

Table S1.: Calculated carbon-carbon spin-spin coupling constants and their contributions (in Hz) for all 39 compounds

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Cyclo-1	1J	1,2	0.15	-0.55	-0.19	14.62	14.02	0.15	-0.59	-0.14	15.60	15.01	0.15	-0.57	-0.12	8.17	7.62
Cyclo-2	1J	1,2	0.19	1.02	1.22	28.34	30.77	0.19	0.87	1.16	29.11	31.33	0.19	1.00	1.19	17.79	20.17
Cyclo-2	2J	1,3	0.02	-0.18	-0.09	-11.00	-11.25	0.02	-0.15	-0.08	-9.95	-10.15	0.02	-0.17	-0.09	-5.34	-5.59
Cyclo-3	1J	1,2	0.21	-0.19	1.07	33.90	34.99	0.21	-0.23	1.03	34.68	35.68	0.21	-0.20	1.05	26.48	27.54
Cyclo-3	2J	1,3	0.02	-0.17	-0.04	0.99	0.80	0.02	-0.15	-0.04	0.96	0.80	0.02	-0.17	-0.05	2.51	2.32
Cyclo-4	1J	1,2	0.22	-0.18	1.08	34.32	35.43	0.22	-0.23	1.03	35.23	36.26	0.22	-0.19	1.05	27.20	28.27
Cyclo-4	2J	1,3	0.03	-0.14	-0.04	-2.52	-2.68	0.03	-0.12	-0.03	-2.42	-2.54	0.03	-0.14	-0.04	-0.75	-0.89
Cyclo-4	3J	1,4	0.01	-0.07	-0.01	2.18	2.11	0.01	-0.06	-0.01	2.05	1.99	0.01	-0.07	-0.01	1.50	1.43
Cyclo-5	1J	1,2	0.22	-0.17	1.06	35.04	36.14	0.22	-0.22	1.02	35.99	37.01	0.22	-0.18	1.03	27.80	28.87
Cyclo-5	2J	1,3	0.03	-0.23	-0.04	-1.77	-2.00	0.03	-0.20	-0.03	-1.66	-1.87	0.03	-0.23	-0.04	-0.05	-0.28
Cyclo-5	3J	1,4	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.26	-0.27
Spiro-1	1J	1,2	0.19	-0.31	-0.14	12.30	12.05	0.19	-0.36	-0.09	13.44	13.18	0.19	-0.33	-0.07	5.82	5.61
Spiro-1	1J	1,3	0.25	-0.99	-0.22	18.65	17.69	0.25	-1.00	-0.17	20.00	19.08	0.25	-1.01	-0.15	11.62	10.71
Spiro-1	1J	2,3	0.25	-0.92	-0.22	15.25	14.37	0.25	-0.94	-0.16	16.52	15.67	0.25	-0.94	-0.14	7.89	7.06
Spiro-1	1J	3,4	0.30	-0.65	0.88	43.93	44.46	0.30	-0.69	0.84	45.02	45.47	0.30	-0.66	0.86	35.89	36.38
Spiro-1	2J	1,4	-0.00	-0.13	-0.00	-0.53	-0.67	-0.00	-0.11	-0.00	-0.45	-0.57	-0.00	-0.12	-0.00	0.93	0.79
Spiro-1	2J	4,7	0.05	-0.20	-0.03	6.20	6.02	0.05	-0.18	-0.02	5.84	5.68	0.05	-0.19	-0.03	7.30	7.13
Spiro-2	1J	1,2	0.19	-0.36	-0.14	13.10	12.78	0.19	-0.41	-0.09	14.25	13.94	0.19	-0.39	-0.07	6.74	6.47
Spiro-2	1J	1,3	0.25	-1.02	-0.21	17.44	16.47	0.25	-1.02	-0.16	18.77	17.84	0.25	-1.04	-0.14	10.22	9.30
Spiro-2	1J	2,3	0.26	-0.96	-0.22	15.41	14.49	0.26	-0.97	-0.16	16.63	15.75	0.26	-0.98	-0.14	8.06	7.20
Spiro-2	1J	3,4	0.30	-0.58	0.92	43.95	44.59	0.30	-0.63	0.88	45.24	45.80	0.30	-0.60	0.90	36.04	36.65
Spiro-2	2J	1,4	0.01	-0.17	-0.02	-1.06	-1.25	0.01	-0.15	-0.02	-0.90	-1.06	0.01	-0.17	-0.03	0.63	0.44
Spiro-2	2J	4,8	0.04	-0.17	-0.05	0.28	0.10	0.04	-0.15	-0.05	0.33	0.18	0.04	-0.17	-0.05	1.79	1.61
Spiro-3	1J	1,4	0.21	0.92	1.16	28.39	30.68	0.21	0.76	1.09	29.25	31.31	0.21	0.89	1.13	18.17	20.39
Spiro-3	2J	1,3	0.05	-0.20	-0.09	-8.66	-8.89	0.05	-0.17	-0.07	-7.59	-7.78	0.05	-0.19	-0.09	-3.00	-3.23
Spiro-3	2J	1,5	0.00	-0.09	0.06	-2.21	-2.25	0.00	-0.08	0.06	-1.91	-1.92	0.00	-0.09	0.06	-0.08	-0.10

