

Electronic Supporting Information for:

## The Presence and Nature of Interpenetration in Porous Polymer Networks

*Richard L. Martin<sup>a,‡</sup>, Mahdi Niknam Shahrak<sup>b,c,‡</sup>, Joseph A. Swisher<sup>c</sup>, Cory M. Simon<sup>c</sup>, Julian P. Sculley<sup>d</sup>, Hong-Cai Zhou<sup>d</sup>, Berend Smit<sup>c</sup>, Maciej Haranczyk<sup>a,\*</sup>*

<sup>a</sup> Computational Research Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94720 (USA)

<sup>b</sup> Department of Chemical Engineering, Quchan Institute of Engineering and Technology, Quchan, P.O. Box 84686-94717 (Islamic Republic of Iran)

<sup>c</sup> Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of California, Berkeley, Berkeley, CA 94720 (USA)

<sup>d</sup> Department of Chemistry, Texas A&M University, College Station, TX 77842 (USA)

### Details of construction of interpenetrated systems

Interpenetrated versions of **dia** net structures were generated by duplicating the underlying net, and positioning the copy with a particular shift in the Cartesian axes with respect to the original. Periodic boundary conditions were preserved, and unit cell parameters were not altered. Practically, this process involved applying a ‘shift’ vector to each atom in the duplicate net, and translating the result back into the unit cell.

Not all such shifts produce feasible structures, and in many cases, the two nets collide. Collisions were detected by comparing the bonding environments of each atom in the interpenetrated structure with their counterparts in the original structure. Any mismatch indicates the presence of undesired atoms of one net within bonding distance of the other. Bonding environments were determined by comparing pairwise, interatomic distances according to the following rule set:

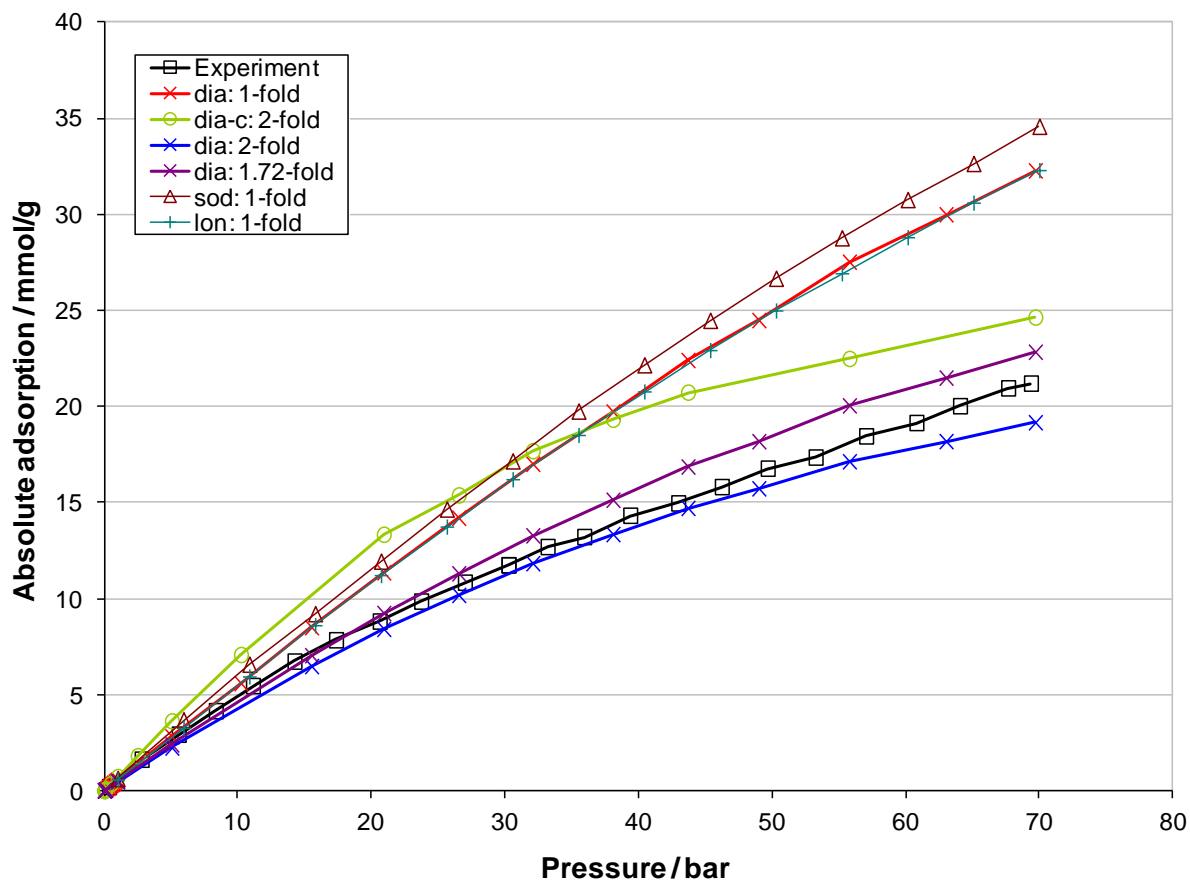
- Si/Ge bonded to any atom if distance  $\leq 2.5 \text{ \AA}$
- Else, any two atoms bonded if distance  $\leq 1.9 \text{ \AA}$
- Else, hydrogen bonded to any atom if distance  $\leq 1.3 \text{ \AA}$

