel, F. H. (2020) 'Direct dry air capture of CO_2 using VTSA with faujasite zeolites', Industrial & Engineering Chemistry Research, 59(18), 8783-8794.
- [75] Kunitomi, S., Ogasawara, K., Narita, H. and Yamamoto, S. (2023) 'Low-energy-consumption CO_2 recovery by combining H_2 sweeping and methanation with the conventional VTSA approach', Journal of CO_2 Utilization, 72, 102482.
- [76] Wang, L., Liu, Z., Li, P., Yu, J. and Rodrigues, A. E. (2012) 'Experimental and modeling investigation on post-combustion carbon dioxide capture using zeolite 13X-APG by hybrid VTSA process', Chemical Engineering Journal, 197, 151-161.
- [77] Bhunia, S. S., Saxena, M. and Saxena, A. K. (2021) 'Ligand-and structure-based virtual screening in drug discovery', Biophysical and Computational Tools in Drug Discovery: Springer, 281-339.
- [78] Fang, H., Kulkarni, A., Kamakoti, P., Awati, R., Ravikovitch, P. I. and Sholl, D. S. (2016) 'Identification of high- CO_2 -capacity cationic zeolites by accurate computational screening', Chemistry of Materials, 28(11), 3887-3896.
- [79] Yeo, B. C. (2022) 'High-throughput Screening Computation for Discovery of Porous Zeolites for Hydrogen Storage', Korean Journal of Metals and Materials, 60(7), 537-544.
- [80] Altundal, O. F., Altintas, C. and Keskin, S. (2020) 'Can COFs replace MOFs in flue gas separation? high-throughput computational screening of COFs for CO_2/N_2 separation', Journal of Materials Chemistry A, 8(29), 14609-14623.
- [81] Lu, X., Wu, Y., Wu, X., Cao, Z., Wei, X. and Cai, W. (2022) 'High-throughput computational screening of porous polymer networks for natural gas sweetening based on a neural network', AIChE Journal, 68(1), e17433.
- [82] Avci, G., Velioglu, S. and Keskin, S. (2018) 'High-throughput screening of MOF adsorbents and membranes for H_2 purification and CO_2 capture', ACS applied materials & interfaces, 10(39), 33693-33706.
- [83] Li, M., Cai, W., Wang, C. and Wu, X. (2022) 'High-throughput computational screening of hypothetical metal-organic frameworks with

open copper sites for CO₂/H₂ separation', *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(31), 18764-18776.

- [84] Aksu, G. O., Erucar, I., Haslak, Z. P. and Keskin, S. (2022) 'Accelerating discovery of COFs for CO₂ capture and H₂ purification using structurally guided computational screening', *Chemical Engineering Journal*, 427, 131574.
- [85] Yilmaz, G., Ozcan, A. and Keskin, S. (2015) 'Computational screening of ZIFs for CO₂ separations', *Molecular Simulation*, 41(9), 713-726.
- [86] Ozturk, T. N. and Keskin, S. (2014) 'Computational screening of porous coordination networks for adsorption and membrane-based gas separations', *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(25), 13988-13997.
- [87] Álvarez-Gutiérrez, N., Gil, M., Rubiera, F. and Pevida, C. (2018) 'Simplistic approach for preliminary screening of potential carbon adsorbents for CO₂ separation from biogas', *Journal of CO₂ Utilization*, 28, 207-215.
- [88] Doganci, M. and Velioglu, S. (2022) 'Identification of H₂/CO₂ Separation Performance of Inorganic Porous Adsorbents via Molecular Simulations', *International Journal of Environment and Geoinformatics*, 9(3), 91-96.
- [89] Krishna, R. and van Baten, J. M. (2011) 'In silico screening of metal–organic frameworks in separation applications', *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13(22), 10593-10616.
- [90] Babarao, R., Dai, S. and Jiang, D.-e. (2011) 'Functionalizing porous aromatic frameworks with polar organic groups for high-capacity and selective CO₂ separation: a molecular simulation study', *Langmuir*, 27(7), 3451-3460.
- [91] Gogotsi, Y. and Anasori, B. 2019. *The rise of MXenes*. ACS Publications.
- [92] Zhan, X., Si, C., Zhou, J. and Sun, Z. (2020) 'MXene and MXene-based composites: synthesis, properties and environment-related applications', *Nanoscale Horizons*, 5(2), 235-258.
- [93] Vahid Mohammadi, A., Rosen, J. and Gogotsi, Y. (2021) 'Review outlines the development and potential applications of a wide range of 2D metal carbides and nitrides', *Science*, 372, 6547.
- [94] Massoumlari, Ş., Doğancı, M. and Velioglu, S. (2022) 'Unveiling the potential of MXenes for H₂ purification and CO₂ capture as an emerging family of nanomaterials', *AIChE Journal*, 68(12), e17837.
- [95] Anasori, B. and Gogotsi, Y. (2019) *2D metal carbides and nitrides (MXenes): structure, properties and applications*. Springer Nature Switzerland AG.
- [96] Chen, J., Long, Q., Xiao, K., Ouyang, T., Li, N., Ye, S. and Liu, Z.-Q. (2021) 'Vertically-interlaced NiFeP/MXene electrocatalyst with tunable electronic

structure for high-efficiency oxygen evolution reaction', *Science Bulletin*, 66(11), 1063-1072.

- [97] Lee, S., Kim, E. H., Yu, S., Kim, H., Park, C., Lee, S. W., Han, H., Jin, W., Lee, K. and Lee, C. E. (2021) 'Polymer-laminated $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXene electrodes for transparent and flexible field-driven electronics', *ACS nano*, 15(5), 8940-8952.
- [98] Wang, J., Qin, Q., Li, F., Anjarsari, Y., Sun, W., Azzahidiah, R., Zou, J., Xiang, K., Ma, H. and Jiang, J. (2022) 'Recent advances of MXenes Mo_2C -based materials for efficient photocatalytic hydrogen evolution reaction', *Carbon Letters*, 1-14.
- [99] Koyappayil, A., Chavan, S. G., Roh, Y.-G. and Lee, M.-H. (2022) 'Advances of MXenes; perspectives on biomedical research', *Biosensors*, 12(7), 454.
- [100] Nguyen, V. P., Lim, M., Kim, K.-S., Kim, J.-H., Park, J. S., Yuk, J. M. and Lee, S.-M. (2021) 'Drastically increased electrical and thermal conductivities of Pt-infiltrated MXenes', *Journal of Materials Chemistry A*, 9(17), 10739-10746.
- [101] Nahirniak, S. and Saruhan, B. (2022) 'MXene heterostructures as perspective materials for gas sensing applications', *Sensors*, 22(3), 972.
- [102] Hao, C., Li, G., Wang, G., Chen, W. and Wang, S. (2022) 'Preparation of acrylic acid modified alkalized MXene adsorbent and study on its dye adsorption performance', *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 632, 127730.
- [103] Hu, X., Chen, C., Zhang, D. and Xue, Y. (2021) 'Kinetics, isotherm and chemical speciation analysis of Hg (II) adsorption over oxygen-containing MXene adsorbent', *Chemosphere*, 278, 130206.
- [104] Song, L., Nan, J., Liu, B. and Wu, F. (2023) 'Novel three-dimensional Ti_3C_2 -MXene embedded zirconium alginate aerogel adsorbent for efficient phosphate removal in water', *Chemosphere*, 319, 138016.
- [105] Arifutzzaman, A., Musa, I. N., Aroua, M. K. and Saidur, R. (2023) 'MXene based activated carbon novel nano-sandwich for efficient CO_2 adsorption in fixed-bed column', *Journal of CO_2 Utilization*, 68, 102353.
- [106] Liu, N., Li, J., Ma, S. and Jiao, Z. (2023) 'MXene V_2CO_2 monolayer: a promising adsorbent to capture toxic NH_3 gas', *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 148, 115651.
- [107] Xu, T., Wei, J., He, P., Wu, J., Chen, N., Shi, E., Pan, C., Zhao, X. and Zhang, Y. (2022) 'CuS-doped Ti_3C_2 MXene nanosheets for highly efficient adsorption of elemental mercury in flue gas', *Energy & Fuels*, 36(5), 2503-2514.

- [108] Liu, F.-Q., Liu, X., Sun, L., Li, R., Yin, C.-X. and Wu, B. (2021) 'MXene-supported stable adsorbents for superior CO₂ capture', *Journal of Materials Chemistry A*, 9(21), 12763-12771.
- [109] Lv, X., Zhang, S., Wang, J., Wang, M., Shan, J. and Zhou, S. (2022) 'Charge controlled capture/release of CH₄ on Nb₂CT_x MXene: A first-principles calculation', *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 110, 108056.
- [110] Liu, S., Liu, J., Liu, X., Shang, J., Xu, L., Yu, R. and Shui, J. (2021) 'Hydrogen storage in incompletely etched multilayer Ti₂CT_x at room temperature', *Nature Nanotechnology*, 16(3), 331-336.
- [111] Genheden, S., Reymer, A., Saenz-Méndez, P. and Eriksson, L. A. (2017) 'Computational chemistry and molecular modelling basics'.
- [112] Evans, J. D., Fraux, G., Gaillac, R., Kohen, D., Trouselet, F., Vanson, J.-M. and Coudert, F.-X. (2016) 'Computational chemistry methods for nanoporous materials', *Chemistry of Materials*, 29(1), 199-212.
- [113] McDonald, I. (1972) 'NpT-ensemble Monte Carlo calculations for binary liquid mixtures', *Molecular Physics*, 23(1), 41-58.
- [114] González, M. (2011) 'Force fields and molecular dynamics simulations', *École thématique de la Société Française de la Neutronique*, 12, 169-200.
- [115] Stephens, P. J., Devlin, F. J., Chabalowski, C. F. and Frisch, M. J. (1994) 'Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields', *The Journal of physical chemistry*, 98(45), 11623-11627.
- [116] Getman, R. B., Bae, Y.-S., Wilmer, C. E. and Snurr, R. Q. (2012) 'Review and analysis of molecular simulations of methane, hydrogen, and acetylene storage in metal–organic frameworks', *Chemical reviews*, 112(2), 703-723.
- [117] Mulliken, R. S. (1955) 'Electronic population analysis on LCAO–MO molecular wave functions. I', *The Journal of chemical physics* 23(10), 1833-1840.
- [118] Manz, T. A. and Sholl, D. S. (2010) 'Chemically meaningful atomic charges that reproduce the electrostatic potential in periodic and nonperiodic materials', *Journal of Chemical Theory and Computation*, 6(8), 2455-2468.
- [119] Breneman, C. M. and Wiberg, K. B. (1990) 'Determining atom-centered monopoles from molecular electrostatic potentials. The need for high sampling density in formamide conformational analysis', *Journal of Computational Chemistry*, 11(3), 361-373.
- [120] Coskuner, Y. B. (2018) A Grand Canonical Monte Carlo Simulation Model for Phase Behavior of Confined Hydrocarbons. Colorado School of Mines.

- [121] Farmahini, A. H., Opletal, G. and Bhatia, S. K. (2013) 'Structural modelling of silicon carbide-derived nanoporous carbon by hybrid reverse Monte Carlo simulation', *The Journal of Physical Chemistry C*, 117(27), 14081-14094.
- [122] Zhou, L., Zhang, Y., Zhuo, Z., Neukirch, A. J. and Tretiak, S. (2018) 'Interlayer-decoupled Sc-based MXene with high carrier mobility and strong light-harvesting ability', *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 9(23), 6915-6920.
- [123] Zeng, Z., Chen, X., Weng, K., Wu, Y., Zhang, P., Jiang, J. and Li, N. (2021) 'Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction', *npj Computational Materials*, 7(1), 80.
- [124] Khazaei, M., Arai, M., Sasaki, T., Estili, M. and Sakka, Y. (2014) 'Two-dimensional molybdenum carbides: potential thermoelectric materials of the MXene family', *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(17), 7841-7849.
- [125] Khazaei, M., Ranjbar, A., Arai, M. and Yunoki, S. (2016) 'Topological insulators in the ordered double transition metals $M_2M''C_2$ MXenes (M' = Mo, W; M'' = Ti, Zr, Hf)', *Physical Review B*, 94(12), 125152.
- [126] Khazaei, M., Arai, M., Sasaki, T., Chung, C. Y., Venkataramanan, N. S., Estili, M., Sakka, Y. and Kawazoe, Y. (2013) 'Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides', *Advanced Functional Materials*, 23(17), 2185-2192.
- [127] Rauhut, G. and Pulay, P. (1995) 'Transferable scaling factors for density functional derived vibrational force fields', *The Journal of Physical Chemistry*, 99(10), 3093-3100.
- [128] Yu, D., Hu, Y., Zhang, G., Li, W. and Jiang, Y. (2022) 'Theoretical studies on the two-photon absorption of II–VI semiconductor nano clusters', *Scientific Reports*, 12(1), 110.
- [129] Delley, B. (1990) 'An all-electron numerical method for solving the local density functional for polyatomic molecules', *The Journal of chemical physics*, 92(1), 508-517.
- [130] Braun, E., Zurhelle, A. F., Thijssen, W., Schnell, S. K., Lin, L.-C., Kim, J., Thompson, J. A. and Smit, B. (2016) 'High-throughput computational screening of nanoporous adsorbents for CO₂ capture from natural gas', *Molecular Systems Design & Engineering*, 1(2), 175-188.
- [131] Altintas, C. and Keskin, S. (2022) 'MOF adsorbents for flue gas separation: Comparison of material ranking approaches', *Chemical Engineering Research and Design*, 179, 308-318.
- [132] Oppenheim, J. J., Mancuso, J. L., Wright, A. M., Rieth, A. J., Hendon, C. H. and Dincă, M. (2021) 'Divergent adsorption behavior controlled by primary

coordination sphere anions in the metal–organic framework $\text{Ni}_2\text{X}_2\text{BTDD}$ ', *Journal of the American Chemical Society*, 143(40), 16343-16347.

- [133] Xie, Y., Naguib, M., Mochalin, V. N., Barsoum, M. W., Gogotsi, Y., Yu, X., Nam, K.-W., Yang, X.-Q., Kolesnikov, A. I. and Kent, P. R. (2014) 'Role of surface structure on Li-ion energy storage capacity of two-dimensional transition-metal carbides', *Journal of the American Chemical Society*, 136(17), 6385-6394.
- [134] Tan, Y., Zhu, Z., Zhang, X., Zhang, J., Zhou, Y., Li, H., Qin, H., Bo, Y. and Pan, Z. (2021) ' $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{Tx}$ (MXene) as a new stable catalyst for the hydrogen evolution reaction', *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(2), pp. 1955-1966.
- [135] Jurado, A., Ibarra, K., Morales-García, Á., Viñes, F. and Illas, F. (2021) 'Adsorption and Activation of CO_2 on Nitride MXenes: Composition, Temperature, and Pressure effects', *ChemPhysChem*, 22(23), 2456-2463.
- [136] Hu, J., Gu, C. and Liu, J. (2022) 'Porous aromatic frameworks with metallized catecholate ligands for CO_2 capture from gas mixtures: A molecular simulation study', *Fuel*, 319, 123768.

BIOGRAPHY

Melih DOĞANCI completed his high school education at Ankara Gülveren High School. He graduated from Karabuk University Mechatronics Engineering in 2017. He started his graduate education at Gebze Nanotechnology Institute. As a part of his master's education, he was awarded a TÜBİTAK scholarship for the project titled "Molecular Investigation of Hydrogen Separation Potential of MXene Nanomaterials for Efficiency and Economical Energy Production" numbered 120M180. One research paper on studies of my master's thesis has been published in the "2022 Future Issue" issue of the "AIChE Journal", which has an impact factor of 4.167 in 2022, where the publications of emerging researchers in the field are included. Moreover, during my master's studies, I compiled a review paper on the subject of "Identification of CO₂/H₂ Separation Performance of Inorganic Porous Adsorbents via Molecular Simulations". I participated as a scholar, was submitted to the journal "ACS Applied Nano Materials". It was submitted to a special issue of "Special Issue on Women in Nano", where publications of rising women scientists in the field of nanotechnology will be included. I find a chance to present my thesis work orally at two international congresses, "16th Nanoscience and Nanotechnology Conference (NanoTr-16)" held on September 5-8, 2022, and "The American Institute of Chemical Engineers (AIChE) 2022" held on November 13-18, 2022, in Phoenix, AZ, USA.

APPENDIX

APPENDIX A: MXene Types Whose Crystal Structures are Available in the Literature

MXene Type	Article Title	Author List	Journal Name, Issue, Date, and Page
$\text{Cr}_2\text{C}(\text{OH})_2$	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7888
Cr_2CBr_2	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7887
Cr_2CCl_2	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7886
Cr_2CF_2	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7885
Cr_2CO_2	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7889
Cr_2CS_2	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7890
Cr_2HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $\text{M}'_2\text{M}''\text{CNO}_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
$\text{Cr}_2\text{HfCNO}_2$	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $\text{M}'_2\text{M}''\text{CNO}_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
$\text{Cr}_2\text{N}(\text{OH})_2$	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2213
Cr_2NF_2	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2192
Cr_2NO_2	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2203
Cr_2NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $\text{M}'_2\text{M}''\text{CNO}_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
$\text{Cr}_2\text{NbCNO}_2$	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $\text{M}'_2\text{M}''\text{CNO}_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Cr_2TaCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $\text{M}'_2\text{M}''\text{CNO}_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

	M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	
Hf ₂ TiCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Hf ₂ VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Hf ₂ VCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Hf ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Hf ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ C(OH) ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7882
Mo ₂ CBr ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7881
Mo ₂ CCl ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7880
Mo ₂ CF ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7879
Mo ₂ CO ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7883
Mo ₂ CS ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7884
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125160
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125154
Mo ₂ HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ HfCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ NbCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125158
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125152
Mo ₂ TiCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ TiCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

Mo ₂ VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ VCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125159
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125153
Mo ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Mo ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ C(OH) ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7857
Nb ₂ CF ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7855
Nb ₂ CO ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7856
Nb ₂ CrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ CrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ HfCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ MoCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ MoCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ TaCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ TaCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ TiCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ TiCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ VCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

	M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	
Nb ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₃ CNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2214
Nb ₄ C ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2193
Nb ₄ C ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2204
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2215
Nb ₅ C ₄ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2194
Nb ₅ C ₄ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2205
Sc ₂ C(OH) ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7860
Sc ₂ CCl ₂	Interlayer-decoupled Sc-based MXene with high carrier mobility and strong light-harvesting ability	Liujiang Zhou, Yu Zhang, Zhiwen Zhuo, Amanda J. Neukirch, Sergei Tretiak	Jornal of Physical Chemistry Letters, 9(23), 2018, 6915–6920
Sc ₂ CF ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7858
Sc ₂ CO ₂ - (model3)	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7859
Ta ₂ C(OH) ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7863
Ta ₂ CF ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7861
Ta ₂ CO ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7862
Ta ₂ CrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ CrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

Ta ₂ HfCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ MoCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ MoCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ NbCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ TiCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ TiCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ VCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2216
Ta ₃ C ₂ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2195
Ta ₃ C ₂ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2206
Ta ₃ CNO ₂ -1	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2217
Ta ₄ C ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2196
Ta ₄ C ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2207
Ti ₂ C(OH) ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi	Physical Chemistry Chemical Physics, 16,

	in MXenes	Estili, Yoshio Sakka	2014, 7841-7866
Ti ₂ CF ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7864
Ti ₂ CO ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7865
Ti ₂ N(OH) ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7869
Ti ₂ NF ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7867
Ti ₂ NO ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7868
Ti ₂ CrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ CrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ HfCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ MoCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ MoCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ NbCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ VCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2218
Ti ₃ C ₂ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2197
Ti ₃ C ₂ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2208

		Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2219
Ti ₄ C ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2198
Ti ₄ C ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2209
Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2220
Ti ₄ N ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2199
Ti ₄ N ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2200
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2221
Ti ₅ C ₄ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2200
Ti ₅ C ₄ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2210
V ₂ C(OH) ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7872
V ₂ CF ₂	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7870
V ₂ CO ₂	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7871
V ₂ CrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ CrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ HfCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ MoCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

	M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	
V ₂ MoCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ NbCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ TiCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ TiCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ ZrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₂ ZrCNO ₂	Computational screening study of double transition metal carbonitrides M' ₂ M''CNO ₂ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
V ₃ C ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2222
V ₃ C ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2201
V ₃ C ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2211
V ₄ C ₃ (OH) ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2223
V ₄ C ₃ F ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2202
V ₄ C ₃ O ₂	Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung, Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka, Yoshiyuki Kawazoe	Advanced Functional Materials, 23(17), 2013, 2185-2212
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125163
W ₂ HfC ₂ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125157
W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125161
W ₂ TiC ₂ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125155
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	Topological insulators in ordered double transition metals M' ₂ M''C ₂ (M'= Mo, W; M''= Ti, Zr, Hf) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125162

$W_2ZrC_2O_2$	Topological insulators in ordered double transition metals $M'_2M''C_2$ ($M'=Mo, W$; $M''=Ti, Zr, Hf$) MXenes	Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki	Physical Review B, 94, 2016, 125156
$Zr_2C(OH)_2$	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7875
Zr_2CF_2	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7873
Zr_2CO_2	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7874
Zr_2CrCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2CrCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2HfCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2HfCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2MoCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2MoCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
$Zr_2N(OH)_2$	Two-dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7878
Zr_2NF_2	Two- dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7876
Zr_2NO_2	Two -dimensional molybdenum carbides: Potential thermoelectric materials in MXenes	Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Mehdi Estili, Yoshio Sakka	Physical Chemistry Chemical Physics, 16, 2014, 7841-7877
Zr_2NbCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2NbCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2TaCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2TaCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2TiCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2TiCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2VCN	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80
Zr_2VCNO_2	Computational screening study of double transition metal carbonitrides $M'_2M''CNO_2$ -MXene as catalysts for hydrogen evolution reaction	Zhoulan Zeng, Xingzhu Chen, Kaiyi Weng, Yang Wu, Peng Zhang, Jizhou Jiang and Neng L	npj Computational Materials, 7, 2021, 80

APPENDIX B: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of Mxene Structures at PSA Conditions

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working	% Regenerability	APS
	1 bar, 35°C	10 bar, 35°C	10 bar, 35°C	10 bar, 35°C	PSA	PSA	PSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0146	0,1490	0,0687	6,51	0,1344	90,21	0,875
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0075	0,0749	0,0522	4,31	0,0674	89,98	0,290
(TiV) ₃ C ₂	0,0168	0,1693	0,0750	6,77	0,1526	90,10	1,033
(TiV)C(OH) ₂	0,0099	0,1016	0,0843	3,62	0,0917	90,26	0,332
(TiV)CF ₂	0,0108	0,1079	0,0793	4,08	0,0971	89,96	0,396
(TiV)CO ₂	0,0108	0,1079	0,0793	4,08	0,0971	89,96	0,396
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0194	0,1723	0,0172	30,05	0,1530	88,77	4,597
Cr ₂ C	0,0116	0,1161	0,1210	2,88	0,1045	90,04	0,301
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0138	0,1362	0,0623	6,56	0,1224	89,86	0,802
Cr ₂ CBr ₂	0,0502	0,5036	0,0440	34,31	0,4534	90,02	15,554
Cr ₂ CCl ₂	0,0432	0,4566	0,0700	19,56	0,4134	90,55	8,086
Cr ₂ CF ₂	0,0077	0,0768	0,0725	3,18	0,0691	89,98	0,220
Cr ₂ CFCl	0,0122	0,1230	0,0708	5,21	0,1108	90,06	0,578
Cr ₂ CH ₂	0,0064	0,0623	0,0760	2,46	0,0559	89,71	0,137
Cr ₂ CO ₂	0,0126	0,1285	0,0648	5,95	0,1159	90,20	0,690
Cr ₂ CS ₂	0,1866	1,4334	0,0372	115,67	1,2468	86,98	144,221
Cr ₂ HfCN	0,0107	0,1138	0,0468	7,29	0,1031	90,56	0,752
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0151	0,1550	0,0293	15,90	0,1399	90,26	2,224
Cr ₂ MoCN	0,0168	0,1821	0,0632	8,64	0,1653	90,75	1,428
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0207	0,2155	0,0382	16,93	0,1948	90,39	3,297
Cr ₂ N	0,0070	0,0694	0,0946	2,20	0,0624	89,92	0,137
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0122	0,1204	0,0594	6,08	0,1081	89,84	0,658
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0096	0,1002	0,0497	6,05	0,0906	90,39	0,548
Cr ₂ NbCN	0,0179	0,1971	0,0646	9,15	0,1791	90,89	1,639
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0217	0,2259	0,0387	17,49	0,2042	90,39	3,572
Cr ₂ NF ₂	0,0062	0,0617	0,0652	2,84	0,0554	89,88	0,157
Cr ₂ NH ₂	0,0063	0,0613	0,0676	2,72	0,0550	89,76	0,150
Cr ₂ NO ₂	0,0089	0,0894	0,0717	3,74	0,0805	90,04	0,301
Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0008	0,0005	5,26	0,0007	90,38	0,004

Cr ₂ TaC ₂	0,0001	0,0007	0,0007	2,93	0,0006	90,00	0,002
Cr ₂ TaCN	0,0002	0,0022	0,0008	8,14	0,0020	90,78	0,016
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0030	0,0005	16,55	0,0027	90,37	0,045
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0148	0,1556	0,0679	6,87	0,1409	90,52	0,968
Cr ₂ TiC ₂	0,0082	0,0815	0,0713	3,43	0,0733	89,96	0,251
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0303	0,0591	0,0340	5,22	0,0288	48,75	0,150
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0252	0,2770	0,0533	15,58	0,2518	90,89	3,923
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0237	0,2459	0,0467	15,81	0,2222	90,38	3,512
Cr ₂ TiCN	0,0237	0,2619	0,0802	9,79	0,2382	90,96	2,332
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0275	0,2886	0,0468	18,52	0,2611	90,47	4,836
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0148	0,1555	0,0654	7,14	0,1407	90,49	1,004
Cr ₂ VC ₂	0,0079	0,0804	0,0701	3,44	0,0724	90,14	0,249
Cr ₂ VCN	0,0247	0,2756	0,0800	10,34	0,2509	91,04	2,594
Cr ₂ VCNO ₂	0,0268	0,2812	0,0463	18,20	0,2543	90,46	4,630
Cr ₂ ZrCN	0,0156	0,1955	0,0624	9,40	0,1799	92,00	1,692
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0295	0,3038	0,0344	26,49	0,2742	90,28	7,263
Cr ₃ C ₂	0,0108	0,1099	0,0797	4,14	0,0991	90,17	0,410
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0158	0,1516	0,0356	12,78	0,1357	89,56	1,735
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0711	0,0386	5,52	0,0639	89,89	0,353
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0985	0,0460	6,43	0,0886	89,93	0,569
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0602	0,5161	0,0589	26,30	0,4559	88,34	11,989
Cr ₃ CN	0,0232	0,2548	0,0794	9,63	0,2316	90,88	2,230
Cr ₃ CNO ₂	0,0311	0,3374	0,0463	21,86	0,3064	90,79	6,696
Cr ₃ N ₂	0,0053	0,0526	0,0545	2,90	0,0473	89,96	0,137
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0109	0,1083	0,0327	9,94	0,0974	89,90	0,968
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0112	0,1141	0,0486	7,05	0,1029	90,15	0,725
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0110	0,1082	0,0330	9,84	0,0972	89,84	0,957
Cr ₄ C ₃	0,0095	0,0975	0,0657	4,45	0,0879	90,22	0,392
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0109	0,1083	0,0327	9,94	0,0974	89,90	0,968
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0056	0,0557	0,0363	4,60	0,0501	89,98	0,231
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0070	0,0696	0,0391	5,34	0,0626	89,98	0,334
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0083	0,0839	0,0361	6,96	0,0756	90,13	0,526
Cr ₄ N ₃	0,0057	0,0568	0,0615	2,77	0,0511	90,03	0,141
Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0088	0,0864	0,0312	8,31	0,0776	89,79	0,645
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0045	0,0445	0,0341	3,92	0,0401	89,97	0,157
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0053	0,0529	0,0357	4,45	0,0476	90,06	0,212

Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0606	0,0346	5,25	0,0546	89,99	0,286
CrMoCF ₂	0,0076	0,0765	0,0634	3,62	0,0689	90,05	0,249
CrWCF ₂	0,0058	0,0593	0,0434	4,10	0,0535	90,21	0,219
Hf ₂ C	0,0043	0,0429	0,0457	2,82	0,0386	89,95	0,109
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0051	0,0494	0,0236	6,27	0,0443	89,75	0,278
Hf ₂ CF ₂	0,0034	0,0334	0,0285	3,52	0,0300	89,85	0,106
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0038	0,0379	0,0318	3,58	0,0341	89,97	0,122
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0048	0,0482	0,0470	3,07	0,0434	90,05	0,133
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0042	0,0422	0,0415	3,06	0,0380	90,00	0,116
Hf ₂ CO ₂	0,0051	0,0520	0,0325	4,79	0,0468	90,10	0,224
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0034	0,0331	0,0251	3,95	0,0297	89,86	0,118
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0045	0,0458	0,0412	3,34	0,0412	90,06	0,137
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0051	0,0518	0,0439	3,54	0,0467	90,13	0,165
Hf ₂ CrCN	0,0057	0,0591	0,0345	5,14	0,0534	90,30	0,275
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0067	0,0662	0,0189	10,53	0,0595	89,86	0,627
Hf ₂ MoCN	0,0065	0,0697	0,0268	7,81	0,0632	90,63	0,493
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0114	0,1071	0,0134	23,90	0,0957	89,36	2,287
Hf ₂ N	0,0033	0,0335	0,0421	2,39	0,0302	90,04	0,072
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0053	0,0517	0,0205	7,55	0,0464	89,74	0,350
Hf ₂ NbCN	0,0048	0,0490	0,0313	4,70	0,0442	90,24	0,208
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0061	0,0601	0,0170	10,58	0,0540	89,81	0,571
Hf ₂ NF ₂	0,0028	0,0278	0,0230	3,63	0,0250	89,80	0,091
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0034	0,0342	0,0248	4,14	0,0308	89,95	0,127
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0065	0,0661	0,0454	4,37	0,0597	90,21	0,261
Hf ₂ NO ₂	0,0044	0,0436	0,0307	4,26	0,0392	89,96	0,167
Hf ₂ TaCN	0,0001	0,0013	0,0008	4,67	0,0011	90,15	0,005
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0017	0,0005	11,07	0,0015	89,69	0,017
Hf ₂ TiCN	0,0056	0,0568	0,0350	4,88	0,0513	90,21	0,250
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0066	0,0651	0,0190	10,26	0,0585	89,86	0,600
Hf ₂ VCN	0,0054	0,0557	0,0346	4,83	0,0503	90,26	0,243
Hf ₂ VCNO ₂	0,0066	0,0650	0,0191	10,22	0,0584	89,83	0,597
Hf ₂ ZrCN	0,0046	0,0463	0,0317	4,39	0,0417	90,13	0,183
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0061	0,0591	0,0170	10,43	0,0530	89,74	0,553
Hf ₃ C ₂	0,0038	0,0392	0,0287	4,09	0,0354	90,20	0,145
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0031	0,0301	0,0109	8,30	0,0269	89,64	0,224
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0030	0,0297	0,0151	5,88	0,0267	89,84	0,157

Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,0099	0,0092	3,24	0,0089	89,65	0,029
Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0052	0,0510	0,0171	8,95	0,0458	89,86	0,410
Hf ₃ CN	0,0038	0,0382	0,0274	4,18	0,0344	90,14	0,144
Hf ₃ CNO ₂	0,0059	0,0594	0,0176	10,11	0,0535	90,01	0,541
Hf ₃ N ₂	0,0026	0,0259	0,0229	3,39	0,0234	89,99	0,079
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0018	0,0169	0,0081	6,27	0,0151	89,56	0,095
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0025	0,0240	0,0121	5,92	0,0215	89,68	0,127
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0015	0,0149	0,0095	4,71	0,0134	89,68	0,063
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0042	0,0415	0,0161	7,71	0,0373	89,83	0,287
Hf ₄ C ₃	0,0022	0,0219	0,0191	3,43	0,0197	89,96	0,067
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0034	0,0335	0,0135	7,43	0,0300	89,74	0,223
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0027	0,0261	0,0126	6,20	0,0235	89,83	0,145
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0012	0,0116	0,0082	4,27	0,0104	89,68	0,045
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0043	0,0424	0,0141	9,04	0,0382	89,98	0,345
Hf ₄ N ₃	0,0021	0,0206	0,0190	3,24	0,0185	89,99	0,060
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0030	0,0283	0,0094	9,04	0,0253	89,45	0,229
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0020	0,0200	0,0115	5,20	0,0180	89,79	0,094
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0012	0,0112	0,0085	3,94	0,0100	89,72	0,040
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0033	0,0329	0,0134	7,34	0,0296	89,99	0,217
HfCrNO ₂	0,0053	0,0528	0,0369	4,29	0,0474	89,92	0,204
Mn ₂ C	0,0115	0,1150	0,1194	2,89	0,1035	89,97	0,299
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0128	0,1266	0,0598	6,35	0,1138	89,87	0,723
Mn ₂ CF ₂	0,0070	0,0695	0,0631	3,30	0,0625	89,99	0,206
Mn ₂ CO ₂	0,0098	0,0984	0,0710	4,16	0,0886	90,02	0,368
Mn ₂ N	0,0063	0,0622	0,0859	2,17	0,0559	89,90	0,121
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0099	0,0966	0,0610	4,75	0,0867	89,75	0,412
Mn ₂ NF ₂	0,0059	0,0581	0,0635	2,74	0,0522	89,91	0,143
Mn ₂ NO ₂	0,0084	0,0837	0,0654	3,84	0,0753	89,95	0,289
Mn ₃ C ₂	0,0106	0,1069	0,0769	4,17	0,0964	90,13	0,402
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0156	0,1484	0,0329	13,51	0,1328	89,47	1,794
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0069	0,0674	0,0370	5,46	0,0606	89,80	0,331
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0102	0,1028	0,0404	7,64	0,0925	90,04	0,707
Mn ₃ N ₂	0,0075	0,0765	0,0771	2,98	0,0690	90,13	0,205
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0127	0,1203	0,0292	12,34	0,1076	89,46	1,327
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0056	0,0545	0,0366	4,46	0,0489	89,80	0,218
Mn ₄ C ₃	0,0092	0,0931	0,0625	4,47	0,0839	90,13	0,375

Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,1146	0,0285	12,08	0,1028	89,67	1,242
Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0055	0,0540	0,0312	5,19	0,0485	89,84	0,251
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0073	0,0745	0,0357	6,26	0,0671	90,14	0,420
Mn ₄ N ₃	0,0050	0,0506	0,0401	3,78	0,0456	90,07	0,172
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0100	0,0975	0,0269	10,87	0,0875	89,73	0,951
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0056	0,0564	0,0332	5,10	0,0508	89,99	0,259
Mo _{1,33} C	0,0176	0,1758	0,1158	4,55	0,1582	89,99	0,720
Mo ₂ C	0,0084	0,0854	0,0776	3,30	0,0769	90,11	0,254
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,3961	1,0585	0,0094	338,66	0,6623	62,57	224,302
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0276	0,2755	0,0368	22,49	0,2479	89,97	5,575
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0078	0,0769	0,0448	5,15	0,0691	89,82	0,356
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0525	0,4384	0,0256	51,40	0,3859	88,03	19,835
Mo ₂ CBr ₂	0,0341	0,3312	0,0344	28,90	0,2971	89,71	8,588
Mo ₂ CCl ₂	0,0259	0,2660	0,0496	16,10	0,2402	90,28	3,866
Mo ₂ CF ₂	0,0054	0,0540	0,0522	3,10	0,0486	89,97	0,151
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0096	0,0974	0,0695	4,21	0,0878	90,13	0,370
Mo ₂ CO ₂	0,0079	0,0791	0,0408	5,82	0,0712	89,99	0,415
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0066	0,0656	0,0502	3,92	0,0591	89,99	0,232
Mo ₂ CrCN	0,0125	0,1338	0,0538	7,46	0,1212	90,62	0,904
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0144	0,1466	0,0336	13,11	0,1322	90,20	1,733
Mo ₂ CS ₂	0,0046	0,0461	0,0492	2,81	0,0415	89,95	0,117
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0048	0,0481	0,0147	9,79	0,0433	89,94	0,424
Mo ₂ HfC ₂	0,0029	0,0293	0,0332	2,64	0,0263	89,93	0,070
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0078	0,0757	0,0199	11,41	0,0679	89,71	0,775
Mo ₂ HfCN	0,0068	0,0697	0,0366	5,72	0,0630	90,28	0,360
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0096	0,0972	0,0235	12,41	0,0876	90,13	1,087
Mo ₂ N	0,0055	0,0557	0,0598	2,79	0,0502	90,12	0,140
Mo ₂ N(OH) ₂	0,0148	0,1427	0,0287	14,92	0,1278	89,60	1,908
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0066	0,0679	0,0383	5,32	0,0613	90,29	0,326
Mo ₂ NbC ₂	0,0039	0,0386	0,0410	2,83	0,0347	89,95	0,098
Mo ₂ NbCN	0,0093	0,0971	0,0445	6,54	0,0878	90,42	0,574
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0123	0,1260	0,0288	13,12	0,1136	90,20	1,490
Mo ₂ NF ₂	0,0052	0,0510	0,0300	5,09	0,0457	89,75	0,233
Mo ₂ NO ₂	0,0070	0,0693	0,0382	5,45	0,0624	89,95	0,340
Mo ₂ ScC ₂	0,0048	0,0478	0,0498	2,88	0,0430	90,01	0,124
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0106	0,1029	0,0280	11,01	0,0923	89,69	1,017

Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0007	0,0004	4,85	0,0006	90,26	0,003
Mo ₂ TaCN	0,0002	0,0016	0,0008	6,18	0,0015	90,40	0,009
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0023	0,0006	12,31	0,0020	90,12	0,025
Mo ₂ TaC ₂	0,0001	0,0006	0,0007	2,69	0,0006	89,84	0,002
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0095	0,0989	0,0490	6,06	0,0895	90,43	0,542
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0130	0,1266	0,0251	15,13	0,1136	89,72	1,719
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0078	0,0790	0,0292	8,10	0,0712	90,13	0,577
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0079	0,0788	0,0256	9,24	0,0709	89,92	0,655
Mo ₂ TiC ₂	0,0048	0,0480	0,0483	2,99	0,0433	90,05	0,129
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0179	0,1578	0,0299	15,83	0,1398	88,63	2,214
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0195	0,1823	0,0258	21,19	0,1628	89,31	3,449
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0142	0,1513	0,0437	10,39	0,1371	90,61	1,424
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,0103	0,1027	0,0303	10,18	0,0924	89,95	0,941
Mo ₂ TiCN	0,0119	0,1266	0,0544	6,97	0,1146	90,59	0,799
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,1453	0,0338	12,89	0,1310	90,17	1,688
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0093	0,0972	0,0478	6,10	0,0879	90,43	0,536
Mo ₂ VC ₂	0,0048	0,0474	0,0475	2,99	0,0427	89,94	0,128
Mo ₂ VCN	0,0118	0,1251	0,0545	6,89	0,1133	90,54	0,780
Mo ₂ VCNO ₂	0,0139	0,1414	0,0338	12,55	0,1276	90,19	1,601
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0068	0,0665	0,0203	9,83	0,0597	89,80	0,587
Mo ₂ ZrC ₂	0,0038	0,0381	0,0416	2,75	0,0343	90,02	0,094
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0106	0,1032	0,0249	12,43	0,0926	89,76	1,151
Mo ₂ ZrCN	0,0089	0,0930	0,0466	5,98	0,0840	90,38	0,503
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0122	0,1229	0,0293	12,59	0,1107	90,09	1,393
Mo ₃ C ₂	0,0071	0,0724	0,0414	5,25	0,0654	90,25	0,343
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0093	0,0081	3,45	0,0083	89,73	0,029
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0053	0,0507	0,0170	8,92	0,0454	89,57	0,405
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0082	0,0798	0,0264	9,07	0,0717	89,79	0,650
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0119	0,1161	0,0228	15,28	0,1043	89,79	1,593
Mo ₃ CN	0,0092	0,0966	0,0465	6,23	0,0873	90,44	0,544
Mo ₃ N ₂	0,0043	0,0433	0,0336	3,86	0,0389	89,95	0,150
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0009	0,0040	0,66	0,0008	89,72	0,001
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0045	0,0426	0,0149	8,60	0,0381	89,53	0,328
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0048	0,0479	0,0274	5,24	0,0431	89,91	0,226
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0083	0,0796	0,0180	13,24	0,0713	89,60	0,944
Mo ₄ C ₃	0,0069	0,0716	0,0400	5,36	0,0647	90,32	0,347

Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0071	0,0676	0,0182	11,13	0,0606	89,54	0,674
Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0040	0,0396	0,0218	5,45	0,0356	89,87	0,194
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0063	0,0633	0,0227	8,37	0,0570	90,02	0,477
Mo ₄ N ₃	0,0039	0,0393	0,0326	3,61	0,0354	90,10	0,128
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0497	0,0212	7,04	0,0446	89,79	0,314
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0331	0,0244	4,07	0,0297	89,89	0,121
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0026	0,0252	0,0166	4,56	0,0226	89,75	0,103
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0044	0,0446	0,0271	4,93	0,0402	90,10	0,198
MoCrC	0,0071	0,0705	0,0962	2,20	0,0634	89,93	0,139
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0087	0,0880	0,0596	4,43	0,0792	90,08	0,351
MoWC	0,0039	0,0382	0,0539	2,13	0,0343	89,87	0,073
MoWC(NCO) ₂	0,0182	0,1815	0,0291	18,69	0,1633	89,98	3,052
MoWC(OCN) ₂	0,0212	0,2115	0,0284	22,30	0,1903	90,00	4,245
MoWC(SCN) ₂	0,0416	0,3526	0,0212	49,97	0,3110	88,20	15,541
MoWCCl ₂	0,0231	0,2492	0,0402	18,61	0,2261	90,72	4,206
MoWCF ₂	0,0032	0,0311	0,0836	1,12	0,0280	89,82	0,031
MoWCO ₂ -(model2)	0,0052	0,0522	0,0342	4,57	0,0470	90,10	0,215
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,1839	1,5554	0,1428	32,67	1,3715	88,17	44,804
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0544	0,4855	0,1371	10,62	0,4311	88,79	4,579
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0271	0,2693	0,1268	6,37	0,2422	89,95	1,544
Nb _{1,33} C	2,6409	3,9771	0,0881	135,40	1,3362	33,60	180,920
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0160	0,1604	0,1174	4,10	0,1444	90,01	0,592
Nb ₂ C	0,0084	0,0842	0,0829	3,05	0,0757	89,97	0,231
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0089	0,0871	0,0409	6,39	0,0781	89,73	0,499
Nb ₂ CF ₂	0,0056	0,0560	0,0483	3,48	0,0504	89,94	0,175
Nb ₂ CO ₂	0,0080	0,0808	0,0524	4,62	0,0728	90,05	0,337
Nb ₂ CrCN	0,0129	0,1372	0,0564	7,30	0,1243	90,61	0,908
Nb ₂ CrCNO ₂	0,0141	0,1420	0,0306	13,95	0,1279	90,07	1,784
Nb ₂ HfCN	0,0070	0,0723	0,0385	5,63	0,0653	90,32	0,368
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0088	0,0877	0,0215	12,24	0,0789	89,92	0,965
Nb ₂ MoCN	0,0100	0,1047	0,0486	6,46	0,0947	90,48	0,611
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0118	0,1180	0,0264	13,43	0,1062	90,00	1,425
Nb ₂ N	0,0064	0,0643	0,0790	2,44	0,0579	89,97	0,141
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0090	0,0904	0,0469	5,78	0,0813	89,99	0,471
Nb ₂ NF ₂	0,0053	0,0521	0,0340	4,60	0,0468	89,91	0,215
Nb ₂ NH ₂	0,0039	0,0379	0,0535	2,12	0,0340	89,80	0,072

Nb ₂ NO ₂	0,0071	0,0718	0,0511	4,21	0,0647	90,12	0,272
Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0008	0,0005	4,96	0,0007	90,25	0,003
Nb ₂ TaCN	0,0002	0,0017	0,0008	6,27	0,0016	90,45	0,010
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0021	0,0005	12,88	0,0019	89,98	0,025
Nb ₂ TiCN	0,0122	0,1282	0,0573	6,71	0,1161	90,51	0,779
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,1437	0,0299	14,43	0,1294	90,02	1,867
Nb ₂ VCN	0,0119	0,1253	0,0569	6,60	0,1134	90,52	0,749
Nb ₂ VCNO ₂	0,0134	0,1348	0,0309	13,10	0,1214	90,03	1,590
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0050	0,0516	0,0275	5,63	0,0466	90,33	0,262
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0067	0,0687	0,0411	5,01	0,0620	90,27	0,311
Nb ₂ ZrCN	0,0093	0,0964	0,0494	5,85	0,0872	90,39	0,510
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0109	0,1081	0,0271	11,96	0,0972	89,92	1,163
Nb ₃ C ₂	0,0079	0,0808	0,0521	4,65	0,0729	90,26	0,339
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0067	0,0638	0,0186	10,32	0,0571	89,47	0,590
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0056	0,0549	0,0253	6,51	0,0493	89,80	0,321
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0039	0,0380	0,0207	5,50	0,0341	89,70	0,187
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0094	0,0931	0,0296	9,42	0,0837	89,92	0,789
Nb ₃ CN	0,0095	0,0998	0,0504	5,94	0,0903	90,47	0,536
Nb ₃ CNO ₂	0,0116	0,1158	0,0268	12,96	0,1042	89,99	1,350
Nb ₃ N ₂	0,0047	0,0461	0,0366	3,79	0,0415	89,92	0,157
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,0023	0,0056	1,23	0,0021	89,57	0,003
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0046	0,0440	0,0162	8,16	0,0394	89,59	0,321
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0047	0,0456	0,0218	6,28	0,0409	89,78	0,257
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0078	0,0764	0,0259	8,86	0,0686	89,84	0,608
Nb ₄ C ₃	0,0059	0,0608	0,0388	4,70	0,0549	90,31	0,258
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0057	0,0536	0,0138	11,65	0,0480	89,45	0,559
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0044	0,0424	0,0182	6,98	0,0380	89,71	0,265
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0032	0,0308	0,0180	5,13	0,0276	89,72	0,142
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0070	0,0696	0,0236	8,86	0,0626	89,97	0,555
Nb ₄ N ₃	0,0042	0,0423	0,0374	3,39	0,0381	90,15	0,129
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0056	0,0542	0,0191	8,53	0,0486	89,68	0,415
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0035	0,0423	0,0182	6,98	0,0388	91,69	0,271
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0054	0,0540	0,0245	6,61	0,0486	90,01	0,322
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0006	0,0054	0,0060	2,69	0,0049	89,82	0,013
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0034	0,0330	0,0143	6,91	0,0296	89,72	0,204
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0055	0,0552	0,0169	9,79	0,0497	90,01	0,486

NbCrN(NCO) ₂	0,0433	0,4079	0,0342	35,82	0,3647	89,40	13,064
NbCrN(NCS) ₂	0,7617	1,1905	0,0049	731,49	0,4288	36,02	313,647
NbCrN(OCN) ₂	0,0321	0,3227	0,0426	22,75	0,2906	90,06	6,611
NbCrN(SCN) ₂	0,0725	0,5748	0,0272	63,39	0,5023	87,39	31,843
NbCrNBr ₂	0,0477	0,4821	0,0361	40,01	0,4344	90,11	17,380
NbCrNCl ₂	0,0362	0,3843	0,0591	19,51	0,3480	90,57	6,789
NbCrNF ₂	0,0079	0,0806	0,0640	3,78	0,0727	90,19	0,275
NbMoN(NCO) ₂	0,0217	0,2178	0,0389	16,80	0,1961	90,04	3,295
NbMoN(NCS) ₂	0,4042	1,0601	0,0096	331,95	0,6558	61,87	217,708
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,0003	0,0040	0,21	0,0002	88,80	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0594	0,4858	0,0249	58,44	0,4264	87,77	24,915
NbMoNBr ₂	0,0373	0,3821	0,0354	32,39	0,3448	90,23	11,170
NbMoNCl ₂	0,0262	0,2853	0,0535	16,01	0,2591	90,81	4,148
NbMoN(CN) ₂	0,0119	0,1219	0,0490	7,46	0,1101	90,26	0,821
NbMoNF ₂	0,0072	0,0724	0,0565	3,85	0,0652	90,06	0,251
NbWN(NCO) ₂	0,0171	0,1724	0,0298	17,36	0,1553	90,11	2,697
NbWN(NCS) ₂	0,3290	0,8346	0,0074	338,61	0,5056	60,58	171,203
NbWN(OCN) ₂	0,0189	0,1918	0,0295	19,51	0,1729	90,14	3,373
NbWN(SCN) ₂	0,0440	0,3719	0,0213	52,50	0,3279	88,16	17,215
NbWNBr ₂	0,0328	0,3302	0,0273	36,35	0,2974	90,07	10,811
NbWNCl ₂	0,0218	0,2346	0,0398	17,66	0,2127	90,69	3,758
NbWN(CN) ₂	0,0071	0,0721	0,0417	5,18	0,0650	90,20	0,337
NbWNF ₂	0,0054	0,0543	0,0452	3,61	0,0489	90,05	0,176
Sc ₂ C	0,0104	0,1021	0,1600	1,91	0,0918	89,86	0,176
Sc ₂ C(CN) ₂	0,0152	0,1534	0,1041	4,42	0,1382	90,10	0,611
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0014	0,0138	0,0147	2,81	0,0124	90,12	0,035
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,4379	1,4445	0,0139	310,79	1,0066	69,69	312,841
Sc ₂ C(OCi) ₂	0,0469	0,5017	0,0637	23,61	0,4548	90,66	10,740
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0018	0,0177	0,0181	2,94	0,0159	89,71	0,047
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0125	0,1220	0,0700	5,23	0,1095	89,75	0,573
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0558	0,5146	0,0479	32,22	0,4588	89,16	14,782
Sc ₂ CBr ₂	0,0348	0,3594	0,0558	19,34	0,3246	90,31	6,278
Sc ₂ CCl ₂	0,0397	0,4111	0,0824	14,97	0,3713	90,33	5,561
Sc ₂ CF ₂	0,0087	0,0860	0,0831	3,10	0,0773	89,85	0,240
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0124	0,1253	0,0900	4,18	0,1130	90,14	0,472
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0140	0,1415	0,1165	3,64	0,1274	90,08	0,464

Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0176	0,1796	0,1211	4,45	0,1620	90,18	0,720
Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0144	0,1446	0,1140	3,81	0,1302	90,05	0,495
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0117	0,1174	0,0907	3,88	0,1057	90,03	0,410
Sc ₂ N	0,0077	0,0762	0,1370	1,67	0,0685	89,88	0,114
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0119	0,1161	0,0689	5,06	0,1042	89,75	0,527
Sc ₂ NF ₂	0,0074	0,0726	0,0757	2,88	0,0653	89,85	0,188
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,0149	0,1500	0,1121	4,01	0,1352	90,10	0,543
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,0114	0,1160	0,0922	3,78	0,1046	90,13	0,395
Sc ₂ NO ₂	0,0111	0,1108	0,0908	3,66	0,0997	90,01	0,365
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0115	0,1149	0,0707	4,87	0,1034	89,96	0,504
Sc ₃ C ₂	0,0088	0,0866	0,0866	3,00	0,0778	89,88	0,234
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0092	0,0878	0,0372	7,08	0,0786	89,51	0,557
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0058	0,0564	0,0256	6,62	0,0507	89,79	0,335
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0747	0,0423	5,31	0,0670	89,61	0,355
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,1294	0,0712	5,45	0,1165	90,08	0,635
Sc ₃ N ₂	0,0058	0,0569	0,0786	2,17	0,0512	89,87	0,111
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0084	0,0812	0,0316	7,70	0,0727	89,59	0,560
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0065	0,0637	0,0414	4,62	0,0572	89,75	0,264
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0096	0,0956	0,0516	5,56	0,0860	89,91	0,478
Sc ₄ C ₃	0,0087	0,0867	0,0787	3,30	0,0781	90,01	0,258
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0727	0,0276	7,91	0,0651	89,53	0,515
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0067	0,0654	0,0362	5,42	0,0587	89,76	0,318
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0103	0,1024	0,0417	7,36	0,0921	89,96	0,678
Sc ₄ N ₃	0,0046	0,0460	0,0615	2,24	0,0414	89,96	0,093
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0084	0,0800	0,0297	8,08	0,0717	89,55	0,579
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0053	0,0515	0,0357	4,33	0,0462	89,78	0,200
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0078	0,0768	0,0418	5,52	0,0691	89,90	0,381
ScCrC(OCN) ₂	0,0393	0,3945	0,0548	21,60	0,3551	90,03	7,671
ScCrC(OH) ₂	0,0171	0,1711	0,0678	7,56	0,1540	90,02	1,165
ScCrCF ₂	0,0101	0,1015	0,0846	3,60	0,0914	90,09	0,329
ScHfN(SCN) ₂	0,0392	0,3439	0,0261	39,50	0,3047	88,61	12,034
ScHfNO ₂	0,0060	0,0602	0,0469	3,85	0,0542	89,98	0,208
ScNbCO ₂	0,0091	0,0909	0,0679	4,02	0,0818	89,98	0,329
ScTaCO ₂	0,0001	0,0010	0,0007	4,07	0,0009	90,01	0,004
ScTiNO ₂	0,0102	0,1026	0,0786	3,92	0,0924	90,06	0,362
ScVCO ₂	0,0107	0,1076	0,0830	3,89	0,0968	90,02	0,377

ScYC(CN) ₂	0,0121	0,1214	0,0687	5,30	0,1093	90,02	0,579
ScYC(NCO) ₂	0,0224	0,2275	0,0553	12,34	0,2051	90,15	2,530
ScYC(NCS) ₂	0,2137	1,1219	0,0221	152,61	0,9082	80,95	138,597
ScYC(OCI) ₂	0,0248	0,2591	0,0634	12,27	0,2343	90,43	2,874
ScYC(OCN) ₂	0,0270	0,2719	0,0511	15,98	0,2449	90,06	3,913
ScYC(OH) ₂	0,0112	0,1110	0,0580	5,74	0,0997	89,87	0,572
ScYC(SCN) ₂	0,0484	0,4405	0,0379	34,90	0,3921	89,01	13,685
ScYCB ₂	0,0328	0,3286	0,0463	21,27	0,2958	90,02	6,293
ScYCCl ₂	0,0263	0,2710	0,0729	11,15	0,2448	90,31	2,730
ScYCF ₂	0,0095	0,0956	0,0790	3,63	0,0861	90,08	0,313
ScZrN(SCN) ₂	0,0589	0,5038	0,0338	44,74	0,4449	88,31	19,907
ScZrNO ₂	0,0090	0,0909	0,0686	3,98	0,0819	90,09	0,326
Ta ₂ C	0,0001	0,0005	0,0005	3,57	0,0005	90,12	0,002
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0001	0,0008	0,0002	10,57	0,0007	89,67	0,008
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,0004	0,0003	3,63	0,0003	89,95	0,001
Ta ₂ CO ₂	0,0001	0,0006	0,0003	4,99	0,0005	90,10	0,003
Ta ₂ CrCN	0,0001	0,0009	0,0004	6,31	0,0008	90,42	0,005
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0001	0,0010	0,0002	11,64	0,0009	89,87	0,010
Ta ₂ HfCN	0,0001	0,0007	0,0004	5,11	0,0006	90,28	0,003
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	10,64	0,0008	89,78	0,008
Ta ₂ MoCN	0,0001	0,0008	0,0004	5,82	0,0007	90,42	0,004
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	11,43	0,0008	89,93	0,010
Ta ₂ N	0,0000	0,0004	0,0004	2,87	0,0004	90,08	0,001
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0001	0,0008	0,0002	12,45	0,0007	89,52	0,009
Ta ₂ NbCN	0,0001	0,0008	0,0004	5,65	0,0007	90,41	0,004
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	11,18	0,0008	89,87	0,009
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,0004	0,0002	5,24	0,0003	89,81	0,002
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,0002	0,0003	2,07	0,0002	89,78	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,0005	0,0003	4,33	0,0004	90,10	0,002
Ta ₂ TiCN	0,0001	0,0008	0,0004	5,96	0,0007	90,39	0,004
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	12,04	0,0008	89,85	0,010
Ta ₂ VCN	0,0001	0,0008	0,0004	5,83	0,0007	90,39	0,004
Ta ₂ VCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	11,02	0,0008	89,90	0,009
Ta ₂ ZrCN	0,0001	0,0007	0,0004	5,24	0,0007	90,28	0,003
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0001	0,0009	0,0002	10,82	0,0008	89,86	0,009
Ta ₃ C ₂	0,0001	0,0005	0,0003	5,53	0,0005	90,33	0,003

Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0003	0,0001	8,72	0,0002	89,59	0,002
Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,0004	0,0001	8,34	0,0003	89,69	0,003
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,0002	0,0001	4,62	0,0001	89,68	0,001
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0001	0,0006	0,0002	9,96	0,0006	89,92	0,006
Ta ₃ CN	0,0000	0,0004	0,0003	4,70	0,0004	90,37	0,002
Ta ₃ CNO ₂	0,0001	0,0006	0,0002	11,08	0,0005	89,85	0,006
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,0003	0,0002	4,58	0,0003	90,10	0,001
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	89,72	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,0003	0,0001	8,70	0,0002	89,54	0,002
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,0002	0,0001	4,93	0,0002	89,66	0,001
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0001	0,0005	0,0002	10,18	0,0005	89,79	0,005
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,0004	0,0002	5,67	0,0004	90,32	0,002
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0004	0,0001	14,56	0,0004	89,35	0,006
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,0003	0,0001	7,86	0,0003	89,84	0,002
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,0002	0,0001	4,75	0,0001	89,69	0,001
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,0005	0,0002	9,27	0,0004	90,09	0,004
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,0003	0,0002	4,00	0,0003	90,14	0,001
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0004	0,0001	9,17	0,0003	89,60	0,003
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,0002	0,0001	4,97	0,0002	89,83	0,001
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,0001	0,0001	4,30	0,0001	89,74	0,001
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,0004	0,0002	7,17	0,0003	90,08	0,002
TaCrN(OCN) ₂	0,0004	0,0039	0,0006	19,90	0,0035	90,03	0,070
TaCrN(SCN) ₂	0,0009	0,0098	0,0008	36,00	0,0089	90,69	0,322
TaCrNBr ₂	0,0009	0,0089	0,0006	45,64	0,0079	89,45	0,362
TaCrNCl ₂	0,0005	0,0052	0,0007	21,52	0,0047	90,41	0,100
TaCrNF ₂	0,0001	0,0009	0,0007	3,57	0,0008	90,13	0,003
TaMoN(NCO) ₂	0,0003	0,0031	0,0006	14,65	0,0028	90,07	0,041
TaMoN(NCS) ₂	0,0056	0,0181	0,0002	270,40	0,0125	69,08	3,382
TaMoN(SCN) ₂	0,0006	0,0050	0,0004	38,27	0,0044	88,86	0,169
TaMoNBr ₂	0,0007	0,0068	0,0007	28,98	0,0061	90,06	0,177
TaMoNCl ₂	0,0004	0,0040	0,0008	14,94	0,0036	90,40	0,054
TaMoNF ₂	0,0001	0,0010	0,0008	3,74	0,0009	90,08	0,003
TaWN(CN) ₂	0,0001	0,0014	0,0008	5,40	0,0012	90,14	0,007
TaWN(NCO) ₂	0,0003	0,0031	0,0006	14,72	0,0028	90,09	0,041
TaWNBr ₂	0,0007	0,0075	0,0007	32,73	0,0067	90,10	0,221
TaWNCl ₂	0,0005	0,0049	0,0007	19,65	0,0044	90,42	0,087

Ti _{0.4} Nb _{1.6} C	0,0193	0,1989	0,0896	6,66	0,1796	90,30	1,195
Ti _{0.8} Nb _{1.2} C	0,0339	0,3594	0,0864	12,48	0,3254	90,56	4,062
Ti _{1.2} Nb _{0.8} C	0,0840	0,8122	0,0890	27,38	0,7282	89,66	19,934
Ti _{1.5} Nb _{0.5} C	0,0198	0,1942	0,1397	4,17	0,1744	89,80	0,728
Ti _{1.6} Nb _{0.4} C	0,0442	0,3832	0,1600	7,19	0,3390	88,47	2,436
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0104	0,1234	0,0117	31,66	0,1130	91,56	3,577
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0053	0,0493	0,0112	13,18	0,0441	89,35	0,581
Ti ₂ C	0,0104	0,1025	0,1374	2,24	0,0921	89,86	0,206
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0148	0,1441	0,0632	6,84	0,1293	89,76	0,884
Ti ₂ CCl ₂	0,0059	0,0585	0,0601	2,92	0,0526	89,87	0,154
Ti ₂ CF ₂	0,0077	0,0758	0,0716	3,18	0,0681	89,85	0,217
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0151	0,1544	0,0938	4,94	0,1393	90,23	0,688
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0166	0,1696	0,1046	4,87	0,1530	90,21	0,745
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0247	0,2577	0,1202	6,43	0,2330	90,42	1,499
Ti ₂ CO _{0.11} F _{1.89}	0,0102	0,1024	0,0765	4,02	0,0922	90,02	0,370
Ti ₂ CO _{0.44} F _{1.56}	0,0113	0,1139	0,0773	4,42	0,1026	90,08	0,454
Ti ₂ CO _{0.67} F _{1.33}	0,0114	0,1153	0,0777	4,45	0,1038	90,09	0,462
Ti ₂ CO _{0.89} F _{1.11}	0,0121	0,1247	0,0784	4,77	0,1126	90,26	0,537
Ti ₂ CO _{1.33} F _{0.67}	0,0121	0,1234	0,0794	4,66	0,1113	90,18	0,519
Ti ₂ CO ₂	0,0108	0,1080	0,0812	3,99	0,0972	90,02	0,388
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0125	0,1264	0,0807	4,70	0,1139	90,12	0,535
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0143	0,1458	0,1005	4,35	0,1315	90,16	0,573
Ti ₂ CrCN	0,0234	0,2528	0,0864	8,78	0,2294	90,74	2,015
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0247	0,2563	0,0476	16,14	0,2316	90,37	3,738
Ti ₂ HfCN	0,0104	0,1093	0,0520	6,31	0,0989	90,46	0,624
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0136	0,1374	0,0297	13,90	0,1239	90,13	1,722
Ti ₂ MoCN	0,0162	0,1725	0,0704	7,35	0,1562	90,58	1,148
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0188	0,1936	0,0392	14,83	0,1748	90,27	2,591
Ti ₂ N	0,0075	0,0741	0,1206	1,84	0,0666	89,94	0,123
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0130	0,1275	0,0622	6,15	0,1145	89,80	0,704
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0993	0,0524	5,68	0,0898	90,43	0,510
Ti ₂ NbC ₂	0,0061	0,0605	0,0624	2,91	0,0544	89,93	0,158
Ti ₂ NbCN	0,0166	0,1761	0,0715	7,39	0,1596	90,58	1,180
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0194	0,1981	0,0394	15,07	0,1787	90,21	2,692
Ti ₂ NF ₂	0,0067	0,0667	0,0702	2,85	0,0600	89,93	0,171
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0147	0,1515	0,0887	5,12	0,1368	90,30	0,701

Ti ₂ NO ₂	0,0095	0,0930	0,0742	3,76	0,0836	89,83	0,314
Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0268	0,2808	0,1185	7,11	0,2539	90,44	1,806
Ti ₂ NS ₂	0,0060	0,0589	0,0555	3,18	0,0529	89,87	0,169
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0008	0,0004	5,68	0,0007	90,31	0,004
Ti ₂ TaC ₂	0,0001	0,0007	0,0007	2,77	0,0006	89,98	0,002
Ti ₂ TaCN	0,0002	0,0020	0,0009	7,09	0,0019	90,60	0,013
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0026	0,0005	14,52	0,0024	90,26	0,034
Ti ₂ VC ₂	0,0084	0,0838	0,0768	3,27	0,0754	89,98	0,247
Ti ₂ VCN	0,0219	0,2345	0,0873	8,06	0,2127	90,68	1,714
Ti ₂ VCNO ₂	0,0239	0,2449	0,0482	15,25	0,2210	90,25	3,370
Ti ₂ ZrCN	0,0154	0,1607	0,0727	6,63	0,1454	90,45	0,964
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0187	0,1897	0,0398	14,30	0,1710	90,15	2,446
Ti ₃ C ₂	0,0094	0,0945	0,0851	3,33	0,0851	90,03	0,284
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0369	0,3254	0,0361	27,06	0,2885	88,65	7,806
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,0449	0,3913	0,0347	33,79	0,3464	88,51	11,704
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,0140	0,1535	0,0341	13,50	0,1395	90,86	1,883
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0169	0,1606	0,0318	15,13	0,1437	89,46	2,174
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0070	0,0689	0,0257	8,03	0,0618	89,79	0,497
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0068	0,0672	0,0347	5,80	0,0603	89,84	0,350
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0766	0,0422	5,45	0,0688	89,82	0,375
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,0120	0,1193	0,0464	7,71	0,1073	89,93	0,828
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0035	0,0335	0,0215	4,67	0,0300	89,58	0,140
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0021	0,0200	0,0144	4,17	0,0179	89,64	0,075
Ti ₃ CN	0,0207	0,2207	0,0919	7,21	0,2000	90,63	1,442
Ti ₃ CNF ₂	0,0314	0,3427	0,0542	18,98	0,3113	90,85	5,908
Ti ₃ CNO ₂	0,0279	0,2925	0,0496	17,68	0,2646	90,47	4,679
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0129	0,1231	0,0295	12,51	0,1102	89,52	1,379
Ti ₃ N ₂	0,0060	0,0595	0,0717	2,49	0,0535	89,94	0,133
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0061	0,0598	0,0361	4,97	0,0537	89,76	0,267
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,0103	0,1014	0,0423	7,19	0,0911	89,82	0,655
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,0131	0,1325	0,0430	9,24	0,1194	90,08	1,103
Ti ₄ C ₃	0,0076	0,0767	0,0679	3,39	0,0691	90,09	0,234
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,1139	0,0313	10,92	0,1021	89,66	1,115
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0605	0,0365	4,97	0,0544	89,89	0,271
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0092	0,0899	0,0372	7,26	0,0807	89,75	0,585
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0090	0,0894	0,0397	6,77	0,0805	89,98	0,544

Ti ₄ N ₃	0,0045	0,0449	0,0551	2,44	0,0404	90,03	0,099
Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0148	0,1472	0,0318	13,91	0,1324	89,95	1,842
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0048	0,0476	0,0329	4,34	0,0427	89,80	0,185
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0058	0,0569	0,0342	4,99	0,0511	89,82	0,255
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0068	0,0675	0,0239	8,46	0,0607	89,97	0,514
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0170	0,1578	0,0216	21,96	0,1408	89,21	3,091
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0087	0,0881	0,0343	7,71	0,0795	90,17	0,612
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0084	0,0835	0,0300	8,36	0,0752	90,00	0,628
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0059	0,0588	0,0290	6,09	0,0530	90,02	0,322
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,0123	0,1202	0,0230	15,71	0,1079	89,73	1,695
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0077	0,0746	0,0189	11,83	0,0669	89,65	0,791
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,0125	0,1159	0,0172	20,21	0,1034	89,23	2,090
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0075	0,0702	0,0152	13,87	0,0627	89,36	0,870
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0133	0,1195	0,0133	26,90	0,1062	88,86	2,856
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0068	0,0684	0,0149	13,80	0,0616	90,09	0,850
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0109	0,0863	0,0111	23,32	0,0754	87,39	1,759
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0052	0,0452	0,0129	10,51	0,0400	88,44	0,420
TiCrCO ₂	0,0100	0,1003	0,0727	4,14	0,0903	90,05	0,374
TiHfCO ₂	0,0067	0,0654	0,0373	5,26	0,0587	89,77	0,309
TiHfN(NO) ₂	0,0052	0,0514	0,0443	3,48	0,0462	89,91	0,161
TiMoCO ₂	0,0068	0,0685	0,0574	3,58	0,0616	90,00	0,220
TiNbC	0,0086	0,0848	0,1324	1,92	0,0762	89,89	0,146
TiVC	0,0122	0,1206	0,1807	2,00	0,1084	89,86	0,217
TiWCO ₂	0,0048	0,0481	0,0396	3,65	0,0433	89,99	0,158
TiZrCO ₂	0,0102	0,1026	0,0668	4,61	0,0924	90,08	0,426
V ₂ C	0,0107	0,1085	0,1243	2,62	0,0977	90,10	0,256
V ₂ C(OH) ₂	0,0152	0,1492	0,0619	7,23	0,1340	89,82	0,970
V ₂ CB ₂	0,0038	0,0365	0,0423	2,58	0,0327	89,67	0,085
V ₂ CF(OH)	0,0105	0,1059	0,0763	4,16	0,0954	90,08	0,397
V ₂ CF ₂	0,0078	0,0773	0,0686	3,38	0,0696	89,96	0,235
V ₂ CO ₂	0,0111	0,1124	0,0728	4,63	0,1013	90,10	0,470
V ₂ CrCN	0,0230	0,2506	0,0835	9,01	0,2276	90,82	2,050
V ₂ CrCNO ₂	0,0231	0,2358	0,0418	16,91	0,2128	90,22	3,597
V ₂ HfCN	0,0104	0,1090	0,0508	6,44	0,0986	90,46	0,635
V ₂ HfCNO ₂	0,0120	0,1191	0,0270	13,22	0,1071	89,94	1,416
V ₂ MoCN	0,0162	0,1716	0,0684	7,53	0,1554	90,56	1,171