Continued on next page

Table S1 – Continued from previous page

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Spiro-4	1J	1,6	0.32	-0.60	-0.05	35.02	34.75	0.32	-0.63	0.99	36.27	36.96	0.32	-0.61	1.01	27.04	27.76
Spiro-4	2J	1,5	0.07	-0.19	-0.06	-1.28	-1.47	0.07	-0.17	-0.05	-1.16	-1.31	0.07	-0.19	-0.06	0.81	0.63
Spiro-4	2J	1,7	0.07	-0.12	-0.05	-0.19	-0.29	0.07	-0.12	-0.04	-0.15	-0.25	0.07	-0.13	-0.04	1.78	1.68
Bicyc-1	1J	1,2	0.22	0.04	0.65	26.76	27.68	0.22	-0.01	0.63	27.52	28.37	0.22	0.03	0.65	13.02	13.92
Bicyc-1	2J	1,3	0.10	0.29	-0.03	-30.82	-30.46	0.10	0.24	-0.04	-27.72	-27.41	0.10	0.29	0.01	-19.17	-18.77
Bicyc-1	2J	2,4	0.04	-0.12	-0.08	-6.31	-6.46	0.04	-0.10	-0.07	-5.89	-6.03	0.04	-0.11	-0.07	0.15	0.00
Bicyc-2	1J	1,2	0.25	-0.50	0.99	35.20	35.93	0.25	-0.54	0.95	36	36.66	0.25	-0.51	0.96	26.45	27.15
Bicyc-2	1J	1,5	0.25	0.06	0.86	27.83	29.00	0.25	-0.01	0.83	28.60	29.66	0.25	0.05	0.84	16.87	18.01
Bicyc-2	1J	2,3	0.23	0.34	1.17	32.81	34.55	0.23	0.24	1.12	33.51	35.10	0.23	0.33	1.15	24.60	26.30
Bicyc-2	2J	1,3	0.04	-0.07	-0.04	0.06	-0.01	0.04	-0.06	-0.03	0.16	0.11	0.04	-0.07	-0.04	1.31	1.24
Bicyc-2	2J	1,4	0.10	-0.09	-0.02	-7.30	-7.30	0.10	-0.07	-0.02	-6.51	-6.50	0.10	-0.08	-0.02	-1.88	-1.87
Bicyc-2	2J	5,6	0.06	-0.12	-0.06	-8.44	-8.56	0.06	-0.10	-0.06	-7.73	-7.82	0.06	-0.11	-0.06	-2.65	-2.76
Bicyc-3	1J	1,2	0.10	-0.15	-0.06	-11.39	36.10	0.10	-0.13	-0.06	-10.43	37.08	0.10	-0.14	-0.06	-5.52	27.76
Bicyc-3	1J	1,6	0.25	0.46	1.04	28.40	30.16	0.25	0.35	0.99	29.19	30.78	0.25	0.45	1.01	17.38	19.09
Bicyc-3	1J	1,7	0.25	0.47	1.08	27.99	29.78	0.25	0.35	1.02	28.80	30.42	0.25	0.45	1.05	17.16	18.91
Bicyc-3	1J	2,3	0.23	0.16	1.15	33.79	35.32	0.23	0.07	1.10	34.74	36.13	0.23	0.14	1.12	26.13	27.62
Bicyc-3	3J	1,4	0.02	-0.06	-0.02	2.96	2.90	0.02	-0.06	-0.02	2.84	2.78	0.02	-0.06	-0.02	1.55	1.49
Bicyc-3	2J	1,5	0.10	-0.15	-0.06	-11.39	-11.50	0.10	-0.13	-0.06	-10.43	-10.53	0.10	-0.14	-0.06	-5.52	-5.63
Bicyc-3	2J	2,4	0.03	-0.12	-0.03	-2.74	-2.86	0.03	-0.10	-0.02	-2.59	-2.68	0.03	-0.12	-0.03	-0.80	-0.91
Bicyc-3	2J	6,7	0.07	-0.16	-0.08	-8.57	-8.74	0.07	-0.13	-0.07	-7.68	-7.81	0.07	-0.15	-0.08	-2.81	-2.97