### Simulation details

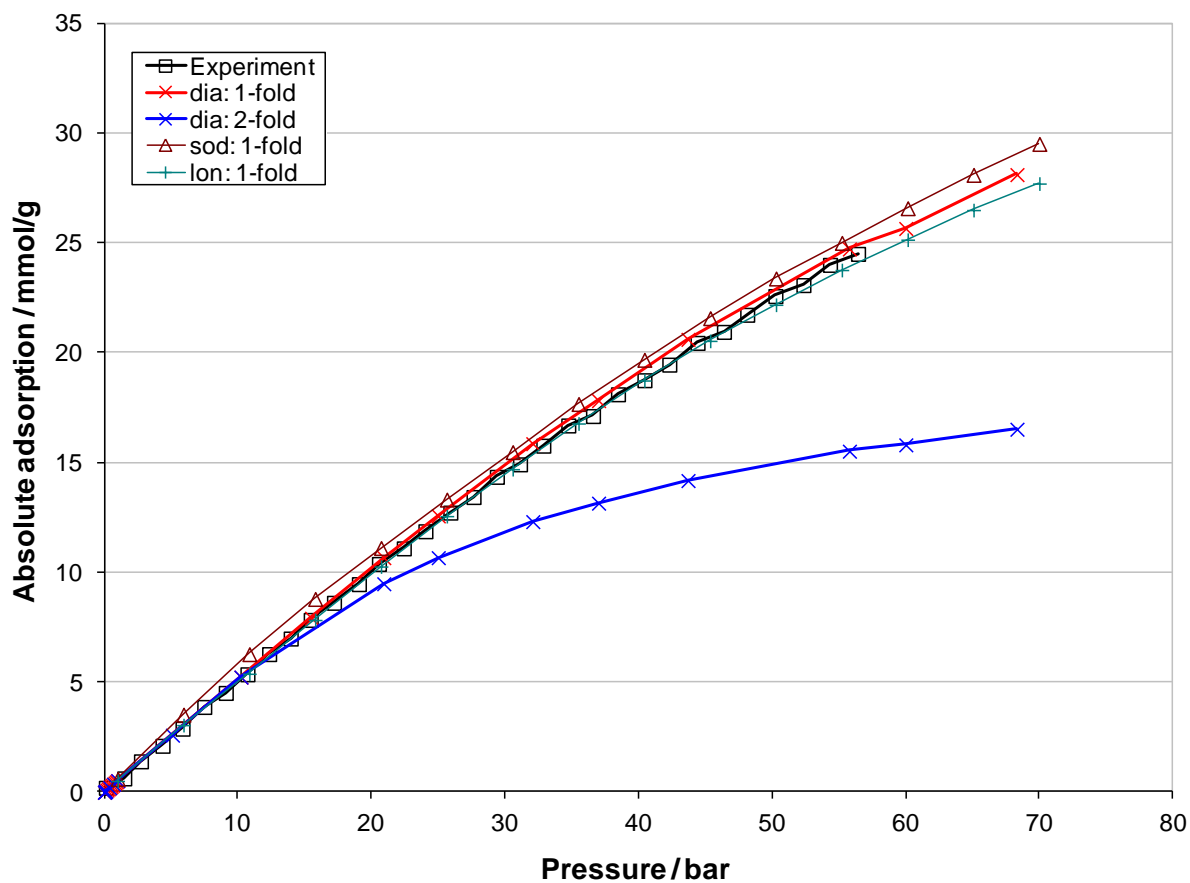
Adsorption performance of each PPN was analyzed on the grand canonical Monte Carlo ( $\mu, V, T$ ) ensemble ( $T = 295 \text{ K}$ ) with the Lennard-Jones (LJ) interaction model.<sup>1</sup> LJ interaction parameters for framework atoms were taken from the Dreiding force field<sup>2</sup> while the methane molecule was modeled using the united-atom approximation (single center) with LJ parameters from the TraPPE force field;<sup>3</sup> all employed LJ parameters are presented in Table S-1. LJ cross-interaction parameters were determined by the Lorentz-Berthelot mixing rules.<sup>4</sup> During simulation, the PPN structures were assumed to be rigid, with atoms fixed at their post-optimization crystallographic positions. Four unit cells are utilized to build the simulation box ( $2 \times 2 \times 1$  cells in the  $a$ ,  $b$  and  $c$  crystallographic axes respectively), and periodic boundary conditions were employed in three dimensions in order to simulate an infinite structure. A cutoff radius of  $12.5 \text{ \AA}$  was applied to the LJ interactions, and the Peng-Robinson equation of state<sup>5</sup> was used to convert the chemical potentials (from simulation) to pressures (from experiments).