V ₂ MoCNO ₂	0,0172	0,1739	0,0356	14,67	0,1567	90,10	2,298
V ₂ N	0,0078	0,0772	0,1145	2,02	0,0694	89,93	0,140
V ₂ N(OH) ₂	0,0117	0,1149	0,0646	5,34	0,1032	89,84	0,551
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0994	0,0513	5,81	0,0898	90,39	0,522
V ₂ NbCN	0,0165	0,1765	0,0692	7,65	0,1600	90,65	1,225
V ₂ NbCNO ₂	0,0195	0,1924	0,0327	17,64	0,1730	89,89	3,050
V ₃ NF ₂	0,0066	0,0654	0,0689	2,84	0,0587	89,84	0,167
V ₂ NO ₂	0,0093	0,0934	0,0720	3,89	0,0841	90,03	0,327
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0008	0,0005	5,12	0,0007	90,30	0,004
V ₂ TaC ₂	0,0001	0,0015	0,0009	5,14	0,0013	90,25	0,007
V ₂ TaCN	0,0002	0,0021	0,0009	7,31	0,0019	90,57	0,014
V ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0023	0,0005	13,91	0,0021	90,02	0,029
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0150	0,1555	0,0707	6,60	0,1406	90,39	0,928
V ₂ TiC ₂	0,0173	0,1796	0,0893	6,03	0,1623	90,38	0,980
V ₂ TiCN	0,0215	0,2324	0,0858	8,13	0,2108	90,73	1,713
V ₂ TiCNO ₂	0,0228	0,2313	0,0429	16,18	0,2085	90,15	3,373
V ₂ ZrCN	0,0230	0,2506	0,0835	9,01	0,2276	90,82	2,050
V ₂ ZrCNO ₂	0,0169	0,1687	0,0360	14,05	0,1518	89,99	2,133
V ₃ C ₂	0,0081	0,0812	0,0764	3,19	0,0732	90,07	0,233
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0210	0,1963	0,0285	20,69	0,1753	89,28	3,626
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0039	0,0380	0,0217	5,25	0,0341	89,72	0,179
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0118	0,1166	0,0372	9,40	0,1048	89,92	0,986
V ₃ C ₂ F ₂	0,0086	0,0842	0,0341	7,40	0,0756	89,76	0,559
V ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,1267	0,0429	8,85	0,1139	89,92	1,008
V ₃ CN	0,0203	0,2163	0,0870	7,46	0,1960	90,61	1,461
V ₃ CNO ₂	0,0272	0,2871	0,0482	17,87	0,2599	90,51	4,645
V ₃ N ₂	0,0053	0,0533	0,0574	2,78	0,0480	89,98	0,134
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0440	0,3951	0,0333	35,62	0,3511	88,86	12,507
V ₃ N ₂ F ₂	0,0069	0,0668	0,0290	6,91	0,0599	89,69	0,414
V ₃ N ₂ H ₂	0,0099	0,0967	0,0401	7,24	0,0868	89,73	0,628
V ₃ N ₂ O ₂	0,0252	0,2623	0,0443	17,76	0,2371	90,40	4,211
V ₄ C ₃	0,0080	0,0824	0,0614	4,02	0,0744	90,30	0,299
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0170	0,1606	0,0262	18,37	0,1436	89,40	2,637
V ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0607	0,0330	5,52	0,0546	89,94	0,301
V ₄ C ₃ H ₂	0,0049	0,0482	0,0315	4,60	0,0433	89,80	0,199
V ₄ C ₃ O ₂	0,0088	0,0888	0,0370	7,20	0,0800	90,10	0,576

V ₄ N ₃	0,0051	0,0514	0,0552	2,79	0,0463	90,06	0,129
V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0095	0,0938	0,0309	9,10	0,0843	89,83	0,767
V ₄ N ₃ F ₂	0,0047	0,0463	0,0343	4,04	0,0416	89,85	0,168
V ₄ N ₃ H ₂	0,0037	0,0366	0,0296	3,70	0,0328	89,77	0,122
V ₄ N ₃ O ₂	0,0064	0,0643	0,0355	5,43	0,0579	90,01	0,314
VCrN(NCS) ₂	0,7400	1,4550	0,0097	448,52	0,7150	49,14	320,694
VCrN(SCN) ₂	0,0943	0,7234	0,0303	71,57	0,6291	86,97	45,029
VCrNBr ₂	0,0710	0,6707	0,0356	56,46	0,5997	89,42	33,860
VCrNF ₂	0,0081	0,0802	0,0722	3,33	0,0721	89,88	0,240
VMoN(NCO) ₂	0,0271	0,2729	0,0440	18,63	0,2458	90,08	4,579
VMoN(NCS) ₂	0,5221	1,2236	0,0098	373,40	0,7015	57,33	261,944
VMoN(OCN) ₂	0,0309	0,3086	0,0428	21,63	0,2777	89,99	6,007
VMoN(SCN) ₂	0,0689	0,5581	0,0280	59,89	0,4892	87,65	29,300
VMoNBr ₂	0,0543	0,5157	0,0336	46,04	0,4614	89,47	21,244
VMoNCl ₂	0,0391	0,4125	0,0553	22,39	0,3734	90,51	8,359
VNbC	0,0084	0,0834	0,1292	1,94	0,0750	89,91	0,145
VNbCF ₂ -(model4)	0,0102	0,1036	0,0772	4,03	0,0934	90,15	0,376
VWN(NCO) ₂	0,0168	0,1689	0,0344	14,71	0,1521	90,04	2,236
VWN(OCN) ₂	0,0216	0,2204	0,0324	20,39	0,1988	90,19	4,054
VWNBr ₂	0,0356	0,3594	0,0294	36,67	0,3238	90,10	11,873
VWNCl ₂	0,0289	0,3028	0,0405	22,41	0,2740	90,47	6,139
VWNF ₂	0,0049	0,0493	0,0434	3,41	0,0444	89,99	0,151
W _{1.33} C	0,8719	1,8066	0,0484	112,01	0,9346	51,74	104,684
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0090	0,0901	0,0346	7,81	0,0811	90,00	0,633
W _{1.33} CO ₂	0,0072	0,0735	0,0392	5,63	0,0663	90,20	0,374
W ₂ C	0,0047	0,0475	0,0373	3,82	0,0428	90,14	0,164
W ₂ C(OH) ₂	0,0080	0,0764	0,0180	12,73	0,0684	89,57	0,871
W ₂ CCl ₂	0,0192	0,2087	0,0322	19,45	0,1894	90,78	3,684
W ₂ CF ₂	0,0034	0,0333	0,0190	5,26	0,0300	89,91	0,158
W ₂ CO ₂	0,0043	0,0431	0,0297	4,36	0,0388	90,05	0,169
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0040	0,0393	0,0115	10,27	0,0353	89,86	0,362
W ₂ HfC ₂	0,0022	0,0218	0,0228	2,87	0,0196	89,92	0,056
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0063	0,0615	0,0137	13,46	0,0552	89,79	0,743
W ₂ N	0,0031	0,0306	0,0380	2,42	0,0275	89,96	0,067
W ₂ N(OH) ₂	0,0095	0,0897	0,0158	17,00	0,0802	89,42	1,364
W ₂ NF ₂	0,0032	0,0309	0,0170	5,45	0,0277	89,77	0,151

W ₂ NO ₂	0,0044	0,0436	0,0211	6,18	0,0392	90,00	0,242
W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0055	0,0552	0,0172	9,62	0,0496	89,99	0,478
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0081	0,0812	0,0185	13,16	0,0731	89,98	0,962
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0051	0,0503	0,0144	10,46	0,0451	89,80	0,472
W ₂ ZrC ₂	0,0026	0,0265	0,0268	2,97	0,0239	90,04	0,071
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0078	0,0749	0,0159	14,11	0,0671	89,62	0,947
W ₃ C ₂	0,0023	0,0225	0,0224	3,00	0,0202	89,97	0,061
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0090	0,0840	0,0127	19,80	0,0750	89,30	1,484
W ₃ C ₂ F ₂	0,0031	0,0294	0,0090	9,84	0,0264	89,53	0,259
W ₃ C ₂ O ₂	0,0054	0,0526	0,0130	12,13	0,0472	89,72	0,572
W ₃ N ₂	0,0024	0,0242	0,0234	3,10	0,0218	89,99	0,068
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0008	0,03	0,0000	90,20	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0022	0,0207	0,0072	8,62	0,0186	89,52	0,160
W ₃ N ₂ O ₂	0,0069	0,0699	0,0157	13,37	0,0630	90,15	0,842
W ₄ C ₃	0,0040	0,0416	0,0219	5,70	0,0376	90,34	0,214
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0041	0,0386	0,0103	11,30	0,0346	89,50	0,390
W ₄ C ₃ F ₂	0,0023	0,0230	0,0123	5,60	0,0206	89,85	0,116
W ₄ C ₃ H ₂	0,0028	0,0279	0,0142	5,90	0,0251	90,12	0,148
W ₄ C ₃ O ₂	0,0041	0,0418	0,0140	8,92	0,0377	90,24	0,336
W ₄ N ₃	0,0051	0,0539	0,0198	8,17	0,0488	90,60	0,399
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0050	0,0495	0,0114	13,04	0,0445	89,96	0,581
W ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0344	0,0158	6,54	0,0311	90,30	0,203
W ₄ N ₃ H ₂	0,0022	0,0223	0,0131	5,12	0,0201	90,27	0,103
W ₄ N ₃ O ₂	0,0025	0,0252	0,0159	4,75	0,0227	90,21	0,108
WCrC	0,0048	0,0475	0,0621	2,29	0,0427	89,96	0,098
WCrCO ₂ -(model4)	0,0061	0,0618	0,0418	4,43	0,0556	90,07	0,247
Y ₂ C	0,0074	0,0742	0,0985	2,26	0,0668	90,01	0,151
Y ₂ C(CN) ₂	0,0126	0,1265	0,0536	7,07	0,1138	90,00	0,805
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0204	0,2011	0,0473	12,76	0,1808	89,88	2,306
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0478	0,4157	0,0229	54,41	0,3679	88,51	20,016
Y ₂ C(OCI) ₂	0,0270	0,2742	0,0474	17,37	0,2472	90,17	4,295
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0211	0,2126	0,0472	13,51	0,1915	90,07	2,587
Y ₂ C(OH) ₂	0,0072	0,0706	0,0481	4,40	0,0634	89,77	0,279
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0423	0,3909	0,0336	34,94	0,3487	89,19	12,184
Y ₂ CBr ₂	0,0218	0,2191	0,0448	14,66	0,1972	90,03	2,891
Y ₂ CCl ₂	0,0243	0,2466	0,0610	12,14	0,2223	90,15	2,698

Y ₂ CF ₂	0,0075	0,0741	0,0594	3,74	0,0666	89,94	0,249
Y ₂ CO ₂	0,0127	0,1302	0,0675	5,78	0,1175	90,26	0,680
Y ₂ N	0,0062	0,0609	0,0886	2,06	0,0547	89,85	0,113
Y ₂ N(OH) ₂	0,0072	0,0698	0,0458	4,57	0,0626	89,72	0,286
Y ₂ NF ₂	0,0061	0,0608	0,0534	3,42	0,0547	89,92	0,187
Y ₂ NO ₂	0,0110	0,1117	0,0666	5,03	0,1007	90,18	0,507
Y ₃ C ₂	0,0061	0,0602	0,0428	4,22	0,0541	89,86	0,228
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0096	0,0123	2,33	0,0086	89,64	0,020
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0698	0,0275	7,62	0,0626	89,73	0,477
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0082	0,0783	0,0199	11,78	0,0701	89,52	0,826
Y ₃ N ₂	0,0049	0,0483	0,0405	3,58	0,0434	89,86	0,156
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0086	0,0814	0,0221	11,06	0,0728	89,48	0,805
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0074	0,0732	0,0267	8,22	0,0658	89,87	0,541
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0072	0,0690	0,0210	9,84	0,0619	89,62	0,609
Y ₄ C ₃	0,0058	0,0584	0,0455	3,85	0,0526	90,10	0,202
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0008	0,0076	0,0109	2,09	0,0068	89,76	0,014
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0065	0,0632	0,0225	8,45	0,0568	89,79	0,480
Y ₄ C ₃ O ₂	0,0128	0,1274	0,0268	14,26	0,1146	89,97	1,634
Y ₄ N ₃	0,0042	0,0423	0,0455	2,79	0,0380	89,96	0,106
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0055	0,0529	0,0215	7,39	0,0474	89,59	0,350
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0063	0,0635	0,0314	6,06	0,0572	90,09	0,347
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0605	0,0263	6,90	0,0545	89,94	0,376
YCrC(NCO) ₂	0,0238	0,2384	0,0478	14,95	0,2146	90,00	3,209
YCrC(NCS) ₂	0,3030	1,1853	0,0160	221,79	0,8824	74,44	195,701
YCrC(OCN) ₂	0,0253	0,2509	0,0460	16,36	0,2257	89,93	3,693
YCrC(OH) ₂	0,0130	0,1283	0,0506	7,61	0,1153	89,84	0,877
YCrCBr ₂	0,0362	0,3692	0,0441	25,13	0,3329	90,19	8,366
YCrCCl ₂	0,0305	0,3214	0,0667	14,46	0,2909	90,50	4,205
YCrCF ₂	0,0093	0,0952	0,0639	4,47	0,0858	90,18	0,383
YHfN(SCN) ₂	0,0338	0,3150	0,0283	33,42	0,2812	89,28	9,399
YHfNO ₂	0,0053	0,0523	0,0350	4,48	0,0470	89,92	0,210
YMoN(NO) ₂	0,0063	0,0630	0,0540	3,50	0,0567	89,99	0,199
YNbCO ₂	0,0083	0,0843	0,0585	4,32	0,0760	90,11	0,328
YTaCO ₂	0,0001	0,0011	0,0007	4,34	0,0010	90,03	0,004
YTiN(NO) ₂	0,0088	0,0881	0,0627	4,21	0,0793	90,04	0,334
YTiNO ₂	0,0082	0,0823	0,0577	4,28	0,0741	90,06	0,317

YVCO ₂	0,0094	0,0938	0,0688	4,09	0,0844	90,01	0,345
YVNF ₂	0,0077	0,0763	0,0562	4,08	0,0686	89,91	0,280
YZrNO ₂	0,0074	0,0742	0,0479	4,64	0,0668	90,01	0,310
Zr ₂ C	0,0068	0,0681	0,1077	1,90	0,0613	89,96	0,116
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0081	0,0794	0,0419	5,68	0,0713	89,74	0,405
Zr ₂ CF ₂	0,0058	0,0579	0,0499	3,48	0,0521	89,96	0,182
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0070	0,0698	0,0531	3,95	0,0628	89,99	0,248
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0090	0,0918	0,0790	3,49	0,0828	90,17	0,289
Zr ₂ CO ₂	0,0087	0,0882	0,0578	4,58	0,0795	90,15	0,364
Zr ₂ CrCN	0,0106	0,1104	0,0573	5,79	0,0998	90,38	0,578
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0120	0,1197	0,0307	11,69	0,1078	89,99	1,259
Zr ₂ HfCN	0,0060	0,0622	0,0392	4,76	0,0561	90,29	0,267
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0080	0,0792	0,0211	11,28	0,0712	89,87	0,803
Zr ₂ MoCN	0,0084	0,0867	0,0490	5,30	0,0783	90,32	0,415
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0100	0,0989	0,0265	11,21	0,0889	89,88	0,997
Zr ₂ N	0,0062	0,0618	0,0819	2,26	0,0556	89,93	0,126
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0078	0,0759	0,0402	5,66	0,0681	89,70	0,385
Zr ₂ NbCN	0,0085	0,0870	0,0494	5,28	0,0785	90,28	0,415
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0102	0,1021	0,0267	11,48	0,0919	89,98	1,055
Zr ₂ NF ₂	0,0052	0,0513	0,0496	3,10	0,0461	89,87	0,143
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0081	0,0814	0,0652	3,74	0,0733	90,04	0,274
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0064	0,0642	0,0487	3,95	0,0578	89,98	0,228
Zr ₂ NO ₂	0,0072	0,0725	0,0540	4,03	0,0653	90,10	0,263
Zr ₂ TaCN	0,0001	0,0014	0,0008	5,16	0,0013	90,29	0,007
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0018	0,0005	11,01	0,0016	89,90	0,018
Zr ₂ TiCN	0,0103	0,1065	0,0586	5,45	0,0962	90,32	0,524
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0120	0,1179	0,0310	11,39	0,1059	89,82	1,206
Zr ₂ VCN	0,0101	0,1038	0,0580	5,37	0,0937	90,28	0,504
Zr ₂ VCNO ₂	0,0115	0,1143	0,0309	11,09	0,1027	89,91	1,139
Zr ₃ C ₂	0,0068	0,0689	0,0540	3,82	0,0621	90,14	0,237
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0125	0,1177	0,0237	14,91	0,1052	89,36	1,568
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0054	0,0530	0,0268	5,94	0,0476	89,76	0,283
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0036	0,0347	0,0200	5,20	0,0311	89,66	0,162
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0096	0,0955	0,0310	9,23	0,0859	89,96	0,793
Zr ₃ CN	0,0081	0,0831	0,0514	4,84	0,0749	90,20	0,363
Zr ₃ CNO ₂	0,0120	0,1208	0,0315	11,51	0,1088	90,06	1,252

$\text{Zr}_3\text{N}_2(\text{OH})_3$	0,0134	0,1271	0,0226	16,85	0,1137	89,43	1,915
Zr_3N_2	0,0047	0,0469	0,0437	3,22	0,0422	90,00	0,136
$\text{Zr}_3\text{N}_2\text{F}_2$	0,0044	0,0424	0,0220	5,77	0,0380	89,69	0,219
$\text{Zr}_3\text{N}_2\text{H}_2$	0,0039	0,0375	0,0203	5,55	0,0336	89,65	0,187
$\text{Zr}_3\text{N}_2\text{O}_2$	0,0077	0,0761	0,0292	7,81	0,0683	89,81	0,534
Zr_4C_3	0,0058	0,0591	0,0428	4,15	0,0533	90,15	0,221
$\text{Zr}_4\text{C}_3(\text{OH})_2$	0,0051	0,0485	0,0171	8,52	0,0434	89,56	0,370
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{F}_2$	0,0047	0,0466	0,0225	6,21	0,0418	89,80	0,260
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{H}_2$	0,0062	0,0607	0,0216	8,43	0,0545	89,78	0,459
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{O}_2$	0,0076	0,0764	0,0255	8,98	0,0688	90,00	0,618
Zr_4N_3	0,0038	0,0378	0,0358	3,16	0,0340	89,98	0,107
$\text{Zr}_4\text{N}_3(\text{OH})_2$	0,0049	0,0469	0,0161	8,72	0,0420	89,55	0,366
$\text{Zr}_4\text{N}_3\text{F}_2$	0,0037	0,0362	0,0207	5,26	0,0326	89,87	0,171
$\text{Zr}_4\text{N}_3\text{O}_2$	0,0058	0,0582	0,0243	7,19	0,0524	90,00	0,377
ZrCrNO_2	0,0079	0,0802	0,0544	4,42	0,0722	90,11	0,319
ZrHfCO_2	0,0051	0,0503	0,0349	4,32	0,0452	89,90	0,195
ZrMoCO_2	0,0056	0,0560	0,0509	3,30	0,0504	90,03	0,166

APPENDIX C: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of Mxene Structures at VSA Conditions

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working	% Regenerebility	APS
	0,1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	VSA	VSA	VSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0014	0,0146	0,0071	6,18	0,0132	90,18	0,081
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0007	0,0075	0,0054	4,17	0,0068	90,15	0,028
(TiV) ₃ C ₂	0,0016	0,0168	0,0076	6,61	0,0151	90,31	0,100
(TiV)C(OH) ₂	0,0010	0,0099	0,0087	3,42	0,0089	89,89	0,030
(TiV)CF ₂	0,0011	0,0108	0,0081	4,01	0,0098	90,16	0,039
(TiV)CO ₂	0,0016	0,0108	0,0081	4,01	0,0092	85,20	0,037
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0019	0,0194	0,0021	27,39	0,0174	90,08	0,477
Cr ₂ C	0,0012	0,0116	0,0123	2,82	0,0104	89,98	0,029
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0014	0,0138	0,0066	6,27	0,0124	89,93	0,078
Cr ₂ CB ₂	0,0049	0,0502	0,0060	25,03	0,0453	90,16	1,134
Cr ₂ CCl ₂	0,0042	0,0432	0,0083	15,68	0,0389	90,16	0,610
Cr ₂ CF ₂	0,0008	0,0077	0,0074	3,11	0,0069	89,83	0,021
Cr ₂ CFCl	0,0012	0,0122	0,0073	5,02	0,0110	90,23	0,055
Cr ₂ CH ₂	0,0007	0,0064	0,0077	2,51	0,0058	89,78	0,014
Cr ₂ CO ₂	0,0013	0,0126	0,0067	5,67	0,0113	89,97	0,064
Cr ₂ CS ₂	0,0178	0,1866	0,0091	61,48	0,1688	90,44	10,375
Cr ₂ HfCN	0,0011	0,0107	0,0049	6,63	0,0097	89,91	0,064
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0015	0,0151	0,0033	13,64	0,0136	90,01	0,185
Cr ₂ MoCN	0,0017	0,0168	0,0066	7,60	0,0152	90,15	0,115
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0021	0,0207	0,0044	14,17	0,0186	89,89	0,264
Cr ₂ N	0,0007	0,0070	0,0097	2,17	0,0063	89,89	0,014
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0012	0,0122	0,0062	5,90	0,0110	90,12	0,065
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0009	0,0096	0,0051	5,62	0,0087	90,26	0,049
Cr ₂ NbCN	0,0018	0,0179	0,0068	7,93	0,0161	89,91	0,128
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0021	0,0217	0,0045	14,61	0,0196	90,15	0,286
Cr ₂ NF ₂	0,0006	0,0062	0,0066	2,84	0,0056	89,74	0,016
Cr ₂ NH ₂	0,0006	0,0063	0,0069	2,72	0,0056	89,95	0,015
Cr ₂ NO ₂	0,0009	0,0089	0,0073	3,64	0,0080	89,78	0,029
Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0000	0,0001	0,0000	4,93	0,0001	90,02	0,000
Cr ₂ TaC ₂	0,0000	0,0001	0,0001	2,88	0,0001	89,88	0,000

Cr ₂ TaCN	0,0000	0,0002	0,0001	7,18	0,0002	89,98	0,001
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0003	0,0001	14,02	0,0003	90,11	0,004
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0015	0,0148	0,0071	6,24	0,0133	90,13	0,083
Cr ₂ TiC ₂	0,0008	0,0082	0,0073	3,35	0,0074	90,18	0,025
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0030	0,0303	0,0042	21,80	0,0273	90,14	0,595
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0025	0,0252	0,0060	12,69	0,0227	90,08	0,288
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0023	0,0237	0,0053	13,34	0,0213	90,08	0,284
Cr ₂ TiCN	0,0024	0,0237	0,0084	8,43	0,0213	90,03	0,180
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0027	0,0275	0,0054	15,30	0,0248	90,24	0,380
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0015	0,0148	0,0069	6,47	0,0133	90,07	0,086
Cr ₂ VC ₂	0,0008	0,0079	0,0071	3,36	0,0071	90,02	0,024
Cr ₂ VCN	0,0024	0,0247	0,0085	8,76	0,0222	90,08	0,195
Cr ₂ VCNO ₂	0,0026	0,0268	0,0054	14,93	0,0242	90,25	0,361
Cr ₂ ZrCN	0,0015	0,0156	0,0068	6,92	0,0141	90,09	0,097
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0029	0,0295	0,0043	20,38	0,0266	90,09	0,542
Cr ₃ C ₂	0,0011	0,0108	0,0082	3,96	0,0097	90,18	0,039
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0016	0,0158	0,0039	12,24	0,0142	90,02	0,174
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0007	0,0072	0,0041	5,31	0,0065	90,02	0,034
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,0099	0,0048	6,16	0,0089	90,08	0,055
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0059	0,0602	0,0047	38,47	0,0543	90,15	2,087
Cr ₃ CN	0,0023	0,0232	0,0084	8,26	0,0209	90,09	0,173
Cr ₃ CNO ₂	0,0031	0,0311	0,0055	16,87	0,0280	90,03	0,472
Cr ₃ N ₂	0,0005	0,0053	0,0055	2,86	0,0047	89,64	0,014
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0011	0,0109	0,0035	9,34	0,0099	90,05	0,092
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0011	0,0112	0,0051	6,63	0,0101	90,05	0,067
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0011	0,0110	0,0035	9,30	0,0099	90,00	0,092
Cr ₄ C ₃	0,0010	0,0095	0,0067	4,27	0,0086	89,94	0,037
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0011	0,0109	0,0035	9,34	0,0099	90,05	0,092
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0006	0,0056	0,0037	4,49	0,0050	89,96	0,023
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0007	0,0070	0,0041	5,15	0,0063	90,08	0,032
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0008	0,0083	0,0038	6,58	0,0075	89,98	0,049
Cr ₄ N ₃	0,0006	0,0057	0,0062	2,73	0,0051	90,00	0,014
Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0009	0,0088	0,0033	7,97	0,0079	89,95	0,063
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0004	0,0045	0,0035	3,83	0,0040	90,08	0,015
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0005	0,0053	0,0037	4,31	0,0047	89,88	0,020
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0006	0,0061	0,0036	5,10	0,0055	90,19	0,028

CrMoCF ₂	0,0008	0,0076	0,0065	3,50	0,0068	89,78	0,024
CrWCF ₂	0,0006	0,0058	0,0044	3,95	0,0052	89,93	0,021
Hf ₂ C	0,0004	0,0043	0,0047	2,78	0,0039	90,23	0,011
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0005	0,0051	0,0025	6,15	0,0045	89,83	0,028
Hf ₂ CF ₂	0,0003	0,0034	0,0029	3,48	0,0030	90,00	0,011
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0004	0,0038	0,0033	3,51	0,0034	89,99	0,012
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0005	0,0048	0,0048	3,00	0,0043	90,16	0,013
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0004	0,0042	0,0042	3,00	0,0038	89,89	0,011
Hf ₂ CO ₂	0,0005	0,0051	0,0033	4,65	0,0046	90,03	0,022
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0003	0,0034	0,0026	3,90	0,0030	89,96	0,012
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0005	0,0045	0,0042	3,27	0,0041	89,94	0,013
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0005	0,0051	0,0045	3,43	0,0046	89,69	0,016
Hf ₂ CrCN	0,0006	0,0057	0,0035	4,87	0,0052	90,07	0,025
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0007	0,0067	0,0020	9,94	0,0060	90,01	0,060
Hf ₂ MoCN	0,0007	0,0065	0,0028	6,98	0,0059	89,99	0,041
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0011	0,0114	0,0016	20,85	0,0103	90,08	0,214
Hf ₂ N	0,0003	0,0033	0,0043	2,35	0,0030	89,86	0,007
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0005	0,0053	0,0022	7,32	0,0048	89,86	0,035
Hf ₂ NbCN	0,0005	0,0048	0,0032	4,48	0,0043	89,83	0,019
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0006	0,0061	0,0018	9,99	0,0055	90,00	0,055
Hf ₂ NF ₂	0,0003	0,0028	0,0024	3,60	0,0025	89,88	0,009
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0004	0,0034	0,0025	4,05	0,0031	89,77	0,013
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0006	0,0065	0,0047	4,15	0,0058	90,04	0,024
Hf ₂ NO ₂	0,0004	0,0044	0,0032	4,16	0,0039	89,98	0,016
Hf ₂ TaCN	0,0000	0,0001	0,0001	4,43	0,0001	90,00	0,000
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0002	0,0000	10,54	0,0002	90,05	0,002
Hf ₂ TiCN	0,0006	0,0056	0,0035	4,71	0,0050	89,98	0,024
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0007	0,0066	0,0020	9,77	0,0059	89,92	0,058
Hf ₂ VCN	0,0005	0,0054	0,0036	4,59	0,0049	90,11	0,022
Hf ₂ VCNO ₂	0,0007	0,0066	0,0021	9,65	0,0060	90,04	0,057
Hf ₂ ZrCN	0,0005	0,0046	0,0032	4,23	0,0041	89,86	0,017
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0006	0,0061	0,0018	9,99	0,0055	90,12	0,055
Hf ₃ C ₂	0,0004	0,0038	0,0029	3,97	0,0035	89,87	0,014
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0003	0,0031	0,0011	8,25	0,0028	90,11	0,023
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0003	0,0030	0,0016	5,77	0,0027	90,04	0,016
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0001	0,0010	0,0009	3,34	0,0009	90,03	0,003

Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0005	0,0052	0,0018	8,55	0,0046	89,99	0,040
Hf ₃ CN	0,0004	0,0038	0,0028	4,03	0,0034	89,92	0,014
Hf ₃ CNO ₂	0,0006	0,0059	0,0019	9,47	0,0053	89,99	0,051
Hf ₃ N ₂	0,0003	0,0026	0,0023	3,33	0,0023	90,19	0,008
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,0018	0,0008	6,35	0,0016	90,13	0,010
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0002	0,0025	0,0013	5,88	0,0022	89,98	0,013
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0002	0,0015	0,0010	4,68	0,0014	90,19	0,006
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0004	0,0042	0,0017	7,41	0,0038	89,93	0,028
Hf ₄ C ₃	0,0002	0,0022	0,0020	3,37	0,0020	90,14	0,007
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0003	0,0034	0,0014	7,17	0,0031	89,97	0,022
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0003	0,0027	0,0013	6,03	0,0024	90,00	0,014
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0001	0,0012	0,0008	4,37	0,0011	90,24	0,005
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0004	0,0043	0,0015	8,49	0,0038	90,14	0,033
Hf ₄ N ₃	0,0002	0,0021	0,0019	3,18	0,0019	90,00	0,006
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0003	0,0030	0,0010	8,99	0,0027	90,12	0,024
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0002	0,0020	0,0012	5,14	0,0018	90,05	0,009
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0001	0,0012	0,0009	3,97	0,0010	90,08	0,004
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0003	0,0033	0,0014	7,11	0,0030	89,99	0,021
HfCrNO ₂	0,0005	0,0053	0,0038	4,15	0,0048	90,12	0,020
Mn ₂ C	0,0011	0,0115	0,0120	2,88	0,0104	90,15	0,030
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0013	0,0128	0,0063	6,09	0,0115	90,04	0,070
Mn ₂ CF ₂	0,0007	0,0070	0,0064	3,27	0,0063	89,97	0,020
Mn ₂ CO ₂	0,0010	0,0098	0,0073	4,02	0,0088	89,83	0,035
Mn ₂ N	0,0006	0,0063	0,0087	2,17	0,0056	89,97	0,012
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0010	0,0099	0,0063	4,69	0,0089	89,98	0,042
Mn ₂ NF ₂	0,0006	0,0059	0,0064	2,74	0,0053	89,88	0,014
Mn ₂ NO ₂	0,0008	0,0084	0,0067	3,79	0,0076	90,06	0,029
Mn ₃ C ₂	0,0010	0,0106	0,0078	4,06	0,0095	90,19	0,039
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0016	0,0156	0,0036	13,00	0,0141	90,07	0,183
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0007	0,0069	0,0038	5,39	0,0062	90,01	0,033
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0010	0,0102	0,0043	7,19	0,0092	89,93	0,066
Mn ₃ N ₂	0,0008	0,0075	0,0078	2,90	0,0068	89,88	0,020
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0013	0,0127	0,0032	11,92	0,0114	89,93	0,136
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0006	0,0056	0,0038	4,36	0,0050	90,06	0,022
Mn ₄ C ₃	0,0009	0,0092	0,0064	4,30	0,0083	89,99	0,036
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0012	0,0118	0,0031	11,30	0,0106	89,92	0,120

Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0005	0,0055	0,0033	5,02	0,0049	90,01	0,025
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0007	0,0073	0,0037	5,92	0,0066	89,96	0,039
Mn ₄ N ₃	0,0005	0,0050	0,0041	3,68	0,0045	89,77	0,017
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0010	0,0100	0,0029	10,34	0,0090	89,98	0,093
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0006	0,0056	0,0034	4,91	0,0051	89,98	0,025
Mo _{1,33} C	0,0017	0,0176	0,0117	4,50	0,0159	90,12	0,071
Mo ₂ C	0,0008	0,0084	0,0079	3,22	0,0076	90,01	0,024
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,0470	0,3961	0,0040	297,99	0,3491	88,12	104,024
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0028	0,0276	0,0045	18,50	0,0249	90,01	0,460
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0008	0,0078	0,0046	5,07	0,0070	89,94	0,036
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0052	0,0525	0,0038	41,55	0,0473	90,04	1,963
Mo ₂ CBr ₂	0,0034	0,0341	0,0045	22,67	0,0307	90,15	0,697
Mo ₂ CCl ₂	0,0026	0,0259	0,0057	13,56	0,0233	90,08	0,316
Mo ₂ CF ₂	0,0005	0,0054	0,0054	3,03	0,0049	89,88	0,015
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0010	0,0096	0,0071	4,08	0,0087	90,11	0,035
Mo ₂ CO ₂	0,0008	0,0079	0,0042	5,61	0,0071	90,07	0,040
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0007	0,0066	0,0051	3,88	0,0059	90,06	0,023
Mo ₂ CrCN	0,0012	0,0125	0,0056	6,71	0,0113	90,05	0,076
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0014	0,0144	0,0037	11,53	0,0129	90,08	0,149
Mo ₂ CS ₂	0,0005	0,0046	0,0050	2,77	0,0042	89,99	0,012
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0005	0,0048	0,0016	9,22	0,0044	90,09	0,040
Mo ₂ HfC ₂	0,0003	0,0029	0,0033	2,65	0,0027	90,25	0,007
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0008	0,0078	0,0022	10,79	0,0070	90,11	0,076
Mo ₂ HfCN	0,0007	0,0068	0,0038	5,38	0,0061	89,98	0,033
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0010	0,0096	0,0026	11,13	0,0086	90,03	0,096
Mo ₂ N	0,0006	0,0055	0,0060	2,73	0,0049	89,92	0,014
Mo ₂ N(OH) ₂	0,0015	0,0148	0,0032	13,70	0,0133	89,92	0,183
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0007	0,0066	0,0039	5,03	0,0059	90,13	0,030
Mo ₂ NbC ₂	0,0004	0,0039	0,0042	2,78	0,0035	90,06	0,010
Mo ₂ NbCN	0,0009	0,0093	0,0046	6,06	0,0084	90,14	0,051
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0012	0,0123	0,0032	11,62	0,0111	90,01	0,129
Mo ₂ NF ₂	0,0005	0,0052	0,0031	5,01	0,0047	90,02	0,024
Mo ₂ NO ₂	0,0007	0,0070	0,0040	5,26	0,0063	89,88	0,033
Mo ₂ ScC ₂	0,0005	0,0048	0,0050	2,84	0,0043	90,24	0,012
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0011	0,0106	0,0031	10,41	0,0095	90,00	0,099
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0000	0,0001	0,0000	4,60	0,0001	90,00	0,000

Mo ₂ TaCN	0,0000	0,0002	0,0001	5,71	0,0001	89,87	0,001
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0002	0,0001	11,05	0,0002	90,06	0,002
Mo ₂ TaC ₂	0,0000	0,0001	0,0001	2,69	0,0001	90,12	0,000
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0009	0,0095	0,0051	5,60	0,0085	90,18	0,048
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0013	0,0130	0,0028	13,75	0,0117	90,24	0,162
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0008	0,0078	0,0031	7,56	0,0070	89,96	0,053
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0008	0,0079	0,0027	8,73	0,0071	89,96	0,062
Mo ₂ TiC ₂	0,0005	0,0048	0,0049	2,93	0,0043	89,88	0,013
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0017	0,0179	0,0033	16,23	0,0162	90,25	0,263
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0020	0,0195	0,0031	19,09	0,0175	89,96	0,334
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0014	0,0142	0,0047	9,16	0,0128	90,03	0,117
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,0010	0,0103	0,0033	9,47	0,0093	89,98	0,088
Mo ₂ TiCN	0,0012	0,0119	0,0057	6,30	0,0107	90,09	0,068
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0014	0,0143	0,0037	11,45	0,0129	90,13	0,147
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0009	0,0093	0,0050	5,61	0,0084	90,11	0,047
Mo ₂ VC ₂	0,0005	0,0048	0,0048	2,96	0,0043	90,15	0,013
Mo ₂ VCN	0,0012	0,0118	0,0056	6,29	0,0107	90,02	0,067
Mo ₂ VCNO ₂	0,0014	0,0139	0,0037	11,17	0,0125	90,07	0,140
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0007	0,0068	0,0022	9,35	0,0061	90,04	0,057
Mo ₂ ZrC ₂	0,0004	0,0038	0,0042	2,69	0,0034	89,72	0,009
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0011	0,0106	0,0027	11,57	0,0095	90,03	0,110
Mo ₂ ZrCN	0,0009	0,0089	0,0049	5,53	0,0081	90,06	0,045
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0012	0,0122	0,0032	11,40	0,0110	90,00	0,125
Mo ₃ C ₂	0,0007	0,0071	0,0042	5,02	0,0063	89,73	0,032
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0010	0,0008	3,51	0,0009	89,54	0,003
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0005	0,0053	0,0018	8,79	0,0048	89,93	0,042
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0008	0,0082	0,0028	8,78	0,0074	90,16	0,065
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0012	0,0119	0,0025	13,96	0,0107	89,98	0,149
Mo ₃ CN	0,0009	0,0092	0,0048	5,75	0,0083	90,06	0,048
Mo ₃ N ₂	0,0004	0,0043	0,0034	3,80	0,0039	89,88	0,015
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0001	0,0004	0,69	0,0001	90,60	0,000
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0004	0,0045	0,0016	8,56	0,0040	90,08	0,034
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0005	0,0048	0,0028	5,15	0,0043	89,96	0,022
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0009	0,0083	0,0020	12,48	0,0074	89,73	0,093
Mo ₄ C ₃	0,0007	0,0069	0,0041	5,06	0,0063	90,25	0,032
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0007	0,0071	0,0020	10,69	0,0064	89,98	0,068

Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0004	0,0040	0,0023	5,32	0,0036	89,90	0,019
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0006	0,0063	0,0024	7,89	0,0057	90,09	0,045
Mo ₄ N ₃	0,0004	0,0039	0,0034	3,48	0,0035	90,13	0,012
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0005	0,0051	0,0022	6,82	0,0046	89,94	0,031
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0003	0,0033	0,0025	4,03	0,0030	90,05	0,012
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0003	0,0026	0,0017	4,54	0,0023	89,93	0,011
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0004	0,0044	0,0028	4,77	0,0040	90,02	0,019
MoCrC	0,0007	0,0071	0,0097	2,19	0,0064	89,96	0,014
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0009	0,0087	0,0061	4,27	0,0079	90,01	0,034
MoWC	0,0004	0,0039	0,0054	2,15	0,0035	89,90	0,007
MoWC(NCO) ₂	0,0018	0,0182	0,0034	15,88	0,0164	90,06	0,260
MoWC(OCN) ₂	0,0021	0,0212	0,0035	18,29	0,0191	90,17	0,349
MoWC(SCN) ₂	0,0042	0,0416	0,0032	39,33	0,0374	89,98	1,473
MoWCCl ₂	0,0023	0,0231	0,0046	14,99	0,0208	90,09	0,313
MoWCF ₂	0,0003	0,0032	0,0085	1,12	0,0029	90,17	0,003
MoWCO ₂ -(model2)	0,0005	0,0052	0,0035	4,39	0,0046	89,86	0,020
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,0185	0,1839	0,0157	35,17	0,1654	89,92	5,818
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0055	0,0544	0,0142	11,53	0,0489	89,94	0,564
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0026	0,0271	0,0129	6,32	0,0245	90,37	0,155
Nb _{1,33} C	0,9869	2,6409	0,0103	768,46	1,6540	62,63	1271,033
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0016	0,0160	0,0120	4,01	0,0144	90,01	0,058
Nb ₂ C	0,0008	0,0084	0,0084	3,03	0,0076	90,04	0,023
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0009	0,0089	0,0043	6,26	0,0080	89,86	0,050
Nb ₂ CF ₂	0,0006	0,0056	0,0049	3,45	0,0051	89,85	0,017
Nb ₂ CO ₂	0,0008	0,0080	0,0054	4,49	0,0072	89,92	0,032
Nb ₂ CrCN	0,0013	0,0129	0,0058	6,61	0,0116	90,14	0,077
Nb ₂ CrCNO ₂	0,0014	0,0141	0,0034	12,37	0,0127	89,88	0,157
Nb ₂ HfCN	0,0007	0,0070	0,0040	5,28	0,0063	89,88	0,033
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0009	0,0088	0,0023	11,31	0,0080	90,12	0,090
Nb ₂ MoCN	0,0010	0,0100	0,0050	5,95	0,0090	89,90	0,053
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0012	0,0118	0,0029	12,10	0,0106	89,90	0,128
Nb ₂ N	0,0007	0,0064	0,0079	2,44	0,0058	89,76	0,014
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0009	0,0090	0,0049	5,52	0,0081	89,90	0,045
Nb ₂ NF ₂	0,0005	0,0053	0,0035	4,47	0,0047	89,70	0,021
Nb ₂ NH ₂	0,0004	0,0039	0,0055	2,12	0,0035	89,80	0,007
Nb ₂ NO ₂	0,0007	0,0071	0,0052	4,08	0,0064	89,84	0,026

Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0000	0,0001	0,0000	4,71	0,0001	90,04	0,000
Nb ₂ TaCN	0,0000	0,0002	0,0001	5,74	0,0001	89,99	0,001
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0002	0,0001	11,61	0,0002	90,03	0,002
Nb ₂ TiCN	0,0012	0,0122	0,0059	6,20	0,0109	89,92	0,068
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0014	0,0143	0,0034	12,80	0,0129	90,02	0,165
Nb ₂ VCN	0,0012	0,0119	0,0059	6,01	0,0107	89,99	0,064
Nb ₂ VCNO ₂	0,0013	0,0134	0,0034	11,78	0,0121	89,97	0,143
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0005	0,0050	0,0028	5,27	0,0045	90,19	0,024
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0007	0,0067	0,0042	4,73	0,0060	90,13	0,028
Nb ₂ ZrCN	0,0009	0,0093	0,0051	5,44	0,0084	90,07	0,045
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0011	0,0109	0,0029	11,10	0,0098	89,92	0,109
Nb ₃ C ₂	0,0008	0,0079	0,0053	4,44	0,0071	89,95	0,031
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0007	0,0067	0,0020	10,24	0,0061	90,11	0,062
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0006	0,0056	0,0026	6,38	0,0050	89,99	0,032
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0004	0,0039	0,0022	5,45	0,0035	89,94	0,019
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0009	0,0094	0,0032	8,90	0,0084	89,96	0,075
Nb ₃ CN	0,0010	0,0095	0,0053	5,43	0,0086	89,98	0,046
Nb ₃ CNO ₂	0,0012	0,0116	0,0030	11,77	0,0104	89,99	0,123
Nb ₃ N ₂	0,0005	0,0047	0,0038	3,70	0,0042	90,09	0,015
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0002	0,0006	1,31	0,0002	89,88	0,000
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0005	0,0046	0,0017	8,04	0,0041	89,88	0,033
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0005	0,0047	0,0023	6,19	0,0042	89,93	0,026
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0008	0,0078	0,0027	8,47	0,0070	90,01	0,059
Nb ₄ C ₃	0,0006	0,0059	0,0040	4,43	0,0053	89,95	0,023
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0006	0,0057	0,0015	11,47	0,0051	89,99	0,058
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0004	0,0044	0,0019	6,90	0,0039	90,20	0,027
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0003	0,0032	0,0018	5,14	0,0029	90,14	0,015
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0007	0,0070	0,0025	8,36	0,0063	89,97	0,053
Nb ₄ N ₃	0,0004	0,0042	0,0038	3,29	0,0037	90,02	0,012
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0006	0,0056	0,0020	8,24	0,0050	90,04	0,041
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0004	0,0035	0,0023	4,57	0,0032	89,94	0,014
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0005	0,0054	0,0026	6,32	0,0049	90,07	0,031
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0001	0,0006	0,0006	2,73	0,0005	90,06	0,001
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0003	0,0034	0,0015	6,77	0,0030	89,91	0,021
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0005	0,0055	0,0018	9,19	0,0050	90,10	0,046
NbCrN(NCO) ₂	0,0043	0,0433	0,0047	27,59	0,0390	90,09	1,075

NbCrN(NCS) ₂	0,1432	0,7617	0,0024	938,75	0,6185	81,19	580,581
NbCrN(OCN) ₂	0,0032	0,0321	0,0053	18,32	0,0289	90,13	0,530
NbCrN(SCN) ₂	0,0073	0,0725	0,0044	48,95	0,0652	89,98	3,194
NbCrNBr ₂	0,0047	0,0477	0,0052	27,53	0,0430	90,11	1,182
NbCrNCl ₂	0,0036	0,0362	0,0070	15,47	0,0327	90,18	0,505
NbCrNF ₂	0,0008	0,0079	0,0065	3,65	0,0071	90,02	0,026
NbMoN(NCO) ₂	0,0022	0,0217	0,0045	14,40	0,0195	90,03	0,281
NbMoN(NCS) ₂	0,0480	0,4042	0,0041	297,17	0,3563	88,13	105,867
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,0000	0,0004	0,23	0,0000	90,69	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0059	0,0594	0,0039	45,84	0,0535	90,02	2,452
NbMoNBr ₂	0,0037	0,0373	0,0048	23,54	0,0336	90,10	0,792
NbMoNCl ₂	0,0026	0,0262	0,0060	13,04	0,0236	89,95	0,308
NbMoN(CN) ₂	0,0012	0,0119	0,0052	6,91	0,0107	90,12	0,074
NbMoNF ₂	0,0007	0,0072	0,0057	3,77	0,0065	90,06	0,024
NbWN(NCO) ₂	0,0017	0,0171	0,0035	14,74	0,0154	90,04	0,226
NbWN(NCS) ₂	0,0389	0,3290	0,0032	307,15	0,2901	88,17	89,107
NbWN(OCN) ₂	0,0019	0,0189	0,0035	16,13	0,0170	89,99	0,275
NbWN(SCN) ₂	0,0044	0,0440	0,0032	40,69	0,0397	90,07	1,614
NbWNBr ₂	0,0032	0,0328	0,0038	25,94	0,0295	90,14	0,766
NbWNCl ₂	0,0022	0,0218	0,0046	14,23	0,0197	90,01	0,280
NbWN(CN) ₂	0,0007	0,0071	0,0043	4,90	0,0064	90,01	0,031
NbWNF ₂	0,0005	0,0054	0,0046	3,54	0,0049	90,05	0,017
Sc ₂ C	0,0011	0,0104	0,0162	1,92	0,0093	89,83	0,018
Sc ₂ C(CN) ₂	0,0015	0,0152	0,0016	27,72	0,0137	89,97	0,379
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0001	0,0014	0,0014	2,82	0,0012	89,98	0,003
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,0487	0,4379	0,0052	251,32	0,3892	88,88	97,807
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0047	0,0469	0,0079	17,78	0,0422	90,08	0,750
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0002	0,0018	0,0019	2,95	0,0016	89,93	0,005
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0013	0,0125	0,0072	5,17	0,0112	89,88	0,058
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0056	0,0558	0,0062	27,18	0,0502	90,04	1,365
Sc ₂ CBr ₂	0,0035	0,0348	0,0066	15,82	0,0314	90,03	0,496
Sc ₂ CCl ₂	0,0040	0,0397	0,0092	12,93	0,0358	90,00	0,462
Sc ₂ CF ₂	0,0009	0,0087	0,0084	3,13	0,0079	89,93	0,025
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0013	0,0124	0,0093	3,99	0,0111	89,76	0,044
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0014	0,0140	0,0118	3,57	0,0126	90,04	0,045
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0018	0,0176	0,0125	4,24	0,0159	89,91	0,067

Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0014	0,0144	0,0116	3,70	0,0130	90,27	0,048
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0012	0,0117	0,0093	3,80	0,0105	90,08	0,040
Sc ₂ N	0,0008	0,0077	0,0137	1,69	0,0069	89,71	0,012
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0012	0,0119	0,0071	5,00	0,0107	89,71	0,053
Sc ₂ NF ₂	0,0008	0,0074	0,0077	2,89	0,0066	89,81	0,019
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,0015	0,0149	0,0115	3,88	0,0134	89,98	0,052
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,0012	0,0114	0,0094	3,65	0,0103	89,79	0,038
Sc ₂ NO ₂	0,0011	0,0111	0,0093	3,56	0,0099	89,88	0,035
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0012	0,0115	0,0072	4,78	0,0104	89,79	0,050
Sc ₃ C ₂	0,0009	0,0088	0,0097	2,72	0,0079	89,87	0,021
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0009	0,0092	0,0039	7,10	0,0083	89,92	0,059
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0006	0,0058	0,0027	6,46	0,0052	89,66	0,033
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0008	0,0078	0,0043	5,41	0,0070	89,90	0,038
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0013	0,0128	0,0074	5,23	0,0116	90,06	0,060
Sc ₃ N ₂	0,0006	0,0058	0,0080	2,16	0,0052	89,85	0,011
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0008	0,0084	0,0033	7,68	0,0076	89,99	0,058
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0006	0,0065	0,0042	4,64	0,0059	90,11	0,027
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0010	0,0096	0,0053	5,45	0,0087	89,98	0,047
Sc ₄ C ₃	0,0009	0,0087	0,0080	3,26	0,0078	89,93	0,025
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0007	0,0076	0,0029	7,88	0,0069	91,01	0,055
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0007	0,0067	0,0037	5,38	0,0060	90,04	0,032
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0010	0,0103	0,0044	7,04	0,0092	89,88	0,065
Sc ₄ N ₃	0,0005	0,0046	0,0062	2,23	0,0042	89,97	0,009
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0008	0,0084	0,0031	8,03	0,0075	89,99	0,060
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0005	0,0053	0,0037	4,30	0,0047	90,13	0,020
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0008	0,0078	0,0043	5,45	0,0070	90,03	0,038
ScCrC(OCN) ₂	0,0039	0,0393	0,0066	17,75	0,0354	90,13	0,629
ScCrC(OH) ₂	0,0017	0,0171	0,0072	7,13	0,0154	89,93	0,110
ScCrCF ₂	0,0010	0,0101	0,0086	3,50	0,0090	89,93	0,032
ScHfN(SCN) ₂	0,0039	0,0392	0,0035	33,21	0,0353	90,05	1,172
ScHfNO ₂	0,0006	0,0060	0,0048	3,80	0,0054	90,08	0,021
ScNbCO ₂	0,0009	0,0091	0,0069	3,94	0,0082	89,92	0,032
ScTaCO ₂	0,0000	0,0001	0,0001	3,94	0,0001	90,01	0,000
ScTiNO ₂	0,0010	0,0102	0,0080	3,82	0,0092	90,04	0,035
ScVCO ₂	0,0011	0,0107	0,0086	3,76	0,0097	89,94	0,036
ScYC(CN) ₂	0,0012	0,0121	0,0071	5,11	0,0109	89,85	0,056

ScYC(NCO) ₂	0,0022	0,0224	0,0060	11,20	0,0202	90,00	0,226
ScYC(NCS) ₂	0,0217	0,2137	0,0056	113,85	0,1920	89,86	21,864
ScYC(OCI) ₂	0,0025	0,0248	0,0070	10,63	0,0223	90,09	0,237
ScYC(OCN) ₂	0,0027	0,0270	0,0058	14,09	0,0243	90,07	0,343
ScYC(OH) ₂	0,0011	0,0112	0,0061	5,53	0,0101	89,89	0,056
ScYC(SCN) ₂	0,0048	0,0484	0,0048	30,00	0,0436	90,09	1,309
ScYCBBr ₂	0,0033	0,0328	0,0055	17,91	0,0295	90,07	0,529
ScYCCl ₂	0,0026	0,0263	0,0079	9,93	0,0236	89,96	0,235
ScYCF ₂	0,0009	0,0095	0,0081	3,53	0,0085	90,11	0,030
ScZrN(SCN) ₂	0,0058	0,0589	0,0048	37,07	0,0531	90,17	1,968
ScZrNO ₂	0,0009	0,0090	0,0070	3,87	0,0081	90,07	0,031
Ta ₂ C	0,0000	0,0001	0,0000	3,47	0,0000	90,12	0,000
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,07	0,0001	89,91	0,001
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	3,57	0,0000	90,08	0,000
Ta ₂ CO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	4,76	0,0001	90,09	0,000
Ta ₂ CrCN	0,0000	0,0001	0,0000	5,82	0,0001	90,15	0,000
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,73	0,0001	90,07	0,001
Ta ₂ HfCN	0,0000	0,0001	0,0000	4,84	0,0001	89,92	0,000
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,04	0,0001	90,01	0,001
Ta ₂ MoCN	0,0000	0,0001	0,0000	5,38	0,0001	90,01	0,000
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,54	0,0001	89,87	0,001
Ta ₂ N	0,0000	0,0000	0,0000	2,80	0,0000	90,13	0,000
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0000	0,0001	0,0000	11,95	0,0001	90,01	0,001
Ta ₂ NbCN	0,0000	0,0001	0,0000	5,23	0,0001	90,01	0,000
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,47	0,0001	90,09	0,001
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	5,17	0,0000	89,68	0,000
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,0000	0,0000	2,08	0,0000	89,99	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,18	0,0000	89,69	0,000
Ta ₂ TiCN	0,0000	0,0001	0,0000	5,57	0,0001	89,96	0,000
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	11,15	0,0001	90,02	0,001
Ta ₂ VCN	0,0000	0,0001	0,0000	5,43	0,0001	89,93	0,000
Ta ₂ VCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,20	0,0001	90,13	0,001
Ta ₂ ZrCN	0,0000	0,0001	0,0000	4,97	0,0001	90,16	0,000
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,11	0,0001	90,06	0,001
Ta ₃ C ₂	0,0000	0,0001	0,0000	5,17	0,0000	89,88	0,000
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,82	0,0000	90,14	0,000

Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,19	0,0000	90,11	0,000
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,66	0,0000	89,87	0,000
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0000	0,0001	0,0000	9,32	0,0001	90,19	0,001
Ta ₃ CN	0,0000	0,0000	0,0000	4,50	0,0000	89,82	0,000
Ta ₃ CNO ₂	0,0000	0,0001	0,0000	10,30	0,0001	89,98	0,001
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,42	0,0000	89,96	0,000
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	91,14	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,67	0,0000	90,32	0,000
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,98	0,0000	90,02	0,000
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0000	0,0001	0,0000	9,65	0,0001	90,08	0,000
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,0000	0,0000	5,28	0,0000	90,19	0,000
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	14,15	0,0000	89,98	0,001
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	7,55	0,0000	89,92	0,000
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,80	0,0000	90,10	0,000
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,62	0,0000	90,10	0,000
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,0000	0,0000	3,83	0,0000	89,84	0,000
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,89	0,0000	90,01	0,000
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,89	0,0000	90,16	0,000
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,32	0,0000	89,79	0,000
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	6,74	0,0000	90,07	0,000
TaCrN(OCN) ₂	0,0000	0,0004	0,0001	16,74	0,0004	90,03	0,006
TaCrN(SCN) ₂	0,0001	0,0009	0,0001	38,32	0,0008	89,99	0,032
TaCrNBr ₂	0,0001	0,0009	0,0001	31,97	0,0008	90,16	0,027
TaCrNCl ₂	0,0000	0,0005	0,0001	17,09	0,0004	90,11	0,008
TaCrNF ₂	0,0000	0,0001	0,0001	3,46	0,0001	89,97	0,000
TaMoN(NCO) ₂	0,0000	0,0003	0,0001	12,94	0,0003	90,04	0,004
TaMoN(NCS) ₂	0,0006	0,0056	0,0001	218,95	0,0050	88,75	1,088
TaMoN(SCN) ₂	0,0001	0,0006	0,0000	33,68	0,0005	90,03	0,017
TaMoNBr ₂	0,0001	0,0007	0,0001	22,17	0,0006	90,17	0,013
TaMoNCl ₂	0,0000	0,0004	0,0001	12,60	0,0003	90,14	0,004
TaMoNF ₂	0,0000	0,0001	0,0001	3,63	0,0001	89,83	0,000
TaWN(CN) ₂	0,0000	0,0001	0,0001	5,17	0,0001	90,00	0,001
TaWN(NCO) ₂	0,0000	0,0003	0,0001	12,96	0,0003	90,13	0,004
TaWNBr ₂	0,0001	0,0007	0,0001	24,06	0,0007	90,21	0,016
TaWNCl ₂	0,0000	0,0005	0,0001	15,94	0,0004	89,95	0,007
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,0019	0,0193	0,0092	6,32	0,0174	90,31	0,110

Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,0032	0,0339	0,0091	11,24	0,0307	90,48	0,345
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,0081	0,0840	0,0099	25,49	0,0759	90,40	1,936
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,0020	0,0198	0,0141	4,20	0,0179	90,12	0,075
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,0042	0,0442	0,0164	8,06	0,0400	90,56	0,323
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0010	0,0104	0,0014	21,78	0,0094	89,99	0,204
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0005	0,0053	0,0013	12,37	0,0047	89,98	0,058
Ti ₂ C	0,0010	0,0104	0,0140	2,23	0,0094	90,19	0,021
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0015	0,0148	0,0067	6,65	0,0133	89,96	0,088
Ti ₂ CCl ₂	0,0006	0,0059	0,0061	2,92	0,0053	89,61	0,015
Ti ₂ CF ₂	0,0008	0,0077	0,0073	3,16	0,0069	89,92	0,022
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0015	0,0151	0,0096	4,73	0,0136	90,04	0,064
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0017	0,0166	0,0107	4,64	0,0150	90,01	0,069
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0025	0,0247	0,0124	5,95	0,0222	89,96	0,132
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,0010	0,0102	0,0079	3,89	0,0092	90,21	0,036
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,0011	0,0113	0,0079	4,31	0,0102	89,95	0,044
Ti ₂ CO _{0,67} F _{1,33}	0,0011	0,0114	0,0079	4,32	0,0103	90,24	0,044
Ti ₂ CO _{0,89} F _{1,11}	0,0012	0,0121	0,0080	4,55	0,0109	90,00	0,050
Ti ₂ CO _{1,33} F _{0,67}	0,0012	0,0121	0,0081	4,49	0,0109	90,07	0,049
Ti ₂ CO ₂	0,0011	0,0108	0,0083	3,88	0,0097	90,18	0,038
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0013	0,0125	0,0082	4,55	0,0112	89,93	0,051
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0014	0,0143	0,0103	4,18	0,0129	89,89	0,054
Ti ₂ CrCN	0,0023	0,0234	0,0091	7,67	0,0211	90,18	0,162
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0024	0,0247	0,0054	13,65	0,0222	90,12	0,304
Ti ₂ HfCN	0,0011	0,0104	0,0054	5,80	0,0094	89,93	0,054
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0014	0,0136	0,0033	12,29	0,0122	90,00	0,150
Ti ₂ MoCN	0,0016	0,0162	0,0074	6,62	0,0146	90,13	0,097
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0019	0,0188	0,0044	12,86	0,0170	90,01	0,218
Ti ₂ N	0,0008	0,0075	0,0122	1,84	0,0067	89,73	0,012
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0013	0,0130	0,0065	5,97	0,0117	90,04	0,070
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0010	0,0095	0,0054	5,29	0,0085	89,91	0,045
Ti ₂ NbC ₂	0,0006	0,0061	0,0064	2,87	0,0055	90,11	0,016
Ti ₂ NbCN	0,0016	0,0166	0,0075	6,68	0,0150	90,15	0,100
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0019	0,0194	0,0045	13,07	0,0175	90,07	0,228
Ti ₂ NF ₂	0,0007	0,0067	0,0071	2,84	0,0061	90,11	0,017
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0015	0,0147	0,0091	4,83	0,0132	90,00	0,064
Ti ₂ NO ₂	0,0009	0,0095	0,0076	3,72	0,0085	90,24	0,032

Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0027	0,0268	0,0124	6,50	0,0242	90,07	0,157
Ti ₂ NS ₂	0,0006	0,0060	0,0056	3,18	0,0054	90,04	0,017
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0000	0,0001	0,0000	5,30	0,0001	90,07	0,000
Ti ₂ TaC ₂	0,0000	0,0001	0,0001	2,73	0,0001	89,99	0,000
Ti ₂ TaCN	0,0000	0,0002	0,0001	6,40	0,0002	89,97	0,001
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0003	0,0001	12,66	0,0002	89,98	0,003
Ti ₂ VC ₂	0,0008	0,0084	0,0078	3,24	0,0075	89,90	0,024
Ti ₂ VCN	0,0022	0,0219	0,0092	7,14	0,0197	90,05	0,141
Ti ₂ VCNO ₂	0,0024	0,0239	0,0054	13,14	0,0215	90,10	0,283
Ti ₂ ZrCN	0,0015	0,0154	0,0076	6,10	0,0138	90,11	0,084
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0019	0,0187	0,0044	12,67	0,0168	89,98	0,213
Ti ₃ C ₂	0,0009	0,0094	0,0087	3,25	0,0085	90,12	0,028
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0036	0,0369	0,0043	25,61	0,0333	90,22	0,853
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,0045	0,0449	0,0044	30,93	0,0405	90,05	1,252
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,0014	0,0140	0,0046	9,15	0,0126	90,09	0,116
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0017	0,0169	0,0035	14,62	0,0152	89,92	0,223
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0007	0,0070	0,0027	7,80	0,0063	89,87	0,049
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0007	0,0068	0,0036	5,66	0,0061	89,83	0,035
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0008	0,0078	0,0044	5,34	0,0070	89,95	0,037
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,0012	0,0120	0,0049	7,32	0,0108	90,14	0,079
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0003	0,0035	0,0022	4,68	0,0031	90,12	0,015
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0002	0,0021	0,0015	4,19	0,0019	89,61	0,008
Ti ₃ CN	0,0020	0,0207	0,0096	6,49	0,0187	90,19	0,121
Ti ₃ CNF ₂	0,0031	0,0314	0,0063	14,83	0,0283	90,12	0,419
Ti ₃ CNO ₂	0,0028	0,0279	0,0057	14,60	0,0251	90,04	0,366
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0013	0,0129	0,0032	12,24	0,0116	89,76	0,142
Ti ₃ N ₂	0,0006	0,0060	0,0072	2,50	0,0054	90,20	0,014
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0006	0,0061	0,0038	4,88	0,0055	89,69	0,027
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,0010	0,0103	0,0044	7,02	0,0093	90,03	0,065
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,0013	0,0131	0,0046	8,50	0,0118	89,93	0,101
Ti ₄ C ₃	0,0008	0,0076	0,0069	3,30	0,0068	89,84	0,023
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0012	0,0118	0,0034	10,49	0,0106	90,03	0,111
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0006	0,0061	0,0038	4,87	0,0055	89,84	0,027
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0009	0,0092	0,0039	7,06	0,0083	90,01	0,059
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0009	0,0090	0,0042	6,43	0,0081	90,06	0,052
Ti ₄ N ₃	0,0005	0,0045	0,0056	2,42	0,0040	89,79	0,010

Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0015	0,0148	0,0036	12,38	0,0133	90,01	0,165
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0005	0,0048	0,0034	4,28	0,0043	89,64	0,019
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0006	0,0058	0,0035	4,91	0,0052	90,08	0,026
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0007	0,0068	0,0039	5,25	0,0061	89,91	0,032
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0017	0,0170	0,0029	17,79	0,0153	89,97	0,272
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0009	0,0087	0,0036	7,15	0,0078	90,07	0,056
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0008	0,0084	0,0032	7,78	0,0075	90,00	0,058
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0006	0,0059	0,0030	5,83	0,0053	90,02	0,031
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,0012	0,0123	0,0027	13,90	0,0111	90,04	0,154
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0008	0,0077	0,0021	11,17	0,0070	90,05	0,078
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,0012	0,0125	0,0021	18,03	0,0113	90,12	0,203
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0008	0,0075	0,0017	13,10	0,0067	89,94	0,088
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0013	0,0133	0,0017	23,77	0,0120	89,94	0,285
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0007	0,0068	0,0015	13,71	0,0061	90,01	0,084
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0011	0,0109	0,0016	20,03	0,0098	89,94	0,196
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0005	0,0052	0,0015	10,46	0,0047	89,97	0,049
TiCrCO ₂	0,0010	0,0100	0,0075	4,01	0,0090	89,99	0,036
TiHfCO ₂	0,0007	0,0067	0,0039	5,20	0,0060	90,16	0,031
TiHfN(NO) ₂	0,0005	0,0052	0,0046	3,42	0,0047	89,98	0,016
TiMoCO ₂	0,0007	0,0068	0,0059	3,51	0,0062	90,08	0,022
TiNbC	0,0009	0,0086	0,0134	1,92	0,0077	90,00	0,015
TiVC	0,0012	0,0122	0,0183	2,01	0,0110	90,06	0,022
TiWCO ₂	0,0005	0,0048	0,0040	3,58	0,0043	89,96	0,016
TiZrCO ₂	0,0010	0,0102	0,0068	4,48	0,0092	90,00	0,041
V ₂ C	0,0011	0,0107	0,0125	2,58	0,0097	90,11	0,025
V ₂ C(OH) ₂	0,0015	0,0152	0,0066	6,96	0,0137	90,15	0,095
V ₂ CBr ₂	0,0004	0,0038	0,0043	2,60	0,0034	90,07	0,009
V ₂ CF(OH)	0,0011	0,0105	0,0079	3,98	0,0094	89,83	0,038
V ₂ CF ₂	0,0008	0,0078	0,0070	3,34	0,0070	89,89	0,023
V ₂ CO ₂	0,0011	0,0111	0,0076	4,42	0,0100	89,93	0,044
V ₂ CrCN	0,0023	0,0230	0,0088	7,88	0,0207	90,17	0,163
V ₂ CrCNO ₂	0,0023	0,0231	0,0048	14,41	0,0207	89,92	0,299
V ₂ HfCN	0,0010	0,0104	0,0053	5,94	0,0094	90,16	0,056
V ₂ HfCNO ₂	0,0012	0,0120	0,0030	11,89	0,0108	90,07	0,128
V ₂ MoCN	0,0016	0,0162	0,0071	6,80	0,0146	90,06	0,099
V ₂ MoCNO ₂	0,0017	0,0172	0,0040	13,03	0,0155	90,01	0,202

V ₂ N	0,0008	0,0078	0,0115	2,02	0,0070	89,98	0,014
V ₂ N(OH) ₂	0,0012	0,0117	0,0067	5,23	0,0105	90,13	0,055
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0010	0,0095	0,0053	5,40	0,0086	89,95	0,046
V ₂ NbCN	0,0016	0,0165	0,0073	6,82	0,0149	90,13	0,101
V ₂ NbCNO ₂	0,0019	0,0195	0,0038	15,43	0,0175	90,05	0,270
V ₂ NF ₂	0,0007	0,0066	0,0070	2,84	0,0060	89,99	0,017
V ₂ NO ₂	0,0009	0,0093	0,0074	3,79	0,0084	90,15	0,032
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0000	0,0001	0,0000	4,84	0,0001	90,00	0,000
V ₂ TaC ₂	0,0000	0,0001	0,0001	4,90	0,0001	90,10	0,001
V ₂ TaCN	0,0000	0,0002	0,0001	6,60	0,0002	90,07	0,001
V ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0002	0,0001	12,47	0,0002	90,10	0,003
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0015	0,0150	0,0074	6,05	0,0135	90,19	0,082
V ₂ TiC ₂	0,0017	0,0173	0,0093	5,60	0,0156	90,10	0,087
V ₂ TiCN	0,0021	0,0215	0,0090	7,18	0,0194	90,09	0,139
V ₂ TiCNO ₂	0,0022	0,0228	0,0049	14,03	0,0205	90,14	0,288
V ₂ ZrCN	0,0023	0,0230	0,0088	7,88	0,0207	90,17	0,163
V ₂ ZrCNO ₂	0,0017	0,0169	0,0040	12,57	0,0152	90,10	0,191
V ₃ C ₂	0,0008	0,0081	0,0077	3,14	0,0073	89,89	0,023
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0021	0,0210	0,0033	19,40	0,0189	89,94	0,367
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0004	0,0039	0,0022	5,25	0,0035	89,98	0,018
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0012	0,0118	0,0040	8,82	0,0106	90,02	0,093
V ₃ C ₂ F ₂	0,0009	0,0086	0,0036	7,22	0,0078	89,89	0,056
V ₃ C ₂ O ₂	0,0013	0,0128	0,0046	8,32	0,0115	89,95	0,096
V ₃ CN	0,0020	0,0203	0,0092	6,65	0,0183	90,01	0,122
V ₃ CNO ₂	0,0027	0,0272	0,0056	14,58	0,0245	90,03	0,358
V ₃ N ₂	0,0005	0,0053	0,0059	2,73	0,0048	90,24	0,013
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0044	0,0440	0,0046	28,88	0,0396	89,97	1,144
V ₃ N ₂ F ₂	0,0007	0,0069	0,0030	6,78	0,0062	90,03	0,042
V ₃ N ₂ H ₂	0,0010	0,0099	0,0042	7,11	0,0089	89,82	0,063
V ₃ N ₂ O ₂	0,0025	0,0252	0,0051	14,77	0,0227	90,09	0,335
V ₄ C ₃	0,0008	0,0080	0,0062	3,87	0,0072	89,93	0,028
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0017	0,0170	0,0030	16,91	0,0153	89,93	0,259
V ₄ C ₃ F ₂	0,0006	0,0061	0,0034	5,33	0,0055	89,82	0,029
V ₄ C ₃ H ₂	0,0005	0,0049	0,0032	4,56	0,0044	89,98	0,020
V ₄ C ₃ O ₂	0,0009	0,0088	0,0039	6,77	0,0079	90,02	0,054
V ₄ N ₃	0,0005	0,0051	0,0056	2,74	0,0046	89,95	0,013