Continued on next page

Table S1 – *Continued from previous page*

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Bicyc-4	¹ J	1,2	0.26	-0.40	1.07	33.99	34.92	0.26	-0.44	1.02	34.85	35.69	0.26	-0.41	1.04	25.87	26.76
Bicyc-4	¹ J	1,7	0.27	-0.61	0.94	32.39	33.00	0.27	-0.62	0.91	33.13	33.69	0.27	-0.61	0.92	24.44	25.01
Bicyc-4	¹ J	2,3	0.23	0.38	1.21	31.64	33.47	0.23	0.28	1.15	32.49	34.16	0.23	0.37	1.18	23.47	25.26
Bicyc-4	² J	1,3	0.05	-0.13	-0.04	-0.75	-0.87	0.05	-0.11	-0.04	-0.64	-0.74	0.05	-0.12	-0.05	0.97	0.85
Bicyc-4	² J	1,4	0.09	-0.10	0.03	6.12	6.14	0.09	-0.09	0.02	5.66	5.69	0.09	-0.10	0.02	7.27	7.29
Bicyc-4	³ J	2,5	0.01	-0.01	-0.02	0.63	0.62	0.01	-0.01	-0.02	0.61	0.59	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03
Bicyc-4	² J	2,6	0.04	-0.22	-0.06	-2.15	-2.38	0.04	-0.19	-0.05	-2.03	-2.22	0.04	-0.21	-0.06	-0.06	-0.29
Bicyc-4	² J	2,7	0.05	-0.18	-0.04	1.50	1.34	0.05	-0.16	-0.04	1.40	1.26	0.05	-0.18	-0.05	3.19	3.03
Bicyc-5	¹ J	1,2	0.27	-0.31	1.08	34.18	35.22	0.27	-0.36	1.03	35.35	36.29	0.27	-0.33	1.05	26.62	27.62
Bicyc-5	¹ J	1,7	0.27	-0.34	1.08	33.90	34.91	0.27	-0.39	1.03	34.87	35.79	0.27	-0.35	1.05	26.00	26.98
Bicyc-5	¹ J	1,8	0.28	-0.49	1.04	32.98	33.80	0.28	-0.52	0.99	33.94	34.68	0.28	-0.50	1.00	25.40	26.18
Bicyc-5	¹ J	2,3	0.24	-0.09	1.10	33.43	34.67	0.24	-0.15	1.05	34.52	35.65	0.24	-0.11	1.07	26.25	27.45
Bicyc-5	¹ J	6,7	0.24	0.28	1.20	32.68	34.40	0.24	0.18	1.14	33.67	35.22	0.24	0.26	1.17	24.73	26.40
Bicyc-5	³ J	1,4	0.03	-0.09	-0.02	1.80	1.74	0.03	-0.08	-0.02	1.72	1.66	0.03	-0.08	-0.01	1.11	1.05
Bicyc-5	² J	1,5	0.09	-0.26	-0.05	0.37	0.15	0.09	-0.23	-0.04	0.45	0.27	0.09	-0.25	-0.05	2.08	1.86
Bicyc-5	² J	1,6	0.06	-0.16	-0.04	-0.17	-0.31	0.06	-0.14	-0.03	-0.02	-0.13	0.06	-0.15	-0.04	1.48	1.35
Bicyc-5	² J	2,4	0.04	-0.15	-0.03	-2.15	-2.30	0.04	-0.13	-0.03	-1.99	-2.11	0.04	-0.15	-0.03	-0.29	-0.43
Bicyc-6	¹ J	1,2	0.27	-0.36	1.10	33.83	34.84	0.27	-0.40	1.05	34.76	35.68	0.27	-0.37	1.07	26.02	26.99
Bicyc-6	¹ J	2,3	0.24	0.47	1.23	32.10	34.05	0.24	0.35	1.17	33.11	34.87	0.24	0.45	1.20	24.33	26.23
Bicyc-6	² J	1,3	0.06	-0.04	-0.03	-2.54	-2.56	0.06	-0.03	-0.02	-2.42	-2.42	0.06	-0.04	-0.03	-0.53	-0.54
Bicyc-6	³ J	1,4	0.09	0.20	0.13	14.37	14.79	0.09	0.15	0.10	13.13	13.47	0.09	0.19	0.13	12.77	13.18
Bicyc-6	³ J	2,5	0.03	-0.02	-0.01	1.98	1.97	0.03	-0.03	-0.02	1.87	1.85	0.03	-0.02	-0.01	1.23	1.22
Bicyc-6	² J	2,6	0.06	-0.04	-0.03	-2.55	-1.96	0.06	-0.03	-0.02	-2.43	-1.84	0.06	-0.04	-0.03	-0.54	0.04
Brbic-1	¹ J	1,2	0.18	-1.23	-0.28	25.08	23.76	0.18	-1.20	-0.22	26.06	24.82	0.18	-1.25	-0.20	17.05	15.79
Brbic-1	¹ J	1,3	0.17	-0.66	-0.84	-14.36	-15.69	0.17	-0.68	-0.70	-12.84	-14.05	0.17	-0.67	-0.49	-22.10	-23.09
Brbic-1	² J	2,4	-0.04	-0.36	-0.04	1.43	0.98	-0.04	-0.30	-0.04	1.53	1.15	-0.04	-0.35	-0.06	2.88	2.43