**Table S-1.** The LJ parameters used for this work.

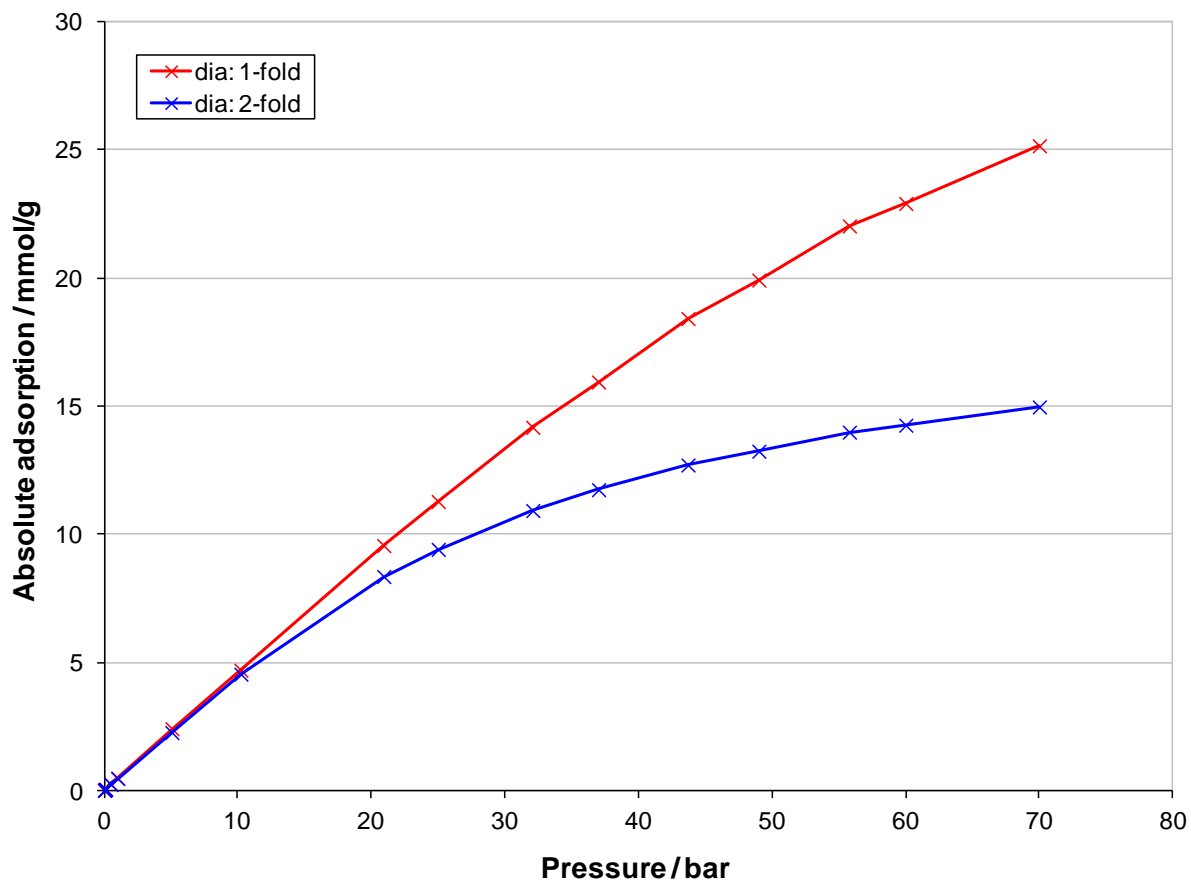
LJ parameters	Structure atoms (Dreiding)				Methane (TraPPE)
	Si	Ge	C	H	
$\delta$ ( $\text{\AA}$ )	3.804	3.804	3.473	2.846	3.73
$\epsilon/k_B$ (K)	156.226	201.582	47.875	7.649	148.0