V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0010	0,0095	0,0033	8,64	0,0086	89,99	0,074
V ₄ N ₃ F ₂	0,0005	0,0047	0,0035	4,01	0,0042	89,98	0,017
V ₄ N ₃ H ₂	0,0004	0,0037	0,0030	3,72	0,0034	90,10	0,013
V ₄ N ₃ O ₂	0,0006	0,0064	0,0037	5,25	0,0058	90,08	0,030
VCrN(NCS) ₂	0,1017	0,7400	0,0047	475,11	0,6383	86,26	303,262
VCrN(SCN) ₂	0,0094	0,0943	0,0052	54,23	0,0849	90,01	4,602
VCrNBr ₂	0,0070	0,0710	0,0059	36,09	0,0640	90,18	2,310
VCrNF ₂	0,0008	0,0081	0,0073	3,33	0,0073	89,72	0,024
VMoN(NCO) ₂	0,0027	0,0271	0,0052	15,74	0,0244	90,10	0,384
VMoN(NCS) ₂	0,0642	0,5221	0,0045	351,85	0,4579	87,70	161,120
VMoN(OCN) ₂	0,0031	0,0309	0,0052	17,88	0,0278	90,09	0,498
VMoN(SCN) ₂	0,0069	0,0689	0,0044	46,91	0,0620	89,93	2,907
VMoNBr ₂	0,0053	0,0543	0,0051	31,91	0,0490	90,17	1,563
VMoNCl ₂	0,0039	0,0391	0,0067	17,58	0,0353	90,13	0,620
VNbC	0,0008	0,0084	0,0129	1,95	0,0076	89,99	0,015
VNbCF ₂ -(model4)	0,0010	0,0102	0,0079	3,89	0,0092	90,03	0,036
VWN(NCO) ₂	0,0017	0,0168	0,0039	12,94	0,0151	90,07	0,196
VWN(OCN) ₂	0,0022	0,0216	0,0039	16,67	0,0195	90,02	0,324
VWNBr ₂	0,0035	0,0356	0,0041	25,93	0,0321	90,15	0,831
VWNCl ₂	0,0028	0,0289	0,0050	17,49	0,0260	90,14	0,455
VWNF ₂	0,0005	0,0049	0,0044	3,35	0,0045	90,26	0,015
W _{1.33} C	0,1706	0,8719	0,0058	447,92	0,7013	80,43	314,127
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0009	0,0090	0,0036	7,47	0,0081	90,07	0,061
W _{1.33} CO ₂	0,0007	0,0072	0,0041	5,33	0,0065	90,21	0,035
W ₂ C	0,0005	0,0047	0,0038	3,67	0,0042	90,08	0,015
W ₂ C(OH) ₂	0,0008	0,0080	0,0020	12,03	0,0072	89,96	0,086
W ₂ CCl ₂	0,0019	0,0192	0,0038	15,22	0,0173	90,10	0,264
W ₂ CF ₂	0,0003	0,0034	0,0020	5,16	0,0030	89,79	0,016
W ₂ CO ₂	0,0004	0,0043	0,0030	4,28	0,0039	89,98	0,016
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0004	0,0040	0,0012	9,68	0,0036	90,03	0,035
W ₂ HfC ₂	0,0002	0,0022	0,0023	2,85	0,0020	89,88	0,006
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0006	0,0063	0,0015	12,57	0,0056	90,02	0,071
W ₂ N	0,0003	0,0031	0,0038	2,40	0,0028	89,89	0,007
W ₂ N(OH) ₂	0,0009	0,0095	0,0018	15,75	0,0085	90,01	0,135
W ₂ NF ₂	0,0003	0,0032	0,0018	5,33	0,0028	90,06	0,015
W ₂ NO ₂	0,0004	0,0044	0,0022	5,96	0,0039	90,07	0,023

W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0006	0,0055	0,0019	8,88	0,0050	89,99	0,044
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0008	0,0081	0,0021	11,83	0,0073	89,93	0,087
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0005	0,0051	0,0016	9,80	0,0046	90,03	0,045
W ₂ ZrC ₂	0,0003	0,0026	0,0027	2,90	0,0024	89,84	0,007
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0008	0,0078	0,0018	13,03	0,0070	89,95	0,091
W ₃ C ₂	0,0002	0,0023	0,0023	2,95	0,0020	90,08	0,006
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0009	0,0090	0,0015	18,08	0,0081	89,97	0,146
W ₃ C ₂ F ₂	0,0003	0,0031	0,0009	9,75	0,0028	89,98	0,027
W ₃ C ₂ O ₂	0,0005	0,0054	0,0014	11,45	0,0049	89,98	0,056
W ₃ N ₂	0,0002	0,0024	0,0024	3,06	0,0022	89,89	0,007
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0001	0,03	0,0000	83,33	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0002	0,0022	0,0008	8,60	0,0020	89,99	0,017
W ₃ N ₂ O ₂	0,0007	0,0069	0,0018	11,80	0,0062	90,01	0,073
W ₄ C ₃	0,0004	0,0040	0,0023	5,31	0,0036	90,05	0,019
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0004	0,0041	0,0011	10,90	0,0036	89,94	0,040
W ₄ C ₃ F ₂	0,0002	0,0023	0,0013	5,47	0,0021	89,88	0,011
W ₄ C ₃ H ₂	0,0003	0,0028	0,0015	5,58	0,0025	90,05	0,014
W ₄ C ₃ O ₂	0,0004	0,0041	0,0015	8,15	0,0037	89,91	0,030
W ₄ N ₃	0,0005	0,0051	0,0021	7,26	0,0046	90,07	0,033
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0005	0,0050	0,0013	11,81	0,0045	90,04	0,053
W ₄ N ₃ F ₂	0,0003	0,0033	0,0016	6,11	0,0030	90,19	0,018
W ₄ N ₃ H ₂	0,0002	0,0022	0,0014	4,81	0,0020	89,99	0,009
W ₄ N ₃ O ₂	0,0002	0,0025	0,0016	4,56	0,0022	89,95	0,010
WCrC	0,0005	0,0048	0,0063	2,29	0,0043	89,94	0,010
WCrCO ₂ -(model4)	0,0006	0,0061	0,0043	4,28	0,0055	90,05	0,024
Y ₂ C	0,0007	0,0074	0,0099	2,25	0,0067	90,04	0,015
Y ₂ C(CN) ₂	0,0013	0,0126	0,0057	6,71	0,0114	90,08	0,076
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0020	0,0204	0,0052	11,83	0,0183	90,03	0,217
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0048	0,0478	0,0032	44,84	0,0430	90,03	1,928
Y ₂ C(OCI) ₂	0,0027	0,0270	0,0055	14,65	0,0243	90,05	0,356
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0021	0,0211	0,0052	12,18	0,0190	90,14	0,232
Y ₂ C(OH) ₂	0,0007	0,0072	0,0050	4,34	0,0065	89,77	0,028
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0042	0,0423	0,0042	30,09	0,0380	90,04	1,145
Y ₂ CB ₂	0,0022	0,0218	0,0050	13,08	0,0197	90,00	0,257
Y ₂ CCl ₂	0,0024	0,0243	0,0067	10,92	0,0219	89,99	0,239
Y ₂ CF ₂	0,0007	0,0075	0,0060	3,70	0,0067	90,04	0,025

Y ₂ CO ₂	0,0012	0,0127	0,0069	5,52	0,0114	90,16	0,063
Y ₂ N	0,0006	0,0062	0,0090	2,07	0,0056	89,96	0,012
Y ₂ N(OH) ₂	0,0007	0,0072	0,0047	4,55	0,0065	90,22	0,029
Y ₂ NF ₂	0,0006	0,0061	0,0054	3,39	0,0055	90,01	0,019
Y ₂ NO ₂	0,0011	0,0110	0,0068	4,81	0,0099	90,01	0,047
Y ₃ C ₂	0,0006	0,0061	0,0044	4,17	0,0055	89,95	0,023
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0010	0,0012	2,42	0,0009	89,74	0,002
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0007	0,0072	0,0029	7,50	0,0065	90,08	0,048
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0008	0,0082	0,0021	11,79	0,0074	89,93	0,087
Y ₃ N ₂	0,0005	0,0049	0,0042	3,53	0,0044	90,18	0,016
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0009	0,0086	0,0024	10,83	0,0077	90,04	0,083
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0007	0,0074	0,0028	7,91	0,0067	90,00	0,053
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0007	0,0072	0,0022	9,72	0,0065	90,08	0,063
Y ₄ C ₃	0,0006	0,0058	0,0046	3,75	0,0052	89,90	0,019
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0001	0,0008	0,0011	2,10	0,0007	89,88	0,001
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0006	0,0065	0,0024	8,19	0,0058	90,13	0,048
Y ₄ C ₃ O ₂	0,0013	0,0128	0,0029	13,30	0,0115	90,18	0,153
Y ₄ N ₃	0,0004	0,0042	0,0046	2,74	0,0038	90,14	0,010
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0006	0,0055	0,0023	7,30	0,0050	89,94	0,036
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0006	0,0063	0,0032	5,82	0,0057	90,00	0,033
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0006	0,0061	0,0027	6,68	0,0055	90,08	0,037
YCrC(NCO) ₂	0,0024	0,0238	0,0054	13,25	0,0215	90,06	0,284
YCrC(NCS) ₂	0,0323	0,3030	0,0053	171,18	0,2707	89,36	46,344
YCrC(OCN) ₂	0,0025	0,0253	0,0053	14,42	0,0228	90,04	0,328
YCrC(OH) ₂	0,0013	0,0130	0,0053	7,34	0,0117	89,93	0,086
YCrCBr ₂	0,0035	0,0362	0,0055	19,63	0,0327	90,21	0,641
YCrCCl ₂	0,0030	0,0305	0,0075	12,27	0,0276	90,21	0,338
YCrCF ₂	0,0009	0,0093	0,0065	4,28	0,0084	90,19	0,036
YHfN(SCN) ₂	0,0033	0,0338	0,0037	27,49	0,0304	90,16	0,837
YHfNO ₂	0,0005	0,0053	0,0036	4,38	0,0047	90,01	0,021
YMoN(NO) ₂	0,0006	0,0063	0,0055	3,43	0,0057	89,99	0,019
YNbCO ₂	0,0008	0,0083	0,0060	4,19	0,0075	90,00	0,031
YTaCO ₂	0,0000	0,0001	0,0001	4,22	0,0001	89,90	0,000
YTiN(NO) ₂	0,0009	0,0088	0,0064	4,10	0,0079	90,11	0,032
YTiNO ₂	0,0008	0,0082	0,0059	4,16	0,0074	89,92	0,031
YVCO ₂	0,0009	0,0094	0,0071	3,98	0,0084	90,08	0,034

YVNF ₂	0,0008	0,0077	0,0058	4,01	0,0069	90,04	0,028
YZrNO ₂	0,0008	0,0074	0,0050	4,48	0,0067	89,79	0,030
Zr ₂ C	0,0007	0,0068	0,0109	1,88	0,0061	89,74	0,012
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0008	0,0081	0,0044	5,60	0,0073	89,80	0,041
Zr ₂ CF ₂	0,0006	0,0058	0,0051	3,39	0,0052	90,03	0,018
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0007	0,0070	0,0054	3,86	0,0063	90,21	0,024
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0009	0,0090	0,0080	3,41	0,0081	89,91	0,028
Zr ₂ CO ₂	0,0009	0,0087	0,0059	4,43	0,0078	89,83	0,035
Zr ₂ CrCN	0,0011	0,0106	0,0059	5,38	0,0096	89,96	0,051
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0012	0,0120	0,0033	10,78	0,0108	89,98	0,116
Zr ₂ HfCN	0,0006	0,0060	0,0040	4,51	0,0054	89,93	0,024
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0008	0,0080	0,0023	10,55	0,0072	90,00	0,076
Zr ₂ MoCN	0,0008	0,0084	0,0050	5,01	0,0076	89,98	0,038
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0010	0,0100	0,0029	10,46	0,0090	89,98	0,094
Zr ₂ N	0,0006	0,0062	0,0083	2,25	0,0056	89,83	0,013
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0008	0,0078	0,0042	5,61	0,0070	89,96	0,039
Zr ₂ NbCN	0,0008	0,0085	0,0051	5,00	0,0076	89,98	0,038
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0010	0,0102	0,0029	10,62	0,0092	90,05	0,098
Zr ₂ NF ₂	0,0005	0,0052	0,0051	3,09	0,0047	90,21	0,014
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0008	0,0081	0,0067	3,65	0,0073	90,22	0,027
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0007	0,0064	0,0050	3,86	0,0058	89,68	0,022
Zr ₂ NO ₂	0,0007	0,0072	0,0056	3,88	0,0065	90,01	0,025
Zr ₂ TaCN	0,0000	0,0001	0,0001	4,88	0,0001	89,89	0,001
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0000	0,0002	0,0001	10,23	0,0002	90,08	0,002
Zr ₂ TiCN	0,0010	0,0103	0,0060	5,11	0,0093	89,96	0,047
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0012	0,0120	0,0034	10,58	0,0108	90,07	0,114
Zr ₂ VCN	0,0010	0,0101	0,0060	5,05	0,0091	90,10	0,046
Zr ₂ VCNO ₂	0,0012	0,0115	0,0033	10,33	0,0104	90,01	0,107
Zr ₃ C ₂	0,0007	0,0068	0,0055	3,69	0,0061	89,89	0,023
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0013	0,0125	0,0027	14,17	0,0113	89,89	0,159
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0005	0,0054	0,0028	5,88	0,0049	89,91	0,029
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0004	0,0036	0,0021	5,21	0,0032	90,09	0,017
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0010	0,0096	0,0033	8,76	0,0086	90,06	0,076
Zr ₃ CN	0,0008	0,0081	0,0053	4,62	0,0073	89,83	0,034
Zr ₃ CNO ₂	0,0012	0,0120	0,0034	10,48	0,0108	90,02	0,113
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0013	0,0134	0,0026	15,71	0,0121	90,01	0,190

Zr ₃ N ₂	0,0005	0,0047	0,0044	3,17	0,0042	89,84	0,013
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0004	0,0044	0,0023	5,69	0,0039	89,92	0,022
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0004	0,0039	0,0021	5,54	0,0035	90,14	0,019
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0008	0,0077	0,0031	7,53	0,0070	90,26	0,053
Zr ₄ C ₃	0,0006	0,0058	0,0044	3,99	0,0052	90,12	0,021
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0005	0,0051	0,0018	8,48	0,0045	89,80	0,039
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0005	0,0047	0,0023	6,10	0,0043	89,92	0,026
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0006	0,0062	0,0023	8,09	0,0056	89,89	0,045
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0008	0,0076	0,0027	8,46	0,0069	89,92	0,058
Zr ₄ N ₃	0,0004	0,0038	0,0036	3,12	0,0034	89,99	0,011
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0005	0,0049	0,0017	8,61	0,0044	89,96	0,038
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0004	0,0037	0,0021	5,12	0,0033	89,99	0,017
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0006	0,0058	0,0026	6,84	0,0052	90,02	0,036
ZrCrNO ₂	0,0008	0,0079	0,0056	4,23	0,0071	89,84	0,030
ZrHfCO ₂	0,0005	0,0051	0,0036	4,26	0,0046	89,70	0,019
ZrMoCO ₂	0,0006	0,0056	0,0052	3,24	0,0050	90,00	0,016

APPENDIX D: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of MXene Structures at TSA conditions(250 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working	% Regenerability	APS
	1 bar, 35°C	1 bar, 250°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	TSA	TSA	TSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0146	0,0024	0,0071	6,18	0,0122	83,62	0,075
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0075	0,0017	0,0054	4,17	0,0059	78,03	0,024
(TiV) ₃ C ₂	0,0168	0,0025	0,0076	6,61	0,0142	84,81	0,094
(TiV)C(OH) ₂	0,0099	0,0026	0,0087	3,42	0,0073	73,74	0,025
(TiV)CF ₂	0,0108	0,0025	0,0081	4,01	0,0083	76,69	0,033
(TiV)CO ₂	0,0108	0,0025	0,0081	4,01	0,0084	77,14	0,034
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0194	0,0009	0,0021	27,39	0,0185	95,40	0,506
Cr ₂ C	0,0116	0,0033	0,0123	2,82	0,0083	71,81	0,023
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0138	0,0023	0,0066	6,27	0,0115	83,64	0,072
Cr ₂ CBBr ₂	0,0502	0,0038	0,0060	25,03	0,0464	92,39	1,162
Cr ₂ CCl ₂	0,0432	0,0044	0,0083	15,68	0,0388	89,83	0,608
Cr ₂ CF ₂	0,0077	0,0021	0,0074	3,11	0,0056	73,20	0,018
Cr ₂ CFCl	0,0122	0,0024	0,0073	5,02	0,0098	80,03	0,049
Cr ₂ CH ₂	0,0064	0,0019	0,0077	2,51	0,0045	70,69	0,011
Cr ₂ CO ₂	0,0126	0,0023	0,0067	5,67	0,0102	81,35	0,058
Cr ₂ CS ₂	0,1866	0,0086	0,0091	61,48	0,1780	95,40	10,945
Cr ₂ HfCN	0,0107	0,0018	0,0049	6,63	0,0089	83,18	0,059
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0151	0,0016	0,0033	13,64	0,0135	89,20	0,184
Cr ₂ MoCN	0,0168	0,0026	0,0066	7,60	0,0142	84,51	0,108
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0207	0,0023	0,0044	14,17	0,0184	89,08	0,261
Cr ₂ N	0,0070	0,0023	0,0097	2,17	0,0047	66,86	0,010
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0122	0,0021	0,0062	5,90	0,0102	83,16	0,060
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0096	0,0018	0,0051	5,62	0,0079	81,73	0,044
Cr ₂ NbCN	0,0179	0,0026	0,0068	7,93	0,0153	85,24	0,121
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0217	0,0023	0,0045	14,61	0,0194	89,47	0,284
Cr ₂ NF ₂	0,0062	0,0018	0,0066	2,84	0,0045	71,89	0,013
Cr ₂ NH ₂	0,0063	0,0017	0,0069	2,72	0,0045	72,24	0,012
Cr ₂ NO ₂	0,0089	0,0021	0,0073	3,64	0,0068	76,12	0,025
Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,93	0,0001	80,00	0,000
Cr ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,88	0,0001	72,98	0,000

Cr ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	7,18	0,0002	83,95	0,001
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	14,02	0,0003	89,10	0,004
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0148	0,0025	0,0071	6,24	0,0122	82,74	0,076
Cr ₂ TiC ₂	0,0082	0,0020	0,0073	3,35	0,0062	75,32	0,021
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0303	0,0020	0,0042	21,80	0,0283	93,49	0,617
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0252	0,0028	0,0060	12,69	0,0224	88,85	0,284
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0237	0,0026	0,0053	13,34	0,0211	89,22	0,282
Cr ₂ TiCN	0,0237	0,0034	0,0084	8,43	0,0202	85,46	0,170
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0275	0,0029	0,0054	15,30	0,0246	89,61	0,377
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0148	0,0025	0,0069	6,47	0,0123	83,27	0,080
Cr ₂ VC ₂	0,0079	0,0020	0,0071	3,36	0,0059	74,62	0,020
Cr ₂ VCN	0,0247	0,0034	0,0085	8,76	0,0213	86,30	0,187
Cr ₂ VCNO ₂	0,0268	0,0028	0,0054	14,93	0,0240	89,46	0,358
Cr ₂ ZrCN	0,0156	0,0025	0,0068	6,92	0,0131	83,78	0,091
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0295	0,0023	0,0043	20,38	0,0273	92,29	0,555
Cr ₃ C ₂	0,0108	0,0025	0,0082	3,96	0,0083	77,26	0,033
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0158	0,0014	0,0039	12,24	0,0144	91,25	0,177
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0013	0,0041	5,31	0,0059	81,67	0,031
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0016	0,0048	6,16	0,0083	83,50	0,051
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0602	0,0017	0,0047	38,47	0,0585	97,20	2,250
Cr ₃ CN	0,0232	0,0033	0,0084	8,26	0,0199	85,78	0,165
Cr ₃ CNO ₂	0,0311	0,0030	0,0055	16,87	0,0281	90,48	0,474
Cr ₃ N ₂	0,0053	0,0015	0,0055	2,86	0,0038	72,13	0,011
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0109	0,0031	0,0035	9,34	0,0079	71,94	0,074
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0112	0,0031	0,0051	6,63	0,0082	72,69	0,054
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0110	0,0018	0,0035	9,30	0,0092	83,32	0,085
Cr ₄ C ₃	0,0095	0,0014	0,0067	4,27	0,0081	85,13	0,035
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0109	0,0021	0,0035	9,34	0,0089	80,95	0,083
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0056	0,0013	0,0037	4,49	0,0042	75,81	0,019
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0070	0,0013	0,0041	5,15	0,0056	80,82	0,029
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0083	0,0014	0,0038	6,58	0,0069	83,00	0,045
Cr ₄ N ₃	0,0057	0,0016	0,0062	2,73	0,0041	71,72	0,011
Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0088	0,0012	0,0033	7,97	0,0076	86,40	0,061
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0045	0,0010	0,0035	3,83	0,0034	76,83	0,013
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0053	0,0011	0,0037	4,31	0,0041	78,40	0,018
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0012	0,0036	5,10	0,0049	80,30	0,025

CrMoCF ₂	0,0076	0,0019	0,0065	3,50	0,0057	75,18	0,020
CrWCF ₂	0,0058	0,0014	0,0044	3,95	0,0044	76,49	0,018
Hf ₂ C	0,0043	0,0012	0,0047	2,78	0,0031	72,30	0,009
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0051	0,0008	0,0025	6,15	0,0043	84,98	0,026
Hf ₂ CF ₂	0,0034	0,0008	0,0029	3,48	0,0026	76,11	0,009
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0038	0,0009	0,0033	3,51	0,0029	75,59	0,010
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0048	0,0013	0,0048	3,00	0,0035	73,03	0,010
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0042	0,0011	0,0042	3,00	0,0031	72,86	0,009
Hf ₂ CO ₂	0,0051	0,0011	0,0033	4,65	0,0041	79,13	0,019
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0034	0,0008	0,0026	3,90	0,0026	77,17	0,010
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0045	0,0012	0,0042	3,27	0,0034	73,70	0,011
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0051	0,0013	0,0045	3,43	0,0038	75,07	0,013
Hf ₂ CrCN	0,0057	0,0011	0,0035	4,87	0,0046	79,97	0,022
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0067	0,0008	0,0020	9,94	0,0059	87,59	0,058
Hf ₂ MoCN	0,0065	0,0010	0,0028	6,98	0,0055	84,49	0,039
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0114	0,0007	0,0016	20,85	0,0107	93,60	0,222
Hf ₂ N	0,0033	0,0011	0,0043	2,35	0,0023	68,47	0,005
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0053	0,0007	0,0022	7,32	0,0046	87,09	0,034
Hf ₂ NbCN	0,0048	0,0010	0,0032	4,48	0,0038	78,67	0,017
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0061	0,0007	0,0018	9,99	0,0054	87,81	0,054
Hf ₂ NF ₂	0,0028	0,0007	0,0024	3,60	0,0022	75,95	0,008
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0034	0,0009	0,0025	4,05	0,0025	73,93	0,010
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0065	0,0014	0,0047	4,15	0,0051	78,30	0,021
Hf ₂ NO ₂	0,0044	0,0010	0,0032	4,16	0,0034	77,79	0,014
Hf ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,43	0,0001	78,84	0,000
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0000	10,54	0,0002	88,92	0,002
Hf ₂ TiCN	0,0056	0,0011	0,0035	4,71	0,0044	79,49	0,021
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0066	0,0008	0,0020	9,77	0,0058	87,44	0,056
Hf ₂ VCN	0,0054	0,0011	0,0036	4,59	0,0043	78,83	0,020
Hf ₂ VCNO ₂	0,0066	0,0008	0,0021	9,65	0,0058	87,44	0,056
Hf ₂ ZrCN	0,0046	0,0010	0,0032	4,23	0,0036	77,90	0,015
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0061	0,0007	0,0018	9,99	0,0054	88,24	0,053
Hf ₃ C ₂	0,0038	0,0009	0,0029	3,97	0,0030	77,12	0,012
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0031	0,0002	0,0011	8,25	0,0029	92,36	0,024
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0030	0,0005	0,0016	5,77	0,0025	82,20	0,014
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,0002	0,0009	3,34	0,0008	82,37	0,003

Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0052	0,0007	0,0018	8,55	0,0045	86,30	0,038
Hf ₃ CN	0,0038	0,0008	0,0028	4,03	0,0029	77,56	0,012
Hf ₃ CNO ₂	0,0059	0,0008	0,0019	9,47	0,0052	87,23	0,049
Hf ₃ N ₂	0,0026	0,0006	0,0023	3,33	0,0019	75,00	0,006
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0018	0,0001	0,0008	6,35	0,0016	92,41	0,010
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0025	0,0004	0,0013	5,88	0,0021	85,34	0,012
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0015	0,0002	0,0010	4,68	0,0013	85,27	0,006
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0042	0,0006	0,0017	7,41	0,0036	85,13	0,027
Hf ₄ C ₃	0,0022	0,0005	0,0020	3,37	0,0017	75,77	0,006
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0034	0,0005	0,0014	7,17	0,0030	86,63	0,021
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0027	0,0005	0,0013	6,03	0,0022	82,92	0,013
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0012	0,0002	0,0008	4,37	0,0010	84,14	0,004
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0043	0,0006	0,0015	8,49	0,0037	85,83	0,031
Hf ₄ N ₃	0,0021	0,0005	0,0019	3,18	0,0015	74,32	0,005
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0030	0,0003	0,0010	8,99	0,0027	90,62	0,024
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0020	0,0004	0,0012	5,14	0,0017	81,12	0,009
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0012	0,0002	0,0009	3,97	0,0009	81,10	0,004
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0033	0,0005	0,0014	7,11	0,0028	83,92	0,020
HfCrNO ₂	0,0053	0,0012	0,0038	4,15	0,0041	78,05	0,017
Mn ₂ C	0,0115	0,0032	0,0120	2,88	0,0084	72,60	0,024
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0128	0,0022	0,0063	6,09	0,0107	83,21	0,065
Mn ₂ CF ₂	0,0070	0,0018	0,0064	3,27	0,0052	74,40	0,017
Mn ₂ CO ₂	0,0098	0,0022	0,0073	4,02	0,0076	77,53	0,031
Mn ₂ N	0,0063	0,0021	0,0087	2,17	0,0042	66,64	0,009
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0099	0,0019	0,0063	4,69	0,0080	80,57	0,037
Mn ₂ NF ₂	0,0059	0,0017	0,0064	2,74	0,0042	71,45	0,011
Mn ₂ NO ₂	0,0084	0,0020	0,0067	3,79	0,0064	76,64	0,024
Mn ₃ C ₂	0,0106	0,0024	0,0078	4,06	0,0082	77,34	0,033
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0156	0,0014	0,0036	13,00	0,0143	91,25	0,185
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0069	0,0012	0,0038	5,39	0,0056	81,85	0,030
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0102	0,0016	0,0043	7,19	0,0086	83,94	0,062
Mn ₃ N ₂	0,0075	0,0021	0,0078	2,90	0,0054	72,19	0,016
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0127	0,0010	0,0032	11,92	0,0116	91,73	0,139
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0056	0,0011	0,0038	4,36	0,0044	79,50	0,019
Mn ₄ C ₃	0,0092	0,0020	0,0064	4,30	0,0072	78,21	0,031
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0013	0,0031	11,30	0,0106	89,32	0,120

Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0055	0,0011	0,0033	5,02	0,0044	80,37	0,022
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0073	0,0013	0,0037	5,92	0,0060	81,77	0,036
Mn ₄ N ₃	0,0050	0,0012	0,0041	3,68	0,0038	75,86	0,014
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0100	0,0011	0,0029	10,34	0,0089	88,63	0,092
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0056	0,0011	0,0034	4,91	0,0045	80,10	0,022
Mo _{1,33} C	0,0176	0,0034	0,0117	4,50	0,0142	80,89	0,064
Mo ₂ C	0,0084	0,0022	0,0079	3,22	0,0063	74,34	0,020
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,3961	0,0066	0,0040	297,99	0,3896	98,35	116,089
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0276	0,0025	0,0045	18,50	0,0252	91,05	0,465
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0078	0,0015	0,0046	5,07	0,0064	81,41	0,032
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0525	0,0023	0,0038	41,55	0,0502	95,71	2,087
Mo ₂ CBr ₂	0,0341	0,0027	0,0045	22,67	0,0314	92,14	0,712
Mo ₂ CCl ₂	0,0259	0,0028	0,0057	13,56	0,0230	89,05	0,312
Mo ₂ CF ₂	0,0054	0,0015	0,0054	3,03	0,0039	72,93	0,012
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0096	0,0022	0,0071	4,08	0,0074	77,39	0,030
Mo ₂ CO ₂	0,0079	0,0014	0,0042	5,61	0,0065	82,05	0,036
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0066	0,0015	0,0051	3,88	0,0050	76,72	0,020
Mo ₂ CrCN	0,0125	0,0021	0,0056	6,71	0,0104	83,30	0,070
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0144	0,0017	0,0037	11,53	0,0126	87,92	0,146
Mo ₂ CS ₂	0,0055	0,0013	0,0039	4,23	0,0043	76,92	0,018
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0048	0,0006	0,0016	9,22	0,0042	87,09	0,039
Mo ₂ HfC ₂	0,0029	0,0009	0,0033	2,65	0,0021	70,96	0,006
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0078	0,0008	0,0022	10,79	0,0069	89,12	0,075
Mo ₂ HfCN	0,0068	0,0013	0,0038	5,38	0,0055	80,80	0,029
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0096	0,0012	0,0026	11,13	0,0084	87,91	0,094
Mo ₂ N	0,0055	0,0016	0,0060	2,73	0,0039	71,04	0,011
Mo ₂ N(OH) ₂	0,0148	0,0013	0,0032	13,70	0,0136	91,52	0,186
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0066	0,0013	0,0039	5,03	0,0053	80,43	0,027
Mo ₂ NbC ₂	0,0039	0,0011	0,0042	2,78	0,0028	72,33	0,008
Mo ₂ NbCN	0,0093	0,0016	0,0046	6,06	0,0077	82,29	0,046
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0123	0,0015	0,0032	11,62	0,0109	88,03	0,126
Mo ₂ NF ₂	0,0052	0,0010	0,0031	5,01	0,0042	81,22	0,021
Mo ₂ NO ₂	0,0070	0,0013	0,0040	5,26	0,0056	80,97	0,030
Mo ₂ ScC ₂	0,0048	0,0013	0,0050	2,84	0,0035	72,66	0,010
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0106	0,0012	0,0031	10,41	0,0094	88,67	0,098
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,60	0,0001	78,91	0,000

Mo ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,71	0,0001	81,64	0,001
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,05	0,0002	87,79	0,002
Mo ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,69	0,0000	72,00	0,000
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0095	0,0018	0,0051	5,60	0,0077	81,33	0,043
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0130	0,0012	0,0028	13,75	0,0118	90,44	0,162
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0078	0,0012	0,0031	7,56	0,0066	84,30	0,050
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0079	0,0011	0,0027	8,73	0,0069	86,38	0,060
Mo ₂ TiC ₂	0,0048	0,0013	0,0049	2,93	0,0035	72,56	0,010
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0179	0,0009	0,0033	16,23	0,0171	95,19	0,277
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0195	0,0013	0,0031	19,09	0,0182	93,39	0,347
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0142	0,0019	0,0047	9,16	0,0123	86,29	0,112
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,0103	0,0014	0,0033	9,47	0,0090	86,86	0,085
Mo ₂ TiCN	0,0119	0,0021	0,0057	6,30	0,0098	82,57	0,062
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0017	0,0037	11,45	0,0126	87,94	0,144
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0093	0,0017	0,0050	5,61	0,0076	81,86	0,043
Mo ₂ VC ₂	0,0048	0,0013	0,0048	2,96	0,0035	73,07	0,010
Mo ₂ VCN	0,0118	0,0020	0,0056	6,29	0,0098	82,71	0,062
Mo ₂ VCNO ₂	0,0139	0,0017	0,0037	11,17	0,0122	87,69	0,136
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0068	0,0008	0,0022	9,35	0,0059	87,49	0,055
Mo ₂ ZrC ₂	0,0038	0,0011	0,0042	2,69	0,0027	71,91	0,007
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0106	0,0011	0,0027	11,57	0,0095	89,43	0,109
Mo ₂ ZrCN	0,0089	0,0017	0,0049	5,53	0,0073	81,36	0,040
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0122	0,0015	0,0032	11,40	0,0107	88,00	0,122
Mo ₃ C ₂	0,0071	0,0014	0,0042	5,02	0,0056	79,95	0,028
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0001	0,0008	3,51	0,0009	92,79	0,003
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0053	0,0006	0,0018	8,79	0,0047	89,49	0,042
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0082	0,0010	0,0028	8,78	0,0071	87,50	0,063
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0119	0,0011	0,0025	13,96	0,0107	90,53	0,150
Mo ₃ CN	0,0092	0,0017	0,0048	5,75	0,0076	82,04	0,044
Mo ₃ N ₂	0,0043	0,0010	0,0034	3,80	0,0033	76,54	0,013
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0004	0,69	0,0001	88,32	0,000
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0045	0,0004	0,0016	8,56	0,0040	90,30	0,034
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0048	0,0009	0,0028	5,15	0,0039	80,88	0,020
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0083	0,0007	0,0020	12,48	0,0076	91,37	0,094
Mo ₄ C ₃	0,0069	0,0014	0,0041	5,06	0,0056	80,50	0,028
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0071	0,0007	0,0020	10,69	0,0064	90,45	0,068

Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0040	0,0008	0,0023	5,32	0,0033	81,17	0,017
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0063	0,0009	0,0024	7,89	0,0054	85,01	0,042
Mo ₄ N ₃	0,0039	0,0010	0,0034	3,48	0,0029	75,29	0,010
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0008	0,0022	6,82	0,0043	85,16	0,029
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0008	0,0025	4,03	0,0026	77,19	0,010
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0026	0,0005	0,0017	4,54	0,0021	80,22	0,009
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0044	0,0009	0,0028	4,77	0,0035	79,26	0,017
MoCrC	0,0071	0,0023	0,0097	2,19	0,0048	66,95	0,010
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0087	0,0019	0,0061	4,27	0,0068	78,03	0,029
MoWC	0,0039	0,0013	0,0054	2,15	0,0026	66,20	0,005
MoWC(NCO) ₂	0,0182	0,0017	0,0034	15,88	0,0164	90,41	0,261
MoWC(OCN) ₂	0,0212	0,0019	0,0035	18,29	0,0192	91,00	0,352
MoWC(SCN) ₂	0,0416	0,0019	0,0032	39,33	0,0397	95,32	1,560
MoWCCl ₂	0,0231	0,0024	0,0046	14,99	0,0207	89,52	0,311
MoWCF ₂	0,0032	0,0008	0,0085	1,12	0,0023	73,74	0,003
MoWCO ₂ -(model2)	0,0052	0,0011	0,0035	4,39	0,0040	78,18	0,018
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,1839	0,0076	0,0157	35,17	0,1763	95,86	6,202
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0544	0,0049	0,0142	11,53	0,0495	90,94	0,571
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0271	0,0042	0,0129	6,32	0,0229	84,46	0,145
Nb _{1,33} C	2,6409	0,0263	0,0103	768,46	2,6146	99,00	2009,219
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0160	0,0033	0,0120	4,01	0,0127	79,13	0,051
Nb ₂ C	0,0084	0,0023	0,0084	3,03	0,0062	73,23	0,019
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0089	0,0013	0,0043	6,26	0,0076	85,00	0,048
Nb ₂ CF ₂	0,0056	0,0014	0,0049	3,45	0,0043	75,39	0,015
Nb ₂ CO ₂	0,0080	0,0017	0,0054	4,49	0,0063	78,66	0,028
Nb ₂ CrCN	0,0129	0,0022	0,0058	6,61	0,0107	83,17	0,071
Nb ₂ CrCNO ₂	0,0141	0,0016	0,0034	12,37	0,0125	88,69	0,155
Nb ₂ HfCN	0,0070	0,0013	0,0040	5,28	0,0056	80,76	0,030
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0088	0,0010	0,0023	11,31	0,0078	88,35	0,088
Nb ₂ MoCN	0,0100	0,0018	0,0050	5,95	0,0082	81,90	0,049
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0118	0,0013	0,0029	12,10	0,0105	88,71	0,127
Nb ₂ N	0,0064	0,0020	0,0079	2,44	0,0045	69,49	0,011
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0090	0,0016	0,0049	5,52	0,0074	81,90	0,041
Nb ₂ NF ₂	0,0053	0,0011	0,0035	4,47	0,0042	79,68	0,019
Nb ₂ NH ₂	0,0039	0,0013	0,0055	2,12	0,0026	67,62	0,006
Nb ₂ NO ₂	0,0071	0,0016	0,0052	4,08	0,0055	77,17	0,022

Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,71	0,0001	79,42	0,000
Nb ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,74	0,0001	81,77	0,001
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,61	0,0002	88,38	0,002
Nb ₂ TiCN	0,0122	0,0021	0,0059	6,20	0,0101	82,68	0,062
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0016	0,0034	12,80	0,0128	89,13	0,164
Nb ₂ VCN	0,0119	0,0021	0,0059	6,01	0,0098	82,24	0,059
Nb ₂ VCNO ₂	0,0134	0,0016	0,0034	11,78	0,0119	88,37	0,140
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0050	0,0009	0,0028	5,27	0,0040	81,02	0,021
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0067	0,0013	0,0042	4,73	0,0053	79,81	0,025
Nb ₂ ZrCN	0,0093	0,0018	0,0051	5,44	0,0075	81,08	0,041
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0109	0,0013	0,0029	11,10	0,0096	88,26	0,107
Nb ₃ C ₂	0,0079	0,0017	0,0053	4,44	0,0062	78,86	0,028
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0067	0,0005	0,0020	10,24	0,0063	93,02	0,064
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0056	0,0009	0,0026	6,38	0,0047	84,54	0,030
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0039	0,0006	0,0022	5,45	0,0033	85,53	0,018
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0094	0,0012	0,0032	8,90	0,0081	86,74	0,072
Nb ₃ CN	0,0095	0,0017	0,0053	5,43	0,0078	81,75	0,042
Nb ₃ CNO ₂	0,0116	0,0013	0,0030	11,77	0,0103	88,56	0,121
Nb ₃ N ₂	0,0047	0,0011	0,0038	3,70	0,0036	76,36	0,013
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,0000	0,0006	1,31	0,0002	90,41	0,000
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0046	0,0005	0,0017	8,04	0,0041	89,65	0,033
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0047	0,0007	0,0023	6,19	0,0040	85,09	0,025
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0078	0,0010	0,0027	8,47	0,0067	86,72	0,057
Nb ₄ C ₃	0,0059	0,0013	0,0040	4,43	0,0046	78,56	0,020
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0057	0,0004	0,0015	11,47	0,0053	93,11	0,060
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0044	0,0006	0,0019	6,90	0,0037	85,15	0,026
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0032	0,0006	0,0018	5,14	0,0026	82,52	0,013
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0070	0,0010	0,0025	8,36	0,0060	85,88	0,050
Nb ₄ N ₃	0,0042	0,0011	0,0038	3,29	0,0031	74,12	0,010
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0056	0,0007	0,0020	8,24	0,0049	88,31	0,041
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0035	0,0007	0,0023	4,57	0,0028	79,48	0,013
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0054	0,0009	0,0026	6,32	0,0045	82,98	0,028
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0006	0,0001	0,0006	2,73	0,0005	90,09	0,001
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0034	0,0005	0,0015	6,77	0,0029	85,49	0,020
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0055	0,0007	0,0018	9,19	0,0048	86,66	0,044
NbCrN(NCO) ₂	0,0433	0,0029	0,0047	27,59	0,0403	93,23	1,113

NbCrN(NCS) ₂	0,7617	0,0098	0,0024	938,75	0,7519	98,71	705,839
NbCrN(OCN) ₂	0,0321	0,0029	0,0053	18,32	0,0292	90,88	0,534
NbCrN(SCN) ₂	0,0725	0,0029	0,0044	48,95	0,0696	96,01	3,408
NbCrNBr ₂	0,0477	0,0035	0,0052	27,53	0,0441	92,56	1,215
NbCrNCl ₂	0,0362	0,0037	0,0070	15,47	0,0325	89,72	0,503
NbCrNF ₂	0,0079	0,0019	0,0065	3,65	0,0060	75,74	0,022
NbMoN(NCO) ₂	0,0217	0,0022	0,0045	14,40	0,0195	89,81	0,280
NbMoN(NCS) ₂	0,4042	0,0071	0,0041	297,17	0,3972	98,25	118,025
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,0000	0,0004	0,23	0,0000	68,53	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0594	0,0024	0,0039	45,84	0,0570	95,94	2,613
NbMoNBr ₂	0,0373	0,0030	0,0048	23,54	0,0344	92,09	0,809
NbMoNCl ₂	0,0262	0,0030	0,0060	13,04	0,0232	88,42	0,302
NbMoN(CN) ₂	0,0119	0,0020	0,0052	6,91	0,0099	83,42	0,068
NbMoNF ₂	0,0072	0,0017	0,0057	3,77	0,0055	76,19	0,021
NbWN(NCO) ₂	0,0171	0,0018	0,0035	14,74	0,0153	89,71	0,225
NbWN(NCS) ₂	0,3290	0,0059	0,0032	307,15	0,3232	98,21	99,259
NbWN(OCN) ₂	0,0189	0,0019	0,0035	16,13	0,0171	90,16	0,275
NbWN(SCN) ₂	0,0440	0,0021	0,0032	40,69	0,0419	95,27	1,707
NbWNBr ₂	0,0328	0,0025	0,0038	25,94	0,0303	92,49	0,786
NbWNCl ₂	0,0218	0,0023	0,0046	14,23	0,0195	89,33	0,278
NbWN(CN) ₂	0,0071	0,0014	0,0043	4,90	0,0056	79,83	0,028
NbWNF ₂	0,0054	0,0013	0,0046	3,54	0,0041	75,36	0,014
Sc ₂ C	0,0104	0,0036	0,0162	1,92	0,0067	64,86	0,013
Sc ₂ C(CN) ₂	0,0152	0,0033	0,0016	27,72	0,0119	78,15	0,329
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0014	0,0001	0,0014	2,82	0,0012	89,19	0,003
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,4379	0,0060	0,0052	251,32	0,4319	98,64	108,549
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0469	0,0045	0,0079	17,78	0,0424	90,41	0,753
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0018	0,0002	0,0019	2,95	0,0016	88,22	0,005
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0125	0,0021	0,0072	5,17	0,0104	83,10	0,054
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0558	0,0034	0,0062	27,18	0,0523	93,81	1,422
Sc ₂ CBr ₂	0,0348	0,0034	0,0066	15,82	0,0314	90,21	0,497
Sc ₂ CCl ₂	0,0397	0,0046	0,0092	12,93	0,0352	88,48	0,454
Sc ₂ CF ₂	0,0087	0,0023	0,0084	3,13	0,0065	73,91	0,020
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0124	0,0029	0,0093	3,99	0,0095	76,81	0,038
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0140	0,0035	0,0118	3,57	0,0105	75,14	0,038
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0176	0,0038	0,0125	4,24	0,0138	78,21	0,059

Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0144	0,0035	0,0116	3,70	0,0109	75,82	0,040
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0117	0,0028	0,0093	3,80	0,0089	76,41	0,034
Sc ₂ N	0,0077	0,0029	0,0137	1,69	0,0048	62,03	0,008
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0119	0,0021	0,0071	5,00	0,0098	82,07	0,049
Sc ₂ NF ₂	0,0074	0,0020	0,0077	2,89	0,0054	72,72	0,015
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,0149	0,0034	0,0115	3,88	0,0115	77,27	0,045
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,0114	0,0027	0,0094	3,65	0,0087	76,07	0,032
Sc ₂ NO ₂	0,0111	0,0027	0,0093	3,56	0,0084	75,92	0,030
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0115	0,0024	0,0072	4,78	0,0092	79,52	0,044
Sc ₃ C ₂	0,0088	0,0025	0,0097	2,72	0,0062	71,18	0,017
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0092	0,0009	0,0039	7,10	0,0083	90,62	0,059
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0058	0,0009	0,0027	6,46	0,0049	85,24	0,032
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0013	0,0043	5,41	0,0064	82,87	0,035
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,0024	0,0074	5,23	0,0104	81,04	0,054
Sc ₃ N ₂	0,0058	0,0019	0,0080	2,16	0,0039	67,57	0,008
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0084	0,0008	0,0033	7,68	0,0077	90,80	0,059
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0065	0,0012	0,0042	4,64	0,0053	81,19	0,025
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0096	0,0018	0,0053	5,45	0,0079	81,39	0,043
Sc ₄ C ₃	0,0087	0,0022	0,0080	3,26	0,0065	75,00	0,021
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0007	0,0029	7,88	0,0069	90,72	0,054
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0067	0,0012	0,0037	5,38	0,0055	81,89	0,030
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0103	0,0016	0,0044	7,04	0,0087	84,21	0,061
Sc ₄ N ₃	0,0046	0,0015	0,0062	2,23	0,0031	67,82	0,007
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0084	0,0009	0,0031	8,03	0,0075	89,23	0,060
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0053	0,0011	0,0037	4,30	0,0041	78,89	0,018
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0078	0,0014	0,0043	5,45	0,0063	81,36	0,034
ScCrC(OCN) ₂	0,0393	0,0036	0,0066	17,75	0,0357	90,84	0,634
ScCrC(OH) ₂	0,0171	0,0026	0,0072	7,13	0,0144	84,49	0,103
ScCrCF ₂	0,0101	0,0025	0,0086	3,50	0,0075	74,93	0,026
ScHfN(SCN) ₂	0,0392	0,0019	0,0035	33,21	0,0373	95,12	1,238
ScHfNO ₂	0,0060	0,0014	0,0048	3,80	0,0046	76,21	0,017
ScNbCO ₂	0,0091	0,0021	0,0069	3,94	0,0070	77,17	0,028
ScTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,94	0,0001	77,24	0,000
ScTiNO ₂	0,0102	0,0024	0,0080	3,82	0,0078	76,82	0,030
ScVCO ₂	0,0107	0,0026	0,0086	3,76	0,0082	76,22	0,031
ScYC(CN) ₂	0,0121	0,0024	0,0071	5,11	0,0097	80,19	0,050

ScYC(NCO) ₂	0,0224	0,0027	0,0060	11,20	0,0197	87,96	0,221
ScYC(NCS) ₂	0,2137	0,0047	0,0056	113,85	0,2090	97,81	23,799
ScYC(OCI) ₂	0,0248	0,0032	0,0070	10,63	0,0216	87,24	0,230
ScYC(OCN) ₂	0,0270	0,0028	0,0058	14,09	0,0242	89,65	0,341
ScYC(OH) ₂	0,0112	0,0019	0,0061	5,53	0,0093	83,05	0,052
ScYC(SCN) ₂	0,0484	0,0026	0,0048	30,00	0,0458	94,58	1,374
ScYCBBr ₂	0,0328	0,0029	0,0055	17,91	0,0300	91,31	0,536
ScYCCl ₂	0,0263	0,0034	0,0079	9,93	0,0228	86,87	0,227
ScYCF ₂	0,0095	0,0023	0,0081	3,53	0,0071	75,33	0,025
ScZrN(SCN) ₂	0,0589	0,0027	0,0048	37,07	0,0561	95,35	2,081
ScZrNO ₂	0,0090	0,0021	0,0070	3,87	0,0069	76,83	0,027
Ta ₂ C	0,0001	0,0000	0,0000	3,47	0,0000	75,20	0,000
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,07	0,0001	89,40	0,001
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	3,57	0,0000	75,81	0,000
Ta ₂ CO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	4,76	0,0000	79,50	0,000
Ta ₂ CrCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,82	0,0001	81,80	0,000
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,73	0,0001	88,04	0,001
Ta ₂ HfCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	79,74	0,000
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,04	0,0001	88,13	0,001
Ta ₂ MoCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,38	0,0001	81,02	0,000
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,54	0,0001	88,08	0,001
Ta ₂ N	0,0000	0,0000	0,0000	2,80	0,0000	71,61	0,000
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,95	0,0001	90,78	0,001
Ta ₂ NbCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,23	0,0001	80,80	0,000
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,47	0,0001	87,89	0,001
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	5,17	0,0000	81,29	0,000
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,0000	0,0000	2,08	0,0000	66,92	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,18	0,0000	77,55	0,000
Ta ₂ TiCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,57	0,0001	81,26	0,000
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,15	0,0001	88,74	0,001
Ta ₂ VCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,43	0,0001	81,09	0,000
Ta ₂ VCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,20	0,0001	87,75	0,001
Ta ₂ ZrCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,97	0,0001	80,09	0,000
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,11	0,0001	87,79	0,001
Ta ₃ C ₂	0,0001	0,0000	0,0000	5,17	0,0000	81,02	0,000
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,82	0,0000	93,77	0,000

Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,19	0,0000	87,86	0,000
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,66	0,0000	85,16	0,000
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,32	0,0001	87,15	0,001
Ta ₃ CN	0,0000	0,0000	0,0000	4,50	0,0000	78,59	0,000
Ta ₃ CNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,30	0,0001	88,12	0,001
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,42	0,0000	78,36	0,000
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	86,07	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,67	0,0000	90,57	0,000
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,98	0,0000	84,68	0,000
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,65	0,0000	88,05	0,000
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,0000	0,0000	5,28	0,0000	80,90	0,000
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	14,15	0,0000	93,66	0,001
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	7,55	0,0000	85,97	0,000
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,80	0,0000	82,88	0,000
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,62	0,0000	85,91	0,000
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,0000	0,0000	3,83	0,0000	76,99	0,000
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,89	0,0000	88,73	0,000
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,89	0,0000	80,31	0,000
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,32	0,0000	80,91	0,000
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	6,74	0,0000	83,49	0,000
TaCrN(OCN) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	16,74	0,0004	90,40	0,006
TaCrN(SCN) ₂	0,0009	0,0000	0,0001	38,32	0,0009	94,99	0,033
TaCrNBr ₂	0,0009	0,0001	0,0001	31,97	0,0009	93,54	0,028
TaCrNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	17,09	0,0004	90,48	0,008
TaCrNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,46	0,0001	75,19	0,000
TaMoN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,94	0,0003	88,93	0,004
TaMoN(NCS) ₂	0,0056	0,0001	0,0001	218,95	0,0055	98,11	1,203
TaMoN(SCN) ₂	0,0006	0,0000	0,0000	33,68	0,0005	96,20	0,018
TaMoNBr ₂	0,0007	0,0001	0,0001	22,17	0,0006	91,82	0,014
TaMoNCl ₂	0,0004	0,0000	0,0001	12,60	0,0003	88,40	0,004
TaMoNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,63	0,0001	75,73	0,000
TaWN(CN) ₂	0,0001	0,0000	0,0001	5,17	0,0001	80,36	0,001
TaWN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,96	0,0003	89,06	0,004
TaWNBr ₂	0,0007	0,0001	0,0001	24,06	0,0007	92,27	0,016
TaWNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	15,94	0,0004	90,03	0,007
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,0193	0,0034	0,0092	6,32	0,0159	82,26	0,100

Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,0339	0,0038	0,0091	11,24	0,0301	88,68	0,338
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,0840	0,0051	0,0099	25,49	0,0789	93,89	2,010
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,0198	0,0039	0,0141	4,20	0,0159	80,44	0,067
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,0442	0,0049	0,0164	8,06	0,0393	88,94	0,317
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0104	0,0007	0,0014	21,78	0,0097	93,29	0,212
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0053	0,0005	0,0013	12,37	0,0047	90,07	0,058
Ti ₂ C	0,0104	0,0034	0,0140	2,23	0,0070	67,38	0,016
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0148	0,0022	0,0067	6,65	0,0125	84,98	0,083
Ti ₂ CCl ₂	0,0059	0,0016	0,0061	2,92	0,0043	72,69	0,013
Ti ₂ CF ₂	0,0077	0,0020	0,0073	3,16	0,0057	73,42	0,018
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0151	0,0031	0,0096	4,73	0,0119	79,11	0,056
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0166	0,0035	0,0107	4,64	0,0131	79,08	0,061
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0247	0,0044	0,0124	5,95	0,0203	82,27	0,121
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,0102	0,0024	0,0079	3,89	0,0078	76,57	0,030
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,0113	0,0025	0,0079	4,31	0,0088	78,08	0,038
Ti ₂ CO _{0,67} F _{1,33}	0,0114	0,0025	0,0079	4,32	0,0089	78,06	0,038
Ti ₂ CO _{0,89} F _{1,11}	0,0121	0,0025	0,0080	4,55	0,0096	79,03	0,044
Ti ₂ CO _{1,33} F _{0,67}	0,0121	0,0026	0,0081	4,49	0,0095	78,76	0,043
Ti ₂ CO ₂	0,0108	0,0025	0,0083	3,88	0,0083	76,79	0,032
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0125	0,0027	0,0082	4,55	0,0098	78,35	0,045
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0143	0,0032	0,0103	4,18	0,0112	77,90	0,047
Ti ₂ CrCN	0,0234	0,0036	0,0091	7,67	0,0198	84,76	0,152
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0247	0,0027	0,0054	13,65	0,0220	89,07	0,300
Ti ₂ HfCN	0,0104	0,0019	0,0054	5,80	0,0086	81,99	0,050
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0136	0,0016	0,0033	12,29	0,0120	88,47	0,147
Ti ₂ MoCN	0,0162	0,0027	0,0074	6,62	0,0135	83,39	0,090
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0188	0,0021	0,0044	12,86	0,0167	88,75	0,215
Ti ₂ N	0,0075	0,0027	0,0122	1,84	0,0047	63,32	0,009
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0130	0,0021	0,0065	5,97	0,0109	83,76	0,065
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0018	0,0054	5,29	0,0077	81,16	0,041
Ti ₂ NbC ₂	0,0061	0,0017	0,0064	2,87	0,0044	72,39	0,013
Ti ₂ NbCN	0,0166	0,0028	0,0075	6,68	0,0138	83,29	0,092
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0194	0,0022	0,0045	13,07	0,0172	88,76	0,225
Ti ₂ NF ₂	0,0067	0,0019	0,0071	2,84	0,0048	72,04	0,014
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0147	0,0030	0,0091	4,83	0,0117	79,54	0,056
Ti ₂ NO ₂	0,0095	0,0023	0,0076	3,72	0,0072	75,99	0,027

Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0268	0,0045	0,0124	6,50	0,0224	83,41	0,146
Ti ₂ NS ₂	0,0060	0,0015	0,0056	3,18	0,0044	74,29	0,014
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	5,30	0,0001	81,09	0,000
Ti ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,73	0,0000	71,56	0,000
Ti ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,40	0,0002	82,93	0,001
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,66	0,0002	88,57	0,003
Ti ₂ VC ₂	0,0084	0,0021	0,0078	3,24	0,0062	74,40	0,020
Ti ₂ VCN	0,0219	0,0035	0,0092	7,14	0,0184	84,13	0,131
Ti ₂ VCNO ₂	0,0239	0,0027	0,0054	13,14	0,0212	88,72	0,278
Ti ₂ ZrCN	0,0154	0,0027	0,0076	6,10	0,0127	82,44	0,077
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0187	0,0021	0,0044	12,67	0,0166	88,75	0,210
Ti ₃ C ₂	0,0094	0,0024	0,0087	3,25	0,0070	74,75	0,023
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0369	0,0022	0,0043	25,61	0,0347	94,03	0,889
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,0449	0,0026	0,0044	30,93	0,0424	94,27	1,311
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,0140	0,0019	0,0046	9,15	0,0121	86,40	0,111
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0169	0,0011	0,0035	14,62	0,0158	93,46	0,231
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0070	0,0009	0,0027	7,80	0,0061	86,71	0,048
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0068	0,0012	0,0036	5,66	0,0057	83,05	0,032
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0014	0,0044	5,34	0,0064	82,07	0,034
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,0120	0,0018	0,0049	7,32	0,0102	85,18	0,075
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0035	0,0006	0,0022	4,68	0,0029	83,19	0,014
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0021	0,0003	0,0015	4,19	0,0017	83,94	0,007
Ti ₃ CN	0,0207	0,0035	0,0096	6,49	0,0172	83,31	0,112
Ti ₃ CNF ₂	0,0314	0,0032	0,0063	14,83	0,0281	89,68	0,417
Ti ₃ CNO ₂	0,0279	0,0028	0,0057	14,60	0,0250	89,81	0,366
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0129	0,0009	0,0032	12,24	0,0120	92,91	0,147
Ti ₃ N ₂	0,0060	0,0018	0,0072	2,50	0,0042	70,16	0,011
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0061	0,0011	0,0038	4,88	0,0050	81,75	0,024
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,0103	0,0015	0,0044	7,02	0,0088	85,45	0,062
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,0131	0,0018	0,0046	8,50	0,0113	85,97	0,096
Ti ₄ C ₃	0,0076	0,0019	0,0069	3,30	0,0057	74,43	0,019
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0012	0,0034	10,49	0,0106	90,05	0,111
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0012	0,0038	4,87	0,0049	80,35	0,024
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0092	0,0013	0,0039	7,06	0,0079	85,60	0,056
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0090	0,0015	0,0042	6,43	0,0075	83,27	0,048
Ti ₄ N ₃	0,0045	0,0014	0,0056	2,42	0,0031	69,19	0,007

Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0148	0,0016	0,0036	12,38	0,0132	89,03	0,163
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0048	0,0010	0,0034	4,28	0,0038	79,06	0,016
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0058	0,0011	0,0035	4,91	0,0047	80,70	0,023
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0068	0,0013	0,0039	5,25	0,0055	80,95	0,029
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0170	0,0013	0,0029	17,79	0,0157	92,29	0,280
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0087	0,0014	0,0036	7,15	0,0073	83,86	0,052
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0084	0,0012	0,0032	7,78	0,0071	85,05	0,055
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0059	0,0011	0,0030	5,83	0,0048	81,93	0,028
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,0123	0,0013	0,0027	13,90	0,0111	89,76	0,154
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0077	0,0008	0,0021	11,17	0,0069	89,37	0,077
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,0125	0,0010	0,0021	18,03	0,0115	92,06	0,207
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0075	0,0007	0,0017	13,10	0,0068	90,77	0,089
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0133	0,0008	0,0017	23,77	0,0125	94,02	0,297
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0068	0,0006	0,0015	13,71	0,0062	91,34	0,085
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0109	0,0008	0,0016	20,03	0,0101	92,68	0,202
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0052	0,0006	0,0015	10,46	0,0046	88,27	0,048
TiCrCO ₂	0,0100	0,0023	0,0075	4,01	0,0077	77,02	0,031
TiHfCO ₂	0,0067	0,0013	0,0039	5,20	0,0054	81,01	0,028
TiHfN(NO) ₂	0,0052	0,0013	0,0046	3,42	0,0039	74,79	0,013
TiMoCO ₂	0,0068	0,0017	0,0059	3,51	0,0052	75,37	0,018
TiNbC	0,0086	0,0031	0,0134	1,92	0,0055	64,20	0,011
TiVC	0,0122	0,0042	0,0183	2,01	0,0081	65,97	0,016
TiWCO ₂	0,0048	0,0012	0,0040	3,58	0,0036	75,48	0,013
TiZrCO ₂	0,0102	0,0022	0,0068	4,48	0,0080	78,79	0,036
V ₂ C	0,0107	0,0033	0,0125	2,58	0,0075	69,52	0,019
V ₂ C(OH) ₂	0,0152	0,0023	0,0066	6,96	0,0129	84,67	0,090
V ₂ CBr ₂	0,0038	0,0011	0,0043	2,60	0,0027	71,30	0,007
V ₂ CF(OH)	0,0105	0,0024	0,0079	3,98	0,0081	77,49	0,032
V ₂ CF ₂	0,0078	0,0020	0,0070	3,34	0,0058	74,39	0,019
V ₂ CO ₂	0,0111	0,0024	0,0076	4,42	0,0087	78,32	0,038
V ₂ CrCN	0,0230	0,0034	0,0088	7,88	0,0196	85,07	0,154
V ₂ CrCNO ₂	0,0231	0,0024	0,0048	14,41	0,0207	89,70	0,298
V ₂ HfCN	0,0104	0,0018	0,0053	5,94	0,0086	82,30	0,051
V ₂ HfCNO ₂	0,0120	0,0013	0,0030	11,89	0,0106	88,75	0,126
V ₂ MoCN	0,0162	0,0027	0,0071	6,80	0,0135	83,49	0,092
V ₂ MoCNO ₂	0,0172	0,0019	0,0040	13,03	0,0153	88,97	0,200

V ₂ N	0,0078	0,0027	0,0115	2,02	0,0051	65,33	0,010
V ₂ N(OH) ₂	0,0117	0,0022	0,0067	5,23	0,0095	81,27	0,050
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0018	0,0053	5,40	0,0078	81,24	0,042
V ₂ NbCN	0,0165	0,0027	0,0073	6,82	0,0138	83,53	0,094
V ₂ NbCNO ₂	0,0195	0,0019	0,0038	15,43	0,0176	90,31	0,271
V ₂ NF ₂	0,0066	0,0019	0,0070	2,84	0,0048	71,96	0,014
V ₂ NO ₂	0,0093	0,0022	0,0074	3,79	0,0071	76,37	0,027
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	80,10	0,000
V ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,90	0,0001	80,34	0,001
V ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,60	0,0002	83,38	0,001
V ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	12,47	0,0002	88,74	0,003
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0150	0,0026	0,0074	6,05	0,0123	82,55	0,075
V ₂ TiC ₂	0,0173	0,0031	0,0093	5,60	0,0141	81,81	0,079
V ₂ TiCN	0,0215	0,0034	0,0090	7,18	0,0181	84,13	0,130
V ₂ TiCNO ₂	0,0228	0,0024	0,0049	14,03	0,0204	89,46	0,286
V ₂ ZrCN	0,0230	0,0026	0,0088	7,88	0,0204	88,63	0,161
V ₂ ZrCNO ₂	0,0169	0,0019	0,0040	12,57	0,0150	88,89	0,189
V ₃ C ₂	0,0081	0,0021	0,0077	3,14	0,0060	74,00	0,019
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0210	0,0012	0,0033	19,40	0,0199	94,52	0,386
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0039	0,0006	0,0022	5,25	0,0033	83,39	0,017
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0118	0,0015	0,0040	8,82	0,0102	86,98	0,090
V ₃ C ₂ F ₂	0,0086	0,0012	0,0036	7,22	0,0074	85,99	0,054
V ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,0018	0,0046	8,32	0,0110	86,13	0,092
V ₃ CN	0,0203	0,0032	0,0092	6,65	0,0171	84,05	0,114
V ₃ CNO ₂	0,0272	0,0028	0,0056	14,58	0,0244	89,65	0,356
V ₃ N ₂	0,0053	0,0015	0,0059	2,73	0,0038	71,71	0,010
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0440	0,0008	0,0046	28,88	0,0432	98,25	1,249
V ₃ N ₂ F ₂	0,0069	0,0010	0,0030	6,78	0,0059	85,79	0,040
V ₃ N ₂ H ₂	0,0099	0,0014	0,0042	7,11	0,0085	85,53	0,060
V ₃ N ₂ O ₂	0,0252	0,0026	0,0051	14,77	0,0226	89,79	0,334
V ₄ C ₃	0,0080	0,0019	0,0062	3,87	0,0061	76,44	0,024
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0170	0,0012	0,0030	16,91	0,0158	92,73	0,267
V ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0012	0,0034	5,33	0,0049	81,06	0,026
V ₄ C ₃ H ₂	0,0049	0,0010	0,0032	4,56	0,0040	80,64	0,018
V ₄ C ₃ O ₂	0,0088	0,0015	0,0039	6,77	0,0073	83,38	0,050
V ₄ N ₃	0,0051	0,0015	0,0056	2,74	0,0036	71,16	0,010

V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0095	0,0012	0,0033	8,64	0,0083	87,15	0,072
V ₄ N ₃ F ₂	0,0047	0,0011	0,0035	4,01	0,0036	77,48	0,015
V ₄ N ₃ H ₂	0,0037	0,0009	0,0030	3,72	0,0029	77,06	0,011
V ₄ N ₃ O ₂	0,0064	0,0013	0,0037	5,25	0,0052	80,28	0,027
VCrN(NCS) ₂	0,7400	0,0128	0,0047	475,11	0,7272	98,27	345,486
VCrN(SCN) ₂	0,0943	0,0036	0,0052	54,23	0,0907	96,19	4,918
VCrNBr ₂	0,0710	0,0043	0,0059	36,09	0,0666	93,88	2,405
VCrNF ₂	0,0081	0,0020	0,0073	3,33	0,0061	75,04	0,020
VMoN(NCO) ₂	0,0271	0,0026	0,0052	15,74	0,0245	90,33	0,385
VMoN(NCS) ₂	0,5221	0,0091	0,0045	351,85	0,5131	98,26	180,522
VMoN(OCN) ₂	0,0309	0,0028	0,0052	17,88	0,0281	90,81	0,502
VMoN(SCN) ₂	0,0689	0,0028	0,0044	46,91	0,0661	95,90	3,100
VMoNBr ₂	0,0543	0,0035	0,0051	31,91	0,0508	93,55	1,622
VMoNCl ₂	0,0391	0,0037	0,0067	17,58	0,0354	90,52	0,623
VNbC	0,0084	0,0029	0,0129	1,95	0,0055	65,19	0,011
VNbCF ₂ -(model4)	0,0102	0,0023	0,0079	3,89	0,0079	77,19	0,031
VWN(NCO) ₂	0,0168	0,0018	0,0039	12,94	0,0150	89,01	0,194
VWN(OCN) ₂	0,0216	0,0021	0,0039	16,67	0,0195	90,28	0,325
VWNBr ₂	0,0356	0,0027	0,0041	25,93	0,0329	92,50	0,853
VWNCl ₂	0,0289	0,0027	0,0050	17,49	0,0261	90,55	0,457
VWNF ₂	0,0049	0,0013	0,0044	3,35	0,0037	74,40	0,012
W _{1.33} C	0,8719	0,0078	0,0058	447,92	0,8641	99,11	387,067
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0090	0,0014	0,0036	7,47	0,0076	84,87	0,057
W _{1.33} CO ₂	0,0072	0,0014	0,0041	5,33	0,0059	81,27	0,031
W ₂ C	0,0047	0,0011	0,0038	3,67	0,0036	76,32	0,013
W ₂ C(OH) ₂	0,0080	0,0008	0,0020	12,03	0,0072	90,46	0,087
W ₂ CCl ₂	0,0192	0,0020	0,0038	15,22	0,0173	89,73	0,263
W ₂ CF ₂	0,0034	0,0006	0,0020	5,16	0,0027	81,30	0,014
W ₂ CO ₂	0,0043	0,0008	0,0030	4,28	0,0035	81,34	0,015
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0040	0,0005	0,0012	9,68	0,0035	87,69	0,034
W ₂ HfC ₂	0,0022	0,0006	0,0023	2,85	0,0016	72,40	0,005
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0063	0,0006	0,0015	12,57	0,0056	89,69	0,071
W ₂ N	0,0031	0,0010	0,0038	2,40	0,0021	68,56	0,005
W ₂ N(OH) ₂	0,0095	0,0007	0,0018	15,75	0,0088	92,63	0,139
W ₂ NF ₂	0,0032	0,0006	0,0018	5,33	0,0026	81,70	0,014
W ₂ NO ₂	0,0044	0,0008	0,0022	5,96	0,0036	82,40	0,021

W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0055	0,0007	0,0019	8,88	0,0048	86,44	0,042
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0081	0,0009	0,0021	11,83	0,0072	89,04	0,086
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0051	0,0006	0,0016	9,80	0,0045	88,03	0,044
W ₂ ZrC ₂	0,0026	0,0007	0,0027	2,90	0,0019	72,52	0,006
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0078	0,0008	0,0018	13,03	0,0070	89,91	0,091
W ₃ C ₂	0,0023	0,0008	0,0023	2,95	0,0015	65,24	0,004
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0090	0,0006	0,0015	18,08	0,0084	93,02	0,151
W ₃ C ₂ F ₂	0,0031	0,0003	0,0009	9,75	0,0028	91,09	0,027
W ₃ C ₂ O ₂	0,0054	0,0006	0,0014	11,45	0,0048	89,37	0,055
W ₃ N ₂	0,0024	0,0008	0,0024	3,06	0,0016	67,81	0,005
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0001	0,03	0,0000	50,00	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0022	0,0002	0,0008	8,60	0,0020	91,74	0,017
W ₃ N ₂ O ₂	0,0069	0,0008	0,0018	11,80	0,0061	88,66	0,072
W ₄ C ₃	0,0040	0,0008	0,0023	5,31	0,0033	81,13	0,017
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0041	0,0004	0,0011	10,90	0,0037	90,68	0,040
W ₄ C ₃ F ₂	0,0023	0,0004	0,0013	5,47	0,0019	81,74	0,010
W ₄ C ₃ H ₂	0,0028	0,0005	0,0015	5,58	0,0023	81,70	0,013
W ₄ C ₃ O ₂	0,0041	0,0006	0,0015	8,15	0,0035	85,19	0,028
W ₄ N ₃	0,0051	0,0008	0,0021	7,26	0,0043	84,02	0,031
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0050	0,0006	0,0013	11,81	0,0044	88,81	0,052
W ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0006	0,0016	6,11	0,0027	82,17	0,017
W ₄ N ₃ H ₂	0,0022	0,0004	0,0014	4,81	0,0017	79,42	0,008
W ₄ N ₃ O ₂	0,0025	0,0005	0,0016	4,56	0,0019	78,81	0,009
WCrC	0,0048	0,0015	0,0063	2,29	0,0032	67,50	0,007
WCrCO ₂ -(model4)	0,0061	0,0014	0,0043	4,28	0,0048	77,80	0,020
Y ₂ C	0,0074	0,0024	0,0099	2,25	0,0050	67,79	0,011
Y ₂ C(CN) ₂	0,0126	0,0020	0,0057	6,71	0,0106	83,87	0,071
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0204	0,0023	0,0052	11,83	0,0181	88,88	0,214
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0478	0,0012	0,0032	44,84	0,0466	97,57	2,090
Y ₂ C(OCI) ₂	0,0270	0,0028	0,0055	14,65	0,0242	89,64	0,354
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0211	0,0024	0,0052	12,18	0,0187	88,67	0,228
Y ₂ C(OH) ₂	0,0072	0,0013	0,0050	4,34	0,0059	81,63	0,026
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0423	0,0022	0,0042	30,09	0,0401	94,87	1,206
Y ₂ CBr ₂	0,0218	0,0024	0,0050	13,08	0,0195	89,16	0,255
Y ₂ CCl ₂	0,0243	0,0029	0,0067	10,92	0,0214	88,02	0,234
Y ₂ CF ₂	0,0075	0,0017	0,0060	3,70	0,0057	76,56	0,021