Continued on next page

Table S1 – *Continued from previous page*

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Brbic-2	1J	1,2	0.23	0.59	1.00	38.14	39.95	0.23	0.44	0.95	39.01	40.62	0.23	0.56	0.99	26.12	27.90
Brbic-2	1J	2,3	0.20	1.27	1.30	28.20	30.97	0.20	1.10	1.23	28.94	31.46	0.20	1.25	1.26	17.24	19.95
Brbic-2	1J	1,4	0.22	-0.10	-0.28	6.26	6.10	0.22	-0.18	-0.21	7.00	6.83	0.22	-0.12	-0.12	-6.17	-6.20
Brbic-2	1J	1,5	0.21	-0.95	-0.22	18.84	17.87	0.21	-0.95	-0.17	19.94	19.03	0.21	-0.97	-0.14	12.00	11.11
Brbic-2	2J	1,3	0.03	-0.14	-0.08	-9.16	-9.36	0.03	-0.11	-0.07	-8.29	-8.44	0.03	-0.13	-0.10	-2.41	-2.61
Brbic-2	2J	2,5	-0.01	-0.07	-0.04	-1.17	-1.29	-0.01	-0.06	-0.04	-1.03	-1.14	-0.01	-0.07	-0.05	0.03	-0.10
Brbic-3	1J	1,2	0.25	-0.48	0.89	43.59	44.25	0.25	-0.52	0.86	44.54	45.13	0.25	-0.49	0.87	35.56	36.18
Brbic-3	1J	2,3	0.22	-0.06	1.11	33.57	34.83	0.22	-0.12	1.06	34.38	35.54	0.22	-0.07	1.08	26.19	27.42
Brbic-3	1J	1,5	0.25	-0.92	-0.18	13.04	12.19	0.25	-0.93	-0.13	14.00	13.18	0.25	-0.93	-0.10	5.53	4.75
Brbic-3	1J	1,6	0.22	-0.73	-0.20	15.86	15.15	0.22	-0.76	-0.15	17.02	16.33	0.22	-0.75	-0.13	8.98	8.32
Brbic-3	2J	1,3	0.04	-0.17	-0.04	-0.83	-1.00	0.04	-0.15	-0.04	-0.78	-0.92	0.04	-0.17	-0.05	0.92	0.74
Brbic-3	2J	2,4	0.03	-0.23	-0.04	1.12	0.87	0.03	-0.20	-0.04	1.05	0.84	0.03	-0.23	-0.05	2.48	2.23
Brbic-3	2J	2,6	-0.01	-0.07	-0.02	-1.62	-1.72	-0.01	-0.06	-0.02	-1.52	-1.60	-0.01	-0.07	-0.02	-0.14	-0.23
Brbic-3	3J	3,6	0.01	0.06	-0.01	0.79	0.85	0.01	0.05	-0.01	0.87	0.92	0.01	0.05	-0.01	0.28	0.34
Brbic-4	1J	1,2	0.24	0.97	1.26	30.89	33.35	0.24	0.78	1.18	31.68	33.87	0.24	0.95	1.23	18.23	20.64
Brbic-4	1J	2,3	0.21	1.34	1.34	28.66	31.54	0.21	1.14	1.26	29.39	32.00	0.21	1.31	1.30	17.48	20.30
Brbic-4	1J	1,4	0.26	2.14	1.49	24.77	28.66	0.26	1.83	1.37	24.90	28.36	0.26	2.11	1.44	7.16	10.97
Brbic-4	2J	1,3	0.05	-0.27	-0.12	-11.17	-11.50	0.05	-0.22	-0.09	-9.84	-10.10	0.05	-0.26	-0.12	-3.82	-4.15
Brbic-4	2J	2,5	0.01	-0.19	-0.05	-3.40	-3.63	0.01	-0.16	-0.04	-3.00	-3.19	0.01	-0.19	-0.05	-0.32	-0.54
Brbic-4	3J	2,6	-0.03	0.00	-0.01	2.20	2.16	-0.03	0.00	-0.02	1.77	1.73	-0.03	0.00	-0.01	0.30	0.26