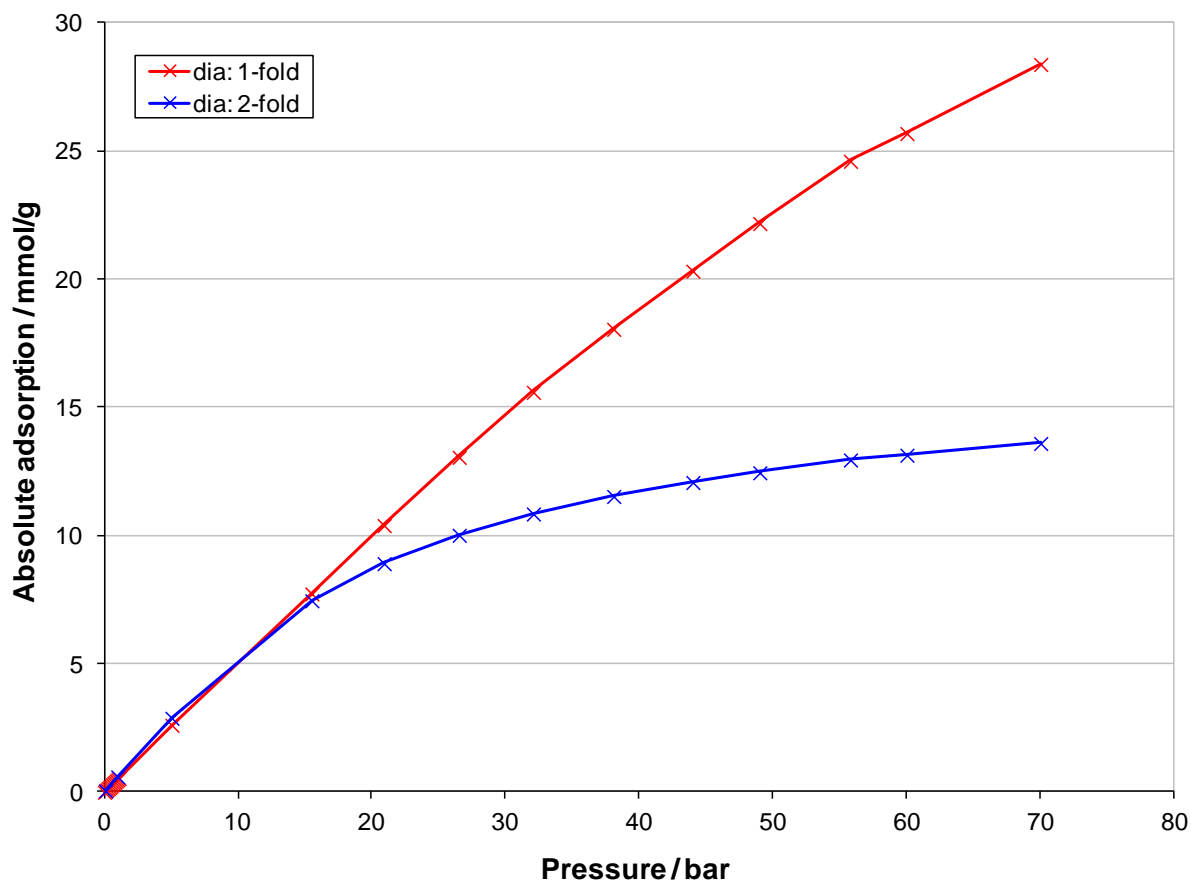
**Figure S-1.** Comparison of methane simulated isotherms for PPN-3 based on models of varying topology and interpenetration, with experimental data (black) at 295 K.