Y ₂ CO ₂	0,0127	0,0024	0,0069	5,52	0,0103	81,28	0,057
Y ₂ N	0,0062	0,0021	0,0090	2,07	0,0041	66,11	0,008
Y ₂ N(OH) ₂	0,0072	0,0013	0,0047	4,55	0,0059	81,94	0,027
Y ₂ NF ₂	0,0061	0,0015	0,0054	3,39	0,0046	75,41	0,016
Y ₂ NO ₂	0,0110	0,0022	0,0068	4,81	0,0087	79,68	0,042
Y ₃ C ₂	0,0061	0,0013	0,0044	4,17	0,0048	78,47	0,020
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0001	0,0012	2,42	0,0009	90,49	0,002
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0009	0,0029	7,50	0,0062	86,86	0,047
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0082	0,0007	0,0021	11,79	0,0075	91,94	0,089
Y ₃ N ₂	0,0049	0,0011	0,0042	3,53	0,0037	76,54	0,013
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0086	0,0007	0,0024	10,83	0,0079	92,36	0,086
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0074	0,0010	0,0028	7,91	0,0064	86,62	0,051
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0072	0,0007	0,0022	9,72	0,0065	90,48	0,063
Y ₄ C ₃	0,0058	0,0013	0,0046	3,75	0,0044	76,85	0,017
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0008	0,0001	0,0011	2,10	0,0007	87,51	0,001
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0065	0,0009	0,0024	8,19	0,0056	86,60	0,046
Y ₄ C ₃ O ₂	0,0128	0,0013	0,0029	13,30	0,0114	89,47	0,152
Y ₄ N ₃	0,0042	0,0012	0,0046	2,74	0,0030	71,73	0,008
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0055	0,0007	0,0023	7,30	0,0048	87,98	0,035
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0063	0,0011	0,0032	5,82	0,0052	81,84	0,030
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0010	0,0027	6,68	0,0051	83,78	0,034
YCrC(NCO) ₂	0,0238	0,0025	0,0054	13,25	0,0213	89,51	0,283
YCrC(NCS) ₂	0,3030	0,0057	0,0053	171,18	0,2972	98,10	50,881
YCrC(OCN) ₂	0,0253	0,0025	0,0053	14,42	0,0228	90,06	0,328
YCrC(OH) ₂	0,0130	0,0019	0,0053	7,34	0,0112	85,50	0,082
YCrCBr ₂	0,0362	0,0031	0,0055	19,63	0,0331	91,46	0,650
YCrCCl ₂	0,0305	0,0036	0,0075	12,27	0,0270	88,30	0,331
YCrCF ₂	0,0093	0,0020	0,0065	4,28	0,0073	78,13	0,031
YHfN(SCN) ₂	0,0338	0,0021	0,0037	27,49	0,0317	93,86	0,871
YHfNO ₂	0,0053	0,0011	0,0036	4,38	0,0042	79,43	0,018
YMoN(NO) ₂	0,0063	0,0016	0,0055	3,43	0,0047	74,92	0,016
YNbCO ₂	0,0083	0,0018	0,0060	4,19	0,0065	77,83	0,027
YTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,22	0,0001	77,94	0,000
YTiN(NO) ₂	0,0088	0,0020	0,0064	4,10	0,0068	77,30	0,028
YTiNO ₂	0,0082	0,0018	0,0059	4,16	0,0064	78,19	0,027
YVCO ₂	0,0094	0,0021	0,0071	3,98	0,0072	77,16	0,029

YVNF ₂	0,0077	0,0017	0,0058	4,01	0,0060	77,69	0,024
YZrNO ₂	0,0074	0,0016	0,0050	4,48	0,0058	78,91	0,026
Zr ₂ C	0,0068	0,0024	0,0109	1,88	0,0044	64,32	0,008
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0081	0,0013	0,0044	5,60	0,0068	83,76	0,038
Zr ₂ CF ₂	0,0058	0,0015	0,0051	3,39	0,0044	75,00	0,015
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0070	0,0016	0,0054	3,86	0,0054	76,89	0,021
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0090	0,0023	0,0080	3,41	0,0068	74,87	0,023
Zr ₂ CO ₂	0,0087	0,0019	0,0059	4,43	0,0068	78,58	0,030
Zr ₂ CrCN	0,0106	0,0020	0,0059	5,38	0,0086	81,08	0,046
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0120	0,0015	0,0033	10,78	0,0105	87,85	0,114
Zr ₂ HfCN	0,0060	0,0013	0,0040	4,51	0,0048	78,91	0,021
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0080	0,0009	0,0023	10,55	0,0071	88,53	0,075
Zr ₂ MoCN	0,0084	0,0017	0,0050	5,01	0,0067	80,15	0,034
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0100	0,0012	0,0029	10,46	0,0088	87,94	0,092
Zr ₂ N	0,0062	0,0020	0,0083	2,25	0,0042	67,86	0,010
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0078	0,0012	0,0042	5,61	0,0066	84,25	0,037
Zr ₂ NbCN	0,0085	0,0017	0,0051	5,00	0,0068	80,13	0,034
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0102	0,0012	0,0029	10,62	0,0090	88,04	0,096
Zr ₂ NF ₂	0,0052	0,0014	0,0051	3,09	0,0038	73,77	0,012
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0081	0,0020	0,0067	3,65	0,0061	75,34	0,022
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0064	0,0015	0,0050	3,86	0,0049	76,38	0,019
Zr ₂ NO ₂	0,0072	0,0017	0,0056	3,88	0,0055	76,69	0,021
Zr ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,88	0,0001	80,08	0,001
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	10,23	0,0002	87,82	0,002
Zr ₂ TiCN	0,0103	0,0020	0,0060	5,11	0,0083	80,61	0,042
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0120	0,0014	0,0034	10,58	0,0106	88,01	0,112
Zr ₂ VCN	0,0101	0,0020	0,0060	5,05	0,0081	80,29	0,041
Zr ₂ VCNO ₂	0,0115	0,0014	0,0033	10,33	0,0101	87,78	0,105
Zr ₃ C ₂	0,0068	0,0016	0,0055	3,69	0,0052	76,29	0,019
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0125	0,0009	0,0027	14,17	0,0116	92,86	0,165
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0054	0,0009	0,0028	5,88	0,0045	83,46	0,027
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0036	0,0005	0,0021	5,21	0,0031	85,77	0,016
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0096	0,0013	0,0033	8,76	0,0083	86,87	0,073
Zr ₃ CN	0,0081	0,0016	0,0053	4,62	0,0065	79,93	0,030
Zr ₃ CNO ₂	0,0120	0,0015	0,0034	10,48	0,0105	87,61	0,110
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0134	0,0010	0,0026	15,71	0,0125	92,87	0,196

Zr ₃ N ₂	0,0047	0,0012	0,0044	3,17	0,0035	74,40	0,011
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0044	0,0007	0,0023	5,69	0,0037	84,82	0,021
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0039	0,0006	0,0021	5,54	0,0033	85,51	0,018
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0077	0,0011	0,0031	7,53	0,0066	85,47	0,050
Zr ₄ C ₃	0,0058	0,0013	0,0044	3,99	0,0045	77,68	0,018
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0004	0,0018	8,48	0,0046	91,25	0,039
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0047	0,0013	0,0023	6,10	0,0035	72,64	0,021
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0062	0,0008	0,0023	8,09	0,0054	86,51	0,043
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0076	0,0011	0,0027	8,46	0,0066	85,85	0,056
Zr ₄ N ₃	0,0038	0,0010	0,0036	3,12	0,0028	73,77	0,009
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0049	0,0004	0,0017	8,61	0,0044	90,83	0,038
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0037	0,0007	0,0021	5,12	0,0030	81,58	0,015
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0058	0,0009	0,0026	6,84	0,0049	83,95	0,033
ZrCrNO ₂	0,0079	0,0017	0,0056	4,23	0,0062	78,11	0,026
ZrHfCO ₂	0,0051	0,0011	0,0036	4,26	0,0040	78,45	0,017
ZrMoCO ₂	0,0056	0,0014	0,0052	3,24	0,0041	74,23	0,013

APPENDIX E: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of MXene Structures at PTSA Conditions (250 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working	% Regenerability	APS
	10 bar, 35°C	1 bar, 250°C	10 bar, 35°C	10 bar, 35°C	PTSA	PTSA	PTSA
(CrV) ₃ C ₂	0,1490	0,0024	0,0687	6,51	0,1466	98,40	0,954
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0749	0,0017	0,0522	4,31	0,0733	97,80	0,316
(TiV) ₃ C ₂	0,1693	0,0025	0,0750	6,77	0,1668	98,50	1,129
(TiV)C(OH) ₂	0,1016	0,0026	0,0843	3,62	0,0990	97,44	0,358
(TiV)CF ₂	0,1079	0,0025	0,0793	4,08	0,1054	97,66	0,430
(TiV)CO ₂	0,1079	0,0025	0,0793	4,08	0,1054	97,71	0,430
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,1723	0,0009	0,0172	30,05	0,1715	99,48	5,152
Cr ₂ C	0,1161	0,0033	0,1210	2,88	0,1128	97,19	0,325
Cr ₂ C(OH) ₂	0,1362	0,0023	0,0623	6,56	0,1339	98,34	0,878
Cr ₂ CB ₂	0,5036	0,0038	0,0440	34,31	0,4998	99,24	17,147
Cr ₂ CCl ₂	0,4566	0,0044	0,0700	19,56	0,4522	99,04	8,844
Cr ₂ CF ₂	0,0768	0,0021	0,0725	3,18	0,0748	97,32	0,238
Cr ₂ CFCl	0,1230	0,0024	0,0708	5,21	0,1206	98,02	0,629
Cr ₂ CH ₂	0,0623	0,0019	0,0760	2,46	0,0604	96,98	0,148
Cr ₂ CO ₂	0,1285	0,0023	0,0648	5,95	0,1261	98,17	0,750
Cr ₂ CS ₂	1,4334	0,0086	0,0372	115,67	1,4248	99,40	164,814
Cr ₂ HfCN	0,1138	0,0018	0,0468	7,29	0,1120	98,41	0,817
Cr ₂ HfCNO ₂	0,1550	0,0016	0,0293	15,90	0,1534	98,95	2,438
Cr ₂ MoCN	0,1821	0,0026	0,0632	8,64	0,1795	98,57	1,551
Cr ₂ MoCNO ₂	0,2155	0,0023	0,0382	16,93	0,2132	98,95	3,609
Cr ₂ N	0,0694	0,0023	0,0946	2,20	0,0671	96,66	0,148
Cr ₂ N(OH) ₂	0,1204	0,0021	0,0594	6,08	0,1183	98,29	0,720
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,1002	0,0018	0,0497	6,05	0,0985	98,24	0,595
Cr ₂ NbCN	0,1971	0,0026	0,0646	9,15	0,1944	98,66	1,778
Cr ₂ NbCNO ₂	0,2259	0,0023	0,0387	17,49	0,2236	98,99	3,911
Cr ₂ NF ₂	0,0617	0,0018	0,0652	2,84	0,0599	97,15	0,170
Cr ₂ NH ₂	0,0613	0,0017	0,0676	2,72	0,0596	97,16	0,162
Cr ₂ NO ₂	0,0894	0,0021	0,0717	3,74	0,0873	97,62	0,326
Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	5,26	0,0008	98,08	0,004
Cr ₂ TaC ₂	0,0007	0,0000	0,0007	2,93	0,0007	97,30	0,002

Cr ₂ TaCN	0,0022	0,0000	0,0008	8,14	0,0021	98,52	0,017
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0030	0,0000	0,0005	16,55	0,0030	98,95	0,050
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,1556	0,0025	0,0679	6,87	0,1531	98,36	1,052
Cr ₂ TiC ₂	0,0815	0,0020	0,0713	3,43	0,0794	97,52	0,272
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0591	0,0020	0,0340	5,22	0,0571	96,66	0,298
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,2770	0,0028	0,0533	15,58	0,2742	98,98	4,272
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,2459	0,0026	0,0467	15,81	0,2433	98,96	3,846
Cr ₂ TiCN	0,2619	0,0034	0,0802	9,79	0,2584	98,69	2,530
Cr ₂ TiCNO ₂	0,2886	0,0029	0,0468	18,52	0,2857	99,01	5,292
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,1555	0,0025	0,0654	7,14	0,1530	98,41	1,092
Cr ₂ VC ₂	0,0804	0,0020	0,0701	3,44	0,0784	97,50	0,270
Cr ₂ VCN	0,2756	0,0034	0,0800	10,34	0,2722	98,77	2,814
Cr ₂ VCNO ₂	0,2812	0,0028	0,0463	18,20	0,2783	98,99	5,066
Cr ₂ ZrCN	0,1955	0,0025	0,0624	9,40	0,1930	98,70	1,815
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,3038	0,0023	0,0344	26,49	0,3015	99,25	7,985
Cr ₃ C ₂	0,1099	0,0025	0,0797	4,14	0,1074	97,77	0,444
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1516	0,0014	0,0356	12,78	0,1502	99,09	1,920
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0711	0,0013	0,0386	5,52	0,0698	98,15	0,385
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0985	0,0016	0,0460	6,43	0,0969	98,34	0,623
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,5161	0,0017	0,0589	26,30	0,5144	99,67	13,527
Cr ₃ CN	0,2548	0,0033	0,0794	9,63	0,2515	98,70	2,422
Cr ₃ CNO ₂	0,3374	0,0030	0,0463	21,86	0,3345	99,12	7,311
Cr ₃ N ₂	0,0526	0,0015	0,0545	2,90	0,0511	97,20	0,148
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,1083	0,0031	0,0327	9,94	0,1053	97,17	1,047
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,1141	0,0031	0,0486	7,05	0,1111	97,31	0,782
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,1082	0,0018	0,0330	9,84	0,1064	98,30	1,047
Cr ₄ C ₃	0,0975	0,0014	0,0657	4,45	0,0961	98,55	0,428
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1083	0,0021	0,0327	9,94	0,1063	98,08	1,056
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0557	0,0013	0,0363	4,60	0,0543	97,58	0,250
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0696	0,0013	0,0391	5,34	0,0682	98,08	0,364
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0839	0,0014	0,0361	6,96	0,0825	98,32	0,574
Cr ₄ N ₃	0,0568	0,0016	0,0615	2,77	0,0552	97,18	0,153
Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0864	0,0012	0,0312	8,31	0,0852	98,61	0,708
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0445	0,0010	0,0341	3,92	0,0435	97,68	0,170
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0529	0,0011	0,0357	4,45	0,0518	97,85	0,230
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0606	0,0012	0,0346	5,25	0,0594	98,03	0,312

CrMoCF ₂	0,0765	0,0019	0,0634	3,62	0,0747	97,53	0,270
CrWCF ₂	0,0593	0,0014	0,0434	4,10	0,0579	97,70	0,238
Hf ₂ C	0,0429	0,0012	0,0457	2,82	0,0418	97,22	0,118
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0494	0,0008	0,0236	6,27	0,0486	98,46	0,305
Hf ₂ CF ₂	0,0334	0,0008	0,0285	3,52	0,0326	97,58	0,115
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0379	0,0009	0,0318	3,58	0,0370	97,55	0,132
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0482	0,0013	0,0470	3,07	0,0469	97,32	0,144
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0422	0,0011	0,0415	3,06	0,0411	97,29	0,126
Hf ₂ CO ₂	0,0520	0,0011	0,0325	4,79	0,0509	97,93	0,244
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0331	0,0008	0,0251	3,95	0,0323	97,68	0,128
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0458	0,0012	0,0412	3,34	0,0446	97,39	0,149
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0518	0,0013	0,0439	3,54	0,0505	97,54	0,179
Hf ₂ CrCN	0,0591	0,0011	0,0345	5,14	0,0580	98,06	0,298
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0662	0,0008	0,0189	10,53	0,0654	98,74	0,689
Hf ₂ MoCN	0,0697	0,0010	0,0268	7,81	0,0687	98,55	0,536
Hf ₂ MoCNO ₂	0,1071	0,0007	0,0134	23,90	0,1063	99,32	2,542
Hf ₂ N	0,0335	0,0011	0,0421	2,39	0,0325	96,86	0,078
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0517	0,0007	0,0205	7,55	0,0510	98,68	0,385
Hf ₂ NbCN	0,0490	0,0010	0,0313	4,70	0,0480	97,92	0,225
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0601	0,0007	0,0170	10,58	0,0594	98,76	0,628
Hf ₂ NF ₂	0,0278	0,0007	0,0230	3,63	0,0271	97,55	0,098
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0342	0,0009	0,0248	4,14	0,0333	97,38	0,138
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0661	0,0014	0,0454	4,37	0,0647	97,88	0,283
Hf ₂ NO ₂	0,0436	0,0010	0,0307	4,26	0,0426	97,77	0,181
Hf ₂ TaCN	0,0013	0,0000	0,0008	4,67	0,0012	97,92	0,006
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0017	0,0000	0,0005	11,07	0,0017	98,86	0,018
Hf ₂ TiCN	0,0568	0,0011	0,0350	4,88	0,0557	97,99	0,271
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0651	0,0008	0,0190	10,26	0,0643	98,73	0,659
Hf ₂ VCN	0,0557	0,0011	0,0346	4,83	0,0546	97,94	0,263
Hf ₂ VCNO ₂	0,0650	0,0008	0,0191	10,22	0,0642	98,72	0,656
Hf ₂ ZrCN	0,0463	0,0010	0,0317	4,39	0,0453	97,82	0,199
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0591	0,0007	0,0170	10,43	0,0584	98,79	0,609
Hf ₃ C ₂	0,0392	0,0009	0,0287	4,09	0,0383	97,76	0,157
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0301	0,0002	0,0109	8,30	0,0298	99,21	0,248
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0297	0,0005	0,0151	5,88	0,0292	98,19	0,172
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0002	0,0092	3,24	0,0098	98,18	0,032

Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0510	0,0007	0,0171	8,95	0,0503	98,61	0,450
Hf ₃ CN	0,0382	0,0008	0,0274	4,18	0,0374	97,79	0,156
Hf ₃ CNO ₂	0,0594	0,0008	0,0176	10,11	0,0587	98,72	0,594
Hf ₃ N ₂	0,0259	0,0006	0,0229	3,39	0,0253	97,50	0,086
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0169	0,0001	0,0081	6,27	0,0168	99,21	0,105
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0240	0,0004	0,0121	5,92	0,0236	98,49	0,140
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0149	0,0002	0,0095	4,71	0,0147	98,48	0,069
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0415	0,0006	0,0161	7,71	0,0408	98,49	0,315
Hf ₄ C ₃	0,0219	0,0005	0,0191	3,43	0,0213	97,57	0,073
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0335	0,0005	0,0135	7,43	0,0330	98,63	0,245
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0261	0,0005	0,0126	6,20	0,0257	98,26	0,159
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0116	0,0002	0,0082	4,27	0,0114	98,36	0,049
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0424	0,0006	0,0141	9,04	0,0418	98,58	0,378
Hf ₄ N ₃	0,0206	0,0005	0,0190	3,24	0,0200	97,43	0,065
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0283	0,0003	0,0094	9,04	0,0280	99,01	0,253
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0200	0,0004	0,0115	5,20	0,0196	98,07	0,102
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0112	0,0002	0,0085	3,94	0,0110	98,06	0,043
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0329	0,0005	0,0134	7,34	0,0324	98,39	0,238
HfCrNO ₂	0,0528	0,0012	0,0369	4,29	0,0516	97,79	0,221
Mn ₂ C	0,1150	0,0032	0,1194	2,89	0,1119	97,25	0,323
Mn ₂ C(OH) ₂	0,1266	0,0022	0,0598	6,35	0,1244	98,30	0,790
Mn ₂ CF ₂	0,0695	0,0018	0,0631	3,30	0,0677	97,44	0,224
Mn ₂ CO ₂	0,0984	0,0022	0,0710	4,16	0,0962	97,76	0,400
Mn ₂ N	0,0622	0,0021	0,0859	2,17	0,0601	96,63	0,130
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0966	0,0019	0,0610	4,75	0,0946	98,01	0,449
Mn ₂ NF ₂	0,0581	0,0017	0,0635	2,74	0,0564	97,12	0,155
Mn ₂ NO ₂	0,0837	0,0020	0,0654	3,84	0,0817	97,65	0,314
Mn ₃ C ₂	0,1069	0,0024	0,0769	4,17	0,1045	97,76	0,436
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1484	0,0014	0,0329	13,51	0,1470	99,08	1,986
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0674	0,0012	0,0370	5,46	0,0662	98,15	0,362
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,1028	0,0016	0,0404	7,64	0,1011	98,40	0,772
Mn ₃ N ₂	0,0765	0,0021	0,0771	2,98	0,0744	97,26	0,221
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,1203	0,0010	0,0292	12,34	0,1192	99,13	1,471
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0545	0,0011	0,0366	4,46	0,0533	97,91	0,238
Mn ₄ C ₃	0,0931	0,0020	0,0625	4,47	0,0911	97,85	0,407
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1146	0,0013	0,0285	12,08	0,1134	98,90	1,369

Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0540	0,0011	0,0312	5,19	0,0529	98,01	0,274
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0745	0,0013	0,0357	6,26	0,0731	98,20	0,458
Mn ₄ N ₃	0,0506	0,0012	0,0401	3,78	0,0494	97,60	0,187
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0975	0,0011	0,0269	10,87	0,0963	98,83	1,047
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0564	0,0011	0,0332	5,10	0,0553	98,01	0,282
Mo _{1,33} C	0,1758	0,0034	0,1158	4,55	0,1724	98,09	0,785
Mo ₂ C	0,0854	0,0022	0,0776	3,30	0,0832	97,46	0,275
Mo ₂ C(NCS) ₂	1,0585	0,0066	0,0094	338,66	1,0519	99,38	356,236
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,2755	0,0025	0,0368	22,49	0,2731	99,10	6,141
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0769	0,0015	0,0448	5,15	0,0755	98,11	0,389
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,4384	0,0023	0,0256	51,40	0,4362	99,49	22,417
Mo ₂ CBr ₂	0,3312	0,0027	0,0344	28,90	0,3285	99,19	9,496
Mo ₂ CCl ₂	0,2660	0,0028	0,0496	16,10	0,2632	98,94	4,236
Mo ₂ CF ₂	0,0540	0,0015	0,0522	3,10	0,0525	97,28	0,163
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0974	0,0022	0,0695	4,21	0,0953	97,77	0,401
Mo ₂ CO ₂	0,0791	0,0014	0,0408	5,82	0,0777	98,20	0,452
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0656	0,0015	0,0502	3,92	0,0641	97,67	0,251
Mo ₂ CrCN	0,1338	0,0021	0,0538	7,46	0,1317	98,43	0,982
Mo ₂ CrCNO ₂	0,1466	0,0017	0,0336	13,11	0,1448	98,82	1,898
Mo ₂ CS ₂	0,0461	0,0055	0,0492	2,81	0,0406	88,15	0,114
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0481	0,0006	0,0147	9,79	0,0475	98,70	0,465
Mo ₂ HfC ₂	0,0293	0,0009	0,0332	2,64	0,0284	97,08	0,075
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0757	0,0008	0,0199	11,41	0,0748	98,88	0,854
Mo ₂ HfCN	0,0697	0,0013	0,0366	5,72	0,0684	98,13	0,392
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0972	0,0012	0,0235	12,41	0,0960	98,81	1,192
Mo ₂ N	0,0557	0,0016	0,0598	2,79	0,0541	97,14	0,151
Mo ₂ N(OH) ₂	0,1427	0,0013	0,0287	14,92	0,1414	99,12	2,110
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0679	0,0013	0,0383	5,32	0,0666	98,10	0,354
Mo ₂ NbC ₂	0,0386	0,0011	0,0410	2,83	0,0375	97,22	0,106
Mo ₂ NbCN	0,0971	0,0016	0,0445	6,54	0,0954	98,30	0,624
Mo ₂ NbCNO ₂	0,1260	0,0015	0,0288	13,12	0,1245	98,83	1,633
Mo ₂ NF ₂	0,0510	0,0010	0,0300	5,09	0,0500	98,08	0,254
Mo ₂ NO ₂	0,0693	0,0013	0,0382	5,45	0,0680	98,09	0,371
Mo ₂ ScC ₂	0,0478	0,0013	0,0498	2,88	0,0465	97,27	0,134
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,1029	0,0012	0,0280	11,01	0,1017	98,83	1,120
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0007	0,0000	0,0004	4,85	0,0007	97,95	0,003

Mo ₂ TaCN	0,0016	0,0000	0,0008	6,18	0,0016	98,24	0,010
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0023	0,0000	0,0006	12,31	0,0022	98,79	0,028
Mo ₂ TaC ₂	0,0006	0,0000	0,0007	2,69	0,0006	97,16	0,002
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0989	0,0018	0,0490	6,06	0,0972	98,21	0,589
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,1266	0,0012	0,0251	15,13	0,1254	99,02	1,898
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0790	0,0012	0,0292	8,10	0,0778	98,45	0,630
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0788	0,0011	0,0256	9,24	0,0777	98,63	0,718
Mo ₂ TiC ₂	0,0480	0,0013	0,0483	2,99	0,0467	97,27	0,140
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,1578	0,0009	0,0299	15,83	0,1569	99,45	2,484
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,1823	0,0013	0,0258	21,19	0,1810	99,29	3,835
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,1513	0,0019	0,0437	10,39	0,1494	98,71	1,552
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,1027	0,0014	0,0303	10,18	0,1014	98,68	1,032
Mo ₂ TiCN	0,1266	0,0021	0,0544	6,97	0,1245	98,36	0,868
Mo ₂ TiCNO ₂	0,1453	0,0017	0,0338	12,89	0,1435	98,82	1,850
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0972	0,0017	0,0478	6,10	0,0955	98,26	0,582
Mo ₂ VC ₂	0,0474	0,0013	0,0475	2,99	0,0461	97,29	0,138
Mo ₂ VCN	0,1251	0,0020	0,0545	6,89	0,1231	98,36	0,848
Mo ₂ VCNO ₂	0,1414	0,0017	0,0338	12,55	0,1397	98,79	1,753
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0665	0,0008	0,0203	9,83	0,0656	98,72	0,645
Mo ₂ ZrC ₂	0,0381	0,0011	0,0416	2,75	0,0370	97,20	0,102
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,1032	0,0011	0,0249	12,43	0,1020	98,92	1,268
Mo ₂ ZrCN	0,0930	0,0017	0,0466	5,98	0,0913	98,21	0,546
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,1229	0,0015	0,0293	12,59	0,1214	98,81	1,528
Mo ₃ C ₂	0,0724	0,0014	0,0414	5,25	0,0710	98,04	0,373
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0093	0,0001	0,0081	3,45	0,0092	99,26	0,032
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0507	0,0006	0,0170	8,92	0,0501	98,90	0,447
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0798	0,0010	0,0264	9,07	0,0788	98,72	0,715
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,1161	0,0011	0,0228	15,28	0,1150	99,03	1,757
Mo ₃ CN	0,0966	0,0017	0,0465	6,23	0,0949	98,28	0,591
Mo ₃ N ₂	0,0433	0,0010	0,0336	3,86	0,0422	97,64	0,163
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0009	0,0000	0,0040	0,66	0,0009	98,80	0,001
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0426	0,0004	0,0149	8,60	0,0421	98,98	0,362
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0479	0,0009	0,0274	5,24	0,0470	98,07	0,246
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0796	0,0007	0,0180	13,24	0,0789	99,10	1,044
Mo ₄ C ₃	0,0716	0,0014	0,0400	5,36	0,0703	98,11	0,377
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0676	0,0007	0,0182	11,13	0,0670	99,00	0,745

Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0396	0,0008	0,0218	5,45	0,0388	98,09	0,212
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0633	0,0009	0,0227	8,37	0,0623	98,50	0,522
Mo ₄ N ₃	0,0393	0,0010	0,0326	3,61	0,0383	97,55	0,138
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0497	0,0008	0,0212	7,04	0,0489	98,48	0,345
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0331	0,0008	0,0244	4,07	0,0323	97,70	0,131
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0252	0,0005	0,0166	4,56	0,0247	97,97	0,113
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0446	0,0009	0,0271	4,93	0,0437	97,95	0,215
MoCrC	0,0705	0,0023	0,0962	2,20	0,0682	96,67	0,150
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0880	0,0019	0,0596	4,43	0,0860	97,82	0,381
MoWC	0,0382	0,0013	0,0539	2,13	0,0369	96,58	0,079
MoWC(NCO) ₂	0,1815	0,0017	0,0291	18,69	0,1797	99,04	3,360
MoWC(OCN) ₂	0,2115	0,0019	0,0284	22,30	0,2096	99,10	4,674
MoWC(SCN) ₂	0,3526	0,0019	0,0212	49,97	0,3507	99,45	17,524
MoWCCl ₂	0,2492	0,0024	0,0402	18,61	0,2468	99,03	4,592
MoWCF ₂	0,0311	0,0008	0,0836	1,12	0,0303	97,33	0,034
MoWCO ₂ -(model2)	0,0522	0,0011	0,0342	4,57	0,0510	97,84	0,233
Nb _{0,4} V _{1,6} C	1,5554	0,0076	0,1428	32,67	1,5478	99,51	50,564
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,4855	0,0049	0,1371	10,62	0,4806	98,98	5,105
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,2693	0,0042	0,1268	6,37	0,2651	98,44	1,689
Nb _{1,33} C	3,9771	0,0263	0,0881	135,40	3,9508	99,34	534,930
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,1604	0,0033	0,1174	4,10	0,1571	97,91	0,644
Nb ₂ C	0,0842	0,0023	0,0829	3,05	0,0819	97,31	0,250
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0871	0,0013	0,0409	6,39	0,0857	98,46	0,548
Nb ₂ CF ₂	0,0560	0,0014	0,0483	3,48	0,0546	97,52	0,190
Nb ₂ CO ₂	0,0808	0,0017	0,0524	4,62	0,0791	97,88	0,366
Nb ₂ CrCN	0,1372	0,0022	0,0564	7,30	0,1351	98,42	0,986
Nb ₂ CrCNO ₂	0,1420	0,0016	0,0306	13,95	0,1405	98,88	1,959
Nb ₂ HfCN	0,0723	0,0013	0,0385	5,63	0,0709	98,14	0,399
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0877	0,0010	0,0215	12,24	0,0867	98,83	1,061
Nb ₂ MoCN	0,1047	0,0018	0,0486	6,46	0,1029	98,28	0,664
Nb ₂ MoCNO ₂	0,1180	0,0013	0,0264	13,43	0,1166	98,87	1,566
Nb ₂ N	0,0643	0,0020	0,0790	2,44	0,0623	96,94	0,152
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0904	0,0016	0,0469	5,78	0,0888	98,19	0,513
Nb ₂ NF ₂	0,0521	0,0011	0,0340	4,60	0,0510	97,95	0,235
Nb ₂ NH ₂	0,0379	0,0013	0,0535	2,12	0,0366	96,70	0,078
Nb ₂ NO ₂	0,0718	0,0016	0,0511	4,21	0,0701	97,74	0,296

Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	4,96	0,0007	97,99	0,004
Nb ₂ TaCN	0,0017	0,0000	0,0008	6,27	0,0017	98,26	0,011
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0021	0,0000	0,0005	12,88	0,0021	98,84	0,027
Nb ₂ TiCN	0,1282	0,0021	0,0573	6,71	0,1261	98,36	0,846
Nb ₂ TiCNO ₂	0,1437	0,0016	0,0299	14,43	0,1422	98,92	2,052
Nb ₂ VCN	0,1253	0,0021	0,0569	6,60	0,1232	98,32	0,814
Nb ₂ VCNO ₂	0,1348	0,0016	0,0309	13,10	0,1333	98,84	1,746
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0516	0,0009	0,0275	5,63	0,0507	98,17	0,285
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0687	0,0013	0,0411	5,01	0,0673	98,04	0,337
Nb ₂ ZrCN	0,0964	0,0018	0,0494	5,85	0,0947	98,18	0,554
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,1081	0,0013	0,0271	11,96	0,1069	98,82	1,278
Nb ₃ C ₂	0,0808	0,0017	0,0521	4,65	0,0791	97,94	0,368
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0638	0,0005	0,0186	10,32	0,0634	99,26	0,654
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0549	0,0009	0,0253	6,51	0,0541	98,42	0,352
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0380	0,0006	0,0207	5,50	0,0374	98,51	0,206
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0931	0,0012	0,0296	9,42	0,0918	98,66	0,865
Nb ₃ CN	0,0998	0,0017	0,0504	5,94	0,0981	98,26	0,582
Nb ₃ CNO ₂	0,1158	0,0013	0,0268	12,96	0,1145	98,85	1,484
Nb ₃ N ₂	0,0461	0,0011	0,0366	3,79	0,0450	97,62	0,171
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0023	0,0000	0,0056	1,23	0,0023	99,00	0,003
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0440	0,0005	0,0162	8,16	0,0435	98,92	0,355
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0456	0,0007	0,0218	6,28	0,0449	98,48	0,282
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0764	0,0010	0,0259	8,86	0,0753	98,65	0,668
Nb ₄ C ₃	0,0608	0,0013	0,0388	4,70	0,0595	97,92	0,279
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0536	0,0004	0,0138	11,65	0,0532	99,27	0,620
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0424	0,0006	0,0182	6,98	0,0417	98,47	0,291
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0308	0,0006	0,0180	5,13	0,0302	98,20	0,155
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0696	0,0010	0,0236	8,86	0,0686	98,58	0,608
Nb ₄ N ₃	0,0423	0,0011	0,0374	3,39	0,0412	97,45	0,140
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0542	0,0007	0,0191	8,53	0,0536	98,79	0,457
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0423	0,0007	0,0182	6,98	0,0416	98,30	0,290
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0540	0,0009	0,0245	6,61	0,0531	98,30	0,351
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0054	0,0001	0,0060	2,69	0,0054	98,99	0,014
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0330	0,0005	0,0143	6,91	0,0325	98,51	0,225
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0552	0,0007	0,0169	9,79	0,0544	98,67	0,533
NbCrN(NCO) ₂	0,4079	0,0029	0,0342	35,82	0,4050	99,28	14,508

NbCrN(NCS) ₂	1,1905	0,0098	0,0049	731,49	1,1807	99,18	863,647
NbCrN(OCN) ₂	0,3227	0,0029	0,0426	22,75	0,3198	99,09	7,274
NbCrN(SCN) ₂	0,5748	0,0029	0,0272	63,39	0,5719	99,50	36,257
NbCrNBr ₂	0,4821	0,0035	0,0361	40,01	0,4785	99,26	19,146
NbCrNCl ₂	0,3843	0,0037	0,0591	19,51	0,3806	99,03	7,423
NbCrNF ₂	0,0806	0,0019	0,0640	3,78	0,0787	97,62	0,298
NbMoN(NCO) ₂	0,2178	0,0022	0,0389	16,80	0,2156	98,99	3,622
NbMoN(NCS) ₂	1,0601	0,0071	0,0096	331,95	1,0530	99,33	349,546
NbMoN(OCN) ₂	0,0003	0,0000	0,0040	0,21	0,0003	96,47	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,4858	0,0024	0,0249	58,44	0,4834	99,50	28,246
NbMoNBr ₂	0,3821	0,0030	0,0354	32,39	0,3792	99,23	12,283
NbMoNCl ₂	0,2853	0,0030	0,0535	16,01	0,2823	98,94	4,519
NbMoN(CN) ₂	0,1219	0,0020	0,0490	7,46	0,1200	98,39	0,895
NbMoNF ₂	0,0724	0,0017	0,0565	3,85	0,0707	97,63	0,272
NbWN(NCO) ₂	0,1724	0,0018	0,0298	17,36	0,1706	98,98	2,962
NbWN(NCS) ₂	0,8346	0,0059	0,0074	338,61	0,8288	99,30	280,626
NbWN(OCN) ₂	0,1918	0,0019	0,0295	19,51	0,1900	99,03	3,705
NbWN(SCN) ₂	0,3719	0,0021	0,0213	52,50	0,3699	99,44	19,417
NbWNBr ₂	0,3302	0,0025	0,0273	36,35	0,3278	99,25	11,913
NbWNCl ₂	0,2346	0,0023	0,0398	17,66	0,2322	99,01	4,102
NbWN(CN) ₂	0,0721	0,0014	0,0417	5,18	0,0707	98,02	0,366
NbWNF ₂	0,0543	0,0013	0,0452	3,61	0,0530	97,55	0,191
Sc ₂ C	0,1021	0,0036	0,1600	1,91	0,0985	96,44	0,189
Sc ₂ C(CN) ₂	0,1534	0,0033	0,1041	4,42	0,1501	97,84	0,663
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0138	0,0001	0,0147	2,81	0,0136	98,93	0,038
Sc ₂ C(NCS) ₂	1,4445	0,0060	0,0139	310,79	1,4385	99,59	447,078
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,5017	0,0045	0,0637	23,61	0,4972	99,10	11,741
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0177	0,0002	0,0181	2,94	0,0175	98,79	0,052
Sc ₂ C(OH) ₂	0,1220	0,0021	0,0700	5,23	0,1199	98,27	0,627
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,5146	0,0034	0,0479	32,22	0,5111	99,33	16,467
Sc ₂ CBr ₂	0,3594	0,0034	0,0558	19,34	0,3560	99,05	6,885
Sc ₂ CCl ₂	0,4111	0,0046	0,0824	14,97	0,4065	98,89	6,087
Sc ₂ CF ₂	0,0860	0,0023	0,0831	3,10	0,0837	97,35	0,260
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,1253	0,0029	0,0900	4,18	0,1225	97,71	0,511
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,1415	0,0035	0,1165	3,64	0,1380	97,53	0,503
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,1796	0,0038	0,1211	4,45	0,1757	97,86	0,782

Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,1446	0,0035	0,1140	3,81	0,1411	97,60	0,537
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,1174	0,0028	0,0907	3,88	0,1147	97,65	0,445
Sc ₂ N	0,0762	0,0029	0,1370	1,67	0,0732	96,16	0,122
Sc ₂ N(OH) ₂	0,1161	0,0021	0,0689	5,06	0,1140	98,16	0,577
Sc ₂ NF ₂	0,0726	0,0020	0,0757	2,88	0,0706	97,23	0,203
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,1500	0,0034	0,1121	4,01	0,1466	97,75	0,589
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,1160	0,0027	0,0922	3,78	0,1133	97,64	0,428
Sc ₂ NO ₂	0,1108	0,0027	0,0908	3,66	0,1081	97,59	0,396
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,1149	0,0024	0,0707	4,87	0,1125	97,94	0,548
Sc ₃ C ₂	0,0866	0,0025	0,0866	3,00	0,0841	97,08	0,252
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0878	0,0009	0,0372	7,08	0,0869	99,02	0,616
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0564	0,0009	0,0256	6,62	0,0556	98,49	0,368
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0747	0,0013	0,0423	5,31	0,0734	98,22	0,389
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,1294	0,0024	0,0712	5,45	0,1269	98,12	0,692
Sc ₃ N ₂	0,0569	0,0019	0,0786	2,17	0,0551	96,72	0,120
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0812	0,0008	0,0316	7,70	0,0804	99,04	0,619
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0637	0,0012	0,0414	4,62	0,0625	98,07	0,288
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0956	0,0018	0,0516	5,56	0,0938	98,12	0,521
Sc ₄ C ₃	0,0867	0,0022	0,0787	3,30	0,0846	97,50	0,279
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0727	0,0007	0,0276	7,91	0,0720	99,03	0,570
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0654	0,0012	0,0362	5,42	0,0642	98,15	0,348
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,1024	0,0016	0,0417	7,36	0,1008	98,41	0,742
Sc ₄ N ₃	0,0460	0,0015	0,0615	2,24	0,0445	96,77	0,100
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0800	0,0009	0,0297	8,08	0,0791	98,87	0,639
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0515	0,0011	0,0357	4,33	0,0504	97,84	0,218
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0768	0,0014	0,0418	5,52	0,0754	98,12	0,416
ScCrC(OCN) ₂	0,3945	0,0036	0,0548	21,60	0,3909	99,09	8,443
ScCrC(OH) ₂	0,1711	0,0026	0,0678	7,56	0,1684	98,45	1,274
ScCrCF ₂	0,1015	0,0025	0,0846	3,60	0,0989	97,51	0,356
ScHfN(SCN) ₂	0,3439	0,0019	0,0261	39,50	0,3420	99,44	13,506
ScHfNO ₂	0,0602	0,0014	0,0469	3,85	0,0587	97,62	0,226
ScNbCO ₂	0,0909	0,0021	0,0679	4,02	0,0889	97,71	0,357
ScTaCO ₂	0,0010	0,0000	0,0007	4,07	0,0010	97,73	0,004
ScTiNO ₂	0,1026	0,0024	0,0786	3,92	0,1003	97,70	0,393
ScVCO ₂	0,1076	0,0026	0,0830	3,89	0,1050	97,63	0,408
ScYC(CN) ₂	0,1214	0,0024	0,0687	5,30	0,1190	98,02	0,631

ScYC(NCO) ₂	0,2275	0,0027	0,0553	12,34	0,2248	98,81	2,773
ScYC(NCS) ₂	1,1219	0,0047	0,0221	152,61	1,1172	99,58	170,498
ScYC(OCI) ₂	0,2591	0,0032	0,0634	12,27	0,2559	98,78	3,139
ScYC(OCN) ₂	0,2719	0,0028	0,0511	15,98	0,2691	98,97	4,300
ScYC(OH) ₂	0,1110	0,0019	0,0580	5,74	0,1091	98,28	0,625
ScYC(SCN) ₂	0,4405	0,0026	0,0379	34,90	0,4379	99,40	15,284
ScYCBBr ₂	0,3286	0,0029	0,0463	21,27	0,3258	99,13	6,930
ScYCCl ₂	0,2710	0,0034	0,0729	11,15	0,2676	98,73	2,985
ScYCF ₂	0,0956	0,0023	0,0790	3,63	0,0932	97,55	0,338
ScZrN(SCN) ₂	0,5038	0,0027	0,0338	44,74	0,5011	99,46	22,420
ScZrNO ₂	0,0909	0,0021	0,0686	3,98	0,0889	97,70	0,354
Ta ₂ C	0,0005	0,0000	0,0005	3,57	0,0005	97,55	0,002
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0002	10,57	0,0008	98,90	0,008
Ta ₂ CF ₂	0,0004	0,0000	0,0003	3,63	0,0004	97,57	0,001
Ta ₂ CO ₂	0,0006	0,0000	0,0003	4,99	0,0006	97,97	0,003
Ta ₂ CrCN	0,0009	0,0000	0,0004	6,31	0,0009	98,26	0,005
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0010	0,0000	0,0002	11,64	0,0009	98,79	0,011
Ta ₂ HfCN	0,0007	0,0000	0,0004	5,11	0,0007	98,03	0,004
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	10,64	0,0008	98,79	0,009
Ta ₂ MoCN	0,0008	0,0000	0,0004	5,82	0,0008	98,18	0,005
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	11,43	0,0009	98,80	0,010
Ta ₂ N	0,0004	0,0000	0,0004	2,87	0,0004	97,18	0,001
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0002	12,45	0,0008	99,03	0,010
Ta ₂ NbCN	0,0008	0,0000	0,0004	5,65	0,0008	98,16	0,004
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	11,18	0,0009	98,77	0,010
Ta ₂ NF ₂	0,0004	0,0000	0,0002	5,24	0,0004	98,09	0,002
Ta ₂ NH ₂	0,0002	0,0000	0,0003	2,07	0,0002	96,62	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0005	0,0000	0,0003	4,33	0,0005	97,78	0,002
Ta ₂ TiCN	0,0008	0,0000	0,0004	5,96	0,0008	98,20	0,005
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	12,04	0,0009	98,86	0,011
Ta ₂ VCN	0,0008	0,0000	0,0004	5,83	0,0008	98,18	0,005
Ta ₂ VCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	11,02	0,0009	98,76	0,010
Ta ₂ ZrCN	0,0007	0,0000	0,0004	5,24	0,0007	98,07	0,004
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	10,82	0,0009	98,76	0,009
Ta ₃ C ₂	0,0005	0,0000	0,0003	5,53	0,0005	98,16	0,003
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	8,72	0,0003	99,35	0,002

Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0004	0,0000	0,0001	8,34	0,0004	98,75	0,003
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	4,62	0,0002	98,47	0,001
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0006	0,0000	0,0002	9,96	0,0006	98,71	0,006
Ta ₃ CN	0,0004	0,0000	0,0003	4,70	0,0004	97,94	0,002
Ta ₃ CNO ₂	0,0006	0,0000	0,0002	11,08	0,0006	98,79	0,007
Ta ₃ N ₂	0,0003	0,0000	0,0002	4,58	0,0003	97,86	0,001
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	98,57	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0003	0,0000	0,0001	8,70	0,0003	99,01	0,002
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	4,93	0,0002	98,42	0,001
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0005	0,0000	0,0002	10,18	0,0005	98,78	0,005
Ta ₄ C ₃	0,0004	0,0000	0,0002	5,67	0,0004	98,15	0,002
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	14,56	0,0004	99,33	0,006
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0003	0,0000	0,0001	7,86	0,0003	98,57	0,002
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	4,75	0,0002	98,23	0,001
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0005	0,0000	0,0002	9,27	0,0005	98,60	0,004
Ta ₄ N ₃	0,0003	0,0000	0,0002	4,00	0,0003	97,73	0,001
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	9,17	0,0004	98,83	0,003
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0002	0,0000	0,0001	4,97	0,0002	98,00	0,001
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,30	0,0001	98,04	0,001
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0004	0,0000	0,0002	7,17	0,0004	98,36	0,003
TaCrN(OCN) ₂	0,0039	0,0000	0,0006	19,90	0,0039	99,04	0,077
TaCrN(SCN) ₂	0,0098	0,0000	0,0008	36,00	0,0098	99,53	0,353
TaCrNBr ₂	0,0089	0,0001	0,0006	45,64	0,0088	99,32	0,402
TaCrNCl ₂	0,0052	0,0000	0,0007	21,52	0,0051	99,09	0,110
TaCrNF ₂	0,0009	0,0000	0,0007	3,57	0,0009	97,55	0,003
TaMoN(NCO) ₂	0,0031	0,0000	0,0006	14,65	0,0031	98,90	0,045
TaMoN(NCS) ₂	0,0181	0,0001	0,0002	270,40	0,0180	99,42	4,868
TaMoN(SCN) ₂	0,0050	0,0000	0,0004	38,27	0,0050	99,58	0,190
TaMoNBr ₂	0,0068	0,0001	0,0007	28,98	0,0067	99,19	0,195
TaMoNCl ₂	0,0040	0,0000	0,0008	14,94	0,0039	98,89	0,059
TaMoNF ₂	0,0010	0,0000	0,0008	3,74	0,0010	97,59	0,004
TaWN(CN) ₂	0,0014	0,0000	0,0008	5,40	0,0013	98,06	0,007
TaWN(NCO) ₂	0,0031	0,0000	0,0006	14,72	0,0031	98,91	0,045
TaWNBr ₂	0,0075	0,0001	0,0007	32,73	0,0074	99,24	0,243
TaWNCl ₂	0,0049	0,0000	0,0007	19,65	0,0048	99,05	0,095
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,1989	0,0034	0,0896	6,66	0,1955	98,28	1,301

Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,3594	0,0038	0,0864	12,48	0,3555	98,93	4,438
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,8122	0,0051	0,0890	27,38	0,8070	99,37	22,094
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,1942	0,0039	0,1397	4,17	0,1904	98,00	0,794
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,3832	0,0049	0,1600	7,19	0,3783	98,73	2,718
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,1234	0,0007	0,0117	31,66	0,1227	99,43	3,885
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0493	0,0005	0,0112	13,18	0,0488	98,94	0,643
Ti ₂ C	0,1025	0,0034	0,1374	2,24	0,0991	96,69	0,222
Ti ₂ C(OH) ₂	0,1441	0,0022	0,0632	6,84	0,1419	98,46	0,970
Ti ₂ CCl ₂	0,0585	0,0016	0,0601	2,92	0,0569	97,23	0,166
Ti ₂ CF ₂	0,0758	0,0020	0,0716	3,18	0,0738	97,30	0,234
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,1544	0,0031	0,0938	4,94	0,1512	97,96	0,746
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,1696	0,0035	0,1046	4,87	0,1662	97,95	0,809
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,2577	0,0044	0,1202	6,43	0,2533	98,30	1,629
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,1024	0,0024	0,0765	4,02	0,1000	97,66	0,402
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,1139	0,0025	0,0773	4,42	0,1114	97,83	0,493
Ti ₂ CO _{0,67} F _{1,33}	0,1153	0,0025	0,0777	4,45	0,1127	97,83	0,502
Ti ₂ CO _{0,89} F _{1,11}	0,1247	0,0025	0,0784	4,77	0,1222	97,96	0,583
Ti ₂ CO _{1,33} F _{0,67}	0,1234	0,0026	0,0794	4,66	0,1208	97,91	0,563
Ti ₂ CO ₂	0,1080	0,0025	0,0812	3,99	0,1055	97,68	0,421
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,1264	0,0027	0,0807	4,70	0,1237	97,86	0,581
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,1458	0,0032	0,1005	4,35	0,1427	97,83	0,621
Ti ₂ CrCN	0,2528	0,0036	0,0864	8,78	0,2492	98,59	2,189
Ti ₂ CrCNO ₂	0,2563	0,0027	0,0476	16,14	0,2536	98,95	4,092
Ti ₂ HfCN	0,1093	0,0019	0,0520	6,31	0,1075	98,28	0,678
Ti ₂ HfCNO ₂	0,1374	0,0016	0,0297	13,90	0,1359	98,86	1,888
Ti ₂ MoCN	0,1725	0,0027	0,0704	7,35	0,1698	98,43	1,248
Ti ₂ MoCNO ₂	0,1936	0,0021	0,0392	14,83	0,1915	98,91	2,839
Ti ₂ N	0,0741	0,0027	0,1206	1,84	0,0713	96,31	0,131
Ti ₂ N(OH) ₂	0,1275	0,0021	0,0622	6,15	0,1254	98,34	0,771
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0993	0,0018	0,0524	5,68	0,0975	98,20	0,554
Ti ₂ NbC ₂	0,0605	0,0017	0,0624	2,91	0,0588	97,22	0,171
Ti ₂ NbCN	0,1761	0,0028	0,0715	7,39	0,1734	98,43	1,282
Ti ₂ NbCNO ₂	0,1981	0,0022	0,0394	15,07	0,1959	98,90	2,951
Ti ₂ NF ₂	0,0667	0,0019	0,0702	2,85	0,0648	97,18	0,185
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,1515	0,0030	0,0887	5,12	0,1485	98,02	0,760
Ti ₂ NO ₂	0,0930	0,0023	0,0742	3,76	0,0907	97,56	0,341

Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,2808	0,0045	0,1185	7,11	0,2763	98,41	1,965
Ti ₂ NS ₂	0,0589	0,0015	0,0555	3,18	0,0574	97,39	0,183
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0004	5,68	0,0008	98,17	0,005
Ti ₂ TaC ₂	0,0007	0,0000	0,0007	2,77	0,0007	97,15	0,002
Ti ₂ TaCN	0,0020	0,0000	0,0009	7,09	0,0020	98,40	0,014
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0026	0,0000	0,0005	14,52	0,0026	98,89	0,037
Ti ₂ VC ₂	0,0838	0,0021	0,0768	3,27	0,0817	97,44	0,267
Ti ₂ VCN	0,2345	0,0035	0,0873	8,06	0,2311	98,52	1,863
Ti ₂ VCNO ₂	0,2449	0,0027	0,0482	15,25	0,2422	98,90	3,693
Ti ₂ ZrCN	0,1607	0,0027	0,0727	6,63	0,1580	98,32	1,048
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,1897	0,0021	0,0398	14,30	0,1876	98,89	2,683
Ti ₃ C ₂	0,0945	0,0024	0,0851	3,33	0,0922	97,48	0,307
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,3254	0,0022	0,0361	27,06	0,3232	99,32	8,746
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,3913	0,0026	0,0347	33,79	0,3887	99,34	13,136
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,1535	0,0019	0,0341	13,50	0,1516	98,76	2,047
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1606	0,0011	0,0318	15,13	0,1595	99,31	2,413
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0689	0,0009	0,0257	8,03	0,0679	98,64	0,546
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0672	0,0012	0,0347	5,80	0,0660	98,28	0,383
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0766	0,0014	0,0422	5,45	0,0752	98,17	0,410
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,1193	0,0018	0,0464	7,71	0,1175	98,51	0,906
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0335	0,0006	0,0215	4,67	0,0329	98,25	0,154
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0200	0,0003	0,0144	4,17	0,0196	98,34	0,082
Ti ₃ CN	0,2207	0,0035	0,0919	7,21	0,2173	98,44	1,566
Ti ₃ CNF ₂	0,3427	0,0032	0,0542	18,98	0,3395	99,05	6,442
Ti ₃ CNO ₂	0,2925	0,0028	0,0496	17,68	0,2897	99,03	5,122
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,1231	0,0009	0,0295	12,51	0,1221	99,26	1,528
Ti ₃ N ₂	0,0595	0,0018	0,0717	2,49	0,0577	97,00	0,144
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0598	0,0011	0,0361	4,97	0,0587	98,13	0,292
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,1014	0,0015	0,0423	7,19	0,0999	98,52	0,718
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,1325	0,0018	0,0430	9,24	0,1307	98,61	1,208
Ti ₄ C ₃	0,0767	0,0019	0,0679	3,39	0,0747	97,47	0,253
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1139	0,0012	0,0313	10,92	0,1127	98,97	1,231
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0605	0,0012	0,0365	4,97	0,0593	98,01	0,295
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0899	0,0013	0,0372	7,26	0,0885	98,52	0,642
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0894	0,0015	0,0397	6,77	0,0879	98,32	0,595
Ti ₄ N ₃	0,0449	0,0014	0,0551	2,44	0,0435	96,93	0,106

Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,1472	0,0016	0,0318	13,91	0,1456	98,90	2,025
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0476	0,0010	0,0329	4,34	0,0466	97,86	0,202
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0569	0,0011	0,0342	4,99	0,0558	98,03	0,279
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0675	0,0013	0,0239	8,46	0,0662	98,09	0,560
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,1578	0,0013	0,0216	21,96	0,1565	99,17	3,436
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0881	0,0014	0,0343	7,71	0,0867	98,41	0,668
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0835	0,0012	0,0300	8,36	0,0823	98,51	0,688
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0588	0,0011	0,0290	6,09	0,0578	98,20	0,352
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,1202	0,0013	0,0230	15,71	0,1189	98,95	1,869
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0746	0,0008	0,0189	11,83	0,0738	98,90	0,873
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,1159	0,0010	0,0172	20,21	0,1149	99,14	2,323
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0702	0,0007	0,0152	13,87	0,0695	99,02	0,964
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,1195	0,0008	0,0133	26,90	0,1187	99,33	3,193
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0684	0,0006	0,0149	13,80	0,0678	99,14	0,936
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0863	0,0008	0,0111	23,32	0,0855	99,08	1,994
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0452	0,0006	0,0129	10,51	0,0446	98,64	0,469
TiCrCO ₂	0,1003	0,0023	0,0727	4,14	0,0980	97,71	0,406
TiHfCO ₂	0,0654	0,0013	0,0373	5,26	0,0641	98,06	0,337
TiHfN(NO) ₂	0,0514	0,0013	0,0443	3,48	0,0501	97,46	0,174
TiMoCO ₂	0,0685	0,0017	0,0574	3,58	0,0668	97,54	0,239
TiNbC	0,0848	0,0031	0,1324	1,92	0,0817	96,38	0,157
TiVC	0,1206	0,0042	0,1807	2,00	0,1165	96,55	0,233
TiWCO ₂	0,0481	0,0012	0,0396	3,65	0,0469	97,54	0,171
TiZrCO ₂	0,1026	0,0022	0,0668	4,61	0,1004	97,90	0,463
V ₂ C	0,1085	0,0033	0,1243	2,62	0,1052	96,98	0,275
V ₂ C(OH) ₂	0,1492	0,0023	0,0619	7,23	0,1469	98,44	1,063
V ₂ CBr ₂	0,0365	0,0011	0,0423	2,58	0,0354	97,04	0,091
V ₂ CF(OH)	0,1059	0,0024	0,0763	4,16	0,1036	97,77	0,431
V ₂ CF ₂	0,0773	0,0020	0,0686	3,38	0,0754	97,43	0,255
V ₂ CO ₂	0,1124	0,0024	0,0728	4,63	0,1100	97,85	0,510
V ₂ CrCN	0,2506	0,0034	0,0835	9,01	0,2471	98,63	2,226
V ₂ CrCNO ₂	0,2358	0,0024	0,0418	16,91	0,2335	98,99	3,947
V ₂ HfCN	0,1090	0,0018	0,0508	6,44	0,1072	98,31	0,691
V ₂ HfCNO ₂	0,1191	0,0013	0,0270	13,22	0,1178	98,87	1,557
V ₂ MoCN	0,1716	0,0027	0,0684	7,53	0,1690	98,44	1,272
V ₂ MoCNO ₂	0,1739	0,0019	0,0356	14,67	0,1720	98,91	2,523

V ₂ N	0,0772	0,0027	0,1145	2,02	0,0745	96,51	0,151
V ₂ N(OH) ₂	0,1149	0,0022	0,0646	5,34	0,1127	98,10	0,602
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0994	0,0018	0,0513	5,81	0,0976	98,20	0,567
V ₂ NbCN	0,1765	0,0027	0,0692	7,65	0,1738	98,46	1,330
V ₂ NbCNO ₂	0,1924	0,0019	0,0327	17,64	0,1905	99,02	3,360
V ₂ NF ₂	0,0654	0,0019	0,0689	2,84	0,0635	97,15	0,181
V ₂ NO ₂	0,0934	0,0022	0,0720	3,89	0,0912	97,64	0,355
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	5,12	0,0008	98,07	0,004
V ₂ TaC ₂	0,0015	0,0000	0,0009	5,14	0,0015	98,08	0,007
V ₂ TaCN	0,0021	0,0000	0,0009	7,31	0,0021	98,43	0,015
V ₂ TaCNO ₂	0,0023	0,0000	0,0005	13,91	0,0023	98,88	0,032
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,1555	0,0026	0,0707	6,60	0,1529	98,32	1,010
V ₂ TiC ₂	0,1796	0,0031	0,0893	6,03	0,1765	98,25	1,065
V ₂ TiCN	0,2324	0,0034	0,0858	8,13	0,2290	98,53	1,860
V ₂ TiCNO ₂	0,2313	0,0024	0,0429	16,18	0,2289	98,96	3,702
V ₂ ZrCN	0,2506	0,0026	0,0835	9,01	0,2479	98,96	2,233
V ₂ ZrCNO ₂	0,1687	0,0019	0,0360	14,05	0,1668	98,89	2,344
V ₃ C ₂	0,0812	0,0021	0,0764	3,19	0,0792	97,42	0,252
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1963	0,0012	0,0285	20,69	0,1952	99,41	4,037
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0380	0,0006	0,0217	5,25	0,0374	98,29	0,196
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,1166	0,0015	0,0372	9,40	0,1150	98,69	1,082
V ₃ C ₂ F ₂	0,0842	0,0012	0,0341	7,40	0,0830	98,57	0,614
V ₃ C ₂ O ₂	0,1267	0,0018	0,0429	8,85	0,1249	98,60	1,106
V ₃ CN	0,2163	0,0032	0,0870	7,46	0,2130	98,50	1,588
V ₃ CNO ₂	0,2871	0,0028	0,0482	17,87	0,2843	99,02	5,081
V ₃ N ₂	0,0533	0,0015	0,0574	2,78	0,0518	97,17	0,144
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,3951	0,0008	0,0333	35,62	0,3944	99,80	14,047
V ₃ N ₂ F ₂	0,0668	0,0010	0,0290	6,91	0,0658	98,53	0,455
V ₃ N ₂ H ₂	0,0967	0,0014	0,0401	7,24	0,0953	98,51	0,690
V ₃ N ₂ O ₂	0,2623	0,0026	0,0443	17,76	0,2597	99,02	4,613
V ₄ C ₃	0,0824	0,0019	0,0614	4,02	0,0805	97,71	0,324
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1606	0,0012	0,0262	18,37	0,1594	99,23	2,927
V ₄ C ₃ F ₂	0,0607	0,0012	0,0330	5,52	0,0595	98,10	0,328
V ₄ C ₃ H ₂	0,0482	0,0010	0,0315	4,60	0,0473	98,02	0,217
V ₄ C ₃ O ₂	0,0888	0,0015	0,0370	7,20	0,0873	98,35	0,629
V ₄ N ₃	0,0514	0,0015	0,0552	2,79	0,0499	97,13	0,140

V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0938	0,0012	0,0309	9,10	0,0926	98,69	0,842
V ₄ N ₃ F ₂	0,0463	0,0011	0,0343	4,04	0,0452	97,71	0,183
V ₄ N ₃ H ₂	0,0366	0,0009	0,0296	3,70	0,0357	97,65	0,132
V ₄ N ₃ O ₂	0,0643	0,0013	0,0355	5,43	0,0630	98,03	0,342
VCrN(NCS) ₂	1,4550	0,0128	0,0097	448,52	1,4422	99,12	646,844
VCrN(SCN) ₂	0,7234	0,0036	0,0303	71,57	0,7198	99,50	51,521
VCrNBr ₂	0,6707	0,0043	0,0356	56,46	0,6664	99,35	37,622
VCrNF ₂	0,0802	0,0020	0,0722	3,33	0,0782	97,47	0,261
VMoN(NCO) ₂	0,2729	0,0026	0,0440	18,63	0,2703	99,04	5,034
VMoN(NCS) ₂	1,2236	0,0091	0,0098	373,40	1,2146	99,26	453,524
VMoN(OCN) ₂	0,3086	0,0028	0,0428	21,63	0,3057	99,08	6,614
VMoN(SCN) ₂	0,5581	0,0028	0,0280	59,89	0,5553	99,49	33,258
VMoNBr ₂	0,5157	0,0035	0,0336	46,04	0,5122	99,32	23,584
VMoNCl ₂	0,4125	0,0037	0,0553	22,39	0,4088	99,10	9,152
VNbC	0,0834	0,0029	0,1292	1,94	0,0805	96,49	0,156
VNbCF ₂ -(model4)	0,1036	0,0023	0,0772	4,03	0,1012	97,75	0,408
VWN(NCO) ₂	0,1689	0,0018	0,0344	14,71	0,1670	98,91	2,456
VWN(OCN) ₂	0,2204	0,0021	0,0324	20,39	0,2183	99,05	4,451
VWNBr ₂	0,3594	0,0027	0,0294	36,67	0,3567	99,26	13,080
VWNCI ₂	0,3028	0,0027	0,0405	22,41	0,3001	99,10	6,724
VWNF ₂	0,0493	0,0013	0,0434	3,41	0,0480	97,44	0,164
W _{1.33} C	1,8066	0,0078	0,0484	112,01	1,7988	99,57	201,474
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0901	0,0014	0,0346	7,81	0,0887	98,49	0,693
W _{1.33} CO ₂	0,0735	0,0014	0,0392	5,63	0,0722	98,16	0,407
W ₂ C	0,0475	0,0011	0,0373	3,82	0,0464	97,67	0,177
W ₂ C(OH) ₂	0,0764	0,0008	0,0180	12,73	0,0756	99,01	0,963
W ₂ CCl ₂	0,2087	0,0020	0,0322	19,45	0,2067	99,05	4,020
W ₂ CF ₂	0,0333	0,0006	0,0190	5,26	0,0327	98,11	0,172
W ₂ CO ₂	0,0431	0,0008	0,0297	4,36	0,0423	98,14	0,184
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0393	0,0005	0,0115	10,27	0,0388	98,75	0,398
W ₂ HfC ₂	0,0218	0,0006	0,0228	2,87	0,0212	97,22	0,061
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0615	0,0006	0,0137	13,46	0,0608	98,95	0,819
W ₂ N	0,0306	0,0010	0,0380	2,42	0,0297	96,84	0,072
W ₂ N(OH) ₂	0,0897	0,0007	0,0158	17,00	0,0890	99,22	1,514
W ₂ NF ₂	0,0309	0,0006	0,0170	5,45	0,0303	98,13	0,165
W ₂ NO ₂	0,0436	0,0008	0,0211	6,18	0,0428	98,24	0,264

W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0552	0,0007	0,0172	9,62	0,0544	98,64	0,524
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0812	0,0009	0,0185	13,16	0,0803	98,90	1,057
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0503	0,0006	0,0144	10,46	0,0496	98,78	0,519
W ₂ ZrC ₂	0,0265	0,0007	0,0268	2,97	0,0258	97,26	0,077
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0749	0,0008	0,0159	14,11	0,0741	98,95	1,045
W ₃ C ₂	0,0225	0,0008	0,0224	3,00	0,0217	96,51	0,065
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0840	0,0006	0,0127	19,80	0,0833	99,25	1,650
W ₃ C ₂ F ₂	0,0294	0,0003	0,0090	9,84	0,0292	99,07	0,287
W ₃ C ₂ O ₂	0,0526	0,0006	0,0130	12,13	0,0520	98,91	0,631
W ₃ N ₂	0,0242	0,0008	0,0234	3,10	0,0234	96,78	0,073
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0008	0,03	0,0000	95,10	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0207	0,0002	0,0072	8,62	0,0206	99,13	0,177
W ₃ N ₂ O ₂	0,0699	0,0008	0,0157	13,37	0,0691	98,88	0,924
W ₄ C ₃	0,0416	0,0008	0,0219	5,70	0,0408	98,18	0,233
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0386	0,0004	0,0103	11,30	0,0382	99,02	0,432
W ₄ C ₃ F ₂	0,0230	0,0004	0,0123	5,60	0,0225	98,15	0,126
W ₄ C ₃ H ₂	0,0279	0,0005	0,0142	5,90	0,0274	98,19	0,162
W ₄ C ₃ O ₂	0,0418	0,0006	0,0140	8,92	0,0411	98,55	0,367
W ₄ N ₃	0,0539	0,0008	0,0198	8,17	0,0531	98,50	0,433
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0495	0,0006	0,0114	13,04	0,0489	98,88	0,638
W ₄ N ₃ F ₂	0,0344	0,0006	0,0158	6,54	0,0338	98,27	0,221
W ₄ N ₃ H ₂	0,0223	0,0004	0,0131	5,12	0,0218	98,00	0,112
W ₄ N ₃ O ₂	0,0252	0,0005	0,0159	4,75	0,0247	97,93	0,117
WCrC	0,0475	0,0015	0,0621	2,29	0,0459	96,74	0,105
WCrCO ₂ -(model4)	0,0618	0,0014	0,0418	4,43	0,0604	97,80	0,268
Y ₂ C	0,0742	0,0024	0,0985	2,26	0,0718	96,78	0,162
Y ₂ C(CN) ₂	0,1265	0,0020	0,0536	7,07	0,1244	98,39	0,880
Y ₂ C(NCO) ₂	0,2011	0,0023	0,0473	12,76	0,1988	98,87	2,536
Y ₂ C(NCS) ₂	0,4157	0,0012	0,0229	54,41	0,4145	99,72	22,551
Y ₂ C(OCi) ₂	0,2742	0,0028	0,0474	17,37	0,2714	98,98	4,715
Y ₂ C(OCN) ₂	0,2126	0,0024	0,0472	13,51	0,2102	98,87	2,840
Y ₂ C(OH) ₂	0,0706	0,0013	0,0481	4,40	0,0693	98,12	0,305
Y ₂ C(SCN) ₂	0,3909	0,0022	0,0336	34,94	0,3888	99,45	13,585
Y ₂ CBr ₂	0,2191	0,0024	0,0448	14,66	0,2167	98,92	3,177
Y ₂ CCl ₂	0,2466	0,0029	0,0610	12,14	0,2437	98,82	2,957
Y ₂ CF ₂	0,0741	0,0017	0,0594	3,74	0,0723	97,64	0,271

Y ₂ CO ₂	0,1302	0,0024	0,0675	5,78	0,1278	98,18	0,739
Y ₂ N	0,0609	0,0021	0,0886	2,06	0,0588	96,56	0,121
Y ₂ N(OH) ₂	0,0698	0,0013	0,0458	4,57	0,0685	98,14	0,313
Y ₂ NF ₂	0,0608	0,0015	0,0534	3,42	0,0593	97,52	0,203
Y ₂ NO ₂	0,1117	0,0022	0,0666	5,03	0,1095	98,01	0,551
Y ₃ C ₂	0,0602	0,0013	0,0428	4,22	0,0589	97,82	0,248
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0096	0,0001	0,0123	2,33	0,0095	99,02	0,022
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0698	0,0009	0,0275	7,62	0,0688	98,65	0,525
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0783	0,0007	0,0199	11,78	0,0777	99,16	0,915
Y ₃ N ₂	0,0483	0,0011	0,0405	3,58	0,0472	97,62	0,169
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0814	0,0007	0,0221	11,06	0,0807	99,20	0,893
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0732	0,0010	0,0267	8,22	0,0722	98,64	0,594
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0690	0,0007	0,0210	9,84	0,0683	99,01	0,672
Y ₄ C ₃	0,0584	0,0013	0,0455	3,85	0,0570	97,71	0,219
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0001	0,0109	2,09	0,0075	98,72	0,016
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0632	0,0009	0,0225	8,45	0,0624	98,63	0,527
Y ₄ C ₃ O ₂	0,1274	0,0013	0,0268	14,26	0,1260	98,94	1,797
Y ₄ N ₃	0,0423	0,0012	0,0455	2,79	0,0411	97,16	0,114
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0529	0,0007	0,0215	7,39	0,0522	98,75	0,386
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0635	0,0011	0,0314	6,06	0,0624	98,20	0,378
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0605	0,0010	0,0263	6,90	0,0596	98,37	0,411
YCrC(NCO) ₂	0,2384	0,0025	0,0478	14,95	0,2359	98,95	3,528
YCrC(NCS) ₂	1,1853	0,0057	0,0160	221,79	1,1796	99,52	261,626
YCrC(OCN) ₂	0,2509	0,0025	0,0460	16,36	0,2484	99,00	4,065
YCrC(OH) ₂	0,1283	0,0019	0,0506	7,61	0,1264	98,53	0,962
YCrCBr ₂	0,3692	0,0031	0,0441	25,13	0,3661	99,16	9,198
YCrCCl ₂	0,3214	0,0036	0,0667	14,46	0,3179	98,89	4,595
YCrCF ₂	0,0952	0,0020	0,0639	4,47	0,0931	97,85	0,416
YHfN(SCN) ₂	0,3150	0,0021	0,0283	33,42	0,3129	99,34	10,458
YHfNO ₂	0,0523	0,0011	0,0350	4,48	0,0512	97,93	0,229
YMoN(NO) ₂	0,0630	0,0016	0,0540	3,50	0,0614	97,49	0,215
YNbCO ₂	0,0843	0,0018	0,0585	4,32	0,0824	97,81	0,356
YTaCO ₂	0,0011	0,0000	0,0007	4,34	0,0010	97,80	0,005
YTiN(NO) ₂	0,0881	0,0020	0,0627	4,21	0,0861	97,74	0,363
YTiNO ₂	0,0823	0,0018	0,0577	4,28	0,0805	97,83	0,344
YVCO ₂	0,0938	0,0021	0,0688	4,09	0,0916	97,72	0,375