Continued on next page

Table S1 – *Continued from previous page*

	Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
				DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
C7	Brbic-5	¹ J	1,2	0.26	-0.49	1.00	35.73	36.50	0.26	-0.53	0.96	36.77	37.46	0.26	-0.50	0.98	27.39	28.13
	Brbic-5	¹ J	2,3	0.23	-0.24	1.05	34.06	35.10	0.23	-0.28	1.01	34.82	35.78	0.23	-0.25	1.03	26.74	27.74
	Brbic-5	¹ J	1,5	0.28	0.94	1.40	26.73	29.35	0.28	0.76	1.31	27.37	29.72	0.28	0.93	1.35	14.39	16.95
	Brbic-5	¹ J	1,6	0.25	1.07	1.32	29.80	32.44	0.25	0.88	1.24	30.61	32.97	0.25	1.05	1.28	18.39	20.97
	Brbic-5	¹ J	6,7	0.22	1.26	1.31	28.56	31.34	0.22	1.07	1.23	29.31	31.83	0.22	1.23	1.28	17.73	20.46
	Brbic-5	² J	1,3	0.05	-0.24	-0.04	1.07	0.85	0.05	-0.21	-0.04	1.00	0.81	0.05	-0.23	-0.05	2.63	2.40
	Brbic-5	² J	1,4	0.05	-0.19	-0.04	0.49	0.31	0.05	-0.17	-0.03	0.56	0.41	0.05	-0.19	-0.04	2.64	2.45
	Brbic-5	² J	2,4	0.04	-0.22	-0.04	2.12	1.90	0.04	-0.19	-0.04	1.95	1.76	0.04	-0.22	-0.05	3.49	3.27
	Brbic-5	² J	1,7	0.06	-0.26	-0.11	-9.92	-10.23	0.06	-0.22	-0.09	-8.82	-9.06	0.06	-0.25	-0.11	-3.82	-4.13
	Brbic-5	² J	2,6	0.02	-0.14	-0.02	-2.01	-2.14	0.02	-0.12	-0.02	-1.84	-1.95	0.02	-0.13	-0.02	0.19	0.06
	Brbic-6	¹ J	1,2	0.27	-0.32	1.08	35.16	36.19	0.27	-0.37	1.03	36.08	37.01	0.27	-0.33	1.05	27.11	28.10
	Brbic-6	¹ J	2,3	0.23	-0.27	1.04	34.20	35.19	0.23	-0.31	1	34.98	35.90	0.23	-0.28	1.02	26.95	27.91
	Brbic-6	¹ J	1,5	0.30	-0.25	1.22	32.19	33.47	0.30	-0.31	1.16	32.97	34.12	0.30	-0.26	1.18	23.11	24.33
	Brbic-6	² J	1,3	0.06	-0.23	-0.05	1.44	1.23	0.06	-0.20	-0.04	1.36	1.18	0.06	-0.22	-0.05	2.99	2.77
	Brbic-6	² J	1,4	0.06	-0.19	-0.04	1.17	0.99	0.06	-0.17	-0.03	1.16	1.01	0.06	-0.19	-0.04	2.86	2.69
	Brbic-6	² J	2,4	0.05	-0.23	-0.04	2.28	2.06	0.05	-0.20	-0.04	2.08	1.90	0.05	-0.22	-0.04	3.72	3.51
	Brbic-6	² J	2,6	0.04	-0.17	-0.03	-0.58	-0.74	0.04	-0.16	-0.02	-0.53	-0.68	0.04	-0.17	-0.03	1.26	1.09
	Brbic-6	³ J	2,7	0.01	0.01	-0.02	-0.12	-0.12	0.01	0.01	-0.02	-0.09	-0.09	0.01	0.01	-0.02	-0.38	-0.38
	Brbic-6	³ J	2,8	-0.03	0.02	-0.01	0.62	0.60	-0.03	0.02	-0.01	0.56	0.54	-0.03	0.02	-0.01	0.37	0.35
	Brbic-6	⁴ J	3,7	-0.03	0.03	-0.01	-0.30	-0.31	-0.03	0.03	-0.01	-0.28	-0.28	-0.03	0.03	-0.01	-0.17	-0.17
	Prop-1	¹ J	1,2	0.22	-2.38	-0.14	13.09	10.79	0.22	-2.20	-0.10	14.30	12.22	0.22	-2.40	0.25	8.16	6.23
	Prop-1	¹ J	1,3	0.17	-0.28	1.99	17.99	19.88	0.17	-0.29	1.64	6.93	8.44	0.17	-0.20	-16.31	-320.31	-336.65
	Prop-1	² J	2,4	-0.01	-0.38	0.11	-1.04	-1.32	-0.01	-0.31	0.09	-0.88	-1.12	-0.01	-0.37	0.04	0.98	0.63