**Figure S-2.** Comparison of methane simulated isotherms for PPN-4 based on models of varying topology and interpenetration, with experimental data (black) at 295 K.



**Figure S-3.** Methane simulated isotherms on interpenetrated (blue) and non-interpenetrated (red) PPN-5 at 295 K.



**Figure S-4.** Methane simulated isotherms on interpenetrated (blue) and non-interpenetrated (red) PPN-6 at 295 K.

<sup>1</sup> LJ interaction model:  $U(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij}[(\delta_{ij}/r_{ij})^{12} - (\delta_{ij}/r_{ij})^6]$

<sup>2</sup> S. L. Mayo, B. D. Olafson, W. A. Goddard, *J. Phys. Chem.* **1990**, *94* (26), 8897-8909.

<sup>3</sup> M. G. Martin, J. I. Siepmann, *J. Phys. Chem. B.* **1998**, *102* (14), 2569-2577.

<sup>4</sup> T. Chen, M. Chidambaram, Z. Liu, B. Smit, A. T. Bell, *J. Phys. Chem. B.* **2010**, *114* (17), 5790-5794.

<sup>5</sup> D.-Y. Peng, D. B. Robinson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **1976**, *15* (1), 59-64.

## Structure data

All considered structures in CIF file format.

```
#####  
#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials  
#  
#####  
  
data_DIA_PPN-2.cif  
  
_cell_length_a          29.8189(0)  
_cell_length_b          29.8189(0)  
_cell_length_c          44.4952(0)  
_cell_angle_alpha       90(0)  
_cell_angle_beta        90(0)  
_cell_angle_gamma       90(0)  
  
_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'  
_symmetry_Int_Tables_number         1  
_stmmetry_cell_setting              Tetragonal  
  
loop_  
_symmetry_equiv_pos_as_xyz  
'+x,+y,+z'  
  
loop_  
_atom_site_label  
_atom_site_type_symbol  
_atom_site_fract_x  
_atom_site_fract_y  
_atom_site_fract_z  
0      H      0.06961      0.04805      0.01369  
1      H      0.93039      0.95195      0.01369  
2      H      0.04805      0.93039      0.98631  
3      H      0.95195      0.06961      0.98631  
4      H      0.43039      0.04805      0.73631  
5      H      0.56961      0.95195      0.73631  
6      H      0.45195      0.93039      0.76369  
7      H      0.54805      0.06961      0.76369  
8      H      0.56961      0.54805      0.51369  
9      H      0.43039      0.45195      0.51369  
10     H      0.54805      0.43039      0.48631  
11     H      0.45195      0.56961      0.48631  
12     H      0.93039      0.54805      0.23631  
13     H      0.06961      0.45195      0.23631  
14     H      0.95195      0.43039      0.26369  
15     H      0.04805      0.56961      0.26369  
16     C      0.03178      0.09327      0.06094  
17     C      0.96822      0.90673      0.06094  
18     C      0.09327      0.96822      0.93906  
19     C      0.90673      0.03178      0.93906  
20     C      0.46822      0.09327      0.68906  
21     C      0.53178      0.90673      0.68906  
22     C      0.40673      0.96822      0.81094  
23     C      0.59327      0.03178      0.81094  
24     C      0.53178      0.59327      0.56094
```