YVNF ₂	0,0763	0,0017	0,0562	4,08	0,0746	97,75	0,304
YZrNO ₂	0,0742	0,0016	0,0479	4,64	0,0726	97,89	0,337
Zr ₂ C	0,0681	0,0024	0,1077	1,90	0,0657	96,42	0,125
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0794	0,0013	0,0419	5,68	0,0781	98,33	0,444
Zr ₂ CF ₂	0,0579	0,0015	0,0499	3,48	0,0565	97,49	0,197
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0698	0,0016	0,0531	3,95	0,0682	97,69	0,269
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0918	0,0023	0,0790	3,49	0,0895	97,53	0,312
Zr ₂ CO ₂	0,0882	0,0019	0,0578	4,58	0,0864	97,89	0,396
Zr ₂ CrCN	0,1104	0,0020	0,0573	5,79	0,1084	98,18	0,627
Zr ₂ CrCNO ₂	0,1197	0,0015	0,0307	11,69	0,1183	98,78	1,382
Zr ₂ HfCN	0,0622	0,0013	0,0392	4,76	0,0609	97,95	0,290
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0792	0,0009	0,0211	11,28	0,0783	98,84	0,883
Zr ₂ MoCN	0,0867	0,0017	0,0490	5,30	0,0850	98,08	0,451
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0989	0,0012	0,0265	11,21	0,0977	98,78	1,095
Zr ₂ N	0,0618	0,0020	0,0819	2,26	0,0598	96,76	0,135
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0759	0,0012	0,0402	5,66	0,0747	98,38	0,422
Zr ₂ NbCN	0,0870	0,0017	0,0494	5,28	0,0853	98,07	0,450
Zr ₂ NbCNO ₂	0,1021	0,0012	0,0267	11,48	0,1009	98,80	1,159
Zr ₂ NF ₂	0,0513	0,0014	0,0496	3,10	0,0499	97,34	0,155
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0814	0,0020	0,0652	3,74	0,0794	97,54	0,297
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0642	0,0015	0,0487	3,95	0,0627	97,63	0,248
Zr ₂ NO ₂	0,0725	0,0017	0,0540	4,03	0,0709	97,69	0,285
Zr ₂ TaCN	0,0014	0,0000	0,0008	5,16	0,0014	98,07	0,007
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0018	0,0000	0,0005	11,01	0,0018	98,77	0,020
Zr ₂ TiCN	0,1065	0,0020	0,0586	5,45	0,1045	98,12	0,570
Zr ₂ TiCNO ₂	0,1179	0,0014	0,0310	11,39	0,1165	98,78	1,327
Zr ₂ VCN	0,1038	0,0020	0,0580	5,37	0,1018	98,08	0,547
Zr ₂ VCNO ₂	0,1143	0,0014	0,0309	11,09	0,1128	98,77	1,251
Zr ₃ C ₂	0,0689	0,0016	0,0540	3,82	0,0673	97,66	0,257
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1177	0,0009	0,0237	14,91	0,1168	99,24	1,742
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0530	0,0009	0,0268	5,94	0,0521	98,31	0,310
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0347	0,0005	0,0200	5,20	0,0342	98,53	0,178
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0955	0,0013	0,0310	9,23	0,0943	98,68	0,870
Zr ₃ CN	0,0831	0,0016	0,0514	4,84	0,0814	98,03	0,395
Zr ₃ CNO ₂	0,1208	0,0015	0,0315	11,51	0,1194	98,77	1,373
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,1271	0,0010	0,0226	16,85	0,1261	99,25	2,126

Zr ₃ N ₂	0,0469	0,0012	0,0437	3,22	0,0457	97,44	0,147
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0424	0,0007	0,0220	5,77	0,0417	98,43	0,240
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0375	0,0006	0,0203	5,55	0,0369	98,50	0,205
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0761	0,0011	0,0292	7,81	0,0749	98,52	0,586
Zr ₄ C ₃	0,0591	0,0013	0,0428	4,15	0,0578	97,80	0,240
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0485	0,0004	0,0171	8,52	0,0480	99,09	0,409
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0466	0,0013	0,0225	6,21	0,0453	97,21	0,281
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0607	0,0008	0,0216	8,43	0,0598	98,62	0,504
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0764	0,0011	0,0255	8,98	0,0754	98,58	0,677
Zr ₄ N ₃	0,0378	0,0010	0,0358	3,16	0,0368	97,37	0,116
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0469	0,0004	0,0161	8,72	0,0464	99,04	0,405
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0362	0,0007	0,0207	5,26	0,0355	98,13	0,187
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0582	0,0009	0,0243	7,19	0,0573	98,39	0,412
ZrCrNO ₂	0,0802	0,0017	0,0544	4,42	0,0784	97,83	0,346
ZrHfCO ₂	0,0503	0,0011	0,0349	4,32	0,0492	97,82	0,212
ZrMoCO ₂	0,0560	0,0014	0,0509	3,30	0,0545	97,43	0,180

APPENDIX F: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of Mxene Structures at VTSA Conditions (250 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working	% Regenerebility	APS
	1 bar, 35°C	0.1 bar, 250°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	VTSA	VTSA	VTSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0146	0,0002	0,0071	6,18	0,0143	98,34	0,089
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0075	0,0002	0,0054	4,17	0,0073	97,78	0,031
(TiV) ₃ C ₂	0,0168	0,0003	0,0076	6,61	0,0165	98,46	0,109
(TiV)C(OH) ₂	0,0099	0,0003	0,0087	3,42	0,0096	97,38	0,033
(TiV)CF ₂	0,0108	0,0003	0,0081	4,01	0,0106	97,68	0,042
(TiV)CO ₂	0,0108	0,0002	0,0081	4,01	0,0106	97,75	0,042
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0194	0,0001	0,0021	27,39	0,0193	99,53	0,528
Cr ₂ C	0,0116	0,0003	0,0123	2,82	0,0112	97,27	0,032
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0138	0,0002	0,0066	6,27	0,0136	98,37	0,085
Cr ₂ CBBr ₂	0,0502	0,0004	0,0060	25,03	0,0499	99,24	1,248
Cr ₂ CCl ₂	0,0432	0,0005	0,0083	15,68	0,0427	98,96	0,670
Cr ₂ CF ₂	0,0077	0,0002	0,0074	3,11	0,0075	97,36	0,023
Cr ₂ CFCl	0,0122	0,0002	0,0073	5,02	0,0120	97,97	0,060
Cr ₂ CH ₂	0,0064	0,0002	0,0077	2,51	0,0062	97,06	0,016
Cr ₂ CO ₂	0,0126	0,0002	0,0067	5,67	0,0124	98,15	0,070
Cr ₂ CS ₂	0,1866	0,0009	0,0091	61,48	0,1857	99,54	11,419
Cr ₂ HfCN	0,0107	0,0002	0,0049	6,63	0,0106	98,34	0,070
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0151	0,0002	0,0033	13,64	0,0149	98,93	0,204
Cr ₂ MoCN	0,0168	0,0003	0,0066	7,60	0,0166	98,43	0,126
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0207	0,0002	0,0044	14,17	0,0205	98,90	0,290
Cr ₂ N	0,0070	0,0002	0,0097	2,17	0,0068	96,79	0,015
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0122	0,0002	0,0062	5,90	0,0120	98,31	0,071
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0096	0,0002	0,0051	5,62	0,0094	98,13	0,053
Cr ₂ NbCN	0,0179	0,0003	0,0068	7,93	0,0177	98,47	0,140
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0217	0,0002	0,0045	14,61	0,0215	98,91	0,314
Cr ₂ NF ₂	0,0062	0,0002	0,0066	2,84	0,0061	97,31	0,017
Cr ₂ NH ₂	0,0063	0,0002	0,0069	2,72	0,0061	97,24	0,017
Cr ₂ NO ₂	0,0089	0,0002	0,0073	3,64	0,0087	97,71	0,032
Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,93	0,0001	98,09	0,000
Cr ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,88	0,0001	97,08	0,000

Cr ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	7,18	0,0002	98,44	0,001
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	14,02	0,0003	98,89	0,004
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0148	0,0002	0,0071	6,24	0,0145	98,31	0,091
Cr ₂ TiC ₂	0,0082	0,0002	0,0073	3,35	0,0080	97,57	0,027
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0303	0,0002	0,0042	21,80	0,0301	99,33	0,656
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0252	0,0003	0,0060	12,69	0,0249	98,86	0,317
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0237	0,0003	0,0053	13,34	0,0234	98,88	0,312
Cr ₂ TiCN	0,0237	0,0003	0,0084	8,43	0,0233	98,58	0,197
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0275	0,0003	0,0054	15,30	0,0272	98,95	0,416
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0148	0,0003	0,0069	6,47	0,0145	98,28	0,094
Cr ₂ VC ₂	0,0079	0,0002	0,0071	3,36	0,0077	97,43	0,026
Cr ₂ VCN	0,0247	0,0003	0,0085	8,76	0,0243	98,61	0,213
Cr ₂ VCNO ₂	0,0268	0,0003	0,0054	14,93	0,0265	98,96	0,396
Cr ₂ ZrCN	0,0156	0,0003	0,0068	6,92	0,0154	98,33	0,106
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0295	0,0002	0,0043	20,38	0,0293	99,19	0,597
Cr ₃ C ₂	0,0108	0,0002	0,0082	3,96	0,0106	97,83	0,042
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0158	0,0001	0,0039	12,24	0,0157	99,15	0,192
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0001	0,0041	5,31	0,0071	98,23	0,037
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0002	0,0048	6,16	0,0098	98,37	0,060
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0602	0,0002	0,0047	38,47	0,0600	99,72	2,309
Cr ₃ CN	0,0232	0,0003	0,0084	8,26	0,0229	98,62	0,189
Cr ₃ CNO ₂	0,0311	0,0003	0,0055	16,87	0,0308	99,05	0,519
Cr ₃ N ₂	0,0053	0,0001	0,0055	2,86	0,0051	97,24	0,015
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0109	0,0003	0,0035	9,34	0,0106	97,22	0,099
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0112	0,0003	0,0051	6,63	0,0109	97,30	0,073
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0110	0,0002	0,0035	9,30	0,0108	98,32	0,101
Cr ₄ C ₃	0,0095	0,0001	0,0067	4,27	0,0094	98,47	0,040
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0109	0,0002	0,0035	9,34	0,0107	98,10	0,100
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0056	0,0001	0,0037	4,49	0,0054	97,56	0,024
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0070	0,0001	0,0041	5,15	0,0068	98,13	0,035
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0083	0,0001	0,0038	6,58	0,0081	98,27	0,054
Cr ₄ N ₃	0,0057	0,0002	0,0062	2,73	0,0055	97,17	0,015
Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0088	0,0001	0,0033	7,97	0,0087	98,63	0,069
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0045	0,0001	0,0035	3,83	0,0044	97,75	0,017
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0053	0,0001	0,0037	4,31	0,0051	97,83	0,022
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0001	0,0036	5,10	0,0059	98,04	0,030

CrMoCF ₂	0,0076	0,0002	0,0065	3,50	0,0074	97,64	0,026
CrWCF ₂	0,0058	0,0001	0,0044	3,95	0,0057	97,67	0,022
Hf ₂ C	0,0043	0,0001	0,0047	2,78	0,0042	97,11	0,012
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0051	0,0001	0,0025	6,15	0,0050	98,49	0,031
Hf ₂ CF ₂	0,0034	0,0001	0,0029	3,48	0,0033	97,62	0,012
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0038	0,0001	0,0033	3,51	0,0037	97,58	0,013
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0048	0,0001	0,0048	3,00	0,0047	97,32	0,014
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0042	0,0001	0,0042	3,00	0,0041	97,35	0,012
Hf ₂ CO ₂	0,0051	0,0001	0,0033	4,65	0,0050	97,90	0,023
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0034	0,0001	0,0026	3,90	0,0033	97,72	0,013
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0045	0,0001	0,0042	3,27	0,0044	97,50	0,014
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0051	0,0001	0,0045	3,43	0,0050	97,55	0,017
Hf ₂ CrCN	0,0057	0,0001	0,0035	4,87	0,0056	98,02	0,027
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0067	0,0001	0,0020	9,94	0,0066	98,69	0,066
Hf ₂ MoCN	0,0065	0,0001	0,0028	6,98	0,0064	98,39	0,045
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0114	0,0001	0,0016	20,85	0,0113	99,38	0,236
Hf ₂ N	0,0033	0,0001	0,0043	2,35	0,0032	96,66	0,008
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0053	0,0001	0,0022	7,32	0,0052	98,65	0,038
Hf ₂ NbCN	0,0048	0,0001	0,0032	4,48	0,0047	97,82	0,021
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0061	0,0001	0,0018	9,99	0,0061	98,83	0,060
Hf ₂ NF ₂	0,0028	0,0001	0,0024	3,60	0,0028	97,61	0,010
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0034	0,0001	0,0025	4,05	0,0033	97,40	0,014
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0065	0,0001	0,0047	4,15	0,0063	97,77	0,026
Hf ₂ NO ₂	0,0044	0,0001	0,0032	4,16	0,0043	97,67	0,018
Hf ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,43	0,0001	97,87	0,001
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0000	10,54	0,0002	98,86	0,002
Hf ₂ TiCN	0,0056	0,0001	0,0035	4,71	0,0055	97,98	0,026
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0066	0,0001	0,0020	9,77	0,0065	98,77	0,064
Hf ₂ VCN	0,0054	0,0001	0,0036	4,59	0,0053	97,82	0,024
Hf ₂ VCNO ₂	0,0066	0,0001	0,0021	9,65	0,0065	98,76	0,063
Hf ₂ ZrCN	0,0046	0,0001	0,0032	4,23	0,0045	97,76	0,019
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0061	0,0001	0,0018	9,99	0,0060	98,85	0,060
Hf ₃ C ₂	0,0038	0,0001	0,0029	3,97	0,0038	97,68	0,015
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0031	0,0000	0,0011	8,25	0,0031	99,24	0,025
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0030	0,0001	0,0016	5,77	0,0030	98,15	0,017
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,0000	0,0009	3,34	0,0010	98,37	0,003

Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0052	0,0001	0,0018	8,55	0,0051	98,59	0,044
Hf ₃ CN	0,0038	0,0001	0,0028	4,03	0,0037	97,75	0,015
Hf ₃ CNO ₂	0,0059	0,0001	0,0019	9,47	0,0059	98,68	0,056
Hf ₃ N ₂	0,0026	0,0001	0,0023	3,33	0,0025	97,44	0,008
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0018	0,0000	0,0008	6,35	0,0018	99,25	0,011
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0025	0,0000	0,0013	5,88	0,0024	98,62	0,014
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0015	0,0000	0,0010	4,68	0,0015	98,65	0,007
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0042	0,0001	0,0017	7,41	0,0042	98,51	0,031
Hf ₄ C ₃	0,0022	0,0001	0,0020	3,37	0,0021	97,61	0,007
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0034	0,0000	0,0014	7,17	0,0034	98,66	0,024
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0027	0,0000	0,0013	6,03	0,0026	98,28	0,016
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0012	0,0000	0,0008	4,37	0,0012	98,46	0,005
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0043	0,0001	0,0015	8,49	0,0042	98,57	0,036
Hf ₄ N ₃	0,0021	0,0001	0,0019	3,18	0,0020	97,44	0,006
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0030	0,0000	0,0010	8,99	0,0030	99,10	0,027
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0020	0,0000	0,0012	5,14	0,0020	98,14	0,010
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0012	0,0000	0,0009	3,97	0,0011	98,14	0,004
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0033	0,0001	0,0014	7,11	0,0032	98,38	0,023
HfCrNO ₂	0,0053	0,0001	0,0038	4,15	0,0052	97,80	0,022
Mn ₂ C	0,0115	0,0003	0,0120	2,88	0,0112	97,17	0,032
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0128	0,0002	0,0063	6,09	0,0126	98,25	0,077
Mn ₂ CF ₂	0,0070	0,0002	0,0064	3,27	0,0068	97,44	0,022
Mn ₂ CO ₂	0,0098	0,0002	0,0073	4,02	0,0096	97,78	0,039
Mn ₂ N	0,0063	0,0002	0,0087	2,17	0,0061	96,69	0,013
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0099	0,0002	0,0063	4,69	0,0097	97,98	0,045
Mn ₂ NF ₂	0,0059	0,0002	0,0064	2,74	0,0057	97,35	0,016
Mn ₂ NO ₂	0,0084	0,0002	0,0067	3,79	0,0082	97,55	0,031
Mn ₃ C ₂	0,0106	0,0002	0,0078	4,06	0,0103	97,73	0,042
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0156	0,0001	0,0036	13,00	0,0155	99,11	0,201
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0069	0,0001	0,0038	5,39	0,0068	98,13	0,036
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0102	0,0002	0,0043	7,19	0,0101	98,45	0,072
Mn ₃ N ₂	0,0075	0,0002	0,0078	2,90	0,0073	97,30	0,021
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0127	0,0001	0,0032	11,92	0,0126	99,13	0,150
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0056	0,0001	0,0038	4,36	0,0054	97,93	0,024
Mn ₄ C ₃	0,0092	0,0002	0,0064	4,30	0,0090	97,76	0,039
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0001	0,0031	11,30	0,0117	98,95	0,132

Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0055	0,0001	0,0033	5,02	0,0054	98,05	0,027
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0073	0,0001	0,0037	5,92	0,0072	98,13	0,043
Mn ₄ N ₃	0,0050	0,0001	0,0041	3,68	0,0049	97,50	0,018
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0100	0,0001	0,0029	10,34	0,0099	98,93	0,102
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0056	0,0001	0,0034	4,91	0,0055	98,04	0,027
Mo _{1,33} C	0,0176	0,0003	0,0117	4,50	0,0173	98,16	0,078
Mo ₂ C	0,0084	0,0002	0,0079	3,22	0,0082	97,33	0,026
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,3961	0,0007	0,0040	297,99	0,3955	99,83	117,846
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0276	0,0002	0,0045	18,50	0,0274	99,12	0,507
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0078	0,0001	0,0046	5,07	0,0077	98,12	0,039
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0525	0,0002	0,0038	41,55	0,0523	99,56	2,171
Mo ₂ CBr ₂	0,0341	0,0003	0,0045	22,67	0,0338	99,21	0,767
Mo ₂ CCl ₂	0,0259	0,0003	0,0057	13,56	0,0256	98,91	0,347
Mo ₂ CF ₂	0,0054	0,0001	0,0054	3,03	0,0053	97,31	0,016
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0096	0,0002	0,0071	4,08	0,0094	97,80	0,038
Mo ₂ CO ₂	0,0079	0,0001	0,0042	5,61	0,0078	98,16	0,044
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0066	0,0001	0,0051	3,88	0,0064	97,75	0,025
Mo ₂ CrCN	0,0125	0,0002	0,0056	6,71	0,0123	98,35	0,083
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0144	0,0002	0,0037	11,53	0,0142	98,74	0,163
Mo ₂ CS ₂	0,0046	0,0005	0,0050	2,77	0,0041	88,24	0,011
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0048	0,0001	0,0016	9,22	0,0048	98,73	0,044
Mo ₂ HfC ₂	0,0029	0,0001	0,0033	2,65	0,0029	97,13	0,008
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0022	10,79	0,0077	98,90	0,083
Mo ₂ HfCN	0,0068	0,0001	0,0038	5,38	0,0066	98,05	0,036
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0096	0,0001	0,0026	11,13	0,0095	98,79	0,106
Mo ₂ N	0,0055	0,0002	0,0060	2,73	0,0053	97,12	0,015
Mo ₂ N(OH) ₂	0,0148	0,0001	0,0032	13,70	0,0147	99,17	0,202
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0066	0,0001	0,0039	5,03	0,0065	98,02	0,033
Mo ₂ NbC ₂	0,0039	0,0001	0,0042	2,78	0,0038	97,28	0,010
Mo ₂ NbCN	0,0093	0,0002	0,0046	6,06	0,0091	98,25	0,055
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0123	0,0001	0,0032	11,62	0,0122	98,79	0,142
Mo ₂ NF ₂	0,0052	0,0001	0,0031	5,01	0,0051	98,04	0,026
Mo ₂ NO ₂	0,0070	0,0001	0,0040	5,26	0,0068	98,06	0,036
Mo ₂ ScC ₂	0,0048	0,0001	0,0050	2,84	0,0046	97,14	0,013
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0106	0,0001	0,0031	10,41	0,0105	98,89	0,109
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,60	0,0001	97,95	0,000

Mo ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,71	0,0002	98,18	0,001
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,05	0,0002	98,77	0,002
Mo ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,69	0,0001	97,13	0,000
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0051	5,60	0,0093	98,15	0,052
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0130	0,0001	0,0028	13,75	0,0129	99,02	0,177
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0078	0,0001	0,0031	7,56	0,0077	98,42	0,058
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0079	0,0001	0,0027	8,73	0,0078	98,59	0,068
Mo ₂ TiC ₂	0,0048	0,0001	0,0049	2,93	0,0046	97,24	0,014
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0179	0,0001	0,0033	16,23	0,0179	99,53	0,290
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0195	0,0001	0,0031	19,09	0,0193	99,34	0,369
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0142	0,0002	0,0047	9,16	0,0140	98,61	0,128
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,0103	0,0001	0,0033	9,47	0,0102	98,67	0,096
Mo ₂ TiCN	0,0119	0,0002	0,0057	6,30	0,0117	98,29	0,074
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0002	0,0037	11,45	0,0141	98,78	0,162
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0093	0,0002	0,0050	5,61	0,0091	98,16	0,051
Mo ₂ VC ₂	0,0048	0,0001	0,0048	2,96	0,0046	97,31	0,014
Mo ₂ VCN	0,0118	0,0002	0,0056	6,29	0,0116	98,27	0,073
Mo ₂ VCNO ₂	0,0139	0,0002	0,0037	11,17	0,0137	98,82	0,153
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0068	0,0001	0,0022	9,35	0,0067	98,80	0,063
Mo ₂ ZrC ₂	0,0038	0,0001	0,0042	2,69	0,0037	97,05	0,010
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0106	0,0001	0,0027	11,57	0,0105	98,98	0,121
Mo ₂ ZrCN	0,0089	0,0002	0,0049	5,53	0,0088	98,16	0,049
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0122	0,0001	0,0032	11,40	0,0120	98,79	0,137
Mo ₃ C ₂	0,0071	0,0001	0,0042	5,02	0,0069	97,98	0,035
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0000	0,0008	3,51	0,0009	99,27	0,003
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0053	0,0001	0,0018	8,79	0,0052	98,93	0,046
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0082	0,0001	0,0028	8,78	0,0080	98,72	0,071
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0119	0,0001	0,0025	13,96	0,0118	99,09	0,164
Mo ₃ CN	0,0092	0,0002	0,0048	5,75	0,0091	98,25	0,052
Mo ₃ N ₂	0,0043	0,0001	0,0034	3,80	0,0042	97,70	0,016
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0004	0,69	0,0001	99,07	0,000
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0045	0,0000	0,0016	8,56	0,0044	99,06	0,038
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0048	0,0001	0,0028	5,15	0,0047	98,17	0,024
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0083	0,0001	0,0020	12,48	0,0082	99,11	0,102
Mo ₄ C ₃	0,0069	0,0001	0,0041	5,06	0,0068	98,11	0,034
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0071	0,0001	0,0020	10,69	0,0070	99,03	0,075

Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0040	0,0001	0,0023	5,32	0,0039	98,09	0,021
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0063	0,0001	0,0024	7,89	0,0062	98,54	0,049
Mo ₄ N ₃	0,0039	0,0001	0,0034	3,48	0,0038	97,52	0,013
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0001	0,0022	6,82	0,0050	98,47	0,034
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0001	0,0025	4,03	0,0033	97,69	0,013
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0026	0,0001	0,0017	4,54	0,0025	98,03	0,012
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0044	0,0001	0,0028	4,77	0,0043	98,01	0,021
MoCrC	0,0071	0,0002	0,0097	2,19	0,0069	96,58	0,015
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0087	0,0002	0,0061	4,27	0,0085	97,89	0,036
MoWC	0,0039	0,0001	0,0054	2,15	0,0037	96,58	0,008
MoWC(NCO) ₂	0,0182	0,0002	0,0034	15,88	0,0180	99,03	0,286
MoWC(OCN) ₂	0,0212	0,0002	0,0035	18,29	0,0210	99,11	0,383
MoWC(SCN) ₂	0,0416	0,0002	0,0032	39,33	0,0414	99,54	1,629
MoWCCl ₂	0,0231	0,0002	0,0046	14,99	0,0229	98,94	0,343
MoWCF ₂	0,0032	0,0001	0,0085	1,12	0,0031	97,36	0,003
MoWCO ₂ -(model2)	0,0052	0,0001	0,0035	4,39	0,0051	97,83	0,022
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,1839	0,0008	0,0157	35,17	0,1832	99,59	6,443
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0544	0,0005	0,0142	11,53	0,0539	99,08	0,622
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0271	0,0004	0,0129	6,32	0,0267	98,48	0,169
Nb _{1,33} C	2,6409	0,0026	0,0103	768,46	2,6383	99,90	2027,460
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0160	0,0003	0,0120	4,01	0,0157	97,87	0,063
Nb ₂ C	0,0084	0,0002	0,0084	3,03	0,0082	97,26	0,025
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0089	0,0001	0,0043	6,26	0,0088	98,46	0,055
Nb ₂ CF ₂	0,0056	0,0001	0,0049	3,45	0,0055	97,59	0,019
Nb ₂ CO ₂	0,0080	0,0002	0,0054	4,49	0,0079	97,87	0,035
Nb ₂ CrCN	0,0129	0,0002	0,0058	6,61	0,0127	98,32	0,084
Nb ₂ CrCNO ₂	0,0141	0,0002	0,0034	12,37	0,0139	98,88	0,173
Nb ₂ HfCN	0,0070	0,0001	0,0040	5,28	0,0069	98,11	0,036
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0088	0,0001	0,0023	11,31	0,0087	98,90	0,099
Nb ₂ MoCN	0,0100	0,0002	0,0050	5,95	0,0098	98,25	0,058
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0118	0,0001	0,0029	12,10	0,0117	98,84	0,141
Nb ₂ N	0,0064	0,0002	0,0079	2,44	0,0062	96,82	0,015
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0090	0,0002	0,0049	5,52	0,0089	98,19	0,049
Nb ₂ NF ₂	0,0053	0,0001	0,0035	4,47	0,0051	97,86	0,023
Nb ₂ NH ₂	0,0039	0,0001	0,0055	2,12	0,0037	96,80	0,008
Nb ₂ NO ₂	0,0071	0,0002	0,0052	4,08	0,0069	97,71	0,028

Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,71	0,0001	97,94	0,000
Nb ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,74	0,0002	98,19	0,001
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,61	0,0002	98,86	0,002
Nb ₂ TiCN	0,0122	0,0002	0,0059	6,20	0,0119	98,20	0,074
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0002	0,0034	12,80	0,0142	98,94	0,182
Nb ₂ VCN	0,0119	0,0002	0,0059	6,01	0,0117	98,28	0,070
Nb ₂ VCNO ₂	0,0134	0,0002	0,0034	11,78	0,0133	98,85	0,157
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0050	0,0001	0,0028	5,27	0,0049	98,10	0,026
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0067	0,0001	0,0042	4,73	0,0065	97,97	0,031
Nb ₂ ZrCN	0,0093	0,0002	0,0051	5,44	0,0091	98,05	0,049
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0109	0,0001	0,0029	11,10	0,0108	98,81	0,120
Nb ₃ C ₂	0,0079	0,0002	0,0053	4,44	0,0077	97,88	0,034
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0067	0,0000	0,0020	10,24	0,0067	99,32	0,068
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0056	0,0001	0,0026	6,38	0,0055	98,42	0,035
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0039	0,0001	0,0022	5,45	0,0039	98,44	0,021
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0094	0,0001	0,0032	8,90	0,0093	98,74	0,082
Nb ₃ CN	0,0095	0,0002	0,0053	5,43	0,0093	98,20	0,051
Nb ₃ CNO ₂	0,0116	0,0001	0,0030	11,77	0,0115	98,87	0,135
Nb ₃ N ₂	0,0047	0,0001	0,0038	3,70	0,0045	97,61	0,017
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,0000	0,0006	1,31	0,0002	98,86	0,000
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0046	0,0000	0,0017	8,04	0,0045	98,99	0,036
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0047	0,0001	0,0023	6,19	0,0046	98,51	0,028
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0027	8,47	0,0077	98,71	0,065
Nb ₄ C ₃	0,0059	0,0001	0,0040	4,43	0,0058	97,90	0,026
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0057	0,0000	0,0015	11,47	0,0056	99,35	0,064
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0044	0,0001	0,0019	6,90	0,0043	98,54	0,030
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0032	0,0001	0,0018	5,14	0,0031	98,24	0,016
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0070	0,0001	0,0025	8,36	0,0069	98,62	0,058
Nb ₄ N ₃	0,0042	0,0001	0,0038	3,29	0,0041	97,42	0,013
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0056	0,0001	0,0020	8,24	0,0055	98,83	0,046
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0035	0,0001	0,0023	4,57	0,0034	97,89	0,016
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0054	0,0001	0,0026	6,32	0,0053	98,27	0,034
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0006	0,0000	0,0006	2,73	0,0005	99,05	0,001
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0034	0,0001	0,0015	6,77	0,0033	98,52	0,023
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0055	0,0001	0,0018	9,19	0,0054	98,67	0,050
NbCrN(NCO) ₂	0,0433	0,0003	0,0047	27,59	0,0430	99,33	1,185

NbCrN(NCS) ₂	0,7617	0,0010	0,0024	938,75	0,7607	99,87	714,112
NbCrN(OCN) ₂	0,0321	0,0003	0,0053	18,32	0,0318	99,08	0,583
NbCrN(SCN) ₂	0,0725	0,0003	0,0044	48,95	0,0722	99,60	3,535
NbCrNBr ₂	0,0477	0,0004	0,0052	27,53	0,0473	99,22	1,302
NbCrNCl ₂	0,0362	0,0004	0,0070	15,47	0,0359	98,93	0,555
NbCrNF ₂	0,0079	0,0002	0,0065	3,65	0,0077	97,65	0,028
NbMoN(NCO) ₂	0,0217	0,0002	0,0045	14,40	0,0215	98,98	0,309
NbMoN(NCS) ₂	0,4042	0,0007	0,0041	297,17	0,4035	99,82	119,912
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,0000	0,0004	0,23	0,0000	95,90	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0594	0,0002	0,0039	45,84	0,0592	99,59	2,713
NbMoNBr ₂	0,0373	0,0003	0,0048	23,54	0,0370	99,20	0,872
NbMoNCl ₂	0,0262	0,0003	0,0060	13,04	0,0259	98,86	0,338
NbMoN(CN) ₂	0,0119	0,0002	0,0052	6,91	0,0117	98,28	0,081
NbMoNF ₂	0,0072	0,0002	0,0057	3,77	0,0070	97,58	0,026
NbWN(NCO) ₂	0,0171	0,0002	0,0035	14,74	0,0169	98,96	0,249
NbWN(NCS) ₂	0,3290	0,0006	0,0032	307,15	0,3284	99,82	100,883
NbWN(OCN) ₂	0,0189	0,0002	0,0035	16,13	0,0187	99,04	0,302
NbWN(SCN) ₂	0,0440	0,0002	0,0032	40,69	0,0438	99,52	1,783
NbWNBr ₂	0,0328	0,0002	0,0038	25,94	0,0325	99,26	0,844
NbWNCl ₂	0,0218	0,0002	0,0046	14,23	0,0216	98,90	0,307
NbWN(CN) ₂	0,0071	0,0001	0,0043	4,90	0,0069	97,93	0,034
NbWNF ₂	0,0054	0,0001	0,0046	3,54	0,0053	97,64	0,019
Sc ₂ C	0,0104	0,0004	0,0162	1,92	0,0100	96,40	0,019
Sc ₂ C(CN) ₂	0,0152	0,0003	0,0016	27,72	0,0149	97,85	0,412
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0014	0,0000	0,0014	2,82	0,0013	98,94	0,004
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,4379	0,0006	0,0052	251,32	0,4373	99,86	109,895
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0469	0,0005	0,0079	17,78	0,0464	99,04	0,825
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0018	0,0000	0,0019	2,95	0,0018	98,92	0,005
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0125	0,0002	0,0072	5,17	0,0123	98,29	0,064
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0558	0,0004	0,0062	27,18	0,0554	99,34	1,506
Sc ₂ CBr ₂	0,0348	0,0004	0,0066	15,82	0,0345	98,99	0,546
Sc ₂ CCl ₂	0,0397	0,0004	0,0092	12,93	0,0393	98,87	0,508
Sc ₂ CF ₂	0,0087	0,0002	0,0084	3,13	0,0085	97,36	0,027
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0124	0,0003	0,0093	3,99	0,0121	97,70	0,048
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0140	0,0003	0,0118	3,57	0,0137	97,56	0,049
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0176	0,0004	0,0125	4,24	0,0172	97,79	0,073

Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0144	0,0004	0,0116	3,70	0,0140	97,49	0,052
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0117	0,0003	0,0093	3,80	0,0114	97,64	0,043
Sc ₂ N	0,0077	0,0003	0,0137	1,69	0,0074	96,29	0,013
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0119	0,0002	0,0071	5,00	0,0117	98,22	0,058
Sc ₂ NF ₂	0,0074	0,0002	0,0077	2,89	0,0072	97,26	0,021
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,0149	0,0003	0,0115	3,88	0,0145	97,72	0,056
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,0114	0,0003	0,0094	3,65	0,0112	97,54	0,041
Sc ₂ NO ₂	0,0111	0,0003	0,0093	3,56	0,0108	97,57	0,038
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0115	0,0002	0,0072	4,78	0,0113	97,92	0,054
Sc ₃ C ₂	0,0088	0,0002	0,0097	2,72	0,0085	97,15	0,023
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0092	0,0001	0,0039	7,10	0,0091	99,05	0,065
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0058	0,0001	0,0027	6,46	0,0057	98,56	0,037
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0001	0,0043	5,41	0,0076	98,34	0,041
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,0002	0,0074	5,23	0,0126	98,08	0,066
Sc ₃ N ₂	0,0058	0,0002	0,0080	2,16	0,0056	96,71	0,012
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0084	0,0001	0,0033	7,68	0,0084	99,14	0,064
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0065	0,0001	0,0042	4,64	0,0064	98,04	0,030
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0096	0,0002	0,0053	5,45	0,0095	98,16	0,052
Sc ₄ C ₃	0,0087	0,0002	0,0080	3,26	0,0084	97,51	0,028
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0001	0,0029	7,88	0,0075	99,01	0,059
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0067	0,0001	0,0037	5,38	0,0066	98,18	0,035
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0103	0,0002	0,0044	7,04	0,0101	98,41	0,071
Sc ₄ N ₃	0,0046	0,0001	0,0062	2,23	0,0045	96,84	0,010
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0084	0,0001	0,0031	8,03	0,0083	98,97	0,066
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0053	0,0001	0,0037	4,30	0,0052	97,97	0,022
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0078	0,0001	0,0043	5,45	0,0076	98,17	0,041
ScCrC(OCN) ₂	0,0393	0,0004	0,0066	17,75	0,0390	99,11	0,692
ScCrC(OH) ₂	0,0171	0,0003	0,0072	7,13	0,0168	98,45	0,120
ScCrCF ₂	0,0101	0,0003	0,0086	3,50	0,0098	97,45	0,034
ScHfN(SCN) ₂	0,0392	0,0002	0,0035	33,21	0,0390	99,51	1,295
ScHfNO ₂	0,0060	0,0001	0,0048	3,80	0,0059	97,53	0,022
ScNbCO ₂	0,0091	0,0002	0,0069	3,94	0,0089	97,57	0,035
ScTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,94	0,0001	97,75	0,000
ScTiNO ₂	0,0102	0,0002	0,0080	3,82	0,0100	97,63	0,038
ScVCO ₂	0,0107	0,0003	0,0086	3,76	0,0105	97,61	0,039
ScYC(CN) ₂	0,0121	0,0002	0,0071	5,11	0,0119	98,12	0,061

ScYC(NCO) ₂	0,0224	0,0003	0,0060	11,20	0,0222	98,82	0,248
ScYC(NCS) ₂	0,2137	0,0005	0,0056	113,85	0,2132	99,78	24,278
ScYC(OCI) ₂	0,0248	0,0003	0,0070	10,63	0,0245	98,72	0,260
ScYC(OCN) ₂	0,0270	0,0003	0,0058	14,09	0,0267	98,96	0,377
ScYC(OH) ₂	0,0112	0,0002	0,0061	5,53	0,0111	98,32	0,061
ScYC(SCN) ₂	0,0484	0,0003	0,0048	30,00	0,0482	99,45	1,445
ScYCBBr ₂	0,0328	0,0003	0,0055	17,91	0,0325	99,10	0,582
ScYCCl ₂	0,0263	0,0003	0,0079	9,93	0,0259	98,68	0,257
ScYCF ₂	0,0095	0,0002	0,0081	3,53	0,0092	97,46	0,033
ScZrN(SCN) ₂	0,0589	0,0003	0,0048	37,07	0,0586	99,52	2,173
ScZrNO ₂	0,0090	0,0002	0,0070	3,87	0,0088	97,70	0,034
Ta ₂ C	0,0001	0,0000	0,0000	3,47	0,0001	97,55	0,000
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,07	0,0001	98,93	0,001
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	3,57	0,0000	97,71	0,000
Ta ₂ CO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	4,76	0,0001	97,99	0,000
Ta ₂ CrCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,82	0,0001	98,19	0,000
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,73	0,0001	98,84	0,001
Ta ₂ HfCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	97,94	0,000
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,04	0,0001	98,79	0,001
Ta ₂ MoCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,38	0,0001	98,07	0,000
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,54	0,0001	98,78	0,001
Ta ₂ N	0,0000	0,0000	0,0000	2,80	0,0000	97,18	0,000
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,95	0,0001	99,06	0,001
Ta ₂ NbCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,23	0,0001	98,09	0,000
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,47	0,0001	98,75	0,001
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	5,17	0,0000	98,21	0,000
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,0000	0,0000	2,08	0,0000	96,72	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,18	0,0000	97,79	0,000
Ta ₂ TiCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,57	0,0001	98,14	0,000
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,15	0,0001	98,85	0,001
Ta ₂ VCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,43	0,0001	98,19	0,000
Ta ₂ VCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,20	0,0001	98,78	0,001
Ta ₂ ZrCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,97	0,0001	98,00	0,000
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,11	0,0001	98,74	0,001
Ta ₃ C ₂	0,0001	0,0000	0,0000	5,17	0,0001	98,15	0,000
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,82	0,0000	99,33	0,000

Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,19	0,0000	98,82	0,000
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,66	0,0000	98,41	0,000
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,32	0,0001	98,69	0,001
Ta ₃ CN	0,0000	0,0000	0,0000	4,50	0,0000	97,95	0,000
Ta ₃ CNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,30	0,0001	98,80	0,001
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,42	0,0000	97,82	0,000
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	98,88	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,67	0,0000	99,10	0,000
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,98	0,0000	98,38	0,000
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,65	0,0001	98,84	0,001
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,0000	0,0000	5,28	0,0000	98,12	0,000
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	14,15	0,0000	99,40	0,001
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	7,55	0,0000	98,54	0,000
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,80	0,0000	98,33	0,000
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,62	0,0000	98,58	0,000
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,0000	0,0000	3,83	0,0000	97,65	0,000
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,89	0,0000	98,93	0,000
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,89	0,0000	98,01	0,000
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,32	0,0000	98,09	0,000
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	6,74	0,0000	98,32	0,000
TaCrN(OCN) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	16,74	0,0004	99,03	0,006
TaCrN(SCN) ₂	0,0009	0,0000	0,0001	38,32	0,0009	99,49	0,035
TaCrNBr ₂	0,0009	0,0000	0,0001	31,97	0,0009	99,35	0,030
TaCrNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	17,09	0,0005	99,05	0,008
TaCrNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,46	0,0001	97,60	0,000
TaMoN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,94	0,0003	98,92	0,004
TaMoN(NCS) ₂	0,0056	0,0000	0,0001	218,95	0,0056	99,81	1,224
TaMoN(SCN) ₂	0,0006	0,0000	0,0000	33,68	0,0006	99,62	0,019
TaMoNBr ₂	0,0007	0,0000	0,0001	22,17	0,0007	99,16	0,015
TaMoNCl ₂	0,0004	0,0000	0,0001	12,60	0,0004	98,82	0,005
TaMoNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,63	0,0001	97,52	0,000
TaWN(CN) ₂	0,0001	0,0000	0,0001	5,17	0,0001	98,04	0,001
TaWN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,96	0,0003	98,91	0,004
TaWNBr ₂	0,0007	0,0000	0,0001	24,06	0,0007	99,21	0,018
TaWNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	15,94	0,0005	99,00	0,007
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,0193	0,0003	0,0092	6,32	0,0189	98,24	0,120

Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,0339	0,0004	0,0091	11,24	0,0336	98,89	0,377
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,0840	0,0005	0,0099	25,49	0,0835	99,39	2,128
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,0198	0,0004	0,0141	4,20	0,0194	97,92	0,082
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,0442	0,0005	0,0164	8,06	0,0437	98,91	0,352
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0104	0,0001	0,0014	21,78	0,0103	99,34	0,225
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0053	0,0001	0,0013	12,37	0,0052	99,01	0,064
Ti ₂ C	0,0104	0,0003	0,0140	2,23	0,0100	96,68	0,022
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0148	0,0002	0,0067	6,65	0,0145	98,51	0,097
Ti ₂ CCl ₂	0,0059	0,0002	0,0061	2,92	0,0058	97,28	0,017
Ti ₂ CF ₂	0,0077	0,0002	0,0073	3,16	0,0075	97,49	0,024
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0151	0,0003	0,0096	4,73	0,0148	97,90	0,070
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0166	0,0003	0,0107	4,64	0,0163	97,97	0,076
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0247	0,0004	0,0124	5,95	0,0243	98,30	0,144
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,0102	0,0002	0,0079	3,89	0,0100	97,70	0,039
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,0113	0,0002	0,0079	4,31	0,0110	97,80	0,048
Ti ₂ CO _{0,67} F _{1,33}	0,0114	0,0003	0,0079	4,32	0,0112	97,77	0,048
Ti ₂ CO _{0,89} F _{1,11}	0,0121	0,0002	0,0080	4,55	0,0119	98,02	0,054
Ti ₂ CO _{1,33} F _{0,67}	0,0121	0,0003	0,0081	4,49	0,0119	97,82	0,053
Ti ₂ CO ₂	0,0108	0,0003	0,0083	3,88	0,0105	97,66	0,041
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0125	0,0003	0,0082	4,55	0,0122	97,86	0,056
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0143	0,0003	0,0103	4,18	0,0140	97,73	0,059
Ti ₂ CrCN	0,0234	0,0004	0,0091	7,67	0,0230	98,44	0,177
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0247	0,0003	0,0054	13,65	0,0244	98,89	0,333
Ti ₂ HfCN	0,0104	0,0002	0,0054	5,80	0,0102	98,25	0,059
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0136	0,0002	0,0033	12,29	0,0134	98,86	0,165
Ti ₂ MoCN	0,0162	0,0003	0,0074	6,62	0,0160	98,34	0,106
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0188	0,0002	0,0044	12,86	0,0186	98,85	0,239
Ti ₂ N	0,0075	0,0003	0,0122	1,84	0,0072	96,23	0,013
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0130	0,0002	0,0065	5,97	0,0128	98,33	0,076
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0054	5,29	0,0093	98,10	0,049
Ti ₂ NbC ₂	0,0061	0,0002	0,0064	2,87	0,0059	97,32	0,017
Ti ₂ NbCN	0,0166	0,0003	0,0075	6,68	0,0163	98,33	0,109
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0194	0,0002	0,0045	13,07	0,0192	98,89	0,250
Ti ₂ NF ₂	0,0067	0,0002	0,0071	2,84	0,0065	97,19	0,019
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0147	0,0003	0,0091	4,83	0,0144	97,85	0,069
Ti ₂ NO ₂	0,0095	0,0002	0,0076	3,72	0,0092	97,69	0,034

Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0268	0,0004	0,0124	6,50	0,0264	98,47	0,172
Ti ₂ NS ₂	0,0060	0,0002	0,0056	3,18	0,0058	97,25	0,018
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	5,30	0,0001	98,14	0,000
Ti ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,73	0,0001	97,15	0,000
Ti ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,40	0,0002	98,37	0,001
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,66	0,0003	98,85	0,003
Ti ₂ VC ₂	0,0084	0,0002	0,0078	3,24	0,0082	97,49	0,027
Ti ₂ VCN	0,0219	0,0003	0,0092	7,14	0,0215	98,47	0,154
Ti ₂ VCNO ₂	0,0239	0,0003	0,0054	13,14	0,0236	98,84	0,310
Ti ₂ ZrCN	0,0154	0,0003	0,0076	6,10	0,0151	98,18	0,092
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0187	0,0002	0,0044	12,67	0,0185	98,84	0,234
Ti ₃ C ₂	0,0094	0,0002	0,0087	3,25	0,0092	97,45	0,030
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0369	0,0002	0,0043	25,61	0,0367	99,39	0,940
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,0449	0,0003	0,0044	30,93	0,0447	99,44	1,383
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,0140	0,0002	0,0046	9,15	0,0138	98,64	0,127
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0169	0,0001	0,0035	14,62	0,0168	99,37	0,246
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0070	0,0001	0,0027	7,80	0,0069	98,66	0,054
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0068	0,0001	0,0036	5,66	0,0067	98,31	0,038
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0001	0,0044	5,34	0,0077	98,15	0,041
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,0120	0,0002	0,0049	7,32	0,0118	98,55	0,087
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0035	0,0001	0,0022	4,68	0,0034	98,25	0,016
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0021	0,0000	0,0015	4,19	0,0020	98,37	0,009
Ti ₃ CN	0,0207	0,0003	0,0096	6,49	0,0203	98,37	0,132
Ti ₃ CNF ₂	0,0314	0,0003	0,0063	14,83	0,0310	98,95	0,460
Ti ₃ CNO ₂	0,0279	0,0003	0,0057	14,60	0,0276	98,98	0,403
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0129	0,0001	0,0032	12,24	0,0128	99,33	0,157
Ti ₃ N ₂	0,0060	0,0002	0,0072	2,50	0,0058	96,82	0,015
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0061	0,0001	0,0038	4,88	0,0060	98,16	0,029
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,0103	0,0001	0,0044	7,02	0,0102	98,57	0,072
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,0131	0,0002	0,0046	8,50	0,0130	98,58	0,110
Ti ₄ C ₃	0,0076	0,0002	0,0069	3,30	0,0074	97,55	0,024
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0001	0,0034	10,49	0,0117	99,02	0,122
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0001	0,0038	4,87	0,0060	98,04	0,029
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0092	0,0001	0,0039	7,06	0,0091	98,63	0,064
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0090	0,0002	0,0042	6,43	0,0088	98,30	0,057
Ti ₄ N ₃	0,0045	0,0001	0,0056	2,42	0,0043	96,86	0,010

Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0148	0,0002	0,0036	12,38	0,0146	98,92	0,181
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0048	0,0001	0,0034	4,28	0,0047	97,84	0,020
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0058	0,0001	0,0035	4,91	0,0057	97,98	0,028
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0068	0,0001	0,0039	5,25	0,0066	98,05	0,035
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0170	0,0001	0,0029	17,79	0,0169	99,23	0,301
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0087	0,0001	0,0036	7,15	0,0085	98,40	0,061
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0084	0,0001	0,0032	7,78	0,0082	98,52	0,064
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0059	0,0001	0,0030	5,83	0,0058	98,13	0,034
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,0123	0,0001	0,0027	13,90	0,0122	99,02	0,170
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0077	0,0001	0,0021	11,17	0,0076	98,91	0,085
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,0125	0,0001	0,0021	18,03	0,0124	99,21	0,223
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0075	0,0001	0,0017	13,10	0,0074	99,08	0,097
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0133	0,0001	0,0017	23,77	0,0132	99,39	0,314
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0068	0,0001	0,0015	13,71	0,0067	99,15	0,092
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0109	0,0001	0,0016	20,03	0,0108	99,27	0,216
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0052	0,0001	0,0015	10,46	0,0052	98,83	0,054
TiCrCO ₂	0,0100	0,0002	0,0075	4,01	0,0098	97,73	0,039
TiHfCO ₂	0,0067	0,0001	0,0039	5,20	0,0066	98,04	0,034
TiHfN(NO) ₂	0,0052	0,0001	0,0046	3,42	0,0051	97,48	0,017
TiMoCO ₂	0,0068	0,0002	0,0059	3,51	0,0067	97,53	0,023
TiNbC	0,0086	0,0003	0,0134	1,92	0,0083	96,42	0,016
TiVC	0,0122	0,0004	0,0183	2,01	0,0118	96,65	0,024
TiWCO ₂	0,0048	0,0001	0,0040	3,58	0,0047	97,50	0,017
TiZrCO ₂	0,0102	0,0002	0,0068	4,48	0,0100	97,84	0,045
V ₂ C	0,0107	0,0003	0,0125	2,58	0,0104	96,98	0,027
V ₂ C(OH) ₂	0,0152	0,0002	0,0066	6,96	0,0150	98,47	0,104
V ₂ CBr ₂	0,0038	0,0001	0,0043	2,60	0,0037	97,09	0,010
V ₂ CF(OH)	0,0105	0,0002	0,0079	3,98	0,0103	97,81	0,041
V ₂ CF ₂	0,0078	0,0002	0,0070	3,34	0,0076	97,54	0,025
V ₂ CO ₂	0,0111	0,0002	0,0076	4,42	0,0109	97,79	0,048
V ₂ CrCN	0,0230	0,0003	0,0088	7,88	0,0227	98,52	0,178
V ₂ CrCNO ₂	0,0231	0,0002	0,0048	14,41	0,0228	98,94	0,329
V ₂ HfCN	0,0104	0,0002	0,0053	5,94	0,0102	98,18	0,061
V ₂ HfCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0030	11,89	0,0119	98,88	0,141
V ₂ MoCN	0,0162	0,0003	0,0071	6,80	0,0159	98,36	0,108
V ₂ MoCNO ₂	0,0172	0,0002	0,0040	13,03	0,0170	98,87	0,222

V ₂ N	0,0078	0,0003	0,0115	2,02	0,0075	96,65	0,015
V ₂ N(OH) ₂	0,0117	0,0002	0,0067	5,23	0,0115	98,14	0,060
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0053	5,40	0,0094	98,06	0,051
V ₂ NbCN	0,0165	0,0003	0,0073	6,82	0,0162	98,36	0,111
V ₂ NbCNO ₂	0,0195	0,0002	0,0038	15,43	0,0193	99,04	0,297
V ₂ NF ₂	0,0066	0,0002	0,0070	2,84	0,0064	97,13	0,018
V ₂ NO ₂	0,0093	0,0002	0,0074	3,79	0,0091	97,56	0,034
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	98,06	0,000
V ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,90	0,0001	98,07	0,001
V ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,60	0,0002	98,34	0,001
V ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	12,47	0,0002	98,87	0,003
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0150	0,0003	0,0074	6,05	0,0147	98,23	0,089
V ₂ TiC ₂	0,0173	0,0003	0,0093	5,60	0,0170	98,16	0,095
V ₂ TiCN	0,0215	0,0003	0,0090	7,18	0,0212	98,43	0,152
V ₂ TiCNO ₂	0,0228	0,0002	0,0049	14,03	0,0225	98,92	0,316
V ₂ ZrCN	0,0230	0,0003	0,0088	7,88	0,0227	98,87	0,179
V ₂ ZrCNO ₂	0,0169	0,0002	0,0040	12,57	0,0167	98,89	0,210
V ₃ C ₂	0,0081	0,0002	0,0077	3,14	0,0079	97,34	0,025
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0210	0,0001	0,0033	19,40	0,0209	99,43	0,406
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0039	0,0001	0,0022	5,25	0,0038	98,33	0,020
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0118	0,0002	0,0040	8,82	0,0116	98,69	0,102
V ₃ C ₂ F ₂	0,0086	0,0001	0,0036	7,22	0,0085	98,61	0,061
V ₃ C ₃ O ₂	0,0128	0,0002	0,0046	8,32	0,0126	98,58	0,105
V ₃ CN	0,0203	0,0003	0,0092	6,65	0,0200	98,38	0,133
V ₃ CNO ₂	0,0272	0,0003	0,0056	14,58	0,0270	99,00	0,393
V ₃ N ₂	0,0053	0,0002	0,0059	2,73	0,0052	97,13	0,014
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0440	0,0001	0,0046	28,88	0,0439	99,83	1,269
V ₃ N ₂ F ₂	0,0069	0,0001	0,0030	6,78	0,0068	98,52	0,046
V ₃ N ₂ H ₂	0,0099	0,0001	0,0042	7,11	0,0098	98,56	0,070
V ₃ N ₂ O ₂	0,0252	0,0003	0,0051	14,77	0,0249	98,96	0,368
V ₄ C ₃	0,0080	0,0002	0,0062	3,87	0,0078	97,60	0,030
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0170	0,0001	0,0030	16,91	0,0169	99,28	0,286
V ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0001	0,0034	5,33	0,0060	98,06	0,032
V ₄ C ₃ H ₂	0,0049	0,0001	0,0032	4,56	0,0048	98,03	0,022
V ₄ C ₃ O ₂	0,0088	0,0002	0,0039	6,77	0,0086	98,27	0,059
V ₄ N ₃	0,0051	0,0001	0,0056	2,74	0,0050	97,13	0,014

V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0095	0,0001	0,0033	8,64	0,0094	98,79	0,081
V ₄ N ₃ F ₂	0,0047	0,0001	0,0035	4,01	0,0046	97,65	0,018
V ₄ N ₃ H ₂	0,0037	0,0001	0,0030	3,72	0,0037	97,86	0,014
V ₄ N ₃ O ₂	0,0064	0,0001	0,0037	5,25	0,0063	98,05	0,033
VCrN(NCS) ₂	0,7400	0,0013	0,0047	475,11	0,7386	99,82	350,941
VCrN(SCN) ₂	0,0943	0,0004	0,0052	54,23	0,0939	99,61	5,093
VCrNBr ₂	0,0710	0,0004	0,0059	36,09	0,0706	99,40	2,546
VCrNF ₂	0,0081	0,0002	0,0073	3,33	0,0079	97,49	0,026
VMoN(NCO) ₂	0,0271	0,0003	0,0052	15,74	0,0268	99,00	0,422
VMoN(NCS) ₂	0,5221	0,0009	0,0045	351,85	0,5212	99,82	183,388
VMoN(OCN) ₂	0,0309	0,0003	0,0052	17,88	0,0306	99,08	0,547
VMoN(SCN) ₂	0,0689	0,0003	0,0044	46,91	0,0686	99,59	3,219
VMoNBr ₂	0,0543	0,0003	0,0051	31,91	0,0540	99,38	1,723
VMoNCl ₂	0,0391	0,0004	0,0067	17,58	0,0388	99,03	0,681
VNbC	0,0084	0,0003	0,0129	1,95	0,0081	96,48	0,016
VNbCF ₂ -(model4)	0,0102	0,0002	0,0079	3,89	0,0100	97,71	0,039
VWN(NCO) ₂	0,0168	0,0002	0,0039	12,94	0,0166	98,89	0,215
VWN(OCN) ₂	0,0216	0,0002	0,0039	16,67	0,0214	99,01	0,357
VWNBr ₂	0,0356	0,0003	0,0041	25,93	0,0353	99,24	0,915
VWNCl ₂	0,0289	0,0003	0,0050	17,49	0,0286	99,05	0,500
VWNF ₂	0,0049	0,0001	0,0044	3,35	0,0048	97,43	0,016
W _{1.33} C	0,8719	0,0007	0,0058	447,92	0,8712	99,91	390,223
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0090	0,0001	0,0036	7,47	0,0089	98,52	0,066
W _{1.33} CO ₂	0,0072	0,0001	0,0041	5,33	0,0071	98,07	0,038
W ₂ C	0,0047	0,0001	0,0038	3,67	0,0046	97,67	0,017
W ₂ C(OH) ₂	0,0080	0,0001	0,0020	12,03	0,0079	99,07	0,095
W ₂ CCl ₂	0,0192	0,0002	0,0038	15,22	0,0191	98,98	0,290
W ₂ CF ₂	0,0034	0,0001	0,0020	5,16	0,0033	98,16	0,017
W ₂ CO ₂	0,0043	0,0001	0,0030	4,28	0,0042	98,18	0,018
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0040	0,0000	0,0012	9,68	0,0039	98,76	0,038
W ₂ HfC ₂	0,0022	0,0001	0,0023	2,85	0,0021	97,24	0,006
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0063	0,0001	0,0015	12,57	0,0062	98,94	0,078
W ₂ N	0,0031	0,0001	0,0038	2,40	0,0030	96,93	0,007
W ₂ N(OH) ₂	0,0095	0,0001	0,0018	15,75	0,0094	99,22	0,148
W ₂ NF ₂	0,0032	0,0001	0,0018	5,33	0,0031	98,17	0,017
W ₂ NO ₂	0,0044	0,0001	0,0022	5,96	0,0043	98,22	0,025

W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0055	0,0001	0,0019	8,88	0,0054	98,65	0,048
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0081	0,0001	0,0021	11,83	0,0080	98,89	0,095
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0051	0,0001	0,0016	9,80	0,0051	98,77	0,050
W ₂ ZrC ₂	0,0026	0,0001	0,0027	2,90	0,0026	97,28	0,007
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0018	13,03	0,0077	99,01	0,100
W ₃ C ₂	0,0023	0,0001	0,0023	2,95	0,0022	96,53	0,006
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0090	0,0001	0,0015	18,08	0,0089	99,31	0,161
W ₃ C ₂ F ₂	0,0031	0,0000	0,0009	9,75	0,0031	99,10	0,030
W ₃ C ₂ O ₂	0,0054	0,0001	0,0014	11,45	0,0053	98,88	0,061
W ₃ N ₂	0,0024	0,0001	0,0024	3,06	0,0023	96,82	0,007
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0001	0,03	0,0000	95,84	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0022	0,0000	0,0008	8,60	0,0022	99,14	0,019
W ₃ N ₂ O ₂	0,0069	0,0001	0,0018	11,80	0,0068	98,88	0,080
W ₄ C ₃	0,0040	0,0001	0,0023	5,31	0,0039	98,11	0,021
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0041	0,0000	0,0011	10,90	0,0040	99,06	0,044
W ₄ C ₃ F ₂	0,0023	0,0000	0,0013	5,47	0,0023	98,18	0,013
W ₄ C ₃ H ₂	0,0028	0,0001	0,0015	5,58	0,0027	98,15	0,015
W ₄ C ₃ O ₂	0,0041	0,0001	0,0015	8,15	0,0040	98,50	0,033
W ₄ N ₃	0,0051	0,0001	0,0021	7,26	0,0050	98,41	0,036
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0050	0,0001	0,0013	11,81	0,0049	98,87	0,058
W ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0001	0,0016	6,11	0,0033	98,24	0,020
W ₄ N ₃ H ₂	0,0022	0,0000	0,0014	4,81	0,0021	97,96	0,010
W ₄ N ₃ O ₂	0,0025	0,0001	0,0016	4,56	0,0024	97,90	0,011
WCrC	0,0048	0,0002	0,0063	2,29	0,0046	96,70	0,011
WCrCO ₂ -(model4)	0,0061	0,0001	0,0043	4,28	0,0060	97,80	0,026
Y ₂ C	0,0074	0,0002	0,0099	2,25	0,0072	96,83	0,016
Y ₂ C(CN) ₂	0,0126	0,0002	0,0057	6,71	0,0124	98,40	0,084
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0204	0,0002	0,0052	11,83	0,0201	98,91	0,238
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0478	0,0001	0,0032	44,84	0,0476	99,74	2,136
Y ₂ C(OCI) ₂	0,0270	0,0003	0,0055	14,65	0,0267	98,98	0,391
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0211	0,0002	0,0052	12,18	0,0209	98,85	0,254
Y ₂ C(OH) ₂	0,0072	0,0001	0,0050	4,34	0,0071	98,18	0,031
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0423	0,0002	0,0042	30,09	0,0420	99,48	1,265
Y ₂ CBr ₂	0,0218	0,0002	0,0050	13,08	0,0216	98,89	0,283
Y ₂ CCl ₂	0,0243	0,0003	0,0067	10,92	0,0240	98,83	0,262
Y ₂ CF ₂	0,0075	0,0002	0,0060	3,70	0,0073	97,68	0,027

Y ₂ CO ₂	0,0127	0,0002	0,0069	5,52	0,0124	98,11	0,069
Y ₂ N	0,0062	0,0002	0,0090	2,07	0,0060	96,64	0,012
Y ₂ N(OH) ₂	0,0072	0,0001	0,0047	4,55	0,0071	98,34	0,032
Y ₂ NF ₂	0,0061	0,0002	0,0054	3,39	0,0060	97,45	0,020
Y ₂ NO ₂	0,0110	0,0002	0,0068	4,81	0,0107	97,95	0,052
Y ₃ C ₂	0,0061	0,0001	0,0044	4,17	0,0060	97,82	0,025
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0000	0,0012	2,42	0,0010	99,11	0,002
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0001	0,0029	7,50	0,0071	98,64	0,053
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0082	0,0001	0,0021	11,79	0,0081	99,19	0,096
Y ₃ N ₂	0,0049	0,0001	0,0042	3,53	0,0048	97,59	0,017
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0086	0,0001	0,0024	10,83	0,0085	99,23	0,092
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0074	0,0001	0,0028	7,91	0,0073	98,60	0,058
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0072	0,0001	0,0022	9,72	0,0071	99,00	0,069
Y ₄ C ₃	0,0058	0,0001	0,0046	3,75	0,0057	97,78	0,021
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0011	2,10	0,0008	98,74	0,002
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0065	0,0001	0,0024	8,19	0,0064	98,74	0,052
Y ₄ C ₃ O ₂	0,0128	0,0001	0,0029	13,30	0,0126	98,94	0,168
Y ₄ N ₃	0,0042	0,0001	0,0046	2,74	0,0041	97,14	0,011
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0055	0,0001	0,0023	7,30	0,0054	98,78	0,040
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0063	0,0001	0,0032	5,82	0,0062	98,21	0,036
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0001	0,0027	6,68	0,0060	98,46	0,040
YCrC(NCO) ₂	0,0238	0,0003	0,0054	13,25	0,0236	98,94	0,312
YCrC(NCS) ₂	0,3030	0,0006	0,0053	171,18	0,3024	99,81	51,767
YCrC(OCN) ₂	0,0253	0,0003	0,0053	14,42	0,0250	98,99	0,361
YCrC(OH) ₂	0,0130	0,0002	0,0053	7,34	0,0129	98,53	0,094
YCrCBr ₂	0,0362	0,0003	0,0055	19,63	0,0359	99,15	0,705
YCrCCl ₂	0,0305	0,0004	0,0075	12,27	0,0302	98,83	0,370
YCrCF ₂	0,0093	0,0002	0,0065	4,28	0,0091	97,85	0,039
YHfN(SCN) ₂	0,0338	0,0002	0,0037	27,49	0,0336	99,38	0,922
YHfNO ₂	0,0053	0,0001	0,0036	4,38	0,0052	97,85	0,023
YMoN(NO) ₂	0,0063	0,0002	0,0055	3,43	0,0061	97,43	0,021
YNbCO ₂	0,0083	0,0002	0,0060	4,19	0,0082	97,84	0,034
YTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,22	0,0001	97,84	0,000
YTiN(NO) ₂	0,0088	0,0002	0,0064	4,10	0,0086	97,76	0,035
YTiNO ₂	0,0082	0,0002	0,0059	4,16	0,0080	97,84	0,033
YVCO ₂	0,0094	0,0002	0,0071	3,98	0,0092	97,75	0,036

YVNF ₂	0,0077	0,0002	0,0058	4,01	0,0075	97,77	0,030
YZrNO ₂	0,0074	0,0002	0,0050	4,48	0,0073	97,91	0,032
Zr ₂ C	0,0068	0,0002	0,0109	1,88	0,0066	96,51	0,012
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0081	0,0001	0,0044	5,60	0,0080	98,43	0,045
Zr ₂ CF ₂	0,0058	0,0001	0,0051	3,39	0,0057	97,47	0,019
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0070	0,0002	0,0054	3,86	0,0068	97,56	0,026
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0090	0,0002	0,0080	3,41	0,0088	97,56	0,030
Zr ₂ CO ₂	0,0087	0,0002	0,0059	4,43	0,0085	97,78	0,038
Zr ₂ CrCN	0,0106	0,0002	0,0059	5,38	0,0104	98,03	0,056
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0033	10,78	0,0118	98,76	0,128
Zr ₂ HfCN	0,0060	0,0001	0,0040	4,51	0,0059	97,84	0,027
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0080	0,0001	0,0023	10,55	0,0079	98,80	0,084
Zr ₂ MoCN	0,0084	0,0002	0,0050	5,01	0,0082	97,99	0,041
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0100	0,0001	0,0029	10,46	0,0099	98,80	0,103
Zr ₂ N	0,0062	0,0002	0,0083	2,25	0,0060	96,71	0,014
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0078	0,0001	0,0042	5,61	0,0077	98,40	0,043
Zr ₂ NbCN	0,0085	0,0002	0,0051	5,00	0,0083	98,00	0,041
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0102	0,0001	0,0029	10,62	0,0101	98,85	0,107
Zr ₂ NF ₂	0,0052	0,0001	0,0051	3,09	0,0051	97,38	0,016
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0081	0,0002	0,0067	3,65	0,0079	97,61	0,029
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0064	0,0002	0,0050	3,86	0,0063	97,63	0,024
Zr ₂ NO ₂	0,0072	0,0002	0,0056	3,88	0,0070	97,68	0,027
Zr ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,88	0,0001	97,99	0,001
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	10,23	0,0002	98,84	0,002
Zr ₂ TiCN	0,0103	0,0002	0,0060	5,11	0,0101	97,99	0,052
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0034	10,58	0,0119	98,77	0,125
Zr ₂ VCN	0,0101	0,0002	0,0060	5,05	0,0099	97,99	0,050
Zr ₂ VCNO ₂	0,0115	0,0001	0,0033	10,33	0,0114	98,76	0,118
Zr ₃ C ₂	0,0068	0,0002	0,0055	3,69	0,0066	97,66	0,024
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0125	0,0001	0,0027	14,17	0,0124	99,30	0,176
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0054	0,0001	0,0028	5,88	0,0053	98,28	0,031
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0036	0,0001	0,0021	5,21	0,0035	98,55	0,018
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0096	0,0001	0,0033	8,76	0,0095	98,70	0,083
Zr ₃ CN	0,0081	0,0002	0,0053	4,62	0,0080	98,09	0,037
Zr ₃ CNO ₂	0,0120	0,0001	0,0034	10,48	0,0119	98,77	0,124
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0134	0,0001	0,0026	15,71	0,0133	99,34	0,210

Zr ₃ N ₂	0,0047	0,0001	0,0044	3,17	0,0046	97,45	0,014
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0044	0,0001	0,0023	5,69	0,0043	98,53	0,024
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0039	0,0001	0,0021	5,54	0,0038	98,59	0,021
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0077	0,0001	0,0031	7,53	0,0076	98,59	0,057
Zr ₄ C ₃	0,0058	0,0001	0,0044	3,99	0,0057	97,74	0,023
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0000	0,0018	8,48	0,0050	99,09	0,043
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0047	0,0001	0,0023	6,10	0,0046	97,24	0,028
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0062	0,0001	0,0023	8,09	0,0061	98,69	0,050
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0076	0,0001	0,0027	8,46	0,0075	98,57	0,064
Zr ₄ N ₃	0,0038	0,0001	0,0036	3,12	0,0037	97,29	0,012
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0049	0,0000	0,0017	8,61	0,0049	99,12	0,042
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0037	0,0001	0,0021	5,12	0,0036	98,09	0,018
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0058	0,0001	0,0026	6,84	0,0057	98,37	0,039
ZrCrNO ₂	0,0079	0,0002	0,0056	4,23	0,0078	97,80	0,033
ZrHfCO ₂	0,0051	0,0001	0,0036	4,26	0,0050	97,84	0,021
ZrMoCO ₂	0,0056	0,0001	0,0052	3,24	0,0054	97,41	0,018

APPENDIX G: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of MXene Structures at TSA Conditions (120 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working Capacity (mol/kg)	% Regenerability	APS
	1 bar, 35°C	1 bar, 120°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	TSA	TSA	TSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0146	0,0002	0,0071	6,18	0,0143	98,34	0,089
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0075	0,0002	0,0054	4,17	0,0073	97,78	0,031
(TiV) ₃ C ₂	0,0168	0,0003	0,0076	6,61	0,0165	98,46	0,109
(TiV)C(OH) ₂	0,0099	0,0003	0,0087	3,42	0,0096	97,38	0,033
(TiV)CF ₂	0,0108	0,0003	0,0081	4,01	0,0106	97,68	0,042
(TiV)CO ₂	0,0108	0,0002	0,0081	4,01	0,0106	97,75	0,042
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0194	0,0001	0,0021	27,39	0,0193	99,53	0,528
Cr ₂ C	0,0116	0,0003	0,0123	2,82	0,0112	97,27	0,032
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0138	0,0002	0,0066	6,27	0,0136	98,37	0,085
Cr ₂ CBr ₂	0,0502	0,0004	0,0060	25,03	0,0499	99,24	1,248
Cr ₂ CCl ₂	0,0432	0,0005	0,0083	15,68	0,0427	98,96	0,670
Cr ₂ CF ₂	0,0077	0,0002	0,0074	3,11	0,0075	97,36	0,023
Cr ₂ CFCl	0,0122	0,0002	0,0073	5,02	0,0120	97,97	0,060
Cr ₂ CH ₂	0,0064	0,0002	0,0077	2,51	0,0062	97,06	0,016
Cr ₂ CO ₂	0,0126	0,0002	0,0067	5,67	0,0124	98,15	0,070
Cr ₂ CS ₂	0,1866	0,0009	0,0091	61,48	0,1857	99,54	11,419
Cr ₂ HfCN	0,0107	0,0002	0,0049	6,63	0,0106	98,34	0,070
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0151	0,0002	0,0033	13,64	0,0149	98,93	0,204
Cr ₂ MoCN	0,0168	0,0003	0,0066	7,60	0,0166	98,43	0,126
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0207	0,0002	0,0044	14,17	0,0205	98,90	0,290
Cr ₂ N	0,0070	0,0002	0,0097	2,17	0,0068	96,79	0,015
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0122	0,0002	0,0062	5,90	0,0120	98,31	0,071
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0096	0,0002	0,0051	5,62	0,0094	98,13	0,053
Cr ₂ NbCN	0,0179	0,0003	0,0068	7,93	0,0177	98,47	0,140
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0217	0,0002	0,0045	14,61	0,0215	98,91	0,314
Cr ₂ NF ₂	0,0062	0,0002	0,0066	2,84	0,0061	97,31	0,017
Cr ₂ NH ₂	0,0063	0,0002	0,0069	2,72	0,0061	97,24	0,017
Cr ₂ NO ₂	0,0089	0,0002	0,0073	3,64	0,0087	97,71	0,032

Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,93	0,0001	98,09	0,000
Cr ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,88	0,0001	97,08	0,000
Cr ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	7,18	0,0002	98,44	0,001
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	14,02	0,0003	98,89	0,004
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0148	0,0002	0,0071	6,24	0,0145	98,31	0,091
Cr ₂ TiC ₂	0,0082	0,0002	0,0073	3,35	0,0080	97,57	0,027
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0303	0,0002	0,0042	21,80	0,0301	99,33	0,656
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0252	0,0003	0,0060	12,69	0,0249	98,86	0,317
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0237	0,0003	0,0053	13,34	0,0234	98,88	0,312
Cr ₂ TiCN	0,0237	0,0003	0,0084	8,43	0,0233	98,58	0,197
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0275	0,0003	0,0054	15,30	0,0272	98,95	0,416
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0148	0,0003	0,0069	6,47	0,0145	98,28	0,094
Cr ₂ VC ₂	0,0079	0,0002	0,0071	3,36	0,0077	97,43	0,026
Cr ₂ VCN	0,0247	0,0003	0,0085	8,76	0,0243	98,61	0,213
Cr ₂ VCNO ₂	0,0268	0,0003	0,0054	14,93	0,0265	98,96	0,396
Cr ₂ ZrCN	0,0156	0,0003	0,0068	6,92	0,0154	98,33	0,106
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0295	0,0002	0,0043	20,38	0,0293	99,19	0,597
Cr ₃ C ₂	0,0108	0,0002	0,0082	3,96	0,0106	97,83	0,042
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0158	0,0001	0,0039	12,24	0,0157	99,15	0,192
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0001	0,0041	5,31	0,0071	98,23	0,037
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0002	0,0048	6,16	0,0098	98,37	0,060
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0602	0,0002	0,0047	38,47	0,0600	99,72	2,309
Cr ₃ CN	0,0232	0,0003	0,0084	8,26	0,0229	98,62	0,189
Cr ₃ CNO ₂	0,0311	0,0003	0,0055	16,87	0,0308	99,05	0,519
Cr ₃ N ₂	0,0053	0,0001	0,0055	2,86	0,0051	97,24	0,015
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0109	0,0003	0,0035	9,34	0,0106	97,22	0,099
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0112	0,0003	0,0051	6,63	0,0109	97,30	0,073
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0110	0,0002	0,0035	9,30	0,0108	98,32	0,101
Cr ₄ C ₃	0,0095	0,0001	0,0067	4,27	0,0094	98,47	0,040
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0109	0,0002	0,0035	9,34	0,0107	98,10	0,100
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0056	0,0001	0,0037	4,49	0,0054	97,56	0,024
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0070	0,0001	0,0041	5,15	0,0068	98,13	0,035
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0083	0,0001	0,0038	6,58	0,0081	98,27	0,054
Cr ₄ N ₃	0,0057	0,0002	0,0062	2,73	0,0055	97,17	0,015

Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0088	0,0001	0,0033	7,97	0,0087	98,63	0,069
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0045	0,0001	0,0035	3,83	0,0044	97,75	0,017
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0053	0,0001	0,0037	4,31	0,0051	97,83	0,022
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0001	0,0036	5,10	0,0059	98,04	0,030
CrMoCF ₂	0,0076	0,0002	0,0065	3,50	0,0074	97,64	0,026
CrWCF ₂	0,0058	0,0001	0,0044	3,95	0,0057	97,67	0,022
Hf ₂ C	0,0043	0,0001	0,0047	2,78	0,0042	97,11	0,012
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0051	0,0001	0,0025	6,15	0,0050	98,49	0,031
Hf ₂ CF ₂	0,0034	0,0001	0,0029	3,48	0,0033	97,62	0,012
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0038	0,0001	0,0033	3,51	0,0037	97,58	0,013
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0048	0,0001	0,0048	3,00	0,0047	97,32	0,014
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0042	0,0001	0,0042	3,00	0,0041	97,35	0,012
Hf ₂ CO ₂	0,0051	0,0001	0,0033	4,65	0,0050	97,90	0,023
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0034	0,0001	0,0026	3,90	0,0033	97,72	0,013
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0045	0,0001	0,0042	3,27	0,0044	97,50	0,014
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0051	0,0001	0,0045	3,43	0,0050	97,55	0,017
Hf ₂ CrCN	0,0057	0,0001	0,0035	4,87	0,0056	98,02	0,027
Hf ₂ CrCNO ₂	0,0067	0,0001	0,0020	9,94	0,0066	98,69	0,066
Hf ₂ MoCN	0,0065	0,0001	0,0028	6,98	0,0064	98,39	0,045
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0114	0,0001	0,0016	20,85	0,0113	99,38	0,236
Hf ₂ N	0,0033	0,0001	0,0043	2,35	0,0032	96,66	0,008
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0053	0,0001	0,0022	7,32	0,0052	98,65	0,038
Hf ₂ NbCN	0,0048	0,0001	0,0032	4,48	0,0047	97,82	0,021
Hf ₂ NbCNO ₂	0,0061	0,0001	0,0018	9,99	0,0061	98,83	0,060
Hf ₂ NF ₂	0,0028	0,0001	0,0024	3,60	0,0028	97,61	0,010
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0034	0,0001	0,0025	4,05	0,0033	97,40	0,014
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0065	0,0001	0,0047	4,15	0,0063	97,77	0,026
Hf ₂ NO ₂	0,0044	0,0001	0,0032	4,16	0,0043	97,67	0,018
Hf ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,43	0,0001	97,87	0,001
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0000	10,54	0,0002	98,86	0,002
Hf ₂ TiCN	0,0056	0,0001	0,0035	4,71	0,0055	97,98	0,026
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0066	0,0001	0,0020	9,77	0,0065	98,77	0,064
Hf ₂ VCN	0,0054	0,0001	0,0036	4,59	0,0053	97,82	0,024
Hf ₂ VCNO ₂	0,0066	0,0001	0,0021	9,65	0,0065	98,76	0,063

Hf ₂ ZrCN	0,0046	0,0001	0,0032	4,23	0,0045	97,76	0,019
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0061	0,0001	0,0018	9,99	0,0060	98,85	0,060
Hf ₃ C ₂	0,0038	0,0001	0,0029	3,97	0,0038	97,68	0,015
Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0031	0,0000	0,0011	8,25	0,0031	99,24	0,025
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0030	0,0001	0,0016	5,77	0,0030	98,15	0,017
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,0000	0,0009	3,34	0,0010	98,37	0,003
Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0052	0,0001	0,0018	8,55	0,0051	98,59	0,044
Hf ₃ CN	0,0038	0,0001	0,0028	4,03	0,0037	97,75	0,015
Hf ₃ CNO ₂	0,0059	0,0001	0,0019	9,47	0,0059	98,68	0,056
Hf ₃ N ₂	0,0026	0,0001	0,0023	3,33	0,0025	97,44	0,008
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0018	0,0000	0,0008	6,35	0,0018	99,25	0,011
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0025	0,0000	0,0013	5,88	0,0024	98,62	0,014
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0015	0,0000	0,0010	4,68	0,0015	98,65	0,007
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0042	0,0001	0,0017	7,41	0,0042	98,51	0,031
Hf ₄ C ₃	0,0022	0,0001	0,0020	3,37	0,0021	97,61	0,007
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0034	0,0000	0,0014	7,17	0,0034	98,66	0,024
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0027	0,0000	0,0013	6,03	0,0026	98,28	0,016
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0012	0,0000	0,0008	4,37	0,0012	98,46	0,005
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0043	0,0001	0,0015	8,49	0,0042	98,57	0,036
Hf ₄ N ₃	0,0021	0,0001	0,0019	3,18	0,0020	97,44	0,006
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0030	0,0000	0,0010	8,99	0,0030	99,10	0,027
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0020	0,0000	0,0012	5,14	0,0020	98,14	0,010
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0012	0,0000	0,0009	3,97	0,0011	98,14	0,004
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0033	0,0001	0,0014	7,11	0,0032	98,38	0,023
HfCrNO ₂	0,0053	0,0001	0,0038	4,15	0,0052	97,80	0,022
Mn ₂ C	0,0115	0,0003	0,0120	2,88	0,0112	97,17	0,032
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0128	0,0002	0,0063	6,09	0,0126	98,25	0,077
Mn ₂ CF ₂	0,0070	0,0002	0,0064	3,27	0,0068	97,44	0,022
Mn ₂ CO ₂	0,0098	0,0002	0,0073	4,02	0,0096	97,78	0,039
Mn ₂ N	0,0063	0,0002	0,0087	2,17	0,0061	96,69	0,013
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0099	0,0002	0,0063	4,69	0,0097	97,98	0,045
Mn ₂ NF ₂	0,0059	0,0002	0,0064	2,74	0,0057	97,35	0,016
Mn ₂ NO ₂	0,0084	0,0002	0,0067	3,79	0,0082	97,55	0,031
Mn ₃ C ₂	0,0106	0,0002	0,0078	4,06	0,0103	97,73	0,042

Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0156	0,0001	0,0036	13,00	0,0155	99,11	0,201
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0069	0,0001	0,0038	5,39	0,0068	98,13	0,036
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0102	0,0002	0,0043	7,19	0,0101	98,45	0,072
Mn ₃ N ₂	0,0075	0,0002	0,0078	2,90	0,0073	97,30	0,021
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0127	0,0001	0,0032	11,92	0,0126	99,13	0,150
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0056	0,0001	0,0038	4,36	0,0054	97,93	0,024
Mn ₄ C ₃	0,0092	0,0002	0,0064	4,30	0,0090	97,76	0,039
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0001	0,0031	11,30	0,0117	98,95	0,132
Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0055	0,0001	0,0033	5,02	0,0054	98,05	0,027
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0073	0,0001	0,0037	5,92	0,0072	98,13	0,043
Mn ₄ N ₃	0,0050	0,0001	0,0041	3,68	0,0049	97,50	0,018
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0100	0,0001	0,0029	10,34	0,0099	98,93	0,102
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0056	0,0001	0,0034	4,91	0,0055	98,04	0,027
Mo _{1,33} C	0,0176	0,0003	0,0117	4,50	0,0173	98,16	0,078
Mo ₂ C	0,0084	0,0002	0,0079	3,22	0,0082	97,33	0,026
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,3961	0,0007	0,0040	297,99	0,3955	99,83	117,846
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0276	0,0002	0,0045	18,50	0,0274	99,12	0,507
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0078	0,0001	0,0046	5,07	0,0077	98,12	0,039
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0525	0,0002	0,0038	41,55	0,0523	99,56	2,171
Mo ₂ CBr ₂	0,0341	0,0003	0,0045	22,67	0,0338	99,21	0,767
Mo ₂ CCl ₂	0,0259	0,0003	0,0057	13,56	0,0256	98,91	0,347
Mo ₂ CF ₂	0,0054	0,0001	0,0054	3,03	0,0053	97,31	0,016
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0096	0,0002	0,0071	4,08	0,0094	97,80	0,038
Mo ₂ CO ₂	0,0079	0,0001	0,0042	5,61	0,0078	98,16	0,044
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0066	0,0001	0,0051	3,88	0,0064	97,75	0,025
Mo ₂ CrCN	0,0125	0,0002	0,0056	6,71	0,0123	98,35	0,083
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0144	0,0002	0,0037	11,53	0,0142	98,74	0,163
Mo ₂ CS ₂	0,0046	0,0005	0,0050	2,77	0,0041	88,24	0,011
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0048	0,0001	0,0016	9,22	0,0048	98,73	0,044
Mo ₂ HfC ₂	0,0029	0,0001	0,0033	2,65	0,0029	97,13	0,008
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0022	10,79	0,0077	98,90	0,083
Mo ₂ HfCN	0,0068	0,0001	0,0038	5,38	0,0066	98,05	0,036
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0096	0,0001	0,0026	11,13	0,0095	98,79	0,106
Mo ₂ N	0,0055	0,0002	0,0060	2,73	0,0053	97,12	0,015

Mo ₂ N(OH) ₂	0,0148	0,0001	0,0032	13,70	0,0147	99,17	0,202
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0066	0,0001	0,0039	5,03	0,0065	98,02	0,033
Mo ₂ NbC ₂	0,0039	0,0001	0,0042	2,78	0,0038	97,28	0,010
Mo ₂ NbCN	0,0093	0,0002	0,0046	6,06	0,0091	98,25	0,055
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0123	0,0001	0,0032	11,62	0,0122	98,79	0,142
Mo ₂ NF ₂	0,0052	0,0001	0,0031	5,01	0,0051	98,04	0,026
Mo ₂ NO ₂	0,0070	0,0001	0,0040	5,26	0,0068	98,06	0,036
Mo ₂ ScC ₂	0,0048	0,0001	0,0050	2,84	0,0046	97,14	0,013
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0106	0,0001	0,0031	10,41	0,0105	98,89	0,109
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,60	0,0001	97,95	0,000
Mo ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,71	0,0002	98,18	0,001
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,05	0,0002	98,77	0,002
Mo ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,69	0,0001	97,13	0,000
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0051	5,60	0,0093	98,15	0,052
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0130	0,0001	0,0028	13,75	0,0129	99,02	0,177
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0078	0,0001	0,0031	7,56	0,0077	98,42	0,058
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0079	0,0001	0,0027	8,73	0,0078	98,59	0,068
Mo ₂ TiC ₂	0,0048	0,0001	0,0049	2,93	0,0046	97,24	0,014
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0179	0,0001	0,0033	16,23	0,0179	99,53	0,290
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0195	0,0001	0,0031	19,09	0,0193	99,34	0,369
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0142	0,0002	0,0047	9,16	0,0140	98,61	0,128
Mo ₂ TiC ₂ O ₂	0,0103	0,0001	0,0033	9,47	0,0102	98,67	0,096
Mo ₂ TiCN	0,0119	0,0002	0,0057	6,30	0,0117	98,29	0,074
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0002	0,0037	11,45	0,0141	98,78	0,162
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0093	0,0002	0,0050	5,61	0,0091	98,16	0,051
Mo ₂ VC ₂	0,0048	0,0001	0,0048	2,96	0,0046	97,31	0,014
Mo ₂ VCN	0,0118	0,0002	0,0056	6,29	0,0116	98,27	0,073
Mo ₂ VCNO ₂	0,0139	0,0002	0,0037	11,17	0,0137	98,82	0,153
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0068	0,0001	0,0022	9,35	0,0067	98,80	0,063
Mo ₂ ZrC ₂	0,0038	0,0001	0,0042	2,69	0,0037	97,05	0,010
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0106	0,0001	0,0027	11,57	0,0105	98,98	0,121
Mo ₂ ZrCN	0,0089	0,0002	0,0049	5,53	0,0088	98,16	0,049
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0122	0,0001	0,0032	11,40	0,0120	98,79	0,137
Mo ₃ C ₂	0,0071	0,0001	0,0042	5,02	0,0069	97,98	0,035

Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0000	0,0008	3,51	0,0009	99,27	0,003
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0053	0,0001	0,0018	8,79	0,0052	98,93	0,046
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0082	0,0001	0,0028	8,78	0,0080	98,72	0,071
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0119	0,0001	0,0025	13,96	0,0118	99,09	0,164
Mo ₃ CN	0,0092	0,0002	0,0048	5,75	0,0091	98,25	0,052
Mo ₃ N ₂	0,0043	0,0001	0,0034	3,80	0,0042	97,70	0,016
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0004	0,69	0,0001	99,07	0,000
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0045	0,0000	0,0016	8,56	0,0044	99,06	0,038
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0048	0,0001	0,0028	5,15	0,0047	98,17	0,024
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0083	0,0001	0,0020	12,48	0,0082	99,11	0,102
Mo ₄ C ₃	0,0069	0,0001	0,0041	5,06	0,0068	98,11	0,034
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0071	0,0001	0,0020	10,69	0,0070	99,03	0,075
Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0040	0,0001	0,0023	5,32	0,0039	98,09	0,021
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0063	0,0001	0,0024	7,89	0,0062	98,54	0,049
Mo ₄ N ₃	0,0039	0,0001	0,0034	3,48	0,0038	97,52	0,013
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0001	0,0022	6,82	0,0050	98,47	0,034
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0001	0,0025	4,03	0,0033	97,69	0,013
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0026	0,0001	0,0017	4,54	0,0025	98,03	0,012
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0044	0,0001	0,0028	4,77	0,0043	98,01	0,021
MoCrC	0,0071	0,0002	0,0097	2,19	0,0069	96,58	0,015
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0087	0,0002	0,0061	4,27	0,0085	97,89	0,036
MoWC	0,0039	0,0001	0,0054	2,15	0,0037	96,58	0,008
MoWC(NCO) ₂	0,0182	0,0002	0,0034	15,88	0,0180	99,03	0,286
MoWC(OCN) ₂	0,0212	0,0002	0,0035	18,29	0,0210	99,11	0,383
MoWC(SCN) ₂	0,0416	0,0002	0,0032	39,33	0,0414	99,54	1,629
MoWCCl ₂	0,0231	0,0002	0,0046	14,99	0,0229	98,94	0,343
MoWCF ₂	0,0032	0,0001	0,0085	1,12	0,0031	97,36	0,003
MoWCO ₂ -(model2)	0,0052	0,0001	0,0035	4,39	0,0051	97,83	0,022
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,1839	0,0008	0,0157	35,17	0,1832	99,59	6,443
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0544	0,0005	0,0142	11,53	0,0539	99,08	0,622
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0271	0,0004	0,0129	6,32	0,0267	98,48	0,169
Nb _{1,33} C	2,6409	0,0026	0,0103	768,46	2,6383	99,90	2027,460
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0160	0,0003	0,0120	4,01	0,0157	97,87	0,063
Nb ₂ C	0,0084	0,0002	0,0084	3,03	0,0082	97,26	0,025

Nb ₂ C(OH) ₂	0,0089	0,0001	0,0043	6,26	0,0088	98,46	0,055
Nb ₂ CF ₂	0,0056	0,0001	0,0049	3,45	0,0055	97,59	0,019
Nb ₂ CO ₂	0,0080	0,0002	0,0054	4,49	0,0079	97,87	0,035
Nb ₂ CrCN	0,0129	0,0002	0,0058	6,61	0,0127	98,32	0,084
Nb ₂ CrCNO ₂	0,0141	0,0002	0,0034	12,37	0,0139	98,88	0,173
Nb ₂ HfCN	0,0070	0,0001	0,0040	5,28	0,0069	98,11	0,036
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0088	0,0001	0,0023	11,31	0,0087	98,90	0,099
Nb ₂ MoCN	0,0100	0,0002	0,0050	5,95	0,0098	98,25	0,058
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0118	0,0001	0,0029	12,10	0,0117	98,84	0,141
Nb ₂ N	0,0064	0,0002	0,0079	2,44	0,0062	96,82	0,015
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0090	0,0002	0,0049	5,52	0,0089	98,19	0,049
Nb ₂ NF ₂	0,0053	0,0001	0,0035	4,47	0,0051	97,86	0,023
Nb ₂ NH ₂	0,0039	0,0001	0,0055	2,12	0,0037	96,80	0,008
Nb ₂ NO ₂	0,0071	0,0002	0,0052	4,08	0,0069	97,71	0,028
Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,71	0,0001	97,94	0,000
Nb ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	5,74	0,0002	98,19	0,001
Nb ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	11,61	0,0002	98,86	0,002
Nb ₂ TiCN	0,0122	0,0002	0,0059	6,20	0,0119	98,20	0,074
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,0002	0,0034	12,80	0,0142	98,94	0,182
Nb ₂ VCN	0,0119	0,0002	0,0059	6,01	0,0117	98,28	0,070
Nb ₂ VCNO ₂	0,0134	0,0002	0,0034	11,78	0,0133	98,85	0,157
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0050	0,0001	0,0028	5,27	0,0049	98,10	0,026
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0067	0,0001	0,0042	4,73	0,0065	97,97	0,031
Nb ₂ ZrCN	0,0093	0,0002	0,0051	5,44	0,0091	98,05	0,049
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0109	0,0001	0,0029	11,10	0,0108	98,81	0,120
Nb ₃ C ₂	0,0079	0,0002	0,0053	4,44	0,0077	97,88	0,034
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0067	0,0000	0,0020	10,24	0,0067	99,32	0,068
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0056	0,0001	0,0026	6,38	0,0055	98,42	0,035
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0039	0,0001	0,0022	5,45	0,0039	98,44	0,021
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0094	0,0001	0,0032	8,90	0,0093	98,74	0,082
Nb ₃ CN	0,0095	0,0002	0,0053	5,43	0,0093	98,20	0,051
Nb ₃ CNO ₂	0,0116	0,0001	0,0030	11,77	0,0115	98,87	0,135
Nb ₃ N ₂	0,0047	0,0001	0,0038	3,70	0,0045	97,61	0,017
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,0000	0,0006	1,31	0,0002	98,86	0,000

Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0046	0,0000	0,0017	8,04	0,0045	98,99	0,036
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0047	0,0001	0,0023	6,19	0,0046	98,51	0,028
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0027	8,47	0,0077	98,71	0,065
Nb ₄ C ₃	0,0059	0,0001	0,0040	4,43	0,0058	97,90	0,026
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0057	0,0000	0,0015	11,47	0,0056	99,35	0,064
Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0044	0,0001	0,0019	6,90	0,0043	98,54	0,030
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0032	0,0001	0,0018	5,14	0,0031	98,24	0,016
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0070	0,0001	0,0025	8,36	0,0069	98,62	0,058
Nb ₄ N ₃	0,0042	0,0001	0,0038	3,29	0,0041	97,42	0,013
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0056	0,0001	0,0020	8,24	0,0055	98,83	0,046
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0035	0,0001	0,0023	4,57	0,0034	97,89	0,016
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0054	0,0001	0,0026	6,32	0,0053	98,27	0,034
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0006	0,0000	0,0006	2,73	0,0005	99,05	0,001
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0034	0,0001	0,0015	6,77	0,0033	98,52	0,023
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0055	0,0001	0,0018	9,19	0,0054	98,67	0,050
NbCrN(NCO) ₂	0,0433	0,0003	0,0047	27,59	0,0430	99,33	1,185
NbCrN(NCS) ₂	0,7617	0,0010	0,0024	938,75	0,7607	99,87	714,112
NbCrN(OCN) ₂	0,0321	0,0003	0,0053	18,32	0,0318	99,08	0,583
NbCrN(SCN) ₂	0,0725	0,0003	0,0044	48,95	0,0722	99,60	3,535
NbCrNBr ₂	0,0477	0,0004	0,0052	27,53	0,0473	99,22	1,302
NbCrNCl ₂	0,0362	0,0004	0,0070	15,47	0,0359	98,93	0,555
NbCrNF ₂	0,0079	0,0002	0,0065	3,65	0,0077	97,65	0,028
NbMoN(NCO) ₂	0,0217	0,0002	0,0045	14,40	0,0215	98,98	0,309
NbMoN(NCS) ₂	0,4042	0,0007	0,0041	297,17	0,4035	99,82	119,912
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,0000	0,0004	0,23	0,0000	95,90	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0594	0,0002	0,0039	45,84	0,0592	99,59	2,713
NbMoNBr ₂	0,0373	0,0003	0,0048	23,54	0,0370	99,20	0,872
NbMoNCl ₂	0,0262	0,0003	0,0060	13,04	0,0259	98,86	0,338
NbMoN(CN) ₂	0,0119	0,0002	0,0052	6,91	0,0117	98,28	0,081
NbMoNF ₂	0,0072	0,0002	0,0057	3,77	0,0070	97,58	0,026
NbWN(NCO) ₂	0,0171	0,0002	0,0035	14,74	0,0169	98,96	0,249
NbWN(NCS) ₂	0,3290	0,0006	0,0032	307,15	0,3284	99,82	100,883
NbWN(OCN) ₂	0,0189	0,0002	0,0035	16,13	0,0187	99,04	0,302
NbWN(SCN) ₂	0,0440	0,0002	0,0032	40,69	0,0438	99,52	1,783

NbWNBBr ₂	0,0328	0,0002	0,0038	25,94	0,0325	99,26	0,844
NbWNBCl ₂	0,0218	0,0002	0,0046	14,23	0,0216	98,90	0,307
NbWNB(CN) ₂	0,0071	0,0001	0,0043	4,90	0,0069	97,93	0,034
NbWNBf ₂	0,0054	0,0001	0,0046	3,54	0,0053	97,64	0,019
Sc ₂ C	0,0104	0,0004	0,0162	1,92	0,0100	96,40	0,019
Sc ₂ C(CN) ₂	0,0152	0,0003	0,0016	27,72	0,0149	97,85	0,412
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0014	0,0000	0,0014	2,82	0,0013	98,94	0,004
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,4379	0,0006	0,0052	251,32	0,4373	99,86	109,895
Sc ₂ C(OCI) ₂	0,0469	0,0005	0,0079	17,78	0,0464	99,04	0,825
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0018	0,0000	0,0019	2,95	0,0018	98,92	0,005
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0125	0,0002	0,0072	5,17	0,0123	98,29	0,064
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0558	0,0004	0,0062	27,18	0,0554	99,34	1,506
Sc ₂ CBr ₂	0,0348	0,0004	0,0066	15,82	0,0345	98,99	0,546
Sc ₂ CCl ₂	0,0397	0,0004	0,0092	12,93	0,0393	98,87	0,508
Sc ₂ CF ₂	0,0087	0,0002	0,0084	3,13	0,0085	97,36	0,027
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0124	0,0003	0,0093	3,99	0,0121	97,70	0,048
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0140	0,0003	0,0118	3,57	0,0137	97,56	0,049
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0176	0,0004	0,0125	4,24	0,0172	97,79	0,073
Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0144	0,0004	0,0116	3,70	0,0140	97,49	0,052
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0117	0,0003	0,0093	3,80	0,0114	97,64	0,043
Sc ₂ N	0,0077	0,0003	0,0137	1,69	0,0074	96,29	0,013
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0119	0,0002	0,0071	5,00	0,0117	98,22	0,058
Sc ₂ Nf ₂	0,0074	0,0002	0,0077	2,89	0,0072	97,26	0,021
Sc ₂ Nf ₂ -(model3)	0,0149	0,0003	0,0115	3,88	0,0145	97,72	0,056
Sc ₂ Nf ₂ -(model4)	0,0114	0,0003	0,0094	3,65	0,0112	97,54	0,041
Sc ₂ NO ₂	0,0111	0,0003	0,0093	3,56	0,0108	97,57	0,038
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0115	0,0002	0,0072	4,78	0,0113	97,92	0,054
Sc ₃ C ₂	0,0088	0,0002	0,0097	2,72	0,0085	97,15	0,023
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0092	0,0001	0,0039	7,10	0,0091	99,05	0,065
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0058	0,0001	0,0027	6,46	0,0057	98,56	0,037
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0001	0,0043	5,41	0,0076	98,34	0,041
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,0002	0,0074	5,23	0,0126	98,08	0,066
Sc ₃ N ₂	0,0058	0,0002	0,0080	2,16	0,0056	96,71	0,012
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0084	0,0001	0,0033	7,68	0,0084	99,14	0,064

Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0065	0,0001	0,0042	4,64	0,0064	98,04	0,030
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0096	0,0002	0,0053	5,45	0,0095	98,16	0,052
Sc ₄ C ₃	0,0087	0,0002	0,0080	3,26	0,0084	97,51	0,028
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0001	0,0029	7,88	0,0075	99,01	0,059
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0067	0,0001	0,0037	5,38	0,0066	98,18	0,035
Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0103	0,0002	0,0044	7,04	0,0101	98,41	0,071
Sc ₄ N ₃	0,0046	0,0001	0,0062	2,23	0,0045	96,84	0,010
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0084	0,0001	0,0031	8,03	0,0083	98,97	0,066
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0053	0,0001	0,0037	4,30	0,0052	97,97	0,022
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0078	0,0001	0,0043	5,45	0,0076	98,17	0,041
ScCrC(OCN) ₂	0,0393	0,0004	0,0066	17,75	0,0390	99,11	0,692
ScCrC(OH) ₂	0,0171	0,0003	0,0072	7,13	0,0168	98,45	0,120
ScCrCF ₂	0,0101	0,0003	0,0086	3,50	0,0098	97,45	0,034
ScHfN(SCN) ₂	0,0392	0,0002	0,0035	33,21	0,0390	99,51	1,295
ScHfNO ₂	0,0060	0,0001	0,0048	3,80	0,0059	97,53	0,022
ScNbCO ₂	0,0091	0,0002	0,0069	3,94	0,0089	97,57	0,035
ScTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,94	0,0001	97,75	0,000
ScTiNO ₂	0,0102	0,0002	0,0080	3,82	0,0100	97,63	0,038
ScVCO ₂	0,0107	0,0003	0,0086	3,76	0,0105	97,61	0,039
ScYC(CN) ₂	0,0121	0,0002	0,0071	5,11	0,0119	98,12	0,061
ScYC(NCO) ₂	0,0224	0,0003	0,0060	11,20	0,0222	98,82	0,248
ScYC(NCS) ₂	0,2137	0,0005	0,0056	113,85	0,2132	99,78	24,278
ScYC(OCI) ₂	0,0248	0,0003	0,0070	10,63	0,0245	98,72	0,260
ScYC(OCN) ₂	0,0270	0,0003	0,0058	14,09	0,0267	98,96	0,377
ScYC(OH) ₂	0,0112	0,0002	0,0061	5,53	0,0111	98,32	0,061
ScYC(SCN) ₂	0,0484	0,0003	0,0048	30,00	0,0482	99,45	1,445
ScYCB ₂	0,0328	0,0003	0,0055	17,91	0,0325	99,10	0,582
ScYCCl ₂	0,0263	0,0003	0,0079	9,93	0,0259	98,68	0,257
ScYCF ₂	0,0095	0,0002	0,0081	3,53	0,0092	97,46	0,033
ScZrN(SCN) ₂	0,0589	0,0003	0,0048	37,07	0,0586	99,52	2,173
ScZrNO ₂	0,0090	0,0002	0,0070	3,87	0,0088	97,70	0,034
Ta ₂ C	0,0001	0,0000	0,0000	3,47	0,0001	97,55	0,000
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,07	0,0001	98,93	0,001
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	3,57	0,0000	97,71	0,000

Ta ₂ CO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	4,76	0,0001	97,99	0,000
Ta ₂ CrCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,82	0,0001	98,19	0,000
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,73	0,0001	98,84	0,001
Ta ₂ HfCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	97,94	0,000
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,04	0,0001	98,79	0,001
Ta ₂ MoCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,38	0,0001	98,07	0,000
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,54	0,0001	98,78	0,001
Ta ₂ N	0,0000	0,0000	0,0000	2,80	0,0000	97,18	0,000
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,95	0,0001	99,06	0,001
Ta ₂ NbCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,23	0,0001	98,09	0,000
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,47	0,0001	98,75	0,001
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,0000	0,0000	5,17	0,0000	98,21	0,000
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,0000	0,0000	2,08	0,0000	96,72	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,18	0,0000	97,79	0,000
Ta ₂ TiCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,57	0,0001	98,14	0,000
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	11,15	0,0001	98,85	0,001
Ta ₂ VCN	0,0001	0,0000	0,0000	5,43	0,0001	98,19	0,000
Ta ₂ VCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,20	0,0001	98,78	0,001
Ta ₂ ZrCN	0,0001	0,0000	0,0000	4,97	0,0001	98,00	0,000
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,11	0,0001	98,74	0,001
Ta ₃ C ₂	0,0001	0,0000	0,0000	5,17	0,0001	98,15	0,000
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,82	0,0000	99,33	0,000
Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,19	0,0000	98,82	0,000
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,66	0,0000	98,41	0,000
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,32	0,0001	98,69	0,001
Ta ₃ CN	0,0000	0,0000	0,0000	4,50	0,0000	97,95	0,000
Ta ₃ CNO ₂	0,0001	0,0000	0,0000	10,30	0,0001	98,80	0,001
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,42	0,0000	97,82	0,000
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,32	0,0000	98,88	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,67	0,0000	99,10	0,000
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,98	0,0000	98,38	0,000
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0001	0,0000	0,0000	9,65	0,0001	98,84	0,001
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,0000	0,0000	5,28	0,0000	98,12	0,000
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	14,15	0,0000	99,40	0,001

Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	7,55	0,0000	98,54	0,000
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,80	0,0000	98,33	0,000
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,62	0,0000	98,58	0,000
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,0000	0,0000	3,83	0,0000	97,65	0,000
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	8,89	0,0000	98,93	0,000
Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,89	0,0000	98,01	0,000
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,0000	0,0000	4,32	0,0000	98,09	0,000
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,0000	0,0000	6,74	0,0000	98,32	0,000
TaCrN(OCN) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	16,74	0,0004	99,03	0,006
TaCrN(SCN) ₂	0,0009	0,0000	0,0001	38,32	0,0009	99,49	0,035
TaCrNBr ₂	0,0009	0,0000	0,0001	31,97	0,0009	99,35	0,030
TaCrNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	17,09	0,0005	99,05	0,008
TaCrNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,46	0,0001	97,60	0,000
TaMoN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,94	0,0003	98,92	0,004
TaMoN(NCS) ₂	0,0056	0,0000	0,0001	218,95	0,0056	99,81	1,224
TaMoN(SCN) ₂	0,0006	0,0000	0,0000	33,68	0,0006	99,62	0,019
TaMoNBr ₂	0,0007	0,0000	0,0001	22,17	0,0007	99,16	0,015
TaMoNCl ₂	0,0004	0,0000	0,0001	12,60	0,0004	98,82	0,005
TaMoNF ₂	0,0001	0,0000	0,0001	3,63	0,0001	97,52	0,000
TaWN(CN) ₂	0,0001	0,0000	0,0001	5,17	0,0001	98,04	0,001
TaWN(NCO) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,96	0,0003	98,91	0,004
TaWNBr ₂	0,0007	0,0000	0,0001	24,06	0,0007	99,21	0,018
TaWNCl ₂	0,0005	0,0000	0,0001	15,94	0,0005	99,00	0,007
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,0193	0,0003	0,0092	6,32	0,0189	98,24	0,120
Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,0339	0,0004	0,0091	11,24	0,0336	98,89	0,377
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,0840	0,0005	0,0099	25,49	0,0835	99,39	2,128
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,0198	0,0004	0,0141	4,20	0,0194	97,92	0,082
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,0442	0,0005	0,0164	8,06	0,0437	98,91	0,352
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0104	0,0001	0,0014	21,78	0,0103	99,34	0,225
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0053	0,0001	0,0013	12,37	0,0052	99,01	0,064
Ti ₂ C	0,0104	0,0003	0,0140	2,23	0,0100	96,68	0,022
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0148	0,0002	0,0067	6,65	0,0145	98,51	0,097
Ti ₂ CCl ₂	0,0059	0,0002	0,0061	2,92	0,0058	97,28	0,017
Ti ₂ CF ₂	0,0077	0,0002	0,0073	3,16	0,0075	97,49	0,024

Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0151	0,0003	0,0096	4,73	0,0148	97,90	0,070
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0166	0,0003	0,0107	4,64	0,0163	97,97	0,076
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0247	0,0004	0,0124	5,95	0,0243	98,30	0,144
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,0102	0,0002	0,0079	3,89	0,0100	97,70	0,039
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,0113	0,0002	0,0079	4,31	0,0110	97,80	0,048
Ti ₂ CO _{0,67} F _{1,33}	0,0114	0,0003	0,0079	4,32	0,0112	97,77	0,048
Ti ₂ CO _{0,89} F _{1,11}	0,0121	0,0002	0,0080	4,55	0,0119	98,02	0,054
Ti ₂ CO _{1,33} F _{0,67}	0,0121	0,0003	0,0081	4,49	0,0119	97,82	0,053
Ti ₂ CO ₂	0,0108	0,0003	0,0083	3,88	0,0105	97,66	0,041
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0125	0,0003	0,0082	4,55	0,0122	97,86	0,056
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0143	0,0003	0,0103	4,18	0,0140	97,73	0,059
Ti ₂ CrCN	0,0234	0,0004	0,0091	7,67	0,0230	98,44	0,177
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0247	0,0003	0,0054	13,65	0,0244	98,89	0,333
Ti ₂ HfCN	0,0104	0,0002	0,0054	5,80	0,0102	98,25	0,059
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0136	0,0002	0,0033	12,29	0,0134	98,86	0,165
Ti ₂ MoCN	0,0162	0,0003	0,0074	6,62	0,0160	98,34	0,106
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0188	0,0002	0,0044	12,86	0,0186	98,85	0,239
Ti ₂ N	0,0075	0,0003	0,0122	1,84	0,0072	96,23	0,013
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0130	0,0002	0,0065	5,97	0,0128	98,33	0,076
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0054	5,29	0,0093	98,10	0,049
Ti ₂ NbC ₂	0,0061	0,0002	0,0064	2,87	0,0059	97,32	0,017
Ti ₂ NbCN	0,0166	0,0003	0,0075	6,68	0,0163	98,33	0,109
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0194	0,0002	0,0045	13,07	0,0192	98,89	0,250
Ti ₂ NF ₂	0,0067	0,0002	0,0071	2,84	0,0065	97,19	0,019
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0147	0,0003	0,0091	4,83	0,0144	97,85	0,069
Ti ₂ NO ₂	0,0095	0,0002	0,0076	3,72	0,0092	97,69	0,034
Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0268	0,0004	0,0124	6,50	0,0264	98,47	0,172
Ti ₂ NS ₂	0,0060	0,0002	0,0056	3,18	0,0058	97,25	0,018
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	5,30	0,0001	98,14	0,000
Ti ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	2,73	0,0001	97,15	0,000
Ti ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,40	0,0002	98,37	0,001
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,0000	0,0001	12,66	0,0003	98,85	0,003
Ti ₂ VC ₂	0,0084	0,0002	0,0078	3,24	0,0082	97,49	0,027
Ti ₂ VCN	0,0219	0,0003	0,0092	7,14	0,0215	98,47	0,154

Ti ₂ VCNO ₂	0,0239	0,0003	0,0054	13,14	0,0236	98,84	0,310
Ti ₂ ZrCN	0,0154	0,0003	0,0076	6,10	0,0151	98,18	0,092
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0187	0,0002	0,0044	12,67	0,0185	98,84	0,234
Ti ₃ C ₂	0,0094	0,0002	0,0087	3,25	0,0092	97,45	0,030
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0369	0,0002	0,0043	25,61	0,0367	99,39	0,940
Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,0449	0,0003	0,0044	30,93	0,0447	99,44	1,383
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,0140	0,0002	0,0046	9,15	0,0138	98,64	0,127
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0169	0,0001	0,0035	14,62	0,0168	99,37	0,246
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0070	0,0001	0,0027	7,80	0,0069	98,66	0,054
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0068	0,0001	0,0036	5,66	0,0067	98,31	0,038
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,0001	0,0044	5,34	0,0077	98,15	0,041
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,0120	0,0002	0,0049	7,32	0,0118	98,55	0,087
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0035	0,0001	0,0022	4,68	0,0034	98,25	0,016
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0021	0,0000	0,0015	4,19	0,0020	98,37	0,009
Ti ₃ CN	0,0207	0,0003	0,0096	6,49	0,0203	98,37	0,132
Ti ₃ CNF ₂	0,0314	0,0003	0,0063	14,83	0,0310	98,95	0,460
Ti ₃ CNO ₂	0,0279	0,0003	0,0057	14,60	0,0276	98,98	0,403
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0129	0,0001	0,0032	12,24	0,0128	99,33	0,157
Ti ₃ N ₂	0,0060	0,0002	0,0072	2,50	0,0058	96,82	0,015
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0061	0,0001	0,0038	4,88	0,0060	98,16	0,029
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,0103	0,0001	0,0044	7,02	0,0102	98,57	0,072
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,0131	0,0002	0,0046	8,50	0,0130	98,58	0,110
Ti ₄ C ₃	0,0076	0,0002	0,0069	3,30	0,0074	97,55	0,024
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,0001	0,0034	10,49	0,0117	99,02	0,122
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0001	0,0038	4,87	0,0060	98,04	0,029
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0092	0,0001	0,0039	7,06	0,0091	98,63	0,064
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0090	0,0002	0,0042	6,43	0,0088	98,30	0,057
Ti ₄ N ₃	0,0045	0,0001	0,0056	2,42	0,0043	96,86	0,010
Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0148	0,0002	0,0036	12,38	0,0146	98,92	0,181
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0048	0,0001	0,0034	4,28	0,0047	97,84	0,020
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0058	0,0001	0,0035	4,91	0,0057	97,98	0,028
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0068	0,0001	0,0039	5,25	0,0066	98,05	0,035
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0170	0,0001	0,0029	17,79	0,0169	99,23	0,301
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0087	0,0001	0,0036	7,15	0,0085	98,40	0,061

Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0084	0,0001	0,0032	7,78	0,0082	98,52	0,064
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0059	0,0001	0,0030	5,83	0,0058	98,13	0,034
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,0123	0,0001	0,0027	13,90	0,0122	99,02	0,170
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0077	0,0001	0,0021	11,17	0,0076	98,91	0,085
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,0125	0,0001	0,0021	18,03	0,0124	99,21	0,223
Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0075	0,0001	0,0017	13,10	0,0074	99,08	0,097
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0133	0,0001	0,0017	23,77	0,0132	99,39	0,314
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0068	0,0001	0,0015	13,71	0,0067	99,15	0,092
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0109	0,0001	0,0016	20,03	0,0108	99,27	0,216
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0052	0,0001	0,0015	10,46	0,0052	98,83	0,054
TiCrCO ₂	0,0100	0,0002	0,0075	4,01	0,0098	97,73	0,039
TiHfCO ₂	0,0067	0,0001	0,0039	5,20	0,0066	98,04	0,034
TiHfN(NO) ₂	0,0052	0,0001	0,0046	3,42	0,0051	97,48	0,017
TiMoCO ₂	0,0068	0,0002	0,0059	3,51	0,0067	97,53	0,023
TiNbC	0,0086	0,0003	0,0134	1,92	0,0083	96,42	0,016
TiVC	0,0122	0,0004	0,0183	2,01	0,0118	96,65	0,024
TiWCO ₂	0,0048	0,0001	0,0040	3,58	0,0047	97,50	0,017
TiZrCO ₂	0,0102	0,0002	0,0068	4,48	0,0100	97,84	0,045
V ₂ C	0,0107	0,0003	0,0125	2,58	0,0104	96,98	0,027
V ₂ C(OH) ₂	0,0152	0,0002	0,0066	6,96	0,0150	98,47	0,104
V ₂ CBr ₂	0,0038	0,0001	0,0043	2,60	0,0037	97,09	0,010
V ₂ CF(OH)	0,0105	0,0002	0,0079	3,98	0,0103	97,81	0,041
V ₂ CF ₂	0,0078	0,0002	0,0070	3,34	0,0076	97,54	0,025
V ₂ CO ₂	0,0111	0,0002	0,0076	4,42	0,0109	97,79	0,048
V ₂ CrCN	0,0230	0,0003	0,0088	7,88	0,0227	98,52	0,178
V ₂ CrCNO ₂	0,0231	0,0002	0,0048	14,41	0,0228	98,94	0,329
V ₂ HfCN	0,0104	0,0002	0,0053	5,94	0,0102	98,18	0,061
V ₂ HfCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0030	11,89	0,0119	98,88	0,141
V ₂ MoCN	0,0162	0,0003	0,0071	6,80	0,0159	98,36	0,108
V ₂ MoCNO ₂	0,0172	0,0002	0,0040	13,03	0,0170	98,87	0,222
V ₂ N	0,0078	0,0003	0,0115	2,02	0,0075	96,65	0,015
V ₂ N(OH) ₂	0,0117	0,0002	0,0067	5,23	0,0115	98,14	0,060
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,0002	0,0053	5,40	0,0094	98,06	0,051
V ₂ NbCN	0,0165	0,0003	0,0073	6,82	0,0162	98,36	0,111

V ₂ NbCNO ₂	0,0195	0,0002	0,0038	15,43	0,0193	99,04	0,297
V ₂ NF ₂	0,0066	0,0002	0,0070	2,84	0,0064	97,13	0,018
V ₂ NO ₂	0,0093	0,0002	0,0074	3,79	0,0091	97,56	0,034
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,0000	0,0000	4,84	0,0001	98,06	0,000
V ₂ TaC ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,90	0,0001	98,07	0,001
V ₂ TaCN	0,0002	0,0000	0,0001	6,60	0,0002	98,34	0,001
V ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	12,47	0,0002	98,87	0,003
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0150	0,0003	0,0074	6,05	0,0147	98,23	0,089
V ₂ TiC ₂	0,0173	0,0003	0,0093	5,60	0,0170	98,16	0,095
V ₂ TiCN	0,0215	0,0003	0,0090	7,18	0,0212	98,43	0,152
V ₂ TiCNO ₂	0,0228	0,0002	0,0049	14,03	0,0225	98,92	0,316
V ₂ ZrCN	0,0230	0,0003	0,0088	7,88	0,0227	98,87	0,179
V ₂ ZrCNO ₂	0,0169	0,0002	0,0040	12,57	0,0167	98,89	0,210
V ₃ C ₂	0,0081	0,0002	0,0077	3,14	0,0079	97,34	0,025
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0210	0,0001	0,0033	19,40	0,0209	99,43	0,406
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0039	0,0001	0,0022	5,25	0,0038	98,33	0,020
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0118	0,0002	0,0040	8,82	0,0116	98,69	0,102
V ₃ C ₂ F ₂	0,0086	0,0001	0,0036	7,22	0,0085	98,61	0,061
V ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,0002	0,0046	8,32	0,0126	98,58	0,105
V ₃ CN	0,0203	0,0003	0,0092	6,65	0,0200	98,38	0,133
V ₃ CNO ₂	0,0272	0,0003	0,0056	14,58	0,0270	99,00	0,393
V ₃ N ₂	0,0053	0,0002	0,0059	2,73	0,0052	97,13	0,014
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0440	0,0001	0,0046	28,88	0,0439	99,83	1,269
V ₃ N ₂ F ₂	0,0069	0,0001	0,0030	6,78	0,0068	98,52	0,046
V ₃ N ₂ H ₂	0,0099	0,0001	0,0042	7,11	0,0098	98,56	0,070
V ₃ N ₂ O ₂	0,0252	0,0003	0,0051	14,77	0,0249	98,96	0,368
V ₄ C ₃	0,0080	0,0002	0,0062	3,87	0,0078	97,60	0,030
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0170	0,0001	0,0030	16,91	0,0169	99,28	0,286
V ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,0001	0,0034	5,33	0,0060	98,06	0,032
V ₄ C ₃ H ₂	0,0049	0,0001	0,0032	4,56	0,0048	98,03	0,022
V ₄ C ₃ O ₂	0,0088	0,0002	0,0039	6,77	0,0086	98,27	0,059
V ₄ N ₃	0,0051	0,0001	0,0056	2,74	0,0050	97,13	0,014
V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0095	0,0001	0,0033	8,64	0,0094	98,79	0,081
V ₄ N ₃ F ₂	0,0047	0,0001	0,0035	4,01	0,0046	97,65	0,018

V ₄ N ₃ H ₂	0,0037	0,0001	0,0030	3,72	0,0037	97,86	0,014
V ₄ N ₃ O ₂	0,0064	0,0001	0,0037	5,25	0,0063	98,05	0,033
VCrN(NCS) ₂	0,7400	0,0013	0,0047	475,11	0,7386	99,82	350,941
VCrN(SCN) ₂	0,0943	0,0004	0,0052	54,23	0,0939	99,61	5,093
VCrNBr ₂	0,0710	0,0004	0,0059	36,09	0,0706	99,40	2,546
VCrNF ₂	0,0081	0,0002	0,0073	3,33	0,0079	97,49	0,026
VMoN(NCO) ₂	0,0271	0,0003	0,0052	15,74	0,0268	99,00	0,422
VMoN(NCS) ₂	0,5221	0,0009	0,0045	351,85	0,5212	99,82	183,388
VMoN(OCN) ₂	0,0309	0,0003	0,0052	17,88	0,0306	99,08	0,547
VMoN(SCN) ₂	0,0689	0,0003	0,0044	46,91	0,0686	99,59	3,219
VMoNBr ₂	0,0543	0,0003	0,0051	31,91	0,0540	99,38	1,723
VMoNCl ₂	0,0391	0,0004	0,0067	17,58	0,0388	99,03	0,681
VNbC	0,0084	0,0003	0,0129	1,95	0,0081	96,48	0,016
VNbCF ₂ -(model4)	0,0102	0,0002	0,0079	3,89	0,0100	97,71	0,039
VWN(NCO) ₂	0,0168	0,0002	0,0039	12,94	0,0166	98,89	0,215
VWN(OCN) ₂	0,0216	0,0002	0,0039	16,67	0,0214	99,01	0,357
VWNBr ₂	0,0356	0,0003	0,0041	25,93	0,0353	99,24	0,915
VWNCl ₂	0,0289	0,0003	0,0050	17,49	0,0286	99,05	0,500
VWNF ₂	0,0049	0,0001	0,0044	3,35	0,0048	97,43	0,016
W _{1.33} C	0,8719	0,0007	0,0058	447,92	0,8712	99,91	390,223
W _{1.33} C(OH) ₂	0,0090	0,0001	0,0036	7,47	0,0089	98,52	0,066
W _{1.33} CO ₂	0,0072	0,0001	0,0041	5,33	0,0071	98,07	0,038
W ₂ C	0,0047	0,0001	0,0038	3,67	0,0046	97,67	0,017
W ₂ C(OH) ₂	0,0080	0,0001	0,0020	12,03	0,0079	99,07	0,095
W ₂ CCl ₂	0,0192	0,0002	0,0038	15,22	0,0191	98,98	0,290
W ₂ CF ₂	0,0034	0,0001	0,0020	5,16	0,0033	98,16	0,017
W ₂ CO ₂	0,0043	0,0001	0,0030	4,28	0,0042	98,18	0,018
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0040	0,0000	0,0012	9,68	0,0039	98,76	0,038
W ₂ HfC ₂	0,0022	0,0001	0,0023	2,85	0,0021	97,24	0,006
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0063	0,0001	0,0015	12,57	0,0062	98,94	0,078
W ₂ N	0,0031	0,0001	0,0038	2,40	0,0030	96,93	0,007
W ₂ N(OH) ₂	0,0095	0,0001	0,0018	15,75	0,0094	99,22	0,148
W ₂ NF ₂	0,0032	0,0001	0,0018	5,33	0,0031	98,17	0,017
W ₂ NO ₂	0,0044	0,0001	0,0022	5,96	0,0043	98,22	0,025

W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0055	0,0001	0,0019	8,88	0,0054	98,65	0,048
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0081	0,0001	0,0021	11,83	0,0080	98,89	0,095
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0051	0,0001	0,0016	9,80	0,0051	98,77	0,050
W ₂ ZrC ₂	0,0026	0,0001	0,0027	2,90	0,0026	97,28	0,007
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0078	0,0001	0,0018	13,03	0,0077	99,01	0,100
W ₃ C ₂	0,0023	0,0001	0,0023	2,95	0,0022	96,53	0,006
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0090	0,0001	0,0015	18,08	0,0089	99,31	0,161
W ₃ C ₂ F ₂	0,0031	0,0000	0,0009	9,75	0,0031	99,10	0,030
W ₃ C ₂ O ₂	0,0054	0,0001	0,0014	11,45	0,0053	98,88	0,061
W ₃ N ₂	0,0024	0,0001	0,0024	3,06	0,0023	96,82	0,007
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0001	0,03	0,0000	95,84	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0022	0,0000	0,0008	8,60	0,0022	99,14	0,019
W ₃ N ₂ O ₂	0,0069	0,0001	0,0018	11,80	0,0068	98,88	0,080
W ₄ C ₃	0,0040	0,0001	0,0023	5,31	0,0039	98,11	0,021
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0041	0,0000	0,0011	10,90	0,0040	99,06	0,044
W ₄ C ₃ F ₂	0,0023	0,0000	0,0013	5,47	0,0023	98,18	0,013
W ₄ C ₃ H ₂	0,0028	0,0001	0,0015	5,58	0,0027	98,15	0,015
W ₄ C ₃ O ₂	0,0041	0,0001	0,0015	8,15	0,0040	98,50	0,033
W ₄ N ₃	0,0051	0,0001	0,0021	7,26	0,0050	98,41	0,036
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0050	0,0001	0,0013	11,81	0,0049	98,87	0,058
W ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,0001	0,0016	6,11	0,0033	98,24	0,020
W ₄ N ₃ H ₂	0,0022	0,0000	0,0014	4,81	0,0021	97,96	0,010
W ₄ N ₃ O ₂	0,0025	0,0001	0,0016	4,56	0,0024	97,90	0,011
WCrC	0,0048	0,0002	0,0063	2,29	0,0046	96,70	0,011
WCrCO ₂ -(model4)	0,0061	0,0001	0,0043	4,28	0,0060	97,80	0,026
Y ₂ C	0,0074	0,0002	0,0099	2,25	0,0072	96,83	0,016
Y ₂ C(CN) ₂	0,0126	0,0002	0,0057	6,71	0,0124	98,40	0,084
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0204	0,0002	0,0052	11,83	0,0201	98,91	0,238
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0478	0,0001	0,0032	44,84	0,0476	99,74	2,136
Y ₂ C(OCI) ₂	0,0270	0,0003	0,0055	14,65	0,0267	98,98	0,391
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0211	0,0002	0,0052	12,18	0,0209	98,85	0,254
Y ₂ C(OH) ₂	0,0072	0,0001	0,0050	4,34	0,0071	98,18	0,031
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0423	0,0002	0,0042	30,09	0,0420	99,48	1,265
Y ₂ CBr ₂	0,0218	0,0002	0,0050	13,08	0,0216	98,89	0,283

Y ₂ CCl ₂	0,0243	0,0003	0,0067	10,92	0,0240	98,83	0,262
Y ₂ CF ₂	0,0075	0,0002	0,0060	3,70	0,0073	97,68	0,027
Y ₂ CO ₂	0,0127	0,0002	0,0069	5,52	0,0124	98,11	0,069
Y ₂ N	0,0062	0,0002	0,0090	2,07	0,0060	96,64	0,012
Y ₂ N(OH) ₂	0,0072	0,0001	0,0047	4,55	0,0071	98,34	0,032
Y ₂ NF ₂	0,0061	0,0002	0,0054	3,39	0,0060	97,45	0,020
Y ₂ NO ₂	0,0110	0,0002	0,0068	4,81	0,0107	97,95	0,052
Y ₃ C ₂	0,0061	0,0001	0,0044	4,17	0,0060	97,82	0,025
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,0000	0,0012	2,42	0,0010	99,11	0,002
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,0001	0,0029	7,50	0,0071	98,64	0,053
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0082	0,0001	0,0021	11,79	0,0081	99,19	0,096
Y ₃ N ₂	0,0049	0,0001	0,0042	3,53	0,0048	97,59	0,017
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0086	0,0001	0,0024	10,83	0,0085	99,23	0,092
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0074	0,0001	0,0028	7,91	0,0073	98,60	0,058
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0072	0,0001	0,0022	9,72	0,0071	99,00	0,069
Y ₄ C ₃	0,0058	0,0001	0,0046	3,75	0,0057	97,78	0,021
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0011	2,10	0,0008	98,74	0,002
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0065	0,0001	0,0024	8,19	0,0064	98,74	0,052
Y ₄ C ₃ O ₂	0,0128	0,0001	0,0029	13,30	0,0126	98,94	0,168
Y ₄ N ₃	0,0042	0,0001	0,0046	2,74	0,0041	97,14	0,011
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0055	0,0001	0,0023	7,30	0,0054	98,78	0,040
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0063	0,0001	0,0032	5,82	0,0062	98,21	0,036
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,0001	0,0027	6,68	0,0060	98,46	0,040
YCrC(NCO) ₂	0,0238	0,0003	0,0054	13,25	0,0236	98,94	0,312
YCrC(NCS) ₂	0,3030	0,0006	0,0053	171,18	0,3024	99,81	51,767
YCrC(OCN) ₂	0,0253	0,0003	0,0053	14,42	0,0250	98,99	0,361
YCrC(OH) ₂	0,0130	0,0002	0,0053	7,34	0,0129	98,53	0,094
YCrCBr ₂	0,0362	0,0003	0,0055	19,63	0,0359	99,15	0,705
YCrCCl ₂	0,0305	0,0004	0,0075	12,27	0,0302	98,83	0,370
YCrCF ₂	0,0093	0,0002	0,0065	4,28	0,0091	97,85	0,039
YHfN(SCN) ₂	0,0338	0,0002	0,0037	27,49	0,0336	99,38	0,922
YHfNO ₂	0,0053	0,0001	0,0036	4,38	0,0052	97,85	0,023
YMoN(NO) ₂	0,0063	0,0002	0,0055	3,43	0,0061	97,43	0,021
YNbCO ₂	0,0083	0,0002	0,0060	4,19	0,0082	97,84	0,034

YTaCO ₂	0,0001	0,0000	0,0001	4,22	0,0001	97,84	0,000
YTiN(NO) ₂	0,0088	0,0002	0,0064	4,10	0,0086	97,76	0,035
YTiNO ₂	0,0082	0,0002	0,0059	4,16	0,0080	97,84	0,033
YVCO ₂	0,0094	0,0002	0,0071	3,98	0,0092	97,75	0,036
YVNF ₂	0,0077	0,0002	0,0058	4,01	0,0075	97,77	0,030
YZrNO ₂	0,0074	0,0002	0,0050	4,48	0,0073	97,91	0,032
Zr ₂ C	0,0068	0,0002	0,0109	1,88	0,0066	96,51	0,012
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0081	0,0001	0,0044	5,60	0,0080	98,43	0,045
Zr ₂ CF ₂	0,0058	0,0001	0,0051	3,39	0,0057	97,47	0,019
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0070	0,0002	0,0054	3,86	0,0068	97,56	0,026
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0090	0,0002	0,0080	3,41	0,0088	97,56	0,030
Zr ₂ CO ₂	0,0087	0,0002	0,0059	4,43	0,0085	97,78	0,038
Zr ₂ CrCN	0,0106	0,0002	0,0059	5,38	0,0104	98,03	0,056
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0033	10,78	0,0118	98,76	0,128
Zr ₂ HfCN	0,0060	0,0001	0,0040	4,51	0,0059	97,84	0,027
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0080	0,0001	0,0023	10,55	0,0079	98,80	0,084
Zr ₂ MoCN	0,0084	0,0002	0,0050	5,01	0,0082	97,99	0,041
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0100	0,0001	0,0029	10,46	0,0099	98,80	0,103
Zr ₂ N	0,0062	0,0002	0,0083	2,25	0,0060	96,71	0,014
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0078	0,0001	0,0042	5,61	0,0077	98,40	0,043
Zr ₂ NbCN	0,0085	0,0002	0,0051	5,00	0,0083	98,00	0,041
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0102	0,0001	0,0029	10,62	0,0101	98,85	0,107
Zr ₂ NF ₂	0,0052	0,0001	0,0051	3,09	0,0051	97,38	0,016
Zr ₂ NF ₂ -(model2)	0,0081	0,0002	0,0067	3,65	0,0079	97,61	0,029
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0064	0,0002	0,0050	3,86	0,0063	97,63	0,024
Zr ₂ NO ₂	0,0072	0,0002	0,0056	3,88	0,0070	97,68	0,027
Zr ₂ TaCN	0,0001	0,0000	0,0001	4,88	0,0001	97,99	0,001
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,0000	0,0001	10,23	0,0002	98,84	0,002
Zr ₂ TiCN	0,0103	0,0002	0,0060	5,11	0,0101	97,99	0,052
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0120	0,0001	0,0034	10,58	0,0119	98,77	0,125
Zr ₂ VCN	0,0101	0,0002	0,0060	5,05	0,0099	97,99	0,050
Zr ₂ VCNO ₂	0,0115	0,0001	0,0033	10,33	0,0114	98,76	0,118
Zr ₃ C ₂	0,0068	0,0002	0,0055	3,69	0,0066	97,66	0,024
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0125	0,0001	0,0027	14,17	0,0124	99,30	0,176

Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0054	0,0001	0,0028	5,88	0,0053	98,28	0,031
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0036	0,0001	0,0021	5,21	0,0035	98,55	0,018
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0096	0,0001	0,0033	8,76	0,0095	98,70	0,083
Zr ₃ CN	0,0081	0,0002	0,0053	4,62	0,0080	98,09	0,037
Zr ₃ CNO ₂	0,0120	0,0001	0,0034	10,48	0,0119	98,77	0,124
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0134	0,0001	0,0026	15,71	0,0133	99,34	0,210
Zr ₃ N ₂	0,0047	0,0001	0,0044	3,17	0,0046	97,45	0,014
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0044	0,0001	0,0023	5,69	0,0043	98,53	0,024
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0039	0,0001	0,0021	5,54	0,0038	98,59	0,021
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0077	0,0001	0,0031	7,53	0,0076	98,59	0,057
Zr ₄ C ₃	0,0058	0,0001	0,0044	3,99	0,0057	97,74	0,023
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0051	0,0000	0,0018	8,48	0,0050	99,09	0,043
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0047	0,0001	0,0023	6,10	0,0046	97,24	0,028
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0062	0,0001	0,0023	8,09	0,0061	98,69	0,050
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0076	0,0001	0,0027	8,46	0,0075	98,57	0,064
Zr ₄ N ₃	0,0038	0,0001	0,0036	3,12	0,0037	97,29	0,012
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0049	0,0000	0,0017	8,61	0,0049	99,12	0,042
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0037	0,0001	0,0021	5,12	0,0036	98,09	0,018
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0058	0,0001	0,0026	6,84	0,0057	98,37	0,039
ZrCrNO ₂	0,0079	0,0002	0,0056	4,23	0,0078	97,80	0,033
ZrHfCO ₂	0,0051	0,0001	0,0036	4,26	0,0050	97,84	0,021
ZrMoCO ₂	0,0056	0,0001	0,0052	3,24	0,0054	97,41	0,018

APPENDIX H: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of MXene Structures at PTSA Conditions (120 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working Capacity (mol/kg)	% Regenerebility	APS
	1 bar, 35°C	10 bar, 120°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	PTSA	PTSA	PTSA
(CrV) ₃ C ₂	0,1490	0,0056	0,0687	0,24	0,1435	96,275	0,933
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0749	0,0034	0,0522	0,20	0,0715	95,459	0,308
(TiV) ₃ C ₂	0,1693	0,0059	0,0750	0,23	0,1635	96,536	1,107
(TiV)C(OH) ₂	0,1016	0,0063	0,0843	0,22	0,0953	93,810	0,345
(TiV)CF ₂	0,1079	0,0050	0,0793	0,19	0,1029	95,387	0,420
(TiV)CO ₂	0,1079	0,0051	0,0793	0,19	0,1028	95,268	0,420
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,1723	0,0039	0,0172	0,68	0,1685	97,741	5,062
Cr ₂ C	0,1161	0,0060	0,1210	0,15	0,1100	94,802	0,317
Cr ₂ C(OH) ₂	0,1362	0,0055	0,0623	0,26	0,1307	95,974	0,857
Cr ₂ CBr ₂	0,5036	0,0129	0,0440	0,88	0,4907	97,447	16,837
Cr ₂ CCl ₂	0,4566	0,0132	0,0700	0,57	0,4434	97,103	8,671
Cr ₂ CF ₂	0,0768	0,0040	0,0725	0,17	0,0728	94,788	0,231
Cr ₂ CFCl	0,1230	0,0052	0,0708	0,22	0,1178	95,741	0,614
Cr ₂ CH ₂	0,0623	0,0034	0,0760	0,14	0,0588	94,480	0,145
Cr ₂ CO ₂	0,1285	0,0053	0,0648	0,24	0,1232	95,900	0,733
Cr ₂ CS ₂	1,4334	0,0362	0,0372	2,92	1,3972	97,474	161,618
Cr ₂ HfCN	0,1138	0,0047	0,0468	0,30	0,1091	95,835	0,795
Cr ₂ HfCNO ₂	0,1550	0,0048	0,0293	0,49	0,1502	96,905	2,388
Cr ₂ MoCN	0,1821	0,0063	0,0632	0,30	0,1758	96,527	1,519
Cr ₂ MoCNO ₂	0,2155	0,0065	0,0382	0,51	0,2089	96,973	3,537
Cr ₂ N	0,0694	0,0040	0,0946	0,13	0,0654	94,264	0,144
Cr ₂ N(OH) ₂	0,1204	0,0050	0,0594	0,25	0,1154	95,840	0,702
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,1002	0,0040	0,0497	0,24	0,0963	96,055	0,582
Cr ₂ NbCN	0,1971	0,0068	0,0646	0,31	0,1903	96,573	1,741
Cr ₂ NbCNO ₂	0,2259	0,0068	0,0387	0,53	0,2191	96,971	3,831
Cr ₂ NF ₂	0,0617	0,0033	0,0652	0,15	0,0584	94,638	0,165
Cr ₂ NH ₂	0,0613	0,0033	0,0676	0,15	0,0580	94,668	0,158
Cr ₂ NO ₂	0,0894	0,0043	0,0717	0,18	0,0851	95,188	0,318

Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	0,22	0,0008	95,872	0,004
Cr ₂ TaC ₂	0,0007	0,0000	0,0007	0,15	0,0007	94,915	0,002
Cr ₂ TaCN	0,0022	0,0001	0,0008	0,29	0,0021	96,396	0,017
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0030	0,0001	0,0005	0,51	0,0029	96,938	0,049
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,1556	0,0058	0,0679	0,26	0,1498	96,272	1,030
Cr ₂ TiC ₂	0,0815	0,0039	0,0713	0,17	0,0775	95,162	0,266
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0591	0,0071	0,0340	0,63	0,0520	88,019	0,272
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,2770	0,0080	0,0533	0,45	0,2690	97,110	4,191
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,2459	0,0072	0,0467	0,47	0,2386	97,052	3,772
Cr ₂ TiCN	0,2619	0,0086	0,0802	0,32	0,2533	96,713	2,480
Cr ₂ TiCNO ₂	0,2886	0,0085	0,0468	0,55	0,2801	97,049	5,187
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,1555	0,0058	0,0654	0,26	0,1498	96,292	1,069
Cr ₂ VC ₂	0,0804	0,0039	0,0701	0,16	0,0765	95,208	0,263
Cr ₂ VCN	0,2756	0,0089	0,0800	0,33	0,2667	96,768	2,757
Cr ₂ VCNO ₂	0,2812	0,0084	0,0463	0,54	0,2728	97,009	4,965
Cr ₂ ZrCN	0,1955	0,0061	0,0624	0,29	0,1894	96,879	1,781
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,3038	0,0023	0,0344	0,20	0,3015	99,251	7,985
Cr ₃ C ₂	0,1099	0,0050	0,0797	0,19	0,1048	95,403	0,434
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1516	0,0044	0,0356	0,37	0,1472	97,124	1,882
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0711	0,0030	0,0386	0,24	0,0681	95,740	0,376
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0985	0,0039	0,0460	0,25	0,0946	96,061	0,608
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,5161	0,0042	0,0589	0,22	0,5119	99,181	13,460
Cr ₃ CN	0,2548	0,0082	0,0794	0,31	0,2466	96,787	2,375
Cr ₃ CNO ₂	0,3374	0,0030	0,0463	0,19	0,3345	99,123	7,311
Cr ₃ N ₂	0,0526	0,0015	0,0545	0,08	0,0511	97,203	0,148
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,1083	0,0031	0,0327	0,28	0,1053	97,166	1,047
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,1141	0,0018	0,0486	0,11	0,1123	98,392	0,791
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,1082	0,0014	0,0330	0,13	0,1068	98,690	1,051
Cr ₄ C ₃	0,0975	0,0021	0,0657	0,10	0,0954	97,862	0,425
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1083	0,0037	0,0327	0,34	0,1046	96,577	1,040
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0557	0,0026	0,0363	0,21	0,0531	95,406	0,244
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0696	0,0030	0,0391	0,23	0,0666	95,718	0,355
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0839	0,0034	0,0361	0,28	0,0805	95,985	0,561
Cr ₄ N ₃	0,0568	0,0030	0,0615	0,14	0,0538	94,773	0,149

Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0864	0,0031	0,0312	0,30	0,0832	96,392	0,692
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0445	0,0021	0,0341	0,19	0,0424	95,232	0,166
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0529	0,0024	0,0357	0,20	0,0505	95,453	0,224
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0606	0,0026	0,0346	0,23	0,0580	95,638	0,304
CrMoCF ₂	0,0765	0,0038	0,0634	0,18	0,0727	95,036	0,263
CrWCF ₂	0,0593	0,0028	0,0434	0,19	0,0565	95,291	0,232
Hf ₂ C	0,0429	0,0022	0,0457	0,15	0,0407	94,784	0,115
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0494	0,0019	0,0236	0,24	0,0474	96,095	0,297
Hf ₂ CF ₂	0,0334	0,0016	0,0285	0,17	0,0317	95,100	0,112
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0379	0,0018	0,0318	0,17	0,0361	95,134	0,129
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0482	0,0024	0,0470	0,16	0,0458	94,924	0,141
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0422	0,0022	0,0415	0,16	0,0401	94,850	0,122
Hf ₂ CO ₂	0,0520	0,0023	0,0325	0,21	0,0497	95,619	0,238
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0331	0,0016	0,0251	0,19	0,0315	95,279	0,125
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0458	0,0023	0,0412	0,17	0,0435	95,051	0,145
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0518	0,0025	0,0439	0,17	0,0494	95,245	0,175
Hf ₂ CrCN	0,0591	0,0025	0,0345	0,22	0,0566	95,744	0,291
Hf ₂ MoCNO ₂	0,1071	0,0020	0,0134	0,45	0,1050	98,097	2,510
Hf ₂ N	0,0335	0,0011	0,0421	0,08	0,0325	96,860	0,078
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0517	0,0018	0,0205	0,27	0,0498	96,428	0,376
Hf ₂ NbCN	0,0490	0,0022	0,0313	0,21	0,0468	95,537	0,220
Hf ₂ NF ₂	0,0278	0,0014	0,0230	0,18	0,0264	95,060	0,096
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0342	0,0018	0,0248	0,22	0,0324	94,746	0,134
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0661	0,0029	0,0454	0,19	0,0632	95,578	0,276
Hf ₂ NO ₂	0,0436	0,0020	0,0307	0,20	0,0416	95,408	0,177
Hf ₂ TaCN	0,0013	0,0001	0,0008	0,21	0,0012	95,573	0,006
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0017	0,0001	0,0005	0,37	0,0016	96,689	0,018
Hf ₂ TiCN	0,0568	0,0025	0,0350	0,21	0,0543	95,651	0,265
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0651	0,0023	0,0190	0,35	0,0629	96,542	0,645
Hf ₂ VCN	0,0557	0,0024	0,0346	0,21	0,0533	95,631	0,257
Hf ₂ VCNO ₂	0,0650	0,0023	0,0191	0,36	0,0628	96,524	0,641
Hf ₂ ZrCN	0,0463	0,0021	0,0317	0,20	0,0442	95,434	0,194
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0591	0,0020	0,0170	0,35	0,0571	96,606	0,596
Hf ₃ C ₂	0,0392	0,0018	0,0287	0,19	0,0374	95,408	0,153

Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0301	0,0008	0,0109	0,22	0,0293	97,326	0,243
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0297	0,0013	0,0151	0,26	0,0284	95,605	0,167
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,0004	0,0092	0,13	0,0095	95,842	0,031
Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0510	0,0018	0,0171	0,32	0,0491	96,378	0,440
Hf ₃ CN	0,0382	0,0018	0,0274	0,19	0,0364	95,353	0,152
Hf ₃ CNO ₂	0,0594	0,0020	0,0176	0,34	0,0575	96,642	0,581
Hf ₃ N ₂	0,0259	0,0013	0,0229	0,16	0,0247	95,138	0,084
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0169	0,0004	0,0081	0,16	0,0165	97,396	0,103
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0240	0,0009	0,0121	0,23	0,0231	96,191	0,136
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0149	0,0006	0,0095	0,18	0,0143	96,248	0,068
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0415	0,0016	0,0161	0,29	0,0399	96,188	0,308
Hf ₄ C ₃	0,0219	0,0011	0,0191	0,17	0,0208	95,111	0,071
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0335	0,0012	0,0135	0,27	0,0323	96,382	0,240
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0261	0,0010	0,0126	0,25	0,0251	96,000	0,155
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0116	0,0005	0,0082	0,17	0,0112	95,989	0,048
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0424	0,0016	0,0141	0,33	0,0409	96,339	0,370
Hf ₄ N ₃	0,0206	0,0010	0,0190	0,16	0,0195	95,013	0,063
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0283	0,0009	0,0094	0,28	0,0274	96,906	0,248
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0200	0,0009	0,0115	0,22	0,0192	95,689	0,100
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0112	0,0005	0,0085	0,17	0,0107	95,694	0,042
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0329	0,0013	0,0134	0,29	0,0316	96,076	0,232
HfCrNO ₂	0,0528	0,0024	0,0369	0,20	0,0503	95,371	0,216
Mn ₂ C	0,1150	0,0059	0,1194	0,15	0,1092	94,899	0,316
Mn ₂ C(OH) ₂	0,1266	0,0052	0,0598	0,26	0,1214	95,901	0,771
Mn ₂ CF ₂	0,0695	0,0035	0,0631	0,16	0,0660	95,027	0,218
Mn ₂ CO ₂	0,0984	0,0045	0,0710	0,19	0,0938	95,379	0,390
Mn ₂ N	0,0622	0,0036	0,0859	0,13	0,0586	94,233	0,127
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0966	0,0043	0,0610	0,21	0,0922	95,523	0,438
Mn ₂ NF ₂	0,0581	0,0031	0,0635	0,15	0,0549	94,584	0,151
Mn ₂ NO ₂	0,0837	0,0040	0,0654	0,18	0,0797	95,187	0,306
Mn ₃ C ₂	0,1069	0,0049	0,0769	0,19	0,1020	95,385	0,426
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1484	0,0044	0,0329	0,40	0,1440	97,024	1,945
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0674	0,0029	0,0370	0,24	0,0645	95,695	0,353
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,1028	0,0040	0,0404	0,30	0,0987	96,088	0,754

Mn ₃ N ₂	0,0765	0,0039	0,0771	0,15	0,0726	94,887	0,216
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,1203	0,0035	0,0292	0,36	0,1168	97,082	1,441
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0545	0,0025	0,0366	0,20	0,0520	95,417	0,232
Mn ₄ C ₃	0,0931	0,0042	0,0625	0,20	0,0889	95,522	0,397
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1146	0,0038	0,0285	0,40	0,1109	96,718	1,339
Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0540	0,0024	0,0312	0,23	0,0516	95,579	0,267
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0745	0,0031	0,0357	0,26	0,0714	95,854	0,447
Mn ₄ N ₃	0,0506	0,0024	0,0401	0,18	0,0482	95,228	0,182
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0975	0,0032	0,0269	0,36	0,0942	96,690	1,025
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0564	0,0025	0,0332	0,23	0,0539	95,579	0,275
Mo _{1,33} C	0,1758	0,0071	0,1158	0,18	0,1687	95,966	0,768
Mo ₂ C	0,0854	0,0042	0,0776	0,16	0,0812	95,061	0,268
Mo ₂ C(NCS) ₂	1,0585	0,0485	0,0094	15,51	1,0100	95,420	342,038
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,2755	0,0079	0,0368	0,64	0,2677	97,141	6,020
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0769	0,0033	0,0448	0,22	0,0736	95,647	0,379
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,4384	0,0101	0,0256	1,19	0,4283	97,686	22,011
Mo ₂ CBr ₂	0,3312	0,0091	0,0344	0,79	0,3221	97,262	9,311
Mo ₂ CCl ₂	0,2660	0,0083	0,0496	0,50	0,2577	96,876	4,148
Mo ₂ CF ₂	0,0540	0,0028	0,0522	0,16	0,0512	94,816	0,159
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0974	0,0044	0,0695	0,19	0,0930	95,465	0,392
Mo ₂ CO ₂	0,0791	0,0033	0,0408	0,24	0,0758	95,831	0,442
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0656	0,0031	0,0502	0,19	0,0625	95,267	0,245
Mo ₂ CrCN	0,1338	0,0049	0,0538	0,27	0,1288	96,315	0,961
Mo ₂ CrCNO ₂	0,1466	0,0048	0,0336	0,43	0,1417	96,695	1,858
Mo ₂ CS ₂	0,0461	0,0236	0,0492	1,44	0,0225	48,794	0,063
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0481	0,0017	0,0147	0,34	0,0464	96,537	0,455
Mo ₂ HfC ₂	0,0293	0,0016	0,0332	0,14	0,0277	94,693	0,073
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0757	0,0024	0,0199	0,36	0,0733	96,811	0,836
Mo ₂ HfCN	0,0697	0,0029	0,0366	0,24	0,0668	95,856	0,383
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0972	0,0033	0,0235	0,42	0,0940	96,653	1,166
Mo ₂ N	0,0557	0,0029	0,0598	0,15	0,0528	94,770	0,147
Mo ₂ N(OH) ₂	0,1427	0,0041	0,0287	0,43	0,1386	97,138	2,068
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0679	0,0028	0,0383	0,22	0,0651	95,840	0,346
Mo ₂ NbC ₂	0,0386	0,0020	0,0410	0,15	0,0366	94,808	0,104

Mo ₂ NbCN	0,0971	0,0038	0,0445	0,26	0,0933	96,076	0,610
Mo ₂ NbCNO ₂	0,1260	0,0041	0,0288	0,43	0,1218	96,717	1,598
Mo ₂ NF ₂	0,0510	0,0022	0,0300	0,22	0,0487	95,588	0,248
Mo ₂ NO ₂	0,0693	0,0030	0,0382	0,23	0,0664	95,745	0,362
Mo ₂ ScC ₂	0,0478	0,0024	0,0498	0,15	0,0453	94,904	0,131
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,1029	0,0033	0,0280	0,36	0,0996	96,745	1,096
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0007	0,0000	0,0004	0,21	0,0007	95,647	0,003
Mo ₂ TaC ₂	0,0006	0,0000	0,0007	0,14	0,0006	94,803	0,002
Mo ₂ TaCN	0,0016	0,0001	0,0008	0,25	0,0016	96,014	0,010
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0023	0,0001	0,0006	0,41	0,0022	96,630	0,027
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0989	0,0039	0,0490	0,24	0,0950	96,048	0,576
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,1266	0,0038	0,0251	0,46	0,1228	96,969	1,858
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0790	0,0030	0,0292	0,31	0,0760	96,150	0,616
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0788	0,0029	0,0256	0,34	0,0759	96,363	0,702
Mo ₂ TiC ₂	0,0480	0,0024	0,0483	0,15	0,0456	94,915	0,136
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,1578	0,0034	0,0299	0,34	0,1544	97,835	2,444
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,1823	0,0046	0,0258	0,54	0,1776	97,472	3,764
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,1513	0,0050	0,0437	0,34	0,1464	96,713	1,520
Mo ₂ TiCN	0,1266	0,0048	0,0544	0,27	0,1217	96,177	0,849
Mo ₂ TiCNO ₂	0,1453	0,0048	0,0338	0,42	0,1405	96,709	1,811
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0972	0,0038	0,0478	0,24	0,0933	96,048	0,569
Mo ₂ VC ₂	0,0474	0,0024	0,0475	0,15	0,0450	94,858	0,135
Mo ₂ VCN	0,1251	0,0048	0,0545	0,26	0,1203	96,163	0,829
Mo ₂ VCNO ₂	0,1414	0,0047	0,0338	0,42	0,1367	96,645	1,715
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0665	0,0023	0,0203	0,34	0,0642	96,583	0,631
Mo ₂ ZrC ₂	0,0381	0,0020	0,0416	0,14	0,0361	94,793	0,099
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,1032	0,0032	0,0249	0,39	0,0999	96,851	1,242
Mo ₂ ZrCN	0,0930	0,0038	0,0466	0,24	0,0892	95,946	0,534
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,1229	0,0041	0,0293	0,42	0,1187	96,649	1,495
Mo ₃ C ₂	0,0724	0,0031	0,0414	0,22	0,0693	95,754	0,364
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0093	0,0002	0,0081	0,09	0,0091	97,510	0,031
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0507	0,0017	0,0170	0,29	0,0490	96,737	0,437
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0798	0,0027	0,0264	0,31	0,0771	96,561	0,699
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,1161	0,0034	0,0228	0,45	0,1127	97,061	1,722

Mo ₃ CN	0,0966	0,0037	0,0465	0,24	0,0929	96,161	0,579
Mo ₃ N ₂	0,0433	0,0021	0,0336	0,19	0,0412	95,193	0,159
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0009	0,0000	0,0040	0,02	0,0009	96,536	0,001
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0426	0,0013	0,0149	0,26	0,0413	96,955	0,355
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0479	0,0021	0,0274	0,23	0,0458	95,676	0,240
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0796	0,0023	0,0180	0,37	0,0773	97,170	1,024
Mo ₄ C ₃	0,0716	0,0029	0,0400	0,22	0,0687	95,883	0,368
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0676	0,0021	0,0182	0,34	0,0656	96,916	0,729
Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0396	0,0017	0,0218	0,23	0,0379	95,691	0,207
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0633	0,0024	0,0227	0,31	0,0609	96,285	0,510
Mo ₄ N ₃	0,0393	0,0019	0,0326	0,18	0,0374	95,151	0,135
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0497	0,0019	0,0212	0,27	0,0478	96,135	0,336
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0331	0,0016	0,0244	0,19	0,0315	95,236	0,128
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0252	0,0011	0,0166	0,20	0,0241	95,580	0,110
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0446	0,0020	0,0271	0,22	0,0426	95,601	0,210
MoCrC	0,0705	0,0040	0,0962	0,13	0,0665	94,316	0,146
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0880	0,0041	0,0596	0,21	0,0839	95,341	0,371
MoWC	0,0382	0,0022	0,0539	0,12	0,0360	94,174	0,077
MoWC(NCO) ₂	0,1815	0,0054	0,0291	0,56	0,1761	97,021	3,291
MoWC(OCN) ₂	0,2115	0,0060	0,0284	0,64	0,2055	97,150	4,582
MoWC(SCN) ₂	0,3526	0,0084	0,0212	1,18	0,3443	97,631	17,204
MoWCCl ₂	0,2492	0,0071	0,0402	0,53	0,2421	97,158	4,505
MoWCF ₂	0,0311	0,0016	0,0836	0,06	0,0296	94,982	0,033
MoWCO ₂ -(model2)	0,0522	0,0024	0,0342	0,21	0,0498	95,425	0,228
Nb _{0.4} V _{1.6} C	1,5554	0,0295	0,1428	0,62	1,5259	98,104	49,849
Nb _{0.8} V _{1.2} C	0,4855	0,0135	0,1371	0,30	0,4720	97,222	5,014
Nb _{1.2} V _{0.8} C	0,2693	0,0095	0,1268	0,23	0,2597	96,454	1,655
Nb _{1.33} C	3,9771	0,3970	0,0881	13,51	3,5801	90,019	484,742
Nb _{1.6} V _{0.4} C	0,1604	0,0069	0,1174	0,18	0,1535	95,714	0,629
Nb ₂ C	0,0842	0,0043	0,0829	0,15	0,0799	94,945	0,243
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0871	0,0034	0,0409	0,25	0,0837	96,115	0,534
Nb ₂ CF ₂	0,0560	0,0027	0,0483	0,17	0,0533	95,104	0,185
Nb ₂ CO ₂	0,0808	0,0036	0,0524	0,21	0,0772	95,536	0,357
Nb ₂ CrCN	0,1372	0,0051	0,0564	0,27	0,1321	96,281	0,964

Nb ₂ CrCNO ₂	0,1420	0,0046	0,0306	0,45	0,1374	96,757	1,917
Nb ₂ HfCN	0,0723	0,0030	0,0385	0,23	0,0693	95,875	0,390
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0877	0,0029	0,0215	0,41	0,0848	96,650	1,038
Nb ₂ MoCN	0,1047	0,0041	0,0486	0,25	0,1006	96,110	0,649
Nb ₂ MoCNO ₂	0,1180	0,0038	0,0264	0,43	0,1142	96,772	1,532
Nb ₂ N	0,0643	0,0035	0,0790	0,13	0,0608	94,526	0,149
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0904	0,0037	0,0469	0,24	0,0867	95,869	0,501
Nb ₂ NF ₂	0,0521	0,0023	0,0340	0,20	0,0498	95,545	0,229
Nb ₂ NH ₂	0,0379	0,0022	0,0535	0,12	0,0357	94,260	0,076
Nb ₂ NO ₂	0,0718	0,0033	0,0511	0,19	0,0685	95,394	0,288
Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	0,21	0,0007	95,772	0,004
Nb ₂ TaCN	0,0017	0,0001	0,0008	0,25	0,0017	96,058	0,010
Nb ₂ TiCN	0,1282	0,0049	0,0573	0,26	0,1233	96,167	0,827
Nb ₂ TiCNO ₂	0,1437	0,0046	0,0299	0,46	0,1392	96,826	2,008
Nb ₂ VCN	0,1253	0,0048	0,0569	0,25	0,1205	96,141	0,796
Nb ₂ VCNO ₂	0,1348	0,0045	0,0309	0,43	0,1304	96,687	1,708
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0516	0,0021	0,0275	0,23	0,0495	95,957	0,279
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0687	0,0029	0,0411	0,21	0,0658	95,775	0,330
Nb ₂ ZrCN	0,0964	0,0040	0,0494	0,24	0,0925	95,895	0,541
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,1081	0,0036	0,0271	0,40	0,1045	96,659	1,250
Nb ₃ C ₂	0,0808	0,0035	0,0521	0,20	0,0773	95,690	0,360
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0638	0,0016	0,0186	0,26	0,0622	97,458	0,642
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0549	0,0021	0,0253	0,25	0,0528	96,152	0,344
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0380	0,0014	0,0207	0,20	0,0366	96,291	0,201
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0931	0,0032	0,0296	0,32	0,0899	96,581	0,847
Nb ₃ CN	0,0998	0,0039	0,0504	0,23	0,0959	96,080	0,569
Nb ₃ CNO ₂	0,1158	0,0038	0,0268	0,43	0,1120	96,708	1,451
Nb ₃ N ₂	0,0461	0,0022	0,0366	0,18	0,0440	95,274	0,166
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0023	0,0001	0,0056	0,03	0,0023	97,161	0,003
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0440	0,0014	0,0162	0,26	0,0426	96,864	0,347
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0456	0,0017	0,0218	0,24	0,0439	96,246	0,275
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0764	0,0027	0,0259	0,31	0,0737	96,511	0,653
Nb ₄ C ₃	0,0608	0,0027	0,0388	0,21	0,0581	95,612	0,273
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0536	0,0014	0,0138	0,30	0,0522	97,422	0,609

Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0424	0,0016	0,0182	0,27	0,0407	96,143	0,284
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0308	0,0013	0,0180	0,21	0,0295	95,899	0,152
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0696	0,0025	0,0236	0,32	0,0671	96,384	0,594
Nb ₄ N ₃	0,0423	0,0021	0,0374	0,17	0,0402	95,091	0,136
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0542	0,0019	0,0191	0,29	0,0523	96,563	0,446
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0423	0,0016	0,0182	0,26	0,0408	96,300	0,285
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0540	0,0021	0,0245	0,26	0,0519	96,019	0,343
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0054	0,0002	0,0060	0,08	0,0052	96,953	0,014
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0330	0,0013	0,0143	0,26	0,0317	96,169	0,219
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0552	0,0020	0,0169	0,35	0,0532	96,464	0,521
NbCrN(NCO) ₂	0,4079	0,0105	0,0342	0,92	0,3974	97,422	14,236
NbCrN(NCS) ₂	1,1905	0,0990	0,0049	60,80	1,0915	91,688	798,442
NbCrN(OCN) ₂	0,3227	0,0093	0,0426	0,66	0,3134	97,106	7,128
NbCrN(SCN) ₂	0,5748	0,0133	0,0272	1,47	0,5615	97,685	35,597
NbCrNBr ₂	0,4821	0,0123	0,0361	1,02	0,4698	97,446	18,795
NbCrNCl ₂	0,3843	0,0110	0,0591	0,56	0,3733	97,136	7,281
NbCrNF ₂	0,0806	0,0039	0,0640	0,18	0,0767	95,188	0,290
NbMoN(CN) ₂	0,1219	0,0048	0,0490	0,29	0,1172	96,086	0,874
NbMoN(NCO) ₂	0,2178	0,0066	0,0389	0,51	0,2112	96,967	3,548
NbMoN(NCS) ₂	1,0601	0,0509	0,0096	15,94	1,0092	95,199	335,000
NbMoN(OCN) ₂	0,0003	0,0000	0,0040	0,01	0,0003	94,410	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,4858	0,0111	0,0249	1,33	0,4747	97,722	27,741
NbMoNBr ₂	0,3821	0,0099	0,0354	0,84	0,3723	97,420	12,060
NbMoNCl ₂	0,2853	0,0086	0,0535	0,49	0,2767	96,969	4,429
NbMoNF ₂	0,0724	0,0034	0,0565	0,18	0,0690	95,244	0,265
NbWN(CN) ₂	0,0721	0,0031	0,0417	0,22	0,0690	95,723	0,358
NbWN(NCO) ₂	0,1724	0,0052	0,0298	0,52	0,1672	96,998	2,903
NbWN(NCS) ₂	0,8346	0,0421	0,0074	17,07	0,7926	94,960	268,373
NbWN(OCN) ₂	0,1918	0,0057	0,0295	0,58	0,1862	97,047	3,631
NbWN(SCN) ₂	0,3719	0,0089	0,0213	1,26	0,3630	97,609	19,060
NbWNBr ₂	0,3302	0,0084	0,0273	0,92	0,3218	97,457	11,697
NbWNCl ₂	0,2346	0,0067	0,0398	0,51	0,2278	97,124	4,024
NbWNF ₂	0,0543	0,0026	0,0452	0,18	0,0517	95,148	0,186
Sc ₂ C	0,1021	0,0060	0,1600	0,11	0,0961	94,111	0,184

Sc ₂ C(CN) ₂	0,1534	0,0070	0,1041	0,20	0,1465	95,461	0,647
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0138	0,0004	0,0147	0,09	0,0134	96,953	0,038
Sc ₂ C(NCS) ₂	1,4445	0,0469	0,0139	10,09	1,3976	96,753	434,353
Sc ₂ C(OCI) ₂	0,5017	0,0138	0,0637	0,65	0,4879	97,249	11,521
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0177	0,0006	0,0181	0,10	0,0172	96,770	0,051
Sc ₂ C(OH) ₂	0,1220	0,0049	0,0700	0,21	0,1170	95,943	0,612
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,5146	0,0129	0,0479	0,80	0,5017	97,501	16,164
Sc ₂ CBr ₂	0,3594	0,0103	0,0558	0,55	0,3491	97,138	6,753
Sc ₂ CCl ₂	0,4111	0,0130	0,0824	0,47	0,3981	96,848	5,961
Sc ₂ CF ₂	0,0860	0,0044	0,0831	0,16	0,0816	94,937	0,253
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,1253	0,0058	0,0900	0,19	0,1195	95,366	0,499
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,1415	0,0068	0,1165	0,17	0,1347	95,202	0,491
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,1796	0,0079	0,1211	0,20	0,1716	95,576	0,763
Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,1446	0,0068	0,1140	0,18	0,1378	95,298	0,524
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,1174	0,0056	0,0907	0,18	0,1119	95,262	0,434
Sc ₂ N	0,0762	0,0048	0,1370	0,10	0,0714	93,747	0,119
Sc ₂ N(OH) ₂	0,1161	0,0049	0,0689	0,21	0,1113	95,822	0,563
Sc ₂ NF ₂	0,0726	0,0039	0,0757	0,15	0,0688	94,698	0,198
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,1500	0,0069	0,1121	0,18	0,1431	95,396	0,575
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,1160	0,0056	0,0922	0,18	0,1104	95,187	0,417
Sc ₂ NO ₂	0,1108	0,0052	0,0908	0,17	0,1056	95,295	0,387
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,1149	0,0052	0,0707	0,22	0,1097	95,504	0,535
Sc ₃ C ₂	0,0866	0,0046	0,0866	0,16	0,0820	94,701	0,246
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0878	0,0027	0,0372	0,22	0,0851	96,930	0,603
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0564	0,0021	0,0256	0,25	0,0543	96,203	0,359
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0747	0,0032	0,0423	0,22	0,0716	95,786	0,380
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,1294	0,0053	0,0712	0,22	0,1241	95,906	0,676
Sc ₃ N ₂	0,0569	0,0033	0,0786	0,12	0,0537	94,284	0,117
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0812	0,0024	0,0316	0,23	0,0788	97,051	0,607
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0637	0,0027	0,0414	0,20	0,0610	95,709	0,282
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0956	0,0041	0,0516	0,24	0,0915	95,700	0,508
Sc ₄ C ₃	0,0867	0,0042	0,0787	0,16	0,0825	95,136	0,273
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0727	0,0022	0,0276	0,24	0,0706	97,002	0,558
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0654	0,0028	0,0362	0,23	0,0626	95,705	0,340

Sc ₄ C ₃ O ₂	0,1024	0,0040	0,0417	0,29	0,0984	96,120	0,725
Sc ₄ N ₃	0,0460	0,0026	0,0615	0,13	0,0434	94,308	0,097
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0800	0,0027	0,0297	0,27	0,0774	96,674	0,625
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0515	0,0024	0,0357	0,20	0,0491	95,379	0,213
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0768	0,0033	0,0418	0,24	0,0735	95,669	0,406
ScCrC(OCN) ₂	0,3945	0,0113	0,0548	0,62	0,3831	97,127	8,276
ScCrC(OH) ₂	0,1711	0,0064	0,0678	0,28	0,1647	96,253	1,246
ScCrCF ₂	0,1015	0,0050	0,0846	0,18	0,0965	95,097	0,347
ScHfN(SCN) ₂	0,3439	0,0080	0,0261	0,92	0,3359	97,674	13,265
ScHfNO ₂	0,0602	0,0029	0,0469	0,18	0,0573	95,262	0,221
ScNbCO ₂	0,0909	0,0043	0,0679	0,19	0,0867	95,298	0,348
ScTaCO ₂	0,0010	0,0000	0,0007	0,19	0,0010	95,358	0,004
ScTiNO ₂	0,1026	0,0048	0,0786	0,18	0,0978	95,313	0,383
ScVCO ₂	0,1076	0,0051	0,0830	0,18	0,1025	95,278	0,399
ScYC(CN) ₂	0,1214	0,0052	0,0687	0,23	0,1162	95,680	0,616
ScYC(NCO) ₂	0,2275	0,0075	0,0553	0,40	0,2200	96,718	2,715
ScYC(NCS) ₂	1,1219	0,0287	0,0221	3,91	1,0932	97,438	166,826
ScYC(OCI) ₂	0,2591	0,0085	0,0634	0,40	0,2506	96,722	3,074
ScYC(OCN) ₂	0,2719	0,0082	0,0511	0,48	0,2637	96,971	4,213
ScYC(OH) ₂	0,1110	0,0045	0,0580	0,23	0,1064	95,912	0,610
ScYC(SCN) ₂	0,4405	0,0105	0,0379	0,83	0,4300	97,612	15,009
ScYCB ₂	0,3286	0,0091	0,0463	0,59	0,3195	97,232	6,797
ScYCCl ₂	0,2710	0,0091	0,0729	0,38	0,2619	96,633	2,921
ScYCF ₂	0,0956	0,0046	0,0790	0,17	0,0910	95,215	0,330
ScZrN(SCN) ₂	0,5038	0,0117	0,0338	1,04	0,4921	97,672	22,017
ScZrNO ₂	0,0909	0,0043	0,0686	0,19	0,0866	95,269	0,345
Ta ₂ C	0,0005	0,0000	0,0005	0,17	0,0005	95,218	0,002
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0002	0,34	0,0008	96,755	0,008
Ta ₂ CF ₂	0,0004	0,0000	0,0003	0,17	0,0004	95,185	0,001
Ta ₂ CO ₂	0,0006	0,0000	0,0003	0,22	0,0005	95,667	0,003
Ta ₂ CrCN	0,0009	0,0000	0,0004	0,25	0,0008	96,037	0,005
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0010	0,0000	0,0002	0,39	0,0009	96,612	0,011
Ta ₂ HfCN	0,0007	0,0000	0,0004	0,22	0,0007	95,668	0,003
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,36	0,0008	96,599	0,009

Ta ₂ MoCN	0,0008	0,0000	0,0004	0,24	0,0008	95,946	0,004
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,39	0,0009	96,610	0,010
Ta ₂ N	0,0004	0,0000	0,0004	0,15	0,0004	94,754	0,001
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0008	0,0000	0,0002	0,37	0,0008	96,990	0,010
Ta ₂ NbCN	0,0008	0,0000	0,0004	0,23	0,0007	95,894	0,004
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,38	0,0009	96,603	0,010
Ta ₂ NF ₂	0,0004	0,0000	0,0002	0,23	0,0004	95,698	0,002
Ta ₂ NH ₂	0,0002	0,0000	0,0003	0,12	0,0002	94,214	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0005	0,0000	0,0003	0,20	0,0005	95,315	0,002
Ta ₂ TiCN	0,0008	0,0000	0,0004	0,24	0,0008	95,950	0,005
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,40	0,0009	96,697	0,011
Ta ₂ VCN	0,0008	0,0000	0,0004	0,24	0,0008	95,940	0,005
Ta ₂ VCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,38	0,0009	96,533	0,010
Ta ₂ ZrCN	0,0007	0,0000	0,0004	0,22	0,0007	95,754	0,004
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0009	0,0000	0,0002	0,37	0,0008	96,598	0,009
Ta ₃ C ₂	0,0005	0,0000	0,0003	0,22	0,0005	95,992	0,003
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0003	0,0000	0,0001	0,21	0,0003	97,619	0,002
Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0004	0,0000	0,0001	0,28	0,0004	96,623	0,003
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	0,18	0,0002	96,190	0,001
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0006	0,0000	0,0002	0,34	0,0006	96,616	0,006
Ta ₃ CN	0,0004	0,0000	0,0003	0,21	0,0004	95,586	0,002
Ta ₃ CNO ₂	0,0006	0,0000	0,0002	0,38	0,0006	96,583	0,006
Ta ₃ N ₂	0,0003	0,0000	0,0002	0,21	0,0003	95,494	0,001
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,01	0,0000	95,952	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0003	0,0000	0,0001	0,26	0,0003	96,956	0,002
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	0,19	0,0002	96,076	0,001
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0005	0,0000	0,0002	0,34	0,0005	96,642	0,005
Ta ₄ C ₃	0,0004	0,0000	0,0002	0,23	0,0004	95,959	0,002
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	0,36	0,0004	97,510	0,006
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0003	0,0000	0,0001	0,29	0,0003	96,316	0,002
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0002	0,0000	0,0001	0,20	0,0002	95,871	0,001
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0005	0,0000	0,0002	0,33	0,0005	96,407	0,004
Ta ₄ N ₃	0,0003	0,0000	0,0002	0,18	0,0003	95,397	0,001
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0004	0,0000	0,0001	0,31	0,0004	96,671	0,003

Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0002	0,0000	0,0001	0,21	0,0002	95,679	0,001
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0001	0,0000	0,0001	0,19	0,0001	95,651	0,001
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0004	0,0000	0,0002	0,28	0,0004	96,096	0,003
TaCrN(OCN) ₂	0,0039	0,0001	0,0006	0,58	0,0038	97,078	0,076
TaCrN(SCN) ₂	0,0098	0,0002	0,0008	0,71	0,0097	98,030	0,348
TaCrNBr ₂	0,0089	0,0002	0,0006	1,13	0,0087	97,521	0,395
TaCrNCl ₂	0,0052	0,0001	0,0007	0,60	0,0050	97,209	0,108
TaCrNF ₂	0,0009	0,0000	0,0007	0,17	0,0008	95,153	0,003
TaMoN(NCO) ₂	0,0031	0,0001	0,0006	0,46	0,0030	96,856	0,044
TaMoN(NCS) ₂	0,0181	0,0007	0,0002	10,75	0,0174	96,025	4,701
TaMoN(SCN) ₂	0,0050	0,0001	0,0004	0,77	0,0049	97,994	0,187
TaMoNBr ₂	0,0068	0,0002	0,0007	0,79	0,0066	97,271	0,191
TaMoNCl ₂	0,0040	0,0001	0,0008	0,47	0,0038	96,839	0,057
TaMoNF ₂	0,0010	0,0000	0,0008	0,18	0,0009	95,288	0,004
TaWN(CN) ₂	0,0014	0,0001	0,0008	0,23	0,0013	95,714	0,007
TaWN(NCO) ₂	0,0031	0,0001	0,0006	0,47	0,0030	96,840	0,044
TaWNBr ₂	0,0075	0,0002	0,0007	0,84	0,0073	97,426	0,239
TaWNCl ₂	0,0049	0,0001	0,0007	0,56	0,0048	97,130	0,093
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,1989	0,0080	0,0896	0,27	0,1908	95,963	1,270
Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,3594	0,0104	0,0864	0,36	0,3490	97,117	4,357
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,8122	0,0176	0,0890	0,59	0,7946	97,833	21,752
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,1942	0,0079	0,1397	0,17	0,1863	95,927	0,777
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,3832	0,0118	0,1600	0,22	0,3714	96,931	2,669
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,1234	0,0026	0,0117	0,65	0,1209	97,932	3,826
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0493	0,0016	0,0112	0,43	0,0477	96,771	0,629
Ti ₂ C	0,1025	0,0058	0,1374	0,13	0,0966	94,294	0,216
Ti ₂ C(OH) ₂	0,1441	0,0056	0,0632	0,27	0,1384	96,088	0,946
Ti ₂ CCl ₂	0,0585	0,0031	0,0601	0,15	0,0554	94,760	0,162
Ti ₂ CF ₂	0,0758	0,0039	0,0716	0,16	0,0719	94,855	0,229
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,1544	0,0067	0,0938	0,22	0,1477	95,639	0,729
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,1696	0,0074	0,1046	0,21	0,1622	95,637	0,790
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,2577	0,0100	0,1202	0,25	0,2476	96,102	1,593
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,1024	0,0048	0,0765	0,19	0,0976	95,303	0,392
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,1139	0,0052	0,0773	0,20	0,1087	95,460	0,481

Ti ₂ CO _{0.67} F _{1.33}	0,1153	0,0052	0,0777	0,20	0,1101	95,517	0,490
Ti ₂ CO _{0.89} F _{1.11}	0,1247	0,0054	0,0784	0,21	0,1193	95,638	0,569
Ti ₂ CO _{1.33} F _{0.67}	0,1234	0,0055	0,0794	0,21	0,1179	95,574	0,550
Ti ₂ CO ₂	0,1080	0,0051	0,0812	0,19	0,1029	95,272	0,411
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,1264	0,0057	0,0807	0,21	0,1207	95,498	0,567
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,1458	0,0065	0,1005	0,19	0,1393	95,526	0,607
Ti ₂ CrCN	0,2528	0,0087	0,0864	0,30	0,2441	96,543	2,143
Ti ₂ CrCNO ₂	0,2563	0,0079	0,0476	0,50	0,2484	96,912	4,008
Ti ₂ HfCN	0,1093	0,0043	0,0520	0,25	0,1050	96,032	0,663
Ti ₂ HfCNO ₂	0,1374	0,0045	0,0297	0,45	0,1330	96,759	1,848
Ti ₂ MoCN	0,1725	0,0064	0,0704	0,27	0,1661	96,284	1,221
Ti ₂ MoCNO ₂	0,1936	0,0062	0,0392	0,47	0,1875	96,822	2,779
Ti ₂ N	0,0741	0,0045	0,1206	0,11	0,0696	93,967	0,128
Ti ₂ N(OH) ₂	0,1275	0,0052	0,0622	0,25	0,1223	95,899	0,752
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0993	0,0040	0,0524	0,23	0,0953	95,980	0,542
Ti ₂ NbC ₂	0,0605	0,0032	0,0624	0,15	0,0573	94,756	0,167
Ti ₂ NbCN	0,1761	0,0065	0,0715	0,27	0,1696	96,290	1,254
Ti ₂ NbCNO ₂	0,1981	0,0063	0,0394	0,48	0,1918	96,826	2,889
Ti ₂ NF ₂	0,0667	0,0035	0,0702	0,15	0,0632	94,730	0,180
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,1515	0,0065	0,0887	0,22	0,1450	95,686	0,742
Ti ₂ NO ₂	0,0930	0,0045	0,0742	0,18	0,0885	95,116	0,333
Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,2808	0,0094	0,1185	0,24	0,2714	96,640	1,930
Ti ₂ NS ₂	0,0589	0,0030	0,0555	0,16	0,0559	94,881	0,178
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0004	0,23	0,0008	95,938	0,004
Ti ₂ TaC ₂	0,0007	0,0000	0,0007	0,15	0,0007	94,703	0,002
Ti ₂ TaCN	0,0020	0,0001	0,0009	0,27	0,0020	96,259	0,014
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0026	0,0001	0,0005	0,46	0,0025	96,830	0,037
Ti ₂ VC ₂	0,0838	0,0042	0,0768	0,16	0,0797	95,047	0,261
Ti ₂ VCN	0,2345	0,0084	0,0873	0,29	0,2261	96,407	1,823
Ti ₂ VCNO ₂	0,2449	0,0077	0,0482	0,48	0,2371	96,839	3,616
Ti ₂ ZrCN	0,1607	0,0062	0,0727	0,26	0,1545	96,153	1,025
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,1897	0,0061	0,0398	0,46	0,1837	96,802	2,626
Ti ₃ C ₂	0,0945	0,0046	0,0851	0,16	0,0899	95,128	0,300
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,3254	0,0084	0,0361	0,70	0,3170	97,423	8,578

Ti ₃ C ₂ (O _{0.1} F _{1.1} (OH) _{0.8})	0,3913	0,0098	0,0347	0,85	0,3815	97,489	12,891
Ti ₃ C ₂ (O _{0.7} F _{1.3})	0,1535	0,0050	0,0341	0,44	0,1485	96,752	2,006
Ti ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1606	0,0040	0,0318	0,37	0,1566	97,536	2,370
Ti ₃ C ₂ Br ₂	0,0689	0,0024	0,0257	0,28	0,0664	96,482	0,534
Ti ₃ C ₂ Cl ₂	0,0672	0,0027	0,0347	0,23	0,0644	95,954	0,374
Ti ₃ C ₂ F ₂	0,0766	0,0033	0,0422	0,23	0,0733	95,709	0,400
Ti ₃ C ₂ O ₂	0,1193	0,0044	0,0464	0,29	0,1148	96,273	0,886
Ti ₃ C ₂ Se ₂	0,0335	0,0013	0,0215	0,19	0,0322	95,976	0,150
Ti ₃ C ₂ Te ₂	0,0200	0,0008	0,0144	0,17	0,0192	95,977	0,080
Ti ₃ CN	0,2207	0,0080	0,0919	0,26	0,2128	96,398	1,534
Ti ₃ CNF ₂	0,3427	0,0094	0,0542	0,52	0,3333	97,264	6,325
Ti ₃ CNO ₂	0,2925	0,0083	0,0496	0,50	0,2842	97,157	5,025
Ti ₃ N ₂	0,0595	0,0032	0,0717	0,13	0,0563	94,632	0,140
Ti ₃ N ₂ (OH) ₃	0,1231	0,0032	0,0295	0,33	0,1199	97,401	1,500
Ti ₃ N ₂ F ₂	0,0598	0,0025	0,0361	0,21	0,0573	95,799	0,285
Ti ₃ N ₂ H ₂	0,1014	0,0038	0,0423	0,27	0,0977	96,292	0,702
Ti ₃ N ₂ O ₂	0,1325	0,0047	0,0430	0,33	0,1278	96,473	1,181
Ti ₄ C ₃	0,0767	0,0037	0,0679	0,17	0,0730	95,125	0,247
Ti ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1139	0,0036	0,0313	0,34	0,1103	96,872	1,205
Ti ₄ C ₃ F ₂	0,0605	0,0027	0,0365	0,22	0,0579	95,598	0,288
Ti ₄ C ₃ H ₂	0,0899	0,0034	0,0372	0,27	0,0865	96,245	0,628
Ti ₄ C ₃ O ₂	0,0894	0,0036	0,0397	0,27	0,0859	96,004	0,581
Ti ₄ N ₃	0,0449	0,0025	0,0551	0,14	0,0424	94,465	0,104
Ti ₄ N ₃ (OH) ₂	0,1472	0,0047	0,0318	0,44	0,1425	96,816	1,982
Ti ₄ N ₃ F ₂	0,0476	0,0022	0,0329	0,20	0,0454	95,420	0,197
Ti ₄ N ₃ H ₂	0,0569	0,0025	0,0342	0,22	0,0544	95,644	0,272
Ti ₄ N ₃ O ₂	0,0675	0,0029	0,0239	0,36	0,0646	95,714	0,546
Ti ₅ C ₄ (OH) ₂	0,1578	0,0045	0,0216	0,62	0,1533	97,175	3,367
Ti ₅ C ₄ F ₂	0,0881	0,0034	0,0343	0,30	0,0847	96,169	0,653
Ti ₅ C ₄ O ₂	0,0835	0,0031	0,0300	0,31	0,0804	96,274	0,672
Ti ₅ N ₄ F ₂	0,0588	0,0024	0,0290	0,25	0,0564	95,872	0,343
Ti ₆ C ₅ F ₂	0,1202	0,0038	0,0230	0,49	0,1164	96,857	1,829
Ti ₆ N ₅ F ₂	0,0746	0,0024	0,0189	0,39	0,0722	96,736	0,854
Ti ₇ C ₆ F ₂	0,1159	0,0034	0,0172	0,58	0,1126	97,109	2,275

Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0702	0,0022	0,0152	0,43	0,0680	96,900	0,943
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,1195	0,0031	0,0133	0,69	0,1164	97,437	3,132
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0684	0,0019	0,0149	0,39	0,0665	97,208	0,917
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0863	0,0028	0,0111	0,76	0,0835	96,749	1,947
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0452	0,0017	0,0129	0,40	0,0435	96,185	0,457
TiCrCO ₂	0,1003	0,0047	0,0727	0,19	0,0956	95,354	0,396
TiHfCO ₂	0,0654	0,0028	0,0373	0,22	0,0626	95,729	0,329
TiHfN(NO) ₂	0,0514	0,0026	0,0443	0,17	0,0489	95,034	0,170
TiMoCO ₂	0,0685	0,0034	0,0574	0,18	0,0651	95,048	0,233
TiNbC	0,0848	0,0051	0,1324	0,12	0,0797	93,994	0,153
TiVC	0,1206	0,0072	0,1807	0,12	0,1135	94,060	0,227
TiWCO ₂	0,0481	0,0051	0,0396	0,39	0,0430	89,385	0,157
TiZrCO ₂	0,1026	0,0046	0,0668	0,21	0,0980	95,523	0,451
V ₂ C	0,1085	0,0058	0,1243	0,14	0,1027	94,667	0,269
V ₂ C(OH) ₂	0,1492	0,0058	0,0619	0,28	0,1434	96,101	1,038
V ₂ CBr ₂	0,0365	0,0020	0,0423	0,14	0,0345	94,582	0,089
V ₂ CF(OH)	0,1059	0,0048	0,0763	0,19	0,1011	95,427	0,421
V ₂ CF ₂	0,0773	0,0039	0,0686	0,17	0,0734	94,919	0,248
V ₂ CO ₂	0,1124	0,0050	0,0728	0,21	0,1074	95,536	0,498
V ₂ CrCN	0,2506	0,0085	0,0835	0,31	0,2420	96,604	2,180
V ₂ CrCNO ₂	0,2358	0,0072	0,0418	0,52	0,2286	96,940	3,865
V ₂ HfCN	0,1090	0,0043	0,0508	0,25	0,1048	96,097	0,675
V ₂ HfCNO ₂	0,1191	0,0039	0,0270	0,43	0,1152	96,724	1,523
V ₂ MoCN	0,1716	0,0063	0,0684	0,28	0,1653	96,326	1,245
V ₂ MoCNO ₂	0,1739	0,0055	0,0356	0,47	0,1683	96,809	2,470
V ₂ N	0,0772	0,0045	0,1145	0,12	0,0727	94,165	0,147
V ₂ N(OH) ₂	0,1149	0,0049	0,0646	0,23	0,1100	95,717	0,587
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0994	0,0040	0,0513	0,23	0,0954	96,014	0,554
V ₂ NbCN	0,1765	0,0065	0,0692	0,28	0,1701	96,339	1,302
V ₂ NbCNO ₂	0,1924	0,0057	0,0327	0,53	0,1867	97,012	3,292
V ₂ NF ₂	0,0654	0,0035	0,0689	0,15	0,0618	94,588	0,176
V ₂ NO ₂	0,0934	0,0044	0,0720	0,18	0,0890	95,293	0,346
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0008	0,0000	0,0005	0,21	0,0008	95,835	0,004
V ₂ TaC ₂	0,0015	0,0001	0,0009	0,21	0,0014	95,901	0,007

V ₂ TaCN	0,0021	0,0001	0,0009	0,27	0,0020	96,321	0,015
V ₂ TaCNO ₂	0,0023	0,0001	0,0005	0,45	0,0023	96,763	0,032
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,1555	0,0059	0,0707	0,25	0,1496	96,183	0,988
V ₂ TiC ₂	0,1796	0,0070	0,0893	0,23	0,1726	96,120	1,042
V ₂ TiCN	0,2324	0,0082	0,0858	0,29	0,2241	96,456	1,821
V ₂ TiCNO ₂	0,2313	0,0071	0,0429	0,50	0,2241	96,910	3,625
V ₂ ZrCN	0,2506	0,0061	0,0835	0,22	0,2444	97,561	2,202
V ₂ ZrCNO ₂	0,1687	0,0055	0,0360	0,46	0,1632	96,755	2,293
V ₃ C ₂	0,0812	0,0040	0,0764	0,16	0,0773	95,101	0,246
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1963	0,0045	0,0285	0,48	0,1918	97,701	3,968
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0380	0,0015	0,0217	0,21	0,0365	95,988	0,192
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,1166	0,0040	0,0372	0,33	0,1125	96,527	1,058
V ₃ C ₂ F ₂	0,0842	0,0031	0,0341	0,27	0,0811	96,297	0,600
V ₃ C ₂ O ₂	0,1267	0,0045	0,0429	0,32	0,1222	96,436	1,081
V ₃ CN	0,2163	0,0077	0,0870	0,27	0,2085	96,434	1,555
V ₃ CNO ₂	0,2871	0,0081	0,0482	0,50	0,2790	97,177	4,987
V ₃ N ₂	0,0533	0,0028	0,0574	0,14	0,0505	94,799	0,141
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,3951	0,0032	0,0333	0,29	0,3920	99,197	13,962
V ₃ N ₂ F ₂	0,0668	0,0025	0,0290	0,25	0,0643	96,321	0,444
V ₃ N ₂ H ₂	0,0967	0,0036	0,0401	0,27	0,0932	96,329	0,674
V ₃ N ₂ O ₂	0,2623	0,0075	0,0443	0,51	0,2548	97,138	4,525
V ₄ C ₃	0,0824	0,0038	0,0614	0,19	0,0786	95,394	0,316
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,1606	0,0043	0,0262	0,50	0,1562	97,294	2,870
V ₄ C ₃ F ₂	0,0607	0,0026	0,0330	0,24	0,0581	95,663	0,320
V ₄ C ₃ H ₂	0,0482	0,0021	0,0315	0,20	0,0461	95,626	0,212
V ₄ C ₃ O ₂	0,0888	0,0035	0,0370	0,29	0,0853	96,035	0,614
V ₄ N ₃	0,0514	0,0027	0,0552	0,15	0,0487	94,698	0,136
V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0938	0,0033	0,0309	0,32	0,0905	96,499	0,824
V ₄ N ₃ F ₂	0,0463	0,0022	0,0343	0,19	0,0441	95,321	0,178
V ₄ N ₃ H ₂	0,0366	0,0018	0,0296	0,18	0,0348	95,145	0,129
V ₄ N ₃ O ₂	0,0643	0,0054	0,0355	0,45	0,0589	91,663	0,320
VCrN(NCS) ₂	1,4550	0,0979	0,0097	30,17	1,3571	93,273	608,683
VCrN(SCN) ₂	0,7234	0,0171	0,0303	1,69	0,7064	97,641	50,556
VCrNBr ₂	0,6707	0,0163	0,0356	1,37	0,6545	97,575	36,949

VCrNF ₂	0,0802	0,0040	0,0722	0,17	0,0762	95,011	0,254
VMoN(NCO) ₂	0,2729	0,0081	0,0440	0,56	0,2648	97,018	4,932
VMoN(NCS) ₂	1,2236	0,0666	0,0098	20,33	1,1570	94,556	432,036
VMoN(OCN) ₂	0,3086	0,0089	0,0428	0,63	0,2996	97,104	6,482
VMoN(SCN) ₂	0,5581	0,0128	0,0280	1,37	0,5453	97,706	32,660
VMoNBr ₂	0,5157	0,0128	0,0336	1,14	0,5029	97,517	23,156
VMoNCl ₂	0,4125	0,0114	0,0553	0,62	0,4011	97,237	8,980
VNbC	0,0834	0,0050	0,1292	0,12	0,0785	94,037	0,152
VNbCF ₂ -(model4)	0,1036	0,0048	0,0772	0,18	0,0988	95,408	0,398
VWN(NCO) ₂	0,1689	0,0053	0,0344	0,46	0,1635	96,841	2,405
VWN(OCN) ₂	0,2204	0,0065	0,0324	0,60	0,2140	97,056	4,362
VWNBr ₂	0,3594	0,0091	0,0294	0,92	0,3503	97,479	12,845
VWNCl ₂	0,3028	0,0084	0,0405	0,62	0,2945	97,241	6,598
VWNF ₂	0,0493	0,0025	0,0434	0,17	0,0468	94,973	0,160
W _{1,33} C	1,8066	0,0801	0,0484	4,97	1,7264	95,565	193,373
W _{1,33} C(OH) ₂	0,0901	0,0034	0,0346	0,30	0,0866	96,192	0,676
W _{1,33} CO ₂	0,0735	0,0030	0,0392	0,23	0,0705	95,881	0,397
W ₂ C	0,0475	0,0022	0,0373	0,18	0,0453	95,340	0,173
W ₂ C(OH) ₂	0,0764	0,0023	0,0180	0,39	0,0741	96,959	0,943
W ₂ CCl ₂	0,2087	0,0059	0,0322	0,55	0,2028	97,192	3,944
W ₂ CF ₂	0,0333	0,0014	0,0190	0,23	0,0319	95,718	0,168
W ₂ CO ₂	0,0431	0,0016	0,0297	0,16	0,0415	96,377	0,181
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0393	0,0013	0,0115	0,35	0,0379	96,592	0,390
W ₂ HfC ₂	0,0218	0,0011	0,0228	0,15	0,0207	94,853	0,059
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0615	0,0019	0,0137	0,42	0,0595	96,868	0,802
W ₂ N	0,0306	0,0017	0,0380	0,13	0,0289	94,447	0,070
W ₂ N(OH) ₂	0,0897	0,0024	0,0158	0,46	0,0873	97,308	1,485
W ₂ NF ₂	0,0309	0,0013	0,0170	0,23	0,0296	95,717	0,161
W ₂ NO ₂	0,0436	0,0018	0,0211	0,25	0,0418	95,952	0,258
W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0552	0,0020	0,0172	0,34	0,0532	96,434	0,512
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0812	0,0025	0,0185	0,41	0,0787	96,870	1,036
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0503	0,0025	0,0144	0,53	0,0477	94,934	0,499
W ₂ ZrC ₂	0,0265	0,0017	0,0268	0,19	0,0248	93,599	0,074
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0749	0,0014	0,0159	0,26	0,0735	98,184	1,037

W ₃ C ₂	0,0225	0,0024	0,0224	0,32	0,0201	89,419	0,060
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0840	0,0023	0,0127	0,53	0,0817	97,299	1,617
W ₃ C ₂ F ₂	0,0294	0,0009	0,0090	0,28	0,0286	97,104	0,281
W ₃ C ₂ O ₂	0,0526	0,0017	0,0130	0,40	0,0508	96,739	0,617
W ₃ N ₂	0,0242	0,0012	0,0234	0,16	0,0230	94,998	0,071
W ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,0000	0,0008	0,00	0,0000	92,653	0,000
W ₃ N ₂ F ₂	0,0207	0,0006	0,0072	0,24	0,0202	97,220	0,174
W ₃ N ₂ O ₂	0,0699	0,0022	0,0157	0,42	0,0677	96,875	0,905
W ₄ C ₃	0,0416	0,0017	0,0219	0,23	0,0399	95,993	0,228
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0386	0,0012	0,0103	0,34	0,0374	96,980	0,423
W ₄ C ₃ F ₂	0,0230	0,0010	0,0123	0,23	0,0220	95,810	0,123
W ₄ C ₃ H ₂	0,0279	0,0011	0,0142	0,24	0,0268	95,902	0,158
W ₄ C ₃ O ₂	0,0418	0,0015	0,0140	0,32	0,0402	96,379	0,359
W ₄ N ₃	0,0539	0,0019	0,0198	0,29	0,0519	96,397	0,424
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0495	0,0016	0,0114	0,42	0,0479	96,753	0,625
W ₄ N ₃ F ₂	0,0344	0,0014	0,0158	0,26	0,0331	96,062	0,216
W ₄ N ₃ H ₂	0,0223	0,0010	0,0131	0,22	0,0213	95,650	0,109
W ₄ N ₃ O ₂	0,0252	0,0011	0,0159	0,21	0,0241	95,525	0,114
WCrC	0,0475	0,0027	0,0621	0,13	0,0448	94,398	0,103
WCrCO ₂ -(model4)	0,0618	0,0028	0,0418	0,20	0,0589	95,441	0,261
Y ₂ C	0,0742	0,0042	0,0985	0,13	0,0701	94,405	0,158
Y ₂ C(CN) ₂	0,1265	0,0049	0,0536	0,28	0,1216	96,106	0,860
Y ₂ C(NCO) ₂	0,2011	0,0065	0,0473	0,41	0,1946	96,765	2,482
Y ₂ C(NCS) ₂	0,4157	0,0067	0,0229	0,87	0,4090	98,392	22,251
Y ₂ C(OCI) ₂	0,2742	0,0084	0,0474	0,53	0,2658	96,946	4,618
Y ₂ C(OCN) ₂	0,2126	0,0068	0,0472	0,43	0,2058	96,805	2,781
Y ₂ C(OH) ₂	0,0706	0,0030	0,0481	0,19	0,0676	95,745	0,298
Y ₂ C(SCN) ₂	0,3909	0,0090	0,0336	0,81	0,3819	97,694	13,346
Y ₂ CBr ₂	0,2191	0,0069	0,0448	0,46	0,2121	96,835	3,110
Y ₂ CCl ₂	0,2466	0,0080	0,0610	0,40	0,2386	96,737	2,895
Y ₂ CF ₂	0,0741	0,0035	0,0594	0,18	0,0705	95,213	0,264
Y ₂ CO ₂	0,1302	0,0053	0,0675	0,23	0,1249	95,950	0,723
Y ₂ N	0,0609	0,0036	0,0886	0,12	0,0573	94,114	0,118
Y ₂ N(OH) ₂	0,0698	0,0030	0,0458	0,20	0,0668	95,714	0,305

Y ₂ NF ₂	0,0608	0,0029	0,0534	0,17	0,0579	95,158	0,198
Y ₂ NO ₂	0,1117	0,0047	0,0666	0,21	0,1070	95,770	0,538
Y ₃ C ₂	0,0602	0,0028	0,0428	0,19	0,0574	95,386	0,242
Y ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0096	0,0003	0,0123	0,07	0,0093	97,043	0,022
Y ₃ C ₂ F ₂	0,0698	0,0025	0,0275	0,27	0,0673	96,457	0,513
Y ₃ C ₂ O ₂	0,0783	0,0021	0,0199	0,32	0,0762	97,305	0,898
Y ₃ N ₂	0,0483	0,0023	0,0405	0,17	0,0460	95,166	0,165
Y ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0814	0,0022	0,0221	0,30	0,0792	97,291	0,876
Y ₃ N ₂ F ₂	0,0732	0,0026	0,0267	0,30	0,0706	96,399	0,580
Y ₃ N ₂ O ₂	0,0690	0,0021	0,0210	0,30	0,0669	96,981	0,659
Y ₄ C ₃	0,0584	0,0027	0,0455	0,18	0,0557	95,319	0,214
Y ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,0003	0,0109	0,07	0,0073	96,623	0,015
Y ₄ C ₃ F ₂	0,0632	0,0023	0,0225	0,30	0,0610	96,421	0,515
Y ₄ C ₃ O ₂	0,1274	0,0039	0,0268	0,44	0,1234	96,924	1,761
Y ₄ N ₃	0,0423	0,0022	0,0455	0,14	0,0401	94,798	0,112
Y ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0529	0,0018	0,0215	0,26	0,0510	96,549	0,377
Y ₄ N ₃ F ₂	0,0635	0,0026	0,0314	0,25	0,0610	95,949	0,370
Y ₄ N ₃ O ₂	0,0605	0,0024	0,0263	0,27	0,0582	96,088	0,401
YCrC(NCO) ₂	0,2384	0,0074	0,0478	0,46	0,2310	96,891	3,455
YCrC(NCS) ₂	1,1853	0,0381	0,0160	7,13	1,1472	96,784	254,446
YCrC(OCN) ₂	0,2509	0,0076	0,0460	0,49	0,2434	96,986	3,983
YCrC(OH) ₂	0,1283	0,0047	0,0506	0,28	0,1236	96,328	0,941
YCrCBr ₂	0,3692	0,0099	0,0441	0,68	0,3592	97,310	9,026
YCrCCl ₂	0,3214	0,0099	0,0667	0,45	0,3115	96,909	4,503
YCrCF ₂	0,0952	0,0043	0,0639	0,20	0,0909	95,500	0,406
YHfN(SCN) ₂	0,3150	0,0078	0,0283	0,83	0,3072	97,527	10,267
YHfNO ₂	0,0523	0,0031	0,0350	0,27	0,0492	94,064	0,220
YMoN(NO) ₂	0,0630	0,0023	0,0540	0,13	0,0606	96,272	0,212
YNbCO ₂	0,0843	0,0038	0,0585	0,20	0,0804	95,444	0,348
YTaCO ₂	0,0011	0,0000	0,0007	0,20	0,0010	95,428	0,004
YTiN(NO) ₂	0,0881	0,0041	0,0627	0,20	0,0840	95,365	0,354
YTiNO ₂	0,0823	0,0038	0,0577	0,20	0,0785	95,370	0,336
YVCO ₂	0,0938	0,0044	0,0688	0,19	0,0894	95,336	0,366
YVNF ₂	0,0763	0,0036	0,0562	0,19	0,0728	95,325	0,297

YZrNO ₂	0,0742	0,0033	0,0479	0,21	0,0709	95,560	0,329
Zr ₂ C	0,0681	0,0040	0,1077	0,11	0,0641	94,139	0,122
Zr ₂ C(OH) ₂	0,0794	0,0032	0,0419	0,23	0,0762	96,024	0,433
Zr ₂ CF ₂	0,0579	0,0029	0,0499	0,17	0,0551	95,048	0,192
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0698	0,0034	0,0531	0,19	0,0665	95,190	0,262
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0918	0,0044	0,0790	0,17	0,0874	95,164	0,305
Zr ₂ CO ₂	0,0882	0,0040	0,0578	0,21	0,0843	95,505	0,386
Zr ₂ CrCN	0,1104	0,0045	0,0573	0,24	0,1060	95,937	0,613
Zr ₂ CrCNO ₂	0,1197	0,0040	0,0307	0,39	0,1157	96,625	1,352
Zr ₂ HfCN	0,0622	0,0028	0,0392	0,21	0,0594	95,567	0,283
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0792	0,0026	0,0211	0,37	0,0766	96,678	0,864
Zr ₂ MoCN	0,0867	0,0037	0,0490	0,22	0,0830	95,768	0,440
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0989	0,0034	0,0265	0,38	0,0955	96,573	1,071
Zr ₂ N	0,0618	0,0035	0,0819	0,13	0,0584	94,405	0,132
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0759	0,0030	0,0402	0,23	0,0729	96,022	0,412
Zr ₂ NbCN	0,0870	0,0037	0,0494	0,22	0,0833	95,763	0,440
Zr ₂ NbCNO ₂	0,1021	0,0034	0,0267	0,39	0,0987	96,645	1,133
Zr ₂ NF ₂	0,0513	0,0026	0,0496	0,16	0,0487	94,944	0,151
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0642	0,0031	0,0487	0,19	0,0612	95,240	0,242
Zr ₂ NO ₂	0,0725	0,0034	0,0540	0,19	0,0691	95,308	0,278
Zr ₂ TaCN	0,0014	0,0001	0,0008	0,22	0,0014	95,790	0,007
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0018	0,0001	0,0005	0,38	0,0018	96,590	0,019
Zr ₂ TiCN	0,1065	0,0044	0,0586	0,23	0,1020	95,843	0,556
Zr ₂ TiCNO ₂	0,1179	0,0040	0,0310	0,39	0,1139	96,610	1,298
Zr ₂ VCN	0,1038	0,0044	0,0580	0,23	0,0994	95,801	0,534
Zr ₂ VCNO ₂	0,1143	0,0039	0,0309	0,38	0,1103	96,567	1,223
Zr ₃ C ₂	0,0689	0,0033	0,0540	0,18	0,0656	95,268	0,251
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,1177	0,0031	0,0237	0,39	0,1146	97,385	1,709
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0530	0,0021	0,0268	0,24	0,0509	95,997	0,302
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0347	0,0013	0,0200	0,20	0,0334	96,246	0,174
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0955	0,0033	0,0310	0,32	0,0922	96,517	0,851
Zr ₃ CN	0,0831	0,0035	0,0514	0,21	0,0796	95,768	0,385
Zr ₃ CNO ₂	0,1208	0,0039	0,0315	0,38	0,1169	96,734	1,345
Zr ₃ N ₂	0,0469	0,0023	0,0437	0,16	0,0446	95,027	0,144

Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,1271	0,0033	0,0226	0,44	0,1238	97,376	2,085
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0424	0,0016	0,0220	0,22	0,0407	96,152	0,235
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0375	0,0014	0,0203	0,21	0,0361	96,288	0,200
Zr ₃ N ₂ O ₂	0,0761	0,0028	0,0292	0,29	0,0733	96,311	0,572
Zr ₄ C ₃	0,0591	0,0027	0,0428	0,19	0,0565	95,508	0,234
Zr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0485	0,0014	0,0171	0,25	0,0470	97,063	0,401
Zr ₄ C ₃ F ₂	0,0466	0,0019	0,0225	0,25	0,0447	95,978	0,277
Zr ₄ C ₃ H ₂	0,0607	0,0022	0,0216	0,30	0,0585	96,394	0,493
Zr ₄ C ₃ O ₂	0,0764	0,0027	0,0255	0,32	0,0737	96,408	0,662
Zr ₄ N ₃	0,0378	0,0019	0,0358	0,16	0,0359	95,015	0,114
Zr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0469	0,0014	0,0161	0,26	0,0455	97,054	0,397
Zr ₄ N ₃ F ₂	0,0362	0,0015	0,0207	0,22	0,0347	95,746	0,182
Zr ₄ N ₃ O ₂	0,0582	0,0023	0,0243	0,28	0,0560	96,134	0,403
ZrCrNO ₂	0,0802	0,0036	0,0544	0,20	0,0765	95,452	0,338
ZrHfCO ₂	0,0503	0,0023	0,0349	0,20	0,0480	95,431	0,207
ZrMoCO ₂	0,0560	0,0028	0,0509	0,16	0,0532	95,003	0,175

APPENDIX I: CO₂/H₂ Mixture Adsorption Performance of Mxene Structures at VTSA Conditions (120 °C)

MXene Type	CO ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)		H ₂ Adsorption Capacity (mol/kg)	CO ₂ /H ₂ Selectivity	CO ₂ Working Capacity (mol/kg)	% Regenerebility	APS
	1 bar, 35°C	0.1 bar, 120°C	1 bar, 35°C	1 bar, 35°C	VTSA	VTSA	VTSA
(CrV) ₃ C ₂	0,0146	0,000552	0,0071	6,18	0,0140	96,214	0,087
(Mo _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0075	0,000343	0,0054	4,17	0,0072	95,434	0,030
(TiV) ₃ C ₂	0,0168	0,000587	0,0076	6,61	0,0162	96,501	0,107
(TiV)C(OH) ₂	0,0099	0,000622	0,0087	3,42	0,0093	93,709	0,032
(TiV)CF ₂	0,0108	0,000505	0,0081	4,01	0,0103	95,341	0,041
(TiV)CO ₂	0,0108	0,000507	0,0081	4,01	0,0103	95,323	0,041
(W _{0.66} Y _{0.33}) ₂ CO ₂	0,0194	0,000389	0,0021	27,39	0,0190	97,989	0,519
Cr ₂ C	0,0116	0,000618	0,0123	2,82	0,0109	94,656	0,031
Cr ₂ C(OH) ₂	0,0138	0,000544	0,0066	6,27	0,0133	96,060	0,083
Cr ₂ CBr ₂	0,0502	0,001281	0,0060	25,03	0,0490	97,451	1,225
Cr ₂ CCL ₂	0,0432	0,001332	0,0083	15,68	0,0418	96,914	0,656
Cr ₂ CF ₂	0,0077	0,000382	0,0074	3,11	0,0073	95,034	0,023
Cr ₂ CFCl	0,0122	0,000535	0,0073	5,02	0,0117	95,619	0,059
Cr ₂ CH ₂	0,0064	0,000341	0,0077	2,51	0,0061	94,681	0,015
Cr ₂ CO ₂	0,0126	0,000527	0,0067	5,67	0,0121	95,815	0,068
Cr ₂ CS ₂	0,1866	0,003629	0,0091	61,48	0,1830	98,055	11,249
Cr ₂ HfCN	0,0107	0,000478	0,0049	6,63	0,0103	95,552	0,068
Cr ₂ HfCNO ₂	0,0151	0,000478	0,0033	13,64	0,0146	96,836	0,199
Cr ₂ MoCN	0,0168	0,000633	0,0066	7,60	0,0162	96,244	0,123
Cr ₂ MoCNO ₂	0,0207	0,000663	0,0044	14,17	0,0200	96,797	0,284
Cr ₂ N	0,0070	0,000408	0,0097	2,17	0,0066	94,168	0,014
Cr ₂ N(OH) ₂	0,0122	0,000491	0,0062	5,90	0,0117	95,988	0,069
Cr ₂ Nb ₂ C ₃	0,0096	0,000392	0,0051	5,62	0,0092	95,925	0,052
Cr ₂ NbCN	0,0179	0,000667	0,0068	7,93	0,0173	96,284	0,137
Cr ₂ NbCNO ₂	0,0217	0,000694	0,0045	14,61	0,0210	96,800	0,307
Cr ₂ NF ₂	0,0062	0,000322	0,0066	2,84	0,0059	94,836	0,017
Cr ₂ NH ₂	0,0063	0,000327	0,0069	2,72	0,0059	94,797	0,016
Cr ₂ NO ₂	0,0089	0,000431	0,0073	3,64	0,0085	95,153	0,031

Cr ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,000003	0,0000	4,93	0,0001	95,696	0,000
Cr ₂ TaC ₂	0,0001	0,000004	0,0001	2,88	0,0001	94,870	0,000
Cr ₂ TaCN	0,0002	0,000008	0,0001	7,18	0,0002	96,067	0,001
Cr ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,000009	0,0001	14,02	0,0003	96,852	0,004
Cr ₂ Ti ₂ C ₃	0,0148	0,000588	0,0071	6,24	0,0142	96,017	0,088
Cr ₂ TiC ₂	0,0082	0,000401	0,0073	3,35	0,0078	95,092	0,026
Cr ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0303	0,000720	0,0042	21,80	0,0296	97,623	0,645
Cr ₂ TiC ₂ F ₂	0,0252	0,000802	0,0060	12,69	0,0244	96,820	0,310
Cr ₂ TiC ₂ O ₂	0,0237	0,000724	0,0053	13,34	0,0229	96,941	0,306
Cr ₂ TiCN	0,0237	0,000860	0,0084	8,43	0,0228	96,365	0,192
Cr ₂ TiCNO ₂	0,0275	0,000847	0,0054	15,30	0,0266	96,919	0,408
Cr ₂ V ₂ C ₃	0,0148	0,000582	0,0069	6,47	0,0142	96,064	0,092
Cr ₂ VC ₂	0,0079	0,000380	0,0071	3,36	0,0075	95,208	0,025
Cr ₂ VCN	0,0247	0,000904	0,0085	8,76	0,0238	96,340	0,208
Cr ₂ VCNO ₂	0,0268	0,000859	0,0054	14,93	0,0260	96,798	0,388
Cr ₂ ZrCN	0,0156	0,000623	0,0068	6,92	0,0150	96,017	0,104
Cr ₂ ZrCNO ₂	0,0295	0,000677	0,0043	20,38	0,0289	97,707	0,588
Cr ₃ C ₂	0,0108	0,000510	0,0082	3,96	0,0103	95,279	0,041
Cr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0158	0,000432	0,0039	12,24	0,0154	97,267	0,188
Cr ₃ C ₂ F ₂	0,0072	0,000303	0,0041	5,31	0,0069	95,779	0,037
Cr ₃ C ₂ H ₂	0,0099	0,000391	0,0048	6,16	0,0095	96,062	0,059
Cr ₃ C ₂ O ₂	0,0602	0,000419	0,0047	38,47	0,0598	99,304	2,299
Cr ₃ CN	0,0232	0,000825	0,0084	8,26	0,0224	96,446	0,185
Cr ₃ CNO ₂	0,0311	0,000296	0,0055	16,87	0,0308	99,049	0,519
Cr ₃ N ₂	0,0053	0,000146	0,0055	2,86	0,0051	97,240	0,015
Cr ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0109	0,000304	0,0035	9,34	0,0106	97,224	0,099
Cr ₃ N ₂ H ₂	0,0112	0,000185	0,0051	6,63	0,0111	98,355	0,073
Cr ₃ N ₂ O ₂	0,0110	0,000145	0,0035	9,30	0,0109	98,678	0,101
Cr ₄ C ₃	0,0095	0,000208	0,0067	4,27	0,0093	97,816	0,040
Cr ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0109	0,000374	0,0035	9,34	0,0106	96,579	0,099
Cr ₄ C ₃ F ₂	0,0056	0,000254	0,0037	4,49	0,0053	95,437	0,024
Cr ₄ C ₃ H ₂	0,0070	0,000290	0,0041	5,15	0,0067	95,833	0,034
Cr ₄ C ₃ O ₂	0,0083	0,000336	0,0038	6,58	0,0079	95,943	0,052
Cr ₄ N ₃	0,0057	0,000295	0,0062	2,73	0,0054	94,780	0,015