Continued on next page

Table S1 – Continued from previous page

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Prop-2	1J	1,2	0.25	1.48	1.27	35.23	38.22	0.25	1.16	1.14	35.25	37.80	0.25	1.45	-4.52	6.30	3.48
Prop-2	1J	1,4	0.19	1.87	2.45	3.09	7.60	0.19	1.52	1.97	-2.32	1.36	0.19	1.93	-108.58	-100.90	-207.37
Prop-2	1J	1,5	0.24	-2.36	-0.22	16.84	14.50	0.24	-2.19	-0.14	18.46	16.37	0.24	-2.38	1.81	37.94	37.61
Prop-2	1J	2,3	0.21	0.81	1.18	31.33	33.53	0.21	0.63	1.10	32.22	34.17	0.21	0.78	0.85	-57.55	-55.70
Prop-2	2J	1,3	0.04	-0.11	-0.35	-4.84	-5.26	0.04	-0.05	-0.22	-3.87	-4.11	0.04	-0.11	12.01	43.20	55.15
Prop-2	2J	2,5	-0.00	-0.04	-0.08	2.13	2.01	-0.00	-0.05	-0.07	2.00	1.87	-0.00	-0.05	0.02	1.92	1.89
Prop-3	1J	1,2	0.27	1.17	1.00	44.94	47.38	0.27	0.90	0.91	45.35	47.44	0.27	1.14	0.89	-11.71	-9.41
Prop-3	1J	1,4	0.27	1.97	2.04	6.41	10.70	0.27	1.58	1.77	4.73	8.35	0.27	1.97	-0.90	-109.60	-108.26
Prop-3	1J	1,7	0.27	-1.72	-0.36	27.54	25.73	0.27	-1.66	-0.27	28.82	27.17	0.27	-1.75	0.34	21.09	19.95
Prop-3	1J	2,3	0.22	1.20	1.34	31.72	34.49	0.22	0.99	1.25	32.12	34.57	0.22	1.17	1.27	1.11	3.77
Prop-3	2J	1,3	0.07	-0.21	-0.21	-8.41	-8.77	0.07	-0.16	-0.14	-7.58	-7.81	0.07	-0.21	-0.06	43.18	42.98
Prop-3	2J	2,5	-0.01	-0.18	-0.03	-0.98	-1.19	-0.01	-0.14	-0.02	0.18	0.02	-0.01	-0.17	-0.04	19.87	19.66
Prop-3	3J	2,6	-0.04	0.00	-0.01	3.76	3.71	-0.04	0.01	-0.02	2.67	2.61	-0.04	0.00	-0.00	-17.24	-17.28
Prop-3	2J	2,7	0.00	-0.05	-0.07	2.35	2.23	0.00	-0.06	-0.06	2.39	2.28	0.00	-0.06	-0.05	2.42	2.31
Polcyc-1	1J	1,2	0.21	-0.37	-0.30	18.91	18.46	0.21	-0.39	-0.24	19.80	19.38	0.21	-0.39	-0.16	6.09	5.75
Polcyc-1	1J	1,3	0.20	-1.18	-0.90	0.10	-1.78	0.20	-1.14	-0.78	1.59	-0.13	0.20	-1.20	-0.67	-3.89	-5.55
Polcyc-1	1J	2,5	0.22	0.42	0.83	35.55	37.01	0.22	0.31	0.78	36.57	37.89	0.22	0.40	0.82	22.83	24.27
Polcyc-1	2J	1,5	0.00	-0.26	-0.06	-4.70	-5.03	0.00	-0.22	-0.06	-4.08	-4.35	0.00	-0.26	-0.09	0.82	0.48
Polcyc-1	2J	2,4	0.05	0.36	0.03	-19.58	-19.14	0.05	0.33	0.02	-17.75	-17.34	0.05	0.37	0.07	-10.60	-10.11
Polcyc-2	1J	1,2	0.24	-1.16	-0.27	23.52	22.33	0.24	-1.14	-0.22	24.44	23.32	0.24	-1.18	-0.18	14.80	13.67
Polcyc-2	1J	1,3	0.21	-0.85	-0.83	-9.08	-10.55	0.21	-0.83	-0.71	-7.42	-8.74	0.21	-0.87	-0.59	-13.67	-14.91
Polcyc-2	2J	2,4	0.04	-0.01	0.03	5.62	5.68	0.04	-0.01	0.02	5.49	5.54	0.04	-0.01	0.03	7.23	7.29
Polcyc-3	1J	1,2	0.25	-1.38	-0.26	24.51	23.12	0.25	-1.33	-0.20	25.62	24.34	0.25	-1.40	-0.17	16.21	14.89
Polcyc-3	1J	2,3	0.25	-1.34	-0.28	24.62	23.25	0.25	-1.30	-0.22	25.63	24.37	0.25	-1.36	-0.19	15.80	14.50
Polcyc-3	1J	1,3	0.21	-0.58	-0.76	-14.76	-15.88	0.21	-0.59	-0.62	-13.05	-14.05	0.21	-0.59	-0.44	-21.21	-22.02
Polcyc-3	2J	2,4	0.02	-0.52	-0.07	-0.49	-1.05	0.02	-0.43	-0.07	-0.35	-0.82	0.02	-0.51	-0.08	1.11	0.54

Continued on next page

Table S1 – *Continued from previous page*

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Polcyc-4	¹ J	1,2	0.25	-1.44	-0.27	24.64	23.19	0.25	-1.39	-0.20	25.69	24.35	0.25	-1.47	-0.18	15.77	14.38
Polcyc-4	¹ J	2,3	0.25	-1.55	-0.27	25.39	23.83	0.25	-1.48	-0.20	26.49	25.07	0.25	-1.57	-0.18	16.52	15.02
Polcyc-4	¹ J	1,3	0.22	-0.53	-0.77	-16.39	-17.48	0.22	-0.55	-0.62	-14.54	-15.50	0.22	-0.54	-0.40	-23.61	-24.33
Polcyc-4	² J	2,4	0.02	-0.60	-0.06	0.81	0.17	0.02	-0.51	-0.06	0.96	0.42	0.02	-0.59	-0.08	2.19	1.55
Polcyc-5	¹ J	1,2	0.25	-1.19	-0.28	24.62	23.40	0.25	-1.17	-0.23	25.42	24.27	0.25	-1.21	-0.19	14.62	13.46
Polcyc-5	¹ J	2,3	0.25	-1.18	-0.24	22.94	21.77	0.25	-1.15	-0.19	23.88	22.79	0.25	-1.19	-0.16	14.25	13.16
Polcyc-5	¹ J	1,3	0.22	-1.02	-0.87	-9.38	-11.05	0.22	-0.98	-0.74	-7.34	-8.83	0.22	-1.04	-0.62	-13.49	-14.92
Polcyc-5	² J	2,4	0.05	-0.05	0.03	3.05	3.08	0.05	-0.04	0.02	3.09	3.12	0.05	-0.04	0.03	4.72	4.75
Polcyc-6	¹ J	1,2	0.26	-1.29	-0.27	23.93	22.64	0.26	-1.25	-0.21	24.95	23.76	0.26	-1.31	-0.18	14.32	13.09
Polcyc-6	¹ J	1,3	0.23	-0.89	-0.85	-12.50	-14.00	0.23	-0.85	-0.71	-10.36	-11.69	0.23	-0.90	-0.58	-17.00	-18.26
Polcyc-6	² J	2,4	0.05	-0.32	-0.06	-2.74	-3.06	0.05	-0.26	-0.06	-2.49	-2.76	0.05	-0.31	-0.06	-0.17	-0.49
Polcyc-7	¹ J	1,2	0.26	-1.24	-0.28	24.88	23.62	0.26	-1.20	-0.21	25.85	24.69	0.26	-1.26	-0.19	15.49	14.30
Polcyc-7	¹ J	1,3	0.22	-0.83	-0.88	-14.15	-15.64	0.22	-0.80	-0.73	-11.88	-13.18	0.22	-0.84	-0.59	-19.30	-20.51
Polcyc-7	¹ J	2,7	0.30	-0.10	0.96	60.25	61.42	0.30	-0.24	0.89	61.57	62.52	0.30	-0.12	0.93	51.17	52.28
Polcyc-7	² J	1,5	0.02	0.00	0.07	-2.13	-2.04	0.02	0.01	0.05	-1.88	-1.81	0.02	0.00	0.04	0.42	0.49
Polcyc-7	² J	2,4	0.04	-0.44	-0.09	-2.54	-3.03	0.04	-0.34	-0.08	-2.68	-3.06	0.04	-0.43	-0.10	-0.54	-1.03
Polcyc-7	³ J	1,6	-0.05	-0.13	0.02	5.53	5.36	-0.05	-0.06	0.01	4.46	4.35	-0.05	-0.12	0.01	3.19	3.02
Polcyc-7	³ J	1,8	0.04	-0.29	0.05	13.66	13.46	0.04	-0.25	0.03	11.56	11.39	0.04	-0.29	0.04	11.73	11.52
Polcyc-7	³ J	2,5	0.04	-0.01	0.01	10.14	10.17	0.04	-0.03	-0.00	9.05	9.05	0.04	-0.01	0.00	9.32	9.35
Caghed-1	¹ J	1,2	0.17	-0.20	-0.90	12.93	12.00	0.17	-0.20	-0.79	14.19	13.37	0.17	-0.23	-0.58	3.42	2.78
Caghed-2	¹ J	1,2	0.24	-0.27	-0.27	13.59	13.30	0.24	-0.36	-0.19	14.23	13.92	0.24	-0.30	-0.08	0.05	-0.09
Caghed-2	¹ J	1,4	0.26	2.30	1.31	40.43	44.30	0.26	1.88	1.14	41.76	45.05	0.26	2.25	1.24	20.64	24.39
Caghed-2	² J	1,3	0.03	-0.23	-0.01	-5.88	-6.09	0.03	-0.15	-0.02	-5.79	-5.94	0.03	-0.21	-0.07	1.57	1.32