25	C	0.46822	0.40673	0.56094
26	C	0.59327	0.46822	0.43906
27	C	0.40673	0.53178	0.43906
28	C	0.96822	0.59327	0.18906
29	C	0.03178	0.40673	0.18906
30	C	0.90673	0.46822	0.31094
31	C	0.09327	0.53178	0.31094
32	H	0.06043	0.0711	0.06194
33	H	0.93957	0.9289	0.06194
34	H	0.0711	0.93957	0.93806
35	H	0.9289	0.06043	0.93806
36	H	0.43957	0.0711	0.68806
37	H	0.56043	0.9289	0.68806
38	H	0.4289	0.93957	0.81194
39	H	0.5711	0.06043	0.81194
40	H	0.56043	0.5711	0.56194
41	H	0.43957	0.4289	0.56194
42	H	0.5711	0.43957	0.43806
43	H	0.4289	0.56043	0.43806
44	H	0.93957	0.5711	0.18806
45	H	0.06043	0.4289	0.18806
46	H	0.9289	0.43957	0.31194
47	H	0.0711	0.56043	0.31194
48	C	0.03168	0.13067	0.07985
49	C	0.96832	0.86933	0.07985
50	C	0.13067	0.96832	0.92015
51	C	0.86933	0.03168	0.92015
52	C	0.46832	0.13067	0.67015
53	C	0.53168	0.86933	0.67015
54	C	0.36933	0.96832	0.82985
55	C	0.63067	0.03168	0.82985
56	C	0.53168	0.63067	0.57985
57	C	0.46832	0.36933	0.57985
58	C	0.63067	0.46832	0.42015
59	C	0.36933	0.53168	0.42015
60	C	0.96832	0.63067	0.17015
61	C	0.03168	0.36933	0.17015
62	C	0.86933	0.46832	0.32985
63	C	0.13067	0.53168	0.32985
64	H	0.05989	0.13636	0.09472
65	H	0.94011	0.86364	0.09472
66	H	0.13636	0.94011	0.90528
67	H	0.86364	0.05989	0.90528
68	H	0.44011	0.13636	0.65528
69	H	0.55989	0.86364	0.65528
70	H	0.36364	0.94011	0.84472
71	H	0.63636	0.05989	0.84472
72	H	0.55989	0.63636	0.59472
73	H	0.44011	0.36364	0.59472
74	H	0.63636	0.44011	0.40528
75	H	0.36364	0.55989	0.40528
76	H	0.94011	0.63636	0.15528
77	H	0.05989	0.36364	0.15528
78	H	0.86364	0.44011	0.34472
79	H	0.13636	0.55989	0.34472
80	H	0.0299	0.00119	0.05516
81	H	0.9701	0.99881	0.05516
82	H	0.00119	0.9701	0.94484
83	H	0.99881	0.0299	0.94484
84	H	0.4701	0.00119	0.69484