Cr ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0088	0,000313	0,0033	7,97	0,0085	96,445	0,068
Cr ₄ N ₃ F ₂	0,0045	0,000208	0,0035	3,83	0,0043	95,340	0,016
Cr ₄ N ₃ H ₂	0,0053	0,000242	0,0037	4,31	0,0050	95,393	0,022
Cr ₄ N ₃ O ₂	0,0061	0,000270	0,0036	5,10	0,0058	95,553	0,030
CrMoCF ₂	0,0076	0,000368	0,0065	3,50	0,0072	95,164	0,025
CrWCF ₂	0,0058	0,000278	0,0044	3,95	0,0055	95,220	0,022
Hf ₂ C	0,0043	0,000234	0,0047	2,78	0,0041	94,574	0,011
Hf ₂ C(OH) ₂	0,0051	0,000189	0,0025	6,15	0,0049	96,263	0,030
Hf ₂ CF ₂	0,0034	0,000159	0,0029	3,48	0,0032	95,319	0,011
Hf ₂ CF ₂ -(model2)	0,0038	0,000192	0,0033	3,51	0,0036	94,946	0,013
Hf ₂ CF ₂ -(model3)	0,0048	0,000246	0,0048	3,00	0,0045	94,875	0,014
Hf ₂ CF ₂ -(model4)	0,0042	0,000216	0,0042	3,00	0,0040	94,896	0,012
Hf ₂ CO ₂	0,0051	0,000228	0,0033	4,65	0,0049	95,576	0,023
Hf ₂ CO ₂ -(model2)	0,0034	0,000153	0,0026	3,90	0,0032	95,441	0,013
Hf ₂ CO ₂ -(model3)	0,0045	0,000231	0,0042	3,27	0,0043	94,913	0,014
Hf ₂ CO ₂ -(model4)	0,0051	0,000248	0,0045	3,43	0,0049	95,147	0,017
Hf ₂ CrCN	0,0057	0,000253	0,0035	4,87	0,0055	95,581	0,027
Hf ₂ MoCNO ₂	0,0114	0,000204	0,0016	20,85	0,0112	98,209	0,233
Hf ₂ N	0,0033	0,000111	0,0043	2,35	0,0032	96,663	0,008
Hf ₂ N(OH) ₂	0,0053	0,000186	0,0022	7,32	0,0051	96,485	0,037
Hf ₂ NbCN	0,0048	0,000221	0,0032	4,48	0,0046	95,386	0,020
Hf ₂ NF ₂	0,0028	0,000138	0,0024	3,60	0,0027	95,139	0,010
Hf ₂ NF ₂ -(model2)	0,0034	0,000179	0,0025	4,05	0,0033	94,802	0,013
Hf ₂ NF ₂ -(model4)	0,0065	0,000284	0,0047	4,15	0,0062	95,613	0,026
Hf ₂ NO ₂	0,0044	0,000203	0,0032	4,16	0,0042	95,375	0,017
Hf ₂ TaCN	0,0001	0,000006	0,0001	4,43	0,0001	95,555	0,001
Hf ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,000006	0,0000	10,54	0,0002	96,699	0,002
Hf ₂ TiCN	0,0056	0,000242	0,0035	4,71	0,0053	95,651	0,025
Hf ₂ TiCNO ₂	0,0066	0,000224	0,0020	9,77	0,0064	96,610	0,062
Hf ₂ VCN	0,0054	0,000246	0,0036	4,59	0,0052	95,469	0,024
Hf ₂ VCNO ₂	0,0066	0,000225	0,0021	9,65	0,0064	96,594	0,062
Hf ₂ ZrCN	0,0046	0,000216	0,0032	4,23	0,0044	95,273	0,018
Hf ₂ ZrCNO ₂	0,0061	0,000203	0,0018	9,99	0,0059	96,659	0,059
Hf ₃ C ₂	0,0038	0,000185	0,0029	3,97	0,0037	95,173	0,015

Hf ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0031	0,000082	0,0011	8,25	0,0030	97,360	0,025
Hf ₃ C ₂ F ₂	0,0030	0,000132	0,0016	5,77	0,0029	95,610	0,017
Hf ₃ C ₂ H ₂	0,0010	0,000042	0,0009	3,34	0,0010	95,910	0,003
Hf ₃ C ₂ O ₂	0,0052	0,000193	0,0018	8,55	0,0050	96,266	0,043
Hf ₃ CN	0,0038	0,000176	0,0028	4,03	0,0036	95,326	0,014
Hf ₃ CNO ₂	0,0059	0,000203	0,0019	9,47	0,0057	96,589	0,054
Hf ₃ N ₂	0,0026	0,000131	0,0023	3,33	0,0025	94,971	0,008
Hf ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0018	0,000045	0,0008	6,35	0,0017	97,427	0,011
Hf ₃ N ₂ F ₂	0,0025	0,000091	0,0013	5,88	0,0024	96,310	0,014
Hf ₃ N ₂ H ₂	0,0015	0,000057	0,0010	4,68	0,0015	96,325	0,007
Hf ₃ N ₂ O ₂	0,0042	0,000158	0,0017	7,41	0,0041	96,263	0,030
Hf ₄ C ₃	0,0022	0,000108	0,0020	3,37	0,0021	95,062	0,007
Hf ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0034	0,000122	0,0014	7,17	0,0033	96,459	0,024
Hf ₄ C ₃ F ₂	0,0027	0,000103	0,0013	6,03	0,0026	96,124	0,015
Hf ₄ C ₃ H ₂	0,0012	0,000047	0,0008	4,37	0,0012	96,104	0,005
Hf ₄ C ₃ O ₂	0,0043	0,000155	0,0015	8,49	0,0041	96,353	0,035
Hf ₄ N ₃	0,0021	0,000104	0,0019	3,18	0,0020	94,967	0,006
Hf ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0030	0,000088	0,0010	8,99	0,0029	97,045	0,026
Hf ₄ N ₃ F ₂	0,0020	0,000088	0,0012	5,14	0,0020	95,692	0,010
Hf ₄ N ₃ H ₂	0,0012	0,000048	0,0009	3,97	0,0011	95,835	0,004
Hf ₄ N ₃ O ₂	0,0033	0,000130	0,0014	7,11	0,0032	96,064	0,023
HfCrNO ₂	0,0053	0,000245	0,0038	4,15	0,0051	95,389	0,021
Mn ₂ C	0,0115	0,000589	0,0120	2,88	0,0109	94,895	0,032
Mn ₂ C(OH) ₂	0,0128	0,000502	0,0063	6,09	0,0123	96,083	0,075
Mn ₂ CF ₂	0,0070	0,000354	0,0064	3,27	0,0066	94,915	0,022
Mn ₂ CO ₂	0,0098	0,000456	0,0073	4,02	0,0094	95,350	0,038
Mn ₂ N	0,0063	0,000364	0,0087	2,17	0,0059	94,200	0,013
Mn ₂ N(OH) ₂	0,0099	0,000441	0,0063	4,69	0,0095	95,547	0,044
Mn ₂ NF ₂	0,0059	0,000312	0,0064	2,74	0,0055	94,669	0,015
Mn ₂ NO ₂	0,0084	0,000400	0,0067	3,79	0,0080	95,247	0,030
Mn ₃ C ₂	0,0106	0,000488	0,0078	4,06	0,0101	95,382	0,041
Mn ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0156	0,000440	0,0036	13,00	0,0152	97,183	0,197
Mn ₃ C ₂ F ₂	0,0069	0,000304	0,0038	5,39	0,0066	95,585	0,035
Mn ₃ C ₂ O ₂	0,0102	0,000396	0,0043	7,19	0,0098	96,134	0,071

Mn ₃ N ₂	0,0075	0,000394	0,0078	2,90	0,0072	94,786	0,021
Mn ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0127	0,000353	0,0032	11,92	0,0123	97,218	0,147
Mn ₃ N ₂ F ₂	0,0056	0,000255	0,0038	4,36	0,0053	95,414	0,023
Mn ₄ C ₃	0,0092	0,000412	0,0064	4,30	0,0088	95,517	0,038
Mn ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0118	0,000373	0,0031	11,30	0,0115	96,849	0,130
Mn ₄ C ₃ F ₂	0,0055	0,000238	0,0033	5,02	0,0052	95,654	0,026
Mn ₄ C ₃ O ₂	0,0073	0,000310	0,0037	5,92	0,0070	95,779	0,042
Mn ₄ N ₃	0,0050	0,000244	0,0041	3,68	0,0048	95,135	0,018
Mn ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0100	0,000331	0,0029	10,34	0,0097	96,694	0,100
Mn ₄ N ₃ O ₂	0,0056	0,000253	0,0034	4,91	0,0054	95,513	0,027
Mo _{1,33} C	0,0176	0,000704	0,0117	4,50	0,0169	96,003	0,076
Mo ₂ C	0,0084	0,000415	0,0079	3,22	0,0080	95,083	0,026
Mo ₂ C(NCS) ₂	0,3961	0,004993	0,0040	297,99	0,3911	98,740	116,554
Mo ₂ C(OCN) ₂	0,0276	0,000769	0,0045	18,50	0,0269	97,217	0,497
Mo ₂ C(OH) ₂	0,0078	0,000337	0,0046	5,07	0,0075	95,701	0,038
Mo ₂ C(SCN) ₂	0,0525	0,001013	0,0038	41,55	0,0515	98,071	2,139
Mo ₂ CBr ₂	0,0341	0,000921	0,0045	22,67	0,0332	97,297	0,752
Mo ₂ CCl ₂	0,0259	0,000837	0,0057	13,56	0,0250	96,765	0,339
Mo ₂ CF ₂	0,0054	0,000280	0,0054	3,03	0,0051	94,826	0,016
Mo ₂ CF ₂ -(model4)	0,0096	0,000440	0,0071	4,08	0,0092	95,420	0,037
Mo ₂ CO ₂	0,0079	0,000328	0,0042	5,61	0,0076	95,865	0,043
Mo ₂ CO ₂ -(model4)	0,0066	0,000316	0,0051	3,88	0,0063	95,198	0,024
Mo ₂ CrCN	0,0125	0,000490	0,0056	6,71	0,0121	96,091	0,081
Mo ₂ CrCNO ₂	0,0144	0,000493	0,0037	11,53	0,0139	96,567	0,160
Mo ₂ CS ₂	0,0046	0,002358	0,0050	2,77	0,0023	49,090	0,006
Mo ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0048	0,000167	0,0016	9,22	0,0047	96,555	0,043
Mo ₂ HfC ₂	0,0029	0,000155	0,0033	2,65	0,0028	94,729	0,007
Mo ₂ HfC ₂ O ₂	0,0078	0,000246	0,0022	10,79	0,0075	96,841	0,081
Mo ₂ HfCN	0,0068	0,000283	0,0038	5,38	0,0065	95,824	0,035
Mo ₂ HfCNO ₂	0,0096	0,000327	0,0026	11,13	0,0093	96,595	0,103
Mo ₂ N	0,0055	0,000294	0,0060	2,73	0,0052	94,663	0,014
Mo ₂ N(OH) ₂	0,0148	0,000401	0,0032	13,70	0,0144	97,296	0,198
Mo ₂ Nb ₂ C ₃	0,0066	0,000284	0,0039	5,03	0,0063	95,690	0,032
Mo ₂ NbC ₂	0,0039	0,000201	0,0042	2,78	0,0037	94,828	0,010

Mo ₂ NbCN	0,0093	0,000376	0,0046	6,06	0,0089	95,958	0,054
Mo ₂ NbCNO ₂	0,0123	0,000406	0,0032	11,62	0,0119	96,708	0,139
Mo ₂ NF ₂	0,0052	0,000226	0,0031	5,01	0,0050	95,662	0,025
Mo ₂ NO ₂	0,0070	0,000294	0,0040	5,26	0,0067	95,785	0,035
Mo ₂ ScC ₂	0,0048	0,000246	0,0050	2,84	0,0045	94,857	0,013
Mo ₂ ScC ₂ O ₂	0,0106	0,000333	0,0031	10,41	0,0103	96,858	0,107
Mo ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,000003	0,0000	4,60	0,0001	95,525	0,000
Mo ₂ TaCN	0,0002	0,000006	0,0001	5,71	0,0001	95,907	0,001
Mo ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,000008	0,0001	11,05	0,0002	96,645	0,002
Mo ₂ TaC ₂	0,0001	0,000003	0,0001	2,69	0,0001	94,840	0,000
Mo ₂ Ti ₂ C ₃	0,0095	0,000397	0,0051	5,60	0,0091	95,805	0,051
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ (OH) _{1.5} F _{0.5}	0,0130	0,000383	0,0028	13,75	0,0126	97,062	0,174
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O _{1.5} F _{0.5}	0,0078	0,000301	0,0031	7,56	0,0075	96,145	0,057
Mo ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0079	0,000291	0,0027	8,73	0,0076	96,332	0,067
Mo ₂ TiC ₂	0,0048	0,000240	0,0049	2,93	0,0045	94,977	0,013
Mo ₂ TiC ₂ (O _{1.5} F _{0.5})	0,0179	0,000332	0,0033	16,23	0,0176	98,152	0,286
Mo ₂ TiC ₂ (OH) ₂	0,0195	0,000459	0,0031	19,09	0,0190	97,643	0,363
Mo ₂ TiC ₂ F ₂	0,0142	0,000500	0,0047	9,16	0,0137	96,480	0,126
Mo ₂ TiCN	0,0119	0,000482	0,0057	6,30	0,0114	95,951	0,072
Mo ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,000480	0,0037	11,45	0,0138	96,637	0,158
Mo ₂ V ₂ C ₃	0,0093	0,000380	0,0050	5,61	0,0089	95,916	0,050
Mo ₂ VC ₂	0,0048	0,000241	0,0048	2,96	0,0045	94,944	0,013
Mo ₂ VCN	0,0118	0,000478	0,0056	6,29	0,0114	95,965	0,071
Mo ₂ VCNO ₂	0,0139	0,000469	0,0037	11,17	0,0134	96,624	0,150
Mo ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0068	0,000230	0,0022	9,35	0,0066	96,611	0,061
Mo ₂ ZrC ₂	0,0038	0,000194	0,0042	2,69	0,0036	94,908	0,010
Mo ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0106	0,000334	0,0027	11,57	0,0102	96,837	0,118
Mo ₂ ZrCN	0,0089	0,000384	0,0049	5,53	0,0086	95,709	0,047
Mo ₂ ZrCNO ₂	0,0122	0,000417	0,0032	11,40	0,0118	96,574	0,134
Mo ₃ C ₂	0,0071	0,000313	0,0042	5,02	0,0067	95,565	0,034
Mo ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0010	0,000025	0,0008	3,51	0,0009	97,403	0,003
Mo ₃ C ₂ F ₂	0,0053	0,000164	0,0018	8,79	0,0051	96,890	0,045
Mo ₃ C ₂ H ₂	0,0082	0,000263	0,0028	8,78	0,0079	96,775	0,069
Mo ₃ C ₂ O ₂	0,0119	0,000338	0,0025	13,96	0,0115	97,151	0,161

Mo ₃ CN	0,0092	0,000377	0,0048	5,75	0,0089	95,921	0,051
Mo ₃ N ₂	0,0043	0,000205	0,0034	3,80	0,0041	95,283	0,016
Mo ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0001	0,000003	0,0004	0,69	0,0001	96,706	0,000
Mo ₃ N ₂ F ₂	0,0045	0,000129	0,0016	8,56	0,0043	97,102	0,037
Mo ₃ N ₂ H ₂	0,0048	0,000205	0,0028	5,15	0,0046	95,753	0,024
Mo ₃ N ₂ O ₂	0,0083	0,000229	0,0020	12,48	0,0080	97,238	0,100
Mo ₄ C ₃	0,0069	0,000302	0,0041	5,06	0,0066	95,648	0,034
Mo ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0071	0,000208	0,0020	10,69	0,0069	97,061	0,073
Mo ₄ C ₃ F ₂	0,0040	0,000172	0,0023	5,32	0,0038	95,720	0,020
Mo ₄ C ₃ O ₂	0,0063	0,000235	0,0024	7,89	0,0061	96,284	0,048
Mo ₄ N ₃	0,0039	0,000194	0,0034	3,48	0,0037	95,011	0,013
Mo ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0051	0,000193	0,0022	6,82	0,0049	96,199	0,033
Mo ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,000160	0,0025	4,03	0,0032	95,209	0,013
Mo ₄ N ₃ H ₂	0,0026	0,000111	0,0017	4,54	0,0025	95,699	0,011
Mo ₄ N ₃ O ₂	0,0044	0,000194	0,0028	4,77	0,0042	95,595	0,020
MoCrC	0,0071	0,000413	0,0097	2,19	0,0067	94,185	0,015
MoCrCO ₂ -(model4)	0,0087	0,000399	0,0061	4,27	0,0083	95,424	0,036
MoWC	0,0039	0,000221	0,0054	2,15	0,0037	94,287	0,008
MoWC(NCO) ₂	0,0182	0,000537	0,0034	15,88	0,0176	97,046	0,280
MoWC(OCN) ₂	0,0212	0,000606	0,0035	18,29	0,0205	97,135	0,376
MoWC(SCN) ₂	0,0416	0,000836	0,0032	39,33	0,0408	97,991	1,604
MoWCCl ₂	0,0231	0,000717	0,0046	14,99	0,0224	96,900	0,336
MoWCF ₂	0,0032	0,000158	0,0085	1,12	0,0030	95,013	0,003
MoWCO ₂ -(model2)	0,0052	0,000242	0,0035	4,39	0,0049	95,317	0,022
Nb _{0,4} V _{1,6} C	0,1839	0,002876	0,0157	35,17	0,1811	98,436	6,369
Nb _{0,8} V _{1,2} C	0,0544	0,001324	0,0142	11,53	0,0531	97,568	0,612
Nb _{1,2} V _{0,8} C	0,0271	0,000940	0,0129	6,32	0,0261	96,527	0,165
Nb _{1,33} C	2,6409	0,045610	0,0103	768,46	2,5953	98,273	1994,380
Nb _{1,6} V _{0,4} C	0,0160	0,000686	0,0120	4,01	0,0153	95,722	0,062
Nb ₂ C	0,0084	0,000421	0,0084	3,03	0,0080	95,013	0,024
Nb ₂ C(OH) ₂	0,0089	0,000337	0,0043	6,26	0,0086	96,231	0,054
Nb ₂ CF ₂	0,0056	0,000274	0,0049	3,45	0,0054	95,144	0,019
Nb ₂ CO ₂	0,0080	0,000365	0,0054	4,49	0,0077	95,458	0,035
Nb ₂ CrCN	0,0129	0,000508	0,0058	6,61	0,0124	96,060	0,082

Nb ₂ CrCNO ₂	0,0141	0,000453	0,0034	12,37	0,0137	96,790	0,169
Nb ₂ HfCN	0,0070	0,000300	0,0040	5,28	0,0067	95,714	0,035
Nb ₂ HfCNO ₂	0,0088	0,000284	0,0023	11,31	0,0086	96,786	0,097
Nb ₂ MoCN	0,0100	0,000406	0,0050	5,95	0,0096	95,932	0,057
Nb ₂ MoCNO ₂	0,0118	0,000388	0,0029	12,10	0,0114	96,714	0,138
Nb ₂ N	0,0064	0,000345	0,0079	2,44	0,0061	94,643	0,015
Nb ₂ N(OH) ₂	0,0090	0,000373	0,0049	5,52	0,0087	95,878	0,048
Nb ₂ NF ₂	0,0053	0,000240	0,0035	4,47	0,0050	95,441	0,022
Nb ₂ NH ₂	0,0039	0,000216	0,0055	2,12	0,0036	94,414	0,008
Nb ₂ NO ₂	0,0071	0,000329	0,0052	4,08	0,0068	95,358	0,028
Nb ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,000003	0,0000	4,71	0,0001	95,641	0,000
Nb ₂ TaCN	0,0002	0,000007	0,0001	5,74	0,0002	95,865	0,001
Nb ₂ TiCN	0,0122	0,000495	0,0059	6,20	0,0117	95,928	0,072
Nb ₂ TiCNO ₂	0,0143	0,000462	0,0034	12,80	0,0139	96,780	0,178
Nb ₂ VCN	0,0119	0,000482	0,0059	6,01	0,0114	95,941	0,069
Nb ₂ VCNO ₂	0,0134	0,000450	0,0034	11,78	0,0130	96,650	0,153
Nb ₂ W ₂ C ₃	0,0050	0,000206	0,0028	5,27	0,0048	95,864	0,025
Nb ₂ Zr ₂ C ₃	0,0067	0,000286	0,0042	4,73	0,0064	95,714	0,030
Nb ₂ ZrCN	0,0093	0,000394	0,0051	5,44	0,0089	95,754	0,048
Nb ₂ ZrCNO ₂	0,0109	0,000358	0,0029	11,10	0,0105	96,715	0,117
Nb ₃ C ₂	0,0079	0,000355	0,0053	4,44	0,0075	95,484	0,033
Nb ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0067	0,000166	0,0020	10,24	0,0066	97,535	0,067
Nb ₃ C ₂ F ₂	0,0056	0,000221	0,0026	6,38	0,0054	96,049	0,034
Nb ₃ C ₂ H ₂	0,0039	0,000143	0,0022	5,45	0,0038	96,333	0,021
Nb ₃ C ₂ O ₂	0,0094	0,000327	0,0032	8,90	0,0091	96,515	0,081
Nb ₃ CN	0,0095	0,000391	0,0053	5,43	0,0091	95,887	0,050
Nb ₃ CNO ₂	0,0116	0,000380	0,0030	11,77	0,0112	96,722	0,132
Nb ₃ N ₂	0,0047	0,000216	0,0038	3,70	0,0044	95,360	0,016
Nb ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0002	0,000008	0,0006	1,31	0,0002	96,868	0,000
Nb ₃ N ₂ F ₂	0,0046	0,000132	0,0017	8,04	0,0044	97,116	0,036
Nb ₃ N ₂ H ₂	0,0047	0,000168	0,0023	6,19	0,0045	96,389	0,028
Nb ₃ N ₂ O ₂	0,0078	0,000270	0,0027	8,47	0,0075	96,518	0,063
Nb ₄ C ₃	0,0059	0,000268	0,0040	4,43	0,0056	95,441	0,025
Nb ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0057	0,000137	0,0015	11,47	0,0055	97,572	0,063

Nb ₄ C ₃ F ₂	0,0044	0,000165	0,0019	6,90	0,0042	96,207	0,029
Nb ₄ C ₃ H ₂	0,0032	0,000129	0,0018	5,14	0,0030	95,922	0,016
Nb ₄ C ₃ O ₂	0,0070	0,000250	0,0025	8,36	0,0067	96,414	0,056
Nb ₄ N ₃	0,0042	0,000209	0,0038	3,29	0,0040	94,989	0,013
Nb ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0056	0,000190	0,0020	8,24	0,0054	96,608	0,045
Nb ₄ N ₃ F ₂	0,0035	0,000158	0,0023	4,57	0,0034	95,501	0,015
Nb ₄ N ₃ O ₂	0,0054	0,000218	0,0026	6,32	0,0052	95,968	0,033
Nb ₅ C ₄ (OH) ₂	0,0006	0,000016	0,0006	2,73	0,0005	97,115	0,001
Nb ₅ C ₄ F ₂	0,0034	0,000125	0,0015	6,77	0,0033	96,312	0,022
Nb ₅ C ₄ O ₂	0,0055	0,000196	0,0018	9,19	0,0053	96,445	0,049
NbCrN(NCO) ₂	0,0433	0,001073	0,0047	27,59	0,0422	97,519	1,164
NbCrN(NCS) ₂	0,7617	0,010605	0,0024	938,75	0,7511	98,608	705,096
NbCrN(OCN) ₂	0,0321	0,000934	0,0053	18,32	0,0312	97,090	0,571
NbCrN(SCN) ₂	0,0725	0,001342	0,0044	48,95	0,0712	98,149	3,484
NbCrNBr ₂	0,0477	0,001219	0,0052	27,53	0,0464	97,442	1,279
NbCrNCl ₂	0,0362	0,001114	0,0070	15,47	0,0351	96,928	0,543
NbCrNF ₂	0,0079	0,000392	0,0065	3,65	0,0075	95,044	0,027
NbMoN(NCO) ₂	0,0217	0,000673	0,0045	14,40	0,0210	96,896	0,303
NbMoN(NCS) ₂	0,4042	0,005242	0,0041	297,17	0,3990	98,703	118,569
NbMoN(OCN) ₂	0,0000	0,000001	0,0004	0,23	0,0000	95,717	0,000
NbMoN(SCN) ₂	0,0594	0,001113	0,0039	45,84	0,0583	98,127	2,673
NbMoNBr ₂	0,0373	0,000988	0,0048	23,54	0,0363	97,353	0,855
NbMoNCl ₂	0,0262	0,000859	0,0060	13,04	0,0254	96,725	0,331
NbMoN(CN) ₂	0,0119	0,000477	0,0052	6,91	0,0114	95,981	0,079
NbMoNF ₂	0,0072	0,000341	0,0057	3,77	0,0069	95,262	0,026
NbWN(NCO) ₂	0,0171	0,000526	0,0035	14,74	0,0165	96,918	0,244
NbWN(NCS) ₂	0,3290	0,004322	0,0032	307,15	0,3247	98,686	99,737
NbWN(OCN) ₂	0,0189	0,000574	0,0035	16,13	0,0183	96,965	0,296
NbWN(SCN) ₂	0,0440	0,000889	0,0032	40,69	0,0431	97,981	1,756
NbWNBr ₂	0,0328	0,000842	0,0038	25,94	0,0319	97,431	0,828
NbWNCl ₂	0,0218	0,000679	0,0046	14,23	0,0212	96,892	0,301
NbWN(CN) ₂	0,0071	0,000310	0,0043	4,90	0,0068	95,613	0,033
NbWNF ₂	0,0054	0,000262	0,0046	3,54	0,0051	95,144	0,018
Sc ₂ C	0,0104	0,000613	0,0162	1,92	0,0097	94,076	0,019

Sc ₂ C(CN) ₂	0,0152	0,000698	0,0016	27,72	0,0145	95,408	0,402
Sc ₂ C(NCO) ₂	0,0014	0,000044	0,0014	2,82	0,0013	96,757	0,004
Sc ₂ C(NCS) ₂	0,4379	0,004757	0,0052	251,32	0,4331	98,914	108,851
Sc ₂ C(OCI) ₂	0,0469	0,001377	0,0079	17,78	0,0455	97,063	0,809
Sc ₂ C(OCN) ₂	0,0018	0,000058	0,0019	2,95	0,0018	96,846	0,005
Sc ₂ C(OH) ₂	0,0125	0,000487	0,0072	5,17	0,0120	96,103	0,062
Sc ₂ C(SCN) ₂	0,0558	0,001280	0,0062	27,18	0,0545	97,705	1,481
Sc ₂ CBr ₂	0,0348	0,001034	0,0066	15,82	0,0338	97,034	0,535
Sc ₂ CCl ₂	0,0397	0,001316	0,0092	12,93	0,0384	96,688	0,497
Sc ₂ CF ₂	0,0087	0,000437	0,0084	3,13	0,0083	94,988	0,026
Sc ₂ CF ₂ -(model2)	0,0124	0,000601	0,0093	3,99	0,0118	95,134	0,047
Sc ₂ CF ₂ -(model3)	0,0140	0,000674	0,0118	3,57	0,0134	95,194	0,048
Sc ₂ CF ₂ -(model4)	0,0176	0,000805	0,0125	4,24	0,0168	95,433	0,071
Sc ₂ CO ₂ -(model3)	0,0144	0,000687	0,0116	3,70	0,0137	95,225	0,051
Sc ₂ CO ₂ -(model4)	0,0117	0,000540	0,0093	3,80	0,0112	95,384	0,042
Sc ₂ N	0,0077	0,000456	0,0137	1,69	0,0073	94,087	0,012
Sc ₂ N(OH) ₂	0,0119	0,000485	0,0071	5,00	0,0114	95,920	0,057
Sc ₂ NF ₂	0,0074	0,000393	0,0077	2,89	0,0070	94,665	0,020
Sc ₂ NF ₂ -(model3)	0,0149	0,000652	0,0115	3,88	0,0142	95,609	0,055
Sc ₂ NF ₂ -(model4)	0,0114	0,000575	0,0094	3,65	0,0109	94,980	0,040
Sc ₂ NO ₂	0,0111	0,000525	0,0093	3,56	0,0105	95,256	0,038
Sc ₂ NO ₂ -(model2)	0,0115	0,000513	0,0072	4,78	0,0110	95,549	0,053
Sc ₃ C ₂	0,0088	0,000469	0,0097	2,72	0,0083	94,653	0,023
Sc ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0092	0,000259	0,0039	7,10	0,0089	97,184	0,063
Sc ₃ C ₂ Br ₂	0,0058	0,000219	0,0027	6,46	0,0055	96,206	0,036
Sc ₃ C ₂ F ₂	0,0078	0,000325	0,0043	5,41	0,0074	95,810	0,040
Sc ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,000530	0,0074	5,23	0,0123	95,867	0,064
Sc ₃ N ₂	0,0058	0,000325	0,0080	2,16	0,0054	94,365	0,012
Sc ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0084	0,000237	0,0033	7,68	0,0082	97,190	0,063
Sc ₃ N ₂ F ₂	0,0065	0,000269	0,0042	4,64	0,0063	95,886	0,029
Sc ₃ N ₂ O ₂	0,0096	0,000403	0,0053	5,45	0,0092	95,819	0,050
Sc ₄ C ₃	0,0087	0,000415	0,0080	3,26	0,0083	95,212	0,027
Sc ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0076	0,000228	0,0029	7,88	0,0074	97,001	0,058
Sc ₄ C ₃ F ₂	0,0067	0,000279	0,0037	5,38	0,0064	95,838	0,035

Sc ₄ C ₃ O ₂	0,0103	0,000395	0,0044	7,04	0,0099	96,157	0,070
Sc ₄ N ₃	0,0046	0,000269	0,0062	2,23	0,0044	94,176	0,010
Sc ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0084	0,000258	0,0031	8,03	0,0081	96,911	0,065
Sc ₄ N ₃ F ₂	0,0053	0,000235	0,0037	4,30	0,0050	95,537	0,022
Sc ₄ N ₃ O ₂	0,0078	0,000326	0,0043	5,45	0,0074	95,807	0,041
ScCrC(OCN) ₂	0,0393	0,001127	0,0066	17,75	0,0382	97,133	0,678
ScCrC(OH) ₂	0,0171	0,000637	0,0072	7,13	0,0164	96,267	0,117
ScCrCF ₂	0,0101	0,000494	0,0086	3,50	0,0096	95,090	0,033
ScHfN(SCN) ₂	0,0392	0,000806	0,0035	33,21	0,0384	97,943	1,274
ScHfNO ₂	0,0060	0,000289	0,0048	3,80	0,0057	95,205	0,022
ScNbCO ₂	0,0091	0,000428	0,0069	3,94	0,0087	95,309	0,034
ScTaCO ₂	0,0001	0,000005	0,0001	3,94	0,0001	95,409	0,000
ScTiNO ₂	0,0102	0,000496	0,0080	3,82	0,0097	95,134	0,037
ScVCO ₂	0,0107	0,000503	0,0086	3,76	0,0102	95,315	0,038
ScYC(CN) ₂	0,0121	0,000832	0,0071	5,11	0,0113	93,134	0,058
ScYC(NCO) ₂	0,0224	0,000742	0,0060	11,20	0,0217	96,688	0,243
ScYC(NCS) ₂	0,2137	0,002887	0,0056	113,85	0,2108	98,649	24,004
ScYC(OCI) ₂	0,0248	0,000847	0,0070	10,63	0,0239	96,584	0,255
ScYC(OCN) ₂	0,0270	0,000832	0,0058	14,09	0,0262	96,921	0,369
ScYC(OH) ₂	0,0112	0,000466	0,0061	5,53	0,0108	95,854	0,060
ScYC(SCN) ₂	0,0484	0,001043	0,0048	30,00	0,0474	97,847	1,422
ScYCB ₂	0,0328	0,000917	0,0055	17,91	0,0319	97,205	0,571
ScYCCl ₂	0,0263	0,000904	0,0079	9,93	0,0254	96,558	0,252
ScYCF ₂	0,0095	0,000462	0,0081	3,53	0,0090	95,126	0,032
ScZrN(SCN) ₂	0,0589	0,001171	0,0048	37,07	0,0577	98,011	2,140
ScZrNO ₂	0,0090	0,000421	0,0070	3,87	0,0086	95,326	0,033
Ta ₂ C	0,0001	0,000003	0,0000	3,47	0,0001	95,097	0,000
Ta ₂ C(OH) ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,07	0,0001	96,789	0,001
Ta ₂ CF ₂	0,0000	0,000002	0,0000	3,57	0,0000	95,260	0,000
Ta ₂ CO ₂	0,0001	0,000002	0,0000	4,76	0,0001	95,727	0,000
Ta ₂ CrCN	0,0001	0,000003	0,0000	5,82	0,0001	95,811	0,000
Ta ₂ CrCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,73	0,0001	96,612	0,001
Ta ₂ HfCN	0,0001	0,000003	0,0000	4,84	0,0001	95,639	0,000
Ta ₂ HfCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,04	0,0001	96,535	0,001

Ta ₂ MoCN	0,0001	0,000003	0,0000	5,38	0,0001	95,636	0,000
Ta ₂ MoCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,54	0,0001	96,669	0,001
Ta ₂ N	0,0000	0,000002	0,0000	2,80	0,0000	94,795	0,000
Ta ₂ N(OH) ₂	0,0001	0,000002	0,0000	11,95	0,0001	97,158	0,001
Ta ₂ NbCN	0,0001	0,000003	0,0000	5,23	0,0001	95,670	0,000
Ta ₂ NbCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,47	0,0001	96,631	0,001
Ta ₂ NF ₂	0,0000	0,000002	0,0000	5,17	0,0000	95,937	0,000
Ta ₂ NH ₂	0,0000	0,000001	0,0000	2,08	0,0000	94,471	0,000
Ta ₂ NO ₂	0,0000	0,000002	0,0000	4,18	0,0000	95,247	0,000
Ta ₂ TiCN	0,0001	0,000003	0,0000	5,57	0,0001	95,717	0,000
Ta ₂ TiCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	11,15	0,0001	96,779	0,001
Ta ₂ VCN	0,0001	0,000003	0,0000	5,43	0,0001	95,796	0,000
Ta ₂ VCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,20	0,0001	96,545	0,001
Ta ₂ ZrCN	0,0001	0,000003	0,0000	4,97	0,0001	95,540	0,000
Ta ₂ ZrCNO ₂	0,0001	0,000003	0,0000	10,11	0,0001	96,637	0,001
Ta ₃ C ₂	0,0001	0,000002	0,0000	5,17	0,0001	95,837	0,000
Ta ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0000	0,000001	0,0000	8,82	0,0000	97,731	0,000
Ta ₃ C ₂ F ₂	0,0000	0,000001	0,0000	8,19	0,0000	96,750	0,000
Ta ₃ C ₂ H ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,66	0,0000	96,169	0,000
Ta ₃ C ₂ O ₂	0,0001	0,000002	0,0000	9,32	0,0001	96,658	0,001
Ta ₃ CN	0,0000	0,000002	0,0000	4,50	0,0000	95,392	0,000
Ta ₃ CNO ₂	0,0001	0,000002	0,0000	10,30	0,0001	96,608	0,001
Ta ₃ N ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,42	0,0000	95,390	0,000
Ta ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0000	0,000000	0,0000	0,32	0,0000	96,346	0,000
Ta ₃ N ₂ F ₂	0,0000	0,000001	0,0000	8,67	0,0000	97,096	0,000
Ta ₃ N ₂ H ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,98	0,0000	96,195	0,000
Ta ₃ N ₂ O ₂	0,0001	0,000002	0,0000	9,65	0,0001	96,731	0,001
Ta ₄ C ₃	0,0000	0,000002	0,0000	5,28	0,0000	95,777	0,000
Ta ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0000	0,000001	0,0000	14,15	0,0000	97,651	0,001
Ta ₄ C ₃ F ₂	0,0000	0,000001	0,0000	7,55	0,0000	96,378	0,000
Ta ₄ C ₃ H ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,80	0,0000	96,036	0,000
Ta ₄ C ₃ O ₂	0,0000	0,000002	0,0000	8,62	0,0000	96,298	0,000
Ta ₄ N ₃	0,0000	0,000001	0,0000	3,83	0,0000	95,353	0,000
Ta ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0000	0,000001	0,0000	8,89	0,0000	96,759	0,000

Ta ₄ N ₃ F ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,89	0,0000	95,797	0,000
Ta ₄ N ₃ H ₂	0,0000	0,000001	0,0000	4,32	0,0000	95,785	0,000
Ta ₄ N ₃ O ₂	0,0000	0,000001	0,0000	6,74	0,0000	96,066	0,000
TaCrN(OCN) ₂	0,0004	0,000012	0,0001	16,74	0,0004	97,040	0,006
TaCrN(SCN) ₂	0,0009	0,000020	0,0001	38,32	0,0009	97,869	0,034
TaCrNBr ₂	0,0009	0,000022	0,0001	31,97	0,0009	97,625	0,029
TaCrNCl ₂	0,0005	0,000014	0,0001	17,09	0,0005	97,101	0,008
TaCrNF ₂	0,0001	0,000004	0,0001	3,46	0,0001	95,141	0,000
TaMoN(NCO) ₂	0,0003	0,000010	0,0001	12,94	0,0003	96,816	0,004
TaMoN(NCS) ₂	0,0056	0,000074	0,0001	218,95	0,0055	98,687	1,210
TaMoN(SCN) ₂	0,0006	0,000010	0,0000	33,68	0,0005	98,153	0,018
TaMoNBr ₂	0,0007	0,000018	0,0001	22,17	0,0007	97,272	0,015
TaMoNCl ₂	0,0004	0,000012	0,0001	12,60	0,0004	96,740	0,005
TaMoNF ₂	0,0001	0,000005	0,0001	3,63	0,0001	95,284	0,000
TaWN(CN) ₂	0,0001	0,000006	0,0001	5,17	0,0001	95,568	0,001
TaWN(NCO) ₂	0,0003	0,000010	0,0001	12,96	0,0003	96,801	0,004
TaWNBr ₂	0,0007	0,000006	0,0001	24,06	0,0007	99,215	0,018
TaWNCl ₂	0,0005	0,000019	0,0001	15,94	0,0004	95,918	0,007
Ti _{0,4} Nb _{1,6} C	0,0193	0,000802	0,0092	6,32	0,0185	95,842	0,117
Ti _{0,8} Nb _{1,2} C	0,0339	0,001033	0,0091	11,24	0,0329	96,957	0,370
Ti _{1,2} Nb _{0,8} C	0,0840	0,001681	0,0099	25,49	0,0823	97,999	2,098
Ti _{1,5} Nb _{0,5} C	0,0198	0,000786	0,0141	4,20	0,0190	96,032	0,080
Ti _{1,6} Nb _{0,4} C	0,0442	0,001159	0,0164	8,06	0,0430	97,375	0,347
Ti ₁₀ C ₉ F ₂	0,0104	0,000257	0,0014	21,78	0,0102	97,534	0,221
Ti ₁₀ N ₉ F ₂	0,0053	0,000159	0,0013	12,37	0,0051	96,973	0,063
Ti ₂ C	0,0104	0,000608	0,0140	2,23	0,0098	94,150	0,022
Ti ₂ C(OH) ₂	0,0148	0,000566	0,0067	6,65	0,0142	96,165	0,094
Ti ₂ CCl ₂	0,0059	0,000306	0,0061	2,92	0,0056	94,837	0,016
Ti ₂ CF ₂	0,0077	0,000387	0,0073	3,16	0,0073	94,976	0,023
Ti ₂ CF ₂ -(model2)	0,0151	0,000673	0,0096	4,73	0,0144	95,537	0,068
Ti ₂ CF ₂ -(model3)	0,0166	0,000746	0,0107	4,64	0,0159	95,508	0,074
Ti ₂ CF ₂ -(model4)	0,0247	0,000994	0,0124	5,95	0,0237	95,974	0,141
Ti ₂ CO _{0,11} F _{1,89}	0,0102	0,000484	0,0079	3,89	0,0097	95,259	0,038
Ti ₂ CO _{0,44} F _{1,56}	0,0113	0,000520	0,0079	4,31	0,0108	95,400	0,046

Ti ₂ CO _{0.67} F _{1.33}	0,0114	0,000518	0,0079	4,32	0,0109	95,468	0,047
Ti ₂ CO _{0.89} F _{1.11}	0,0121	0,000526	0,0080	4,55	0,0116	95,667	0,053
Ti ₂ CO _{1.33} F _{0.67}	0,0121	0,000566	0,0081	4,49	0,0116	95,326	0,052
Ti ₂ CO ₂	0,0108	0,000512	0,0083	3,88	0,0103	95,253	0,040
Ti ₂ CO ₂ -(model2)	0,0125	0,000582	0,0082	4,55	0,0119	95,344	0,054
Ti ₂ CO ₂ -(model3)	0,0143	0,000659	0,0103	4,18	0,0137	95,406	0,057
Ti ₂ CrCN	0,0234	0,000887	0,0091	7,67	0,0225	96,210	0,173
Ti ₂ CrCNO ₂	0,0247	0,000791	0,0054	13,65	0,0239	96,795	0,326
Ti ₂ HfCN	0,0104	0,000425	0,0054	5,80	0,0100	95,924	0,058
Ti ₂ HfCNO ₂	0,0136	0,000442	0,0033	12,29	0,0131	96,742	0,161
Ti ₂ MoCN	0,0162	0,000645	0,0074	6,62	0,0156	96,031	0,103
Ti ₂ MoCNO ₂	0,0188	0,000625	0,0044	12,86	0,0182	96,684	0,234
Ti ₂ N	0,0075	0,000457	0,0122	1,84	0,0070	93,871	0,013
Ti ₂ N(OH) ₂	0,0130	0,000521	0,0065	5,97	0,0125	95,990	0,075
Ti ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,000395	0,0054	5,29	0,0091	95,841	0,048
Ti ₂ NbC ₂	0,0061	0,000305	0,0064	2,87	0,0058	94,992	0,017
Ti ₂ NbCN	0,0166	0,000650	0,0075	6,68	0,0159	96,079	0,106
Ti ₂ NbCNO ₂	0,0194	0,000627	0,0045	13,07	0,0188	96,767	0,245
Ti ₂ NF ₂	0,0067	0,000353	0,0071	2,84	0,0064	94,737	0,018
Ti ₂ NF ₂ -(model2)	0,0147	0,000648	0,0091	4,83	0,0140	95,589	0,068
Ti ₂ NO ₂	0,0095	0,000438	0,0076	3,72	0,0090	95,364	0,034
Ti ₂ NO ₂ -(model4)	0,0268	0,000913	0,0124	6,50	0,0259	96,600	0,169
Ti ₂ NS ₂	0,0060	0,000311	0,0056	3,18	0,0057	94,789	0,018
Ti ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,000003	0,0000	5,30	0,0001	95,786	0,000
Ti ₂ TaC ₂	0,0001	0,000004	0,0001	2,73	0,0001	94,738	0,000
Ti ₂ TaCN	0,0002	0,000008	0,0001	6,40	0,0002	96,003	0,001
Ti ₂ TaCNO ₂	0,0003	0,000008	0,0001	12,66	0,0002	96,768	0,003
Ti ₂ VC ₂	0,0084	0,000424	0,0078	3,24	0,0080	94,952	0,026
Ti ₂ VCN	0,0219	0,000845	0,0092	7,14	0,0210	96,135	0,150
Ti ₂ VCNO ₂	0,0239	0,000782	0,0054	13,14	0,0231	96,723	0,303
Ti ₂ ZrCN	0,0154	0,000629	0,0076	6,10	0,0147	95,901	0,090
Ti ₂ ZrCNO ₂	0,0187	0,000601	0,0044	12,67	0,0181	96,785	0,229
Ti ₃ C ₂	0,0094	0,000465	0,0087	3,25	0,0090	95,064	0,029
Ti ₃ C ₂ (O _{0.13} F _{0.83} (OH) _{1.04})	0,0369	0,000807	0,0043	25,61	0,0361	97,816	0,925

$\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{O}_{0.1}\text{F}_{1.1}(\text{OH})_{0.8})$	0,0449	0,000960	0,0044	30,93	0,0440	97,864	1,361
$\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{O}_{0.7}\text{F}_{1.3})$	0,0140	0,000505	0,0046	9,15	0,0135	96,403	0,124
$\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{OH})_2$	0,0169	0,000414	0,0035	14,62	0,0165	97,554	0,241
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Br}_2$	0,0070	0,000241	0,0027	7,80	0,0068	96,571	0,053
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Cl}_2$	0,0068	0,000274	0,0036	5,66	0,0065	95,985	0,037
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{F}_2$	0,0078	0,000323	0,0044	5,34	0,0075	95,858	0,040
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{O}_2$	0,0120	0,000445	0,0049	7,32	0,0116	96,299	0,085
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Se}_2$	0,0035	0,000134	0,0022	4,68	0,0034	96,163	0,016
$\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Te}_2$	0,0021	0,000079	0,0015	4,19	0,0020	96,199	0,008
Ti_3CN	0,0207	0,000814	0,0096	6,49	0,0199	96,066	0,129
Ti_3CNF_2	0,0314	0,000939	0,0063	14,83	0,0304	97,009	0,451
Ti_3CNO_2	0,0279	0,000845	0,0057	14,60	0,0270	96,968	0,395
$\text{Ti}_3\text{N}_2(\text{OH})_3$	0,0129	0,000316	0,0032	12,24	0,0126	97,552	0,154
Ti_3N_2	0,0060	0,000321	0,0072	2,50	0,0057	94,635	0,014
$\text{Ti}_3\text{N}_2\text{F}_2$	0,0061	0,000250	0,0038	4,88	0,0059	95,920	0,029
$\text{Ti}_3\text{N}_2\text{H}_2$	0,0103	0,000366	0,0044	7,02	0,0100	96,455	0,070
$\text{Ti}_3\text{N}_2\text{O}_2$	0,0131	0,000469	0,0046	8,50	0,0127	96,434	0,108
Ti_4C_3	0,0076	0,000378	0,0069	3,30	0,0072	95,026	0,024
$\text{Ti}_4\text{C}_3(\text{OH})_2$	0,0118	0,000359	0,0034	10,49	0,0114	96,950	0,120
$\text{Ti}_4\text{C}_3\text{F}_2$	0,0061	0,000267	0,0038	4,87	0,0059	95,637	0,028
$\text{Ti}_4\text{C}_3\text{H}_2$	0,0092	0,000338	0,0039	7,06	0,0089	96,332	0,063
$\text{Ti}_4\text{C}_3\text{O}_2$	0,0090	0,000359	0,0042	6,43	0,0086	95,992	0,055
Ti_4N_3	0,0045	0,000245	0,0056	2,42	0,0042	94,516	0,010
$\text{Ti}_4\text{N}_3(\text{OH})_2$	0,0148	0,000468	0,0036	12,38	0,0143	96,835	0,177
$\text{Ti}_4\text{N}_3\text{F}_2$	0,0048	0,000217	0,0034	4,28	0,0046	95,533	0,020
$\text{Ti}_4\text{N}_3\text{H}_2$	0,0058	0,000248	0,0035	4,91	0,0055	95,717	0,027
$\text{Ti}_4\text{N}_3\text{O}_2$	0,0068	0,000285	0,0039	5,25	0,0065	95,794	0,034
$\text{Ti}_5\text{C}_4(\text{OH})_2$	0,0170	0,000441	0,0029	17,79	0,0166	97,408	0,295
$\text{Ti}_5\text{C}_4\text{F}_2$	0,0087	0,000338	0,0036	7,15	0,0083	96,092	0,059
$\text{Ti}_5\text{C}_4\text{O}_2$	0,0084	0,000313	0,0032	7,78	0,0080	96,246	0,063
$\text{Ti}_5\text{N}_4\text{F}_2$	0,0059	0,000244	0,0030	5,83	0,0056	95,840	0,033
$\text{Ti}_6\text{C}_5\text{F}_2$	0,0123	0,000379	0,0027	13,90	0,0120	96,933	0,166
$\text{Ti}_6\text{N}_5\text{F}_2$	0,0077	0,000244	0,0021	11,17	0,0075	96,836	0,084
$\text{Ti}_7\text{C}_6\text{F}_2$	0,0125	0,000335	0,0021	18,03	0,0122	97,318	0,219

Ti ₇ N ₆ F ₂	0,0075	0,000219	0,0017	13,10	0,0072	97,062	0,095
Ti ₈ C ₇ F ₂	0,0133	0,000309	0,0017	23,77	0,0130	97,680	0,309
Ti ₈ N ₇ F ₂	0,0068	0,000190	0,0015	13,71	0,0066	97,194	0,090
Ti ₉ C ₈ F ₂	0,0109	0,000280	0,0016	20,03	0,0106	97,422	0,212
Ti ₉ N ₈ F ₂	0,0052	0,000172	0,0015	10,46	0,0051	96,704	0,053
TiCrCO ₂	0,0100	0,000463	0,0075	4,01	0,0095	95,356	0,038
TiHfCO ₂	0,0067	0,000295	0,0039	5,20	0,0064	95,589	0,033
TiHfN(NO) ₂	0,0052	0,000258	0,0046	3,42	0,0049	95,026	0,017
TiMoCO ₂	0,0068	0,000342	0,0059	3,51	0,0065	95,011	0,023
TiNbC	0,0086	0,000497	0,0134	1,92	0,0081	94,204	0,015
TiVC	0,0122	0,000717	0,0183	2,01	0,0115	94,140	0,023
TiWCO ₂	0,0048	0,000228	0,0040	3,58	0,0046	95,264	0,016
TiZrCO ₂	0,0102	0,000449	0,0068	4,48	0,0097	95,584	0,044
V ₂ C	0,0107	0,000578	0,0125	2,58	0,0102	94,621	0,026
V ₂ C(OH) ₂	0,0152	0,000574	0,0066	6,96	0,0146	96,224	0,102
V ₂ CB ₂	0,0038	0,000197	0,0043	2,60	0,0036	94,768	0,009
V ₂ CF(OH)	0,0105	0,000484	0,0079	3,98	0,0100	95,391	0,040
V ₂ CF ₂	0,0078	0,000402	0,0070	3,34	0,0074	94,816	0,025
V ₂ CrCN	0,0230	0,000846	0,0088	7,88	0,0221	96,319	0,174
V ₂ CrCNO ₂	0,0231	0,000713	0,0048	14,41	0,0223	96,907	0,322
V ₂ HfCN	0,0104	0,000430	0,0053	5,94	0,0100	95,869	0,059
V ₂ HfCNO ₂	0,0120	0,000391	0,0030	11,89	0,0116	96,739	0,138
V ₂ MoCN	0,0162	0,000618	0,0071	6,80	0,0156	96,183	0,106
V ₂ MoCNO ₂	0,0172	0,000561	0,0040	13,03	0,0167	96,740	0,217
V ₂ N	0,0078	0,000456	0,0115	2,02	0,0073	94,136	0,015
V ₂ N(OH) ₂	0,0117	0,000505	0,0067	5,23	0,0112	95,674	0,058
V ₂ Nb ₂ C ₃	0,0095	0,000396	0,0053	5,40	0,0092	95,850	0,049
V ₂ NbCN	0,0165	0,000635	0,0073	6,82	0,0159	96,154	0,108
V ₂ NbCNO ₂	0,0195	0,000591	0,0038	15,43	0,0189	96,964	0,291
V ₂ NF ₂	0,0066	0,000355	0,0070	2,84	0,0063	94,657	0,018
V ₂ NO ₂	0,0093	0,000442	0,0074	3,79	0,0089	95,249	0,034
V ₂ Ta ₂ C ₃	0,0001	0,000003	0,0000	4,84	0,0001	95,701	0,000
V ₂ TaC ₂	0,0001	0,000006	0,0001	4,90	0,0001	95,780	0,001
V ₂ TaCN	0,0002	0,000008	0,0001	6,60	0,0002	96,079	0,001

V ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,000007	0,0001	12,47	0,0002	96,816	0,003
V ₂ Ti ₂ C ₃	0,0150	0,000590	0,0074	6,05	0,0144	96,051	0,087
V ₂ TiC ₂	0,0173	0,000684	0,0093	5,60	0,0166	96,038	0,093
V ₂ TiCN	0,0215	0,000835	0,0090	7,18	0,0207	96,123	0,149
V ₂ TiCNO ₂	0,0228	0,000723	0,0049	14,03	0,0221	96,827	0,309
V ₂ ZrCN	0,0230	0,000607	0,0088	7,88	0,0224	97,362	0,176
V ₂ ZrCNO ₂	0,0169	0,000540	0,0040	12,57	0,0163	96,801	0,206
V ₃ C ₂	0,0081	0,000406	0,0077	3,14	0,0077	94,968	0,024
V ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0210	0,000461	0,0033	19,40	0,0206	97,810	0,399
V ₃ C ₂ Br ₂	0,0039	0,000151	0,0022	5,25	0,0038	96,144	0,020
V ₃ C ₂ Cl ₂	0,0118	0,000393	0,0040	8,82	0,0114	96,658	0,100
V ₃ C ₂ F ₂	0,0086	0,000315	0,0036	7,22	0,0083	96,345	0,060
V ₃ C ₂ O ₂	0,0128	0,000450	0,0046	8,32	0,0123	96,475	0,103
V ₃ CN	0,0203	0,000774	0,0092	6,65	0,0195	96,190	0,130
V ₃ CNO ₂	0,0272	0,000836	0,0056	14,58	0,0264	96,932	0,385
V ₃ N ₂	0,0053	0,000282	0,0059	2,73	0,0051	94,726	0,014
V ₃ N ₂ (OH) ₂	0,0440	0,000321	0,0046	28,88	0,0437	99,270	1,262
V ₃ N ₂ F ₂	0,0069	0,000244	0,0030	6,78	0,0066	96,458	0,045
V ₃ N ₂ H ₂	0,0099	0,000362	0,0042	7,11	0,0096	96,354	0,068
V ₃ N ₂ O ₂	0,0252	0,000750	0,0051	14,77	0,0244	97,023	0,361
V ₄ C ₃	0,0080	0,000381	0,0062	3,87	0,0076	95,235	0,029
V ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0170	0,000435	0,0030	16,91	0,0166	97,442	0,280
V ₄ C ₃ F ₂	0,0061	0,000263	0,0034	5,33	0,0058	95,696	0,031
V ₄ C ₃ H ₂	0,0049	0,000208	0,0032	4,56	0,0047	95,776	0,022
V ₄ C ₃ O ₂	0,0088	0,000362	0,0039	6,77	0,0084	95,883	0,057
V ₄ N ₃	0,0051	0,000268	0,0056	2,74	0,0048	94,753	0,013
V ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0095	0,000327	0,0033	8,64	0,0092	96,576	0,080
V ₄ N ₃ F ₂	0,0047	0,000212	0,0035	4,01	0,0045	95,478	0,018
V ₄ N ₃ H ₂	0,0037	0,000179	0,0030	3,72	0,0036	95,203	0,013
V ₄ N ₃ O ₂	0,0064	0,000543	0,0037	5,25	0,0059	91,539	0,031
VCrN(NCS) ₂	0,7400	0,010249	0,0047	475,11	0,7297	98,615	346,694
VCrN(SCN) ₂	0,0943	0,001735	0,0052	54,23	0,0926	98,160	5,019
VCrNBr ₂	0,0710	0,001296	0,0059	36,09	0,0697	98,174	2,515
VCrNF ₂	0,0081	0,000402	0,0073	3,33	0,0077	95,045	0,026

VMoN(NCO) ₂	0,0271	0,000826	0,0052	15,74	0,0262	96,949	0,413
VMoN(NCS) ₂	0,5221	0,006865	0,0045	351,85	0,5153	98,685	181,296
VMoN(OCN) ₂	0,0309	0,000904	0,0052	17,88	0,0300	97,073	0,536
VMoN(SCN) ₂	0,0689	0,001287	0,0044	46,91	0,0676	98,132	3,172
VMoNBr ₂	0,0543	0,001296	0,0051	31,91	0,0530	97,613	1,692
VMoNCl ₂	0,0391	0,001153	0,0067	17,58	0,0380	97,054	0,668
VNbC	0,0084	0,000493	0,0129	1,95	0,0079	94,148	0,015
VNbCF ₂ -(model4)	0,0102	0,000464	0,0079	3,89	0,0097	95,449	0,038
VWN(NCO) ₂	0,0168	0,000543	0,0039	12,94	0,0163	96,772	0,211
VWN(OCN) ₂	0,0216	0,000649	0,0039	16,67	0,0210	96,997	0,350
VWNBr ₂	0,0356	0,000910	0,0041	25,93	0,0347	97,442	0,899
VWNCl ₂	0,0289	0,000833	0,0050	17,49	0,0280	97,112	0,490
VWNF ₂	0,0049	0,000249	0,0044	3,35	0,0047	94,951	0,016
W _{1,33} C	0,8719	0,008640	0,0058	447,92	0,8633	99,009	386,687
W _{1,33} CO ₂	0,0072	0,000316	0,0041	5,33	0,0069	95,609	0,037
W ₂ C	0,0047	0,000223	0,0038	3,67	0,0045	95,228	0,016
W ₂ C(OH) ₂	0,0080	0,000234	0,0020	12,03	0,0077	97,061	0,093
W ₂ CCl ₂	0,0192	0,000589	0,0038	15,22	0,0187	96,939	0,284
W ₂ CF ₂	0,0034	0,000142	0,0020	5,16	0,0032	95,787	0,017
W ₂ CO ₂	0,0043	0,000155	0,0030	4,28	0,0041	96,395	0,018
W ₂ Hf ₂ C ₃ O ₂	0,0040	0,000135	0,0012	9,68	0,0038	96,619	0,037
W ₂ HfC ₂	0,0022	0,000114	0,0023	2,85	0,0021	94,795	0,006
W ₂ HfC ₂ O ₂	0,0063	0,000194	0,0015	12,57	0,0061	96,901	0,076
W ₂ N	0,0031	0,000166	0,0038	2,40	0,0029	94,614	0,007
W ₂ N(OH) ₂	0,0095	0,000246	0,0018	15,75	0,0092	97,411	0,146
W ₂ NF ₂	0,0032	0,000136	0,0018	5,33	0,0030	95,712	0,016
W ₂ NO ₂	0,0044	0,000183	0,0022	5,96	0,0042	95,801	0,025
W ₂ Ti ₂ C ₃ O ₂	0,0055	0,000199	0,0019	8,88	0,0053	96,388	0,047
W ₂ TiC ₂ O ₂	0,0081	0,000256	0,0021	11,83	0,0079	96,853	0,093
W ₂ Zr ₂ C ₃ O ₂	0,0051	0,000168	0,0016	9,80	0,0050	96,715	0,049
W ₂ ZrC ₂	0,0026	0,000134	0,0027	2,90	0,0025	94,935	0,007
W ₂ ZrC ₂ O ₂	0,0078	0,000237	0,0018	13,03	0,0075	96,956	0,098
W ₃ C ₂	0,0023	0,000177	0,0023	2,95	0,0021	92,145	0,006
W ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0090	0,000227	0,0015	18,08	0,0088	97,476	0,158

W ₃ C ₂ F ₂	0,0031	0,000085	0,0009	9,75	0,0030	97,232	0,029
W ₃ C ₂ O ₂	0,0054	0,000172	0,0014	11,45	0,0052	96,812	0,060
W ₃ N ₂	0,0024	0,000122	0,0024	3,06	0,0023	94,977	0,007
W ₃ N ₂ F ₂	0,0022	0,000057	0,0008	8,60	0,0021	97,368	0,018
W ₃ N ₂ O ₂	0,0069	0,000217	0,0018	11,80	0,0067	96,846	0,079
W ₄ C ₃	0,0040	0,000167	0,0023	5,31	0,0039	95,846	0,020
W ₄ C ₃ (OH) ₂	0,0041	0,000117	0,0011	10,90	0,0039	97,109	0,043
W ₄ C ₃ F ₂	0,0023	0,000096	0,0013	5,47	0,0022	95,881	0,012
W ₄ C ₃ H ₂	0,0028	0,000117	0,0015	5,58	0,0026	95,766	0,015
W ₄ C ₃ O ₂	0,0041	0,000153	0,0015	8,15	0,0039	96,254	0,032
W ₄ N ₃	0,0051	0,000195	0,0021	7,26	0,0049	96,142	0,035
W ₄ N ₃ (OH) ₂	0,0050	0,000161	0,0013	11,81	0,0048	96,754	0,057
W ₄ N ₃ F ₂	0,0033	0,000136	0,0016	6,11	0,0032	95,926	0,020
W ₄ N ₃ H ₂	0,0022	0,000097	0,0014	4,81	0,0021	95,550	0,010
W ₄ N ₃ O ₂	0,0025	0,000115	0,0016	4,56	0,0024	95,357	0,011
WCrC	0,0048	0,000271	0,0063	2,29	0,0045	94,321	0,010
WCrCO ₂ -(model4)	0,0061	0,000287	0,0043	4,28	0,0058	95,313	0,025
Y ₂ C	0,0074	0,000417	0,0099	2,25	0,0070	94,373	0,016
Y ₂ C(CN) ₂	0,0126	0,000485	0,0057	6,71	0,0122	96,162	0,082
Y ₂ C(NCO) ₂	0,0204	0,000661	0,0052	11,83	0,0197	96,751	0,233
Y ₂ C(NCS) ₂	0,0478	0,000669	0,0032	44,84	0,0471	98,599	2,112
Y ₂ C(OCi) ₂	0,0270	0,000836	0,0055	14,65	0,0261	96,898	0,383
Y ₂ C(OCN) ₂	0,0211	0,000678	0,0052	12,18	0,0204	96,787	0,249
Y ₂ C(OH) ₂	0,0072	0,000306	0,0050	4,34	0,0069	95,773	0,030
Y ₂ C(SCN) ₂	0,0423	0,000890	0,0042	30,09	0,0414	97,894	1,245
Y ₂ CB ₂	0,0218	0,000693	0,0050	13,08	0,0211	96,828	0,277
Y ₂ CCl ₂	0,0243	0,000816	0,0067	10,92	0,0235	96,642	0,256
Y ₂ CF ₂	0,0075	0,000357	0,0060	3,70	0,0071	95,217	0,026
Y ₂ CO ₂	0,0127	0,000525	0,0069	5,52	0,0122	95,855	0,067
Y ₂ N	0,0062	0,000350	0,0090	2,07	0,0058	94,342	0,012
Y ₂ N(OH) ₂	0,0072	0,000299	0,0047	4,55	0,0069	95,837	0,031
Y ₂ NF ₂	0,0061	0,000481	0,0054	3,39	0,0057	92,156	0,019
Y ₂ NO ₂	0,0110	0,000299	0,0068	4,81	0,0107	97,276	0,051
Y ₃ C ₂	0,0061	0,000268	0,0044	4,17	0,0058	95,607	0,024

$\text{Y}_3\text{C}_2(\text{OH})_2$	0,0010	0,000027	0,0012	2,42	0,0010	97,323	0,002
$\text{Y}_3\text{C}_2\text{F}_2$	0,0072	0,000241	0,0029	7,50	0,0069	96,639	0,052
$\text{Y}_3\text{C}_2\text{O}_2$	0,0082	0,000215	0,0021	11,79	0,0080	97,377	0,094
Y_3N_2	0,0049	0,000233	0,0042	3,53	0,0047	95,251	0,016
$\text{Y}_3\text{N}_2(\text{OH})_2$	0,0086	0,000219	0,0024	10,83	0,0083	97,442	0,090
$\text{Y}_3\text{N}_2\text{F}_2$	0,0074	0,000269	0,0028	7,91	0,0071	96,372	0,057
$\text{Y}_3\text{N}_2\text{O}_2$	0,0072	0,000203	0,0022	9,72	0,0070	97,162	0,068
Y_4C_3	0,0058	0,000268	0,0046	3,75	0,0055	95,368	0,021
$\text{Y}_4\text{C}_3(\text{OH})_2$	0,0008	0,000026	0,0011	2,10	0,0008	96,712	0,002
$\text{Y}_4\text{C}_3\text{F}_2$	0,0065	0,000234	0,0024	8,19	0,0062	96,382	0,051
$\text{Y}_4\text{C}_3\text{O}_2$	0,0128	0,000387	0,0029	13,30	0,0124	96,975	0,165
Y_4N_3	0,0042	0,000219	0,0046	2,74	0,0040	94,845	0,011
$\text{Y}_4\text{N}_3(\text{OH})_2$	0,0055	0,000187	0,0023	7,30	0,0053	96,603	0,039
$\text{Y}_4\text{N}_3\text{F}_2$	0,0063	0,000260	0,0032	5,82	0,0060	95,868	0,035
$\text{Y}_4\text{N}_3\text{O}_2$	0,0061	0,000242	0,0027	6,68	0,0059	96,028	0,039
$\text{YCrC}(\text{NCO})_2$	0,0238	0,000736	0,0054	13,25	0,0231	96,913	0,306
$\text{YCrC}(\text{NCS})_2$	0,3030	0,003871	0,0053	171,18	0,2991	98,722	51,203
$\text{YCrC}(\text{OCN})_2$	0,0253	0,000750	0,0053	14,42	0,0245	97,032	0,354
$\text{YCrC}(\text{OH})_2$	0,0130	0,000486	0,0053	7,34	0,0126	96,275	0,092
YCrCBr_2	0,0362	0,001020	0,0055	19,63	0,0352	97,182	0,691
YCrCCl_2	0,0305	0,000990	0,0075	12,27	0,0295	96,760	0,363
YCrCF_2	0,0093	0,000435	0,0065	4,28	0,0089	95,339	0,038
$\text{YHfN}(\text{SCN})_2$	0,0338	0,000795	0,0037	27,49	0,0330	97,647	0,906
YHfNO_2	0,0053	0,000241	0,0036	4,38	0,0050	95,423	0,022
$\text{YMoN}(\text{NO})_2$	0,0063	0,000319	0,0055	3,43	0,0060	94,933	0,021
YNbCO_2	0,0083	0,000375	0,0060	4,19	0,0080	95,505	0,033
YTaCO_2	0,0001	0,000005	0,0001	4,22	0,0001	95,433	0,000
$\text{YTIN}(\text{NO})_2$	0,0088	0,000412	0,0064	4,10	0,0084	95,302	0,034
YTINO_2	0,0082	0,000383	0,0059	4,16	0,0078	95,314	0,032
YVCO_2	0,0094	0,000431	0,0071	3,98	0,0089	95,401	0,036
YVNF_2	0,0077	0,000343	0,0058	4,01	0,0074	95,549	0,029
YZrNO_2	0,0074	0,000323	0,0050	4,48	0,0071	95,646	0,032
Zr_2C	0,0068	0,000392	0,0109	1,88	0,0064	94,265	0,012
$\text{Zr}_2\text{C}(\text{OH})_2$	0,0081	0,000327	0,0044	5,60	0,0078	95,988	0,044

Zr ₂ CF ₂	0,0058	0,000283	0,0051	3,39	0,0055	95,133	0,019
Zr ₂ CF ₂ -(model2)	0,0070	0,000330	0,0054	3,86	0,0067	95,278	0,026
Zr ₂ CF ₂ -(model3)	0,0090	0,000458	0,0080	3,41	0,0086	94,929	0,029
Zr ₂ CO ₂	0,0087	0,000394	0,0059	4,43	0,0083	95,464	0,037
Zr ₂ CrCN	0,0106	0,000449	0,0059	5,38	0,0102	95,773	0,055
Zr ₂ CrCNO ₂	0,0120	0,000408	0,0033	10,78	0,0116	96,600	0,125
Zr ₂ HfCN	0,0060	0,000275	0,0040	4,51	0,0058	95,450	0,026
Zr ₂ HfCNO ₂	0,0080	0,000265	0,0023	10,55	0,0078	96,696	0,082
Zr ₂ MoCN	0,0084	0,000364	0,0050	5,01	0,0080	95,664	0,040
Zr ₂ MoCNO ₂	0,0100	0,000342	0,0029	10,46	0,0097	96,584	0,101
Zr ₂ N	0,0062	0,000365	0,0083	2,25	0,0059	94,134	0,013
Zr ₂ N(OH) ₂	0,0078	0,000287	0,0042	5,61	0,0075	96,325	0,042
Zr ₂ NbCN	0,0085	0,000364	0,0051	5,00	0,0081	95,696	0,040
Zr ₂ NbCNO ₂	0,0102	0,000345	0,0029	10,62	0,0099	96,633	0,105
Zr ₂ NF ₂	0,0052	0,000254	0,0051	3,09	0,0049	95,119	0,015
Zr ₂ NF ₂ -(model4)	0,0064	0,000316	0,0050	3,86	0,0061	95,083	0,024
Zr ₂ NO ₂	0,0072	0,000334	0,0056	3,88	0,0068	95,344	0,027
Zr ₂ TaCN	0,0001	0,000006	0,0001	4,88	0,0001	95,551	0,001
Zr ₂ TaCNO ₂	0,0002	0,000006	0,0001	10,23	0,0002	96,612	0,002
Zr ₂ TiCN	0,0103	0,000444	0,0060	5,11	0,0099	95,696	0,050
Zr ₂ TiCNO ₂	0,0120	0,000413	0,0034	10,58	0,0116	96,561	0,123
Zr ₂ VCN	0,0101	0,000435	0,0060	5,05	0,0097	95,689	0,049
Zr ₂ VCNO ₂	0,0115	0,000395	0,0033	10,33	0,0111	96,572	0,115
Zr ₃ C ₂	0,0068	0,000334	0,0055	3,69	0,0065	95,086	0,024
Zr ₃ C ₂ (OH) ₂	0,0125	0,000307	0,0027	14,17	0,0122	97,550	0,173
Zr ₃ C ₂ F ₂	0,0054	0,000215	0,0028	5,88	0,0052	96,046	0,031
Zr ₃ C ₂ H ₂	0,0036	0,000133	0,0021	5,21	0,0035	96,297	0,018
Zr ₃ C ₂ O ₂	0,0096	0,000332	0,0033	8,76	0,0093	96,534	0,081
Zr ₃ CN	0,0081	0,000351	0,0053	4,62	0,0078	95,684	0,036
Zr ₃ CNO ₂	0,0120	0,000397	0,0034	10,48	0,0116	96,696	0,122
Zr ₃ N ₂ (OH) ₃	0,0134	0,000317	0,0026	15,71	0,0131	97,636	0,206
Zr ₃ N ₂	0,0047	0,000233	0,0044	3,17	0,0045	95,027	0,014
Zr ₃ N ₂ F ₂	0,0044	0,000166	0,0023	5,69	0,0042	96,210	0,024
Zr ₃ N ₂ H ₂	0,0039	0,000141	0,0021	5,54	0,0037	96,367	0,021

$\text{Zr}_3\text{N}_2\text{O}_2$	0,0077	0,000282	0,0031	7,53	0,0075	96,354	0,056
Zr_4C_3	0,0058	0,000268	0,0044	3,99	0,0056	95,398	0,022
$\text{Zr}_4\text{C}_3(\text{OH})_2$	0,0051	0,000144	0,0018	8,48	0,0049	97,163	0,042
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{F}_2$	0,0047	0,000189	0,0023	6,10	0,0046	96,030	0,028
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{H}_2$	0,0062	0,000212	0,0023	8,09	0,0060	96,589	0,048
$\text{Zr}_4\text{C}_3\text{O}_2$	0,0076	0,000274	0,0027	8,46	0,0074	96,417	0,062
Zr_4N_3	0,0038	0,000186	0,0036	3,12	0,0036	95,092	0,011
$\text{Zr}_4\text{N}_3(\text{OH})_2$	0,0049	0,000139	0,0017	8,61	0,0048	97,152	0,041
$\text{Zr}_4\text{N}_3\text{F}_2$	0,0037	0,000155	0,0021	5,12	0,0035	95,773	0,018
$\text{Zr}_4\text{N}_3\text{O}_2$	0,0058	0,000223	0,0026	6,84	0,0056	96,177	0,038
ZrCrNO_2	0,0079	0,000372	0,0056	4,23	0,0076	95,310	0,032
ZrHfCO_2	0,0051	0,000225	0,0036	4,26	0,0049	95,561	0,021