Continued on next page

Table S1 – *Continued from previous page*

Compound	Type	Nuclei	SOPPA					HRPA(D)					RPA(D)				
			DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total	DSO	PSO	SD	FC	Total
Caghed-3	1J	1,2	0.27	1.49	1.22	25.27	28.25	0.27	1.22	1.13	25.56	28.18	0.27	1.45	1.19	6.26	9.18
Caghed-3	1J	1,4	0.27	1.83	1.13	33.68	36.92	0.27	1.51	1.01	34.65	37.44	0.27	1.79	1.10	14.11	17.28
Caghed-3	1J	2,7	0.25	0.03	0.86	31.31	32.45	0.25	-0.04	0.83	32.06	33.10	0.25	0.02	0.85	19.24	20.36
Caghed-3	1J	2,3	0.28	0.47	0.99	37.90	39.64	0.28	0.31	0.92	38.86	40.38	0.28	0.45	0.97	23.83	25.54
Caghed-3	1J	3,6	0.26	-0.73	-0.15	13.78	13.17	0.26	-0.76	-0.09	14.75	14.15	0.26	-0.75	-0.02	6.17	5.66
Caghed-4	1J	1,2	0.26	-0.99	-0.26	14.57	13.59	0.26	-1.00	-0.19	15.95	15.03	0.26	-1.01	-0.14	6.77	5.88
Caghed-4	1J	1,7	0.27	-0.79	0.80	44.36	44.64	0.27	-0.79	0.78	45.10	45.35	0.27	-0.79	0.78	36.90	37.16
Caghed-4	1J	2,6	0.26	-0.21	-0.24	12.02	11.83	0.26	-0.29	-0.17	12.67	12.47	0.26	-0.23	-0.08	-1.49	-1.55
Caghed-4	1J	2,3	0.28	0.93	1.08	44.63	46.92	0.28	0.71	0.97	45.64	47.60	0.28	0.91	1.02	29.17	31.38
Caghed-5	1J	1,2	0.28	2.13	1.46	28.72	32.59	0.28	1.71	1.31	28.44	31.74	0.28	2.06	1.42	6.56	10.33
Caghed-5	2J	1,6	0.08	-0.40	-0.13	-11.24	-11.70	0.08	-0.30	-0.10	-9.46	-9.78	0.08	-0.38	-0.14	1.68	1.24
Caghed-5	3J	1,7	-0.02	-0.07	-0.04	18.30	18.17	-0.02	-0.04	-0.04	13.34	13.24	-0.02	-0.07	-0.04	9.51	9.39
Caghed-6	1J	1,2	0.31	0.65	1.20	30.18	32.33	0.31	0.46	1.11	30.64	32.51	0.31	0.63	1.17	15.12	17.23
Caghed-6	1J	1,6	0.30	2.06	1.51	27.06	30.94	0.30	1.71	1.38	27.14	30.53	0.30	2.02	1.46	8.79	12.58
Caghed-6	2J	1,3	0.07	-0.30	-0.05	0.66	0.37	0.07	-0.24	-0.04	0.70	0.49	0.07	-0.29	-0.06	3.78	3.49
Caghed-6	2J	1,7	0.10	-0.29	-0.11	-10.57	-10.87	0.10	-0.25	-0.09	-8.88	-9.11	0.10	-0.29	-0.12	-1.34	-1.65
Caghed-7	1J	1,2	0.32	1.04	1.19	30.86	33.41	0.32	0.78	1.10	31.64	33.83	0.32	1.01	1.16	14.94	17.43
Caghed-7	1J	1,7	0.31	1.96	1.60	27.99	31.86	0.31	1.63	1.46	27.82	31.22	0.31	1.92	1.54	8.81	12.58
Caghed-7	2J	1,3	0.06	0.01	0.01	-4.14	-4.07	0.06	0.02	0.01	-3.72	-3.63	0.06	0.01	0.00	0.38	0.45
Caghed-7	3J	1,4	0.05	-0.15	0.01	9.31	9.21	0.05	-0.13	0.00	7.73	7.65	0.05	-0.15	0.01	6.67	6.58
Caghed-7	2J	1,8	0.11	-0.26	-0.11	-12.71	-12.97	0.11	-0.23	-0.09	-10.57	-10.77	0.11	-0.26	-0.12	-2.63	-2.90
Caghed-8	1J	1,2	0.29	-0.35	1.09	32.50	33.53	0.29	-0.40	1.04	33.52	34.46	0.29	-0.36	1.06	25.09	26.08
Caghed-8	2J	1,3	0.09	-0.05	-0.02	-2.85	-2.84	0.09	-0.05	-0.02	-2.73	-2.72	0.09	-0.05	-0.02	-0.96	-0.94
Caghed-8	3J	1,4	0.04	-0.09	-0.01	1.57	1.52	0.04	-0.08	-0.01	1.50	1.45	0.04	-0.09	-0.01	0.87	0.82

Table S2.: CPU time of SOPPA, HRP(A(D), and RPA(D) given in hours. Some calculations were carried out differently than the others due to work space limitations and convergence difficulty. These calculations are annotated and italicised.

Compound	SOPPA	HRPA(D)	RPA(D)
Cyclo-1	2.90	1.62	0.64
Cyclo-2	36.71	31.41	7.40
Cyclo-3	161.06	70.45	41.21
<i>Cyclo-4</i>	<i>118.40^a</i>	213.17	95.44
<i>Cyclo-5</i>	<i>227.72^c</i>	155.79	53.78
Spiro-1	291.23	175.91	78.28
Spiro-2	556.91	277.71	116.43
<i>Spiro-3</i>	<i>90.69^b</i>	143.35	74.43
<i>Spiro-4</i>	<i>380.27^{a,b,c}</i>	<i>423.66^{a,b,c}</i>	<i>203.48^{a,b,c}</i>
Bicyc-1	12.68	6.42	3.30
Bicyc-2	29.50	19.22	8.57
<i>Bicyc-3</i>	<i>134.84^a</i>	<i>79.29^a</i>	<i>30.17^a</i>
<i>Bicyc-4</i>	<i>74.12^a</i>	<i>63.20^a</i>	<i>25.98^a</i>
Bicyc-5	78.45	180.41	59.03
<i>Bicyc-6</i>	<i>246.18^a</i>	294.67	156.93
Brbic-1	2.91	2.12	0.59
<i>Brbic-2</i>	<i>33.99^a</i>	<i>17.78^a</i>	<i>8.49^a</i>
<i>Brbic-3</i>	<i>75.63^a</i>	<i>54.58^a</i>	<i>24.72^a</i>
<i>Brbic-4</i>	<i>39.59^a</i>	<i>13.85^a</i>	<i>7.24^a</i>
<i>Brbic-5</i>	<i>193.58^a</i>	<i>80.96^a</i>	<i>43.49^a</i>
<i>Brbic-6</i>	<i>221.15^a</i>	276.46	164.48
Prop-1	65.09	32.41	15.59
Prop-2	283.42	118.68	55.35
<i>Prop-3</i>	<i>322.58^b</i>	368.31	102.13
Polcyc-1	6.37	3.31	1.29
Polcyc-2	26.20	9.70	5.10
Polcyc-3	137.78	100.21	52.24
<i>Polcyc-4</i>	<i>176.48^a</i>	209.86	114.86
Polcyc-5	156.90	78.00	23.30
Polcyc-6	90.53	66.02	21.92
Polcyc-7	27.20	16.03	5.47
Caghed-1	9.26	5.06	1.74
Caghed-2	147.29	73.33	30.14
Caghed-3	162.13	93.40	31.25
Caghed-4	32.96	18.96	6.50
Caghed-5	74.97	446.82	165.10
Caghed-6	333.22	127.02	53.36
Caghed-7	365.38	152.90	67.18
Caghed-8	56.22	33.48	8.86

^a Only the reported $J(CC)$ were calculated

^b Basis set on hydrogen atoms reduced from cc-pVTZ to cc-pVDZ

^c SSCC contributions were calculated in separate jobs.