85	H	0.5299	0.99881	0.69484
86	H	0.49881	0.9701	0.80516
87	H	0.50119	0.0299	0.80516
88	H	0.5299	0.50119	0.55516
89	H	0.4701	0.49881	0.55516
90	H	0.50119	0.4701	0.44484
91	H	0.49881	0.5299	0.44484
92	H	0.9701	0.50119	0.19484
93	H	0.0299	0.49881	0.19484
94	H	0.99881	0.4701	0.30516
95	H	0.00119	0.5299	0.30516
96	C	0 0	0.04027	
98	C	0 0	0.95973	
100	C	0.5 0	0.70973	
102	C	0.5 0	0.79027	
104	C	0.5 0.5	0.54027	
106	C	0.5 0.5	0.45973	
108	C	0 0.5	0.20973	
110	C	0 0.5	0.29027	
112	C	0.03875	0.04529	0.99982
113	C	0.96125	0.95471	0.99982
114	C	0.04529	0.96125	0.000180006
115	C	0.95471	0.03875	0.000180006
116	C	0.46125	0.04529	0.75018
117	C	0.53875	0.95471	0.75018
118	C	0.45471	0.96125	0.74982
119	C	0.54529	0.03875	0.74982
120	C	0.53875	0.54529	0.49982
121	C	0.46125	0.45471	0.49982
122	C	0.54529	0.46125	0.50018
123	C	0.45471	0.53875	0.50018
124	C	0.96125	0.54529	0.25018
125	C	0.03875	0.45471	0.25018
126	C	0.95471	0.46125	0.24982
127	C	0.04529	0.53875	0.24982
144	H	0.03625	0.07603	0.98572
145	H	0.96375	0.92397	0.98572
146	H	0.07603	0.96375	0.01428
147	H	0.92397	0.03625	0.01428
148	H	0.46375	0.07603	0.76428
149	H	0.53625	0.92397	0.76428
150	H	0.42397	0.96375	0.73572
151	H	0.57603	0.03625	0.73572
152	H	0.53625	0.57603	0.48572
153	H	0.46375	0.42397	0.48572
154	H	0.57603	0.46375	0.51428
155	H	0.42397	0.53625	0.51428
156	H	0.96375	0.57603	0.26428
157	H	0.03625	0.42397	0.26428
158	H	0.92397	0.46375	0.23572
159	H	0.07603	0.53625	0.23572
256	C	0.04286	0.00302	0.9794
257	C	0.95714	0.99698	0.9794
258	C	0.00302	0.95714	0.0206
259	C	0.99698	0.04286	0.0206
260	C	0.45714	0.00302	0.7706
261	C	0.54286	0.99698	0.7706
262	C	0.49698	0.95714	0.7294
263	C	0.50302	0.04286	0.7294
264	C	0.54286	0.50302	0.4794



265	C	0.45714	0.49698	0.4794
266	C	0.50302	0.45714	0.5206
267	C	0.49698	0.54286	0.5206
268	C	0.95714	0.50302	0.2706
269	C	0.04286	0.49698	0.2706
270	C	0.99698	0.45714	0.2294
271	C	0.00302	0.54286	0.2294
272	C	0.08462	0.00436	0.95883
273	C	0.91538	0.99564	0.95883
274	C	0.00436	0.91538	0.04117
275	C	0.99564	0.08462	0.04117
276	C	0.41538	0.00436	0.79117
277	C	0.58462	0.99564	0.79117
278	C	0.49564	0.91538	0.70883
279	C	0.50436	0.08462	0.70883
280	C	0.58462	0.50436	0.45883
281	C	0.41538	0.49564	0.45883
282	C	0.50436	0.41538	0.54117
283	C	0.49564	0.58462	0.54117
284	C	0.91538	0.50436	0.29117
285	C	0.08462	0.49564	0.29117
286	C	0.99564	0.41538	0.20883
287	C	0.00436	0.58462	0.20883
288	C	0.16037	0.0045	0.92041
289	C	0.83963	0.9955	0.92041
290	C	0.0045	0.83963	0.07959
291	C	0.9955	0.16037	0.07959
292	C	0.33963	0.0045	0.82959
293	C	0.66037	0.9955	0.82959
294	C	0.4955	0.83963	0.67041
295	C	0.5045	0.16037	0.67041
296	C	0.66037	0.5045	0.42041
297	C	0.33963	0.4955	0.42041
298	C	0.5045	0.33963	0.57959
299	C	0.4955	0.66037	0.57959
300	C	0.83963	0.5045	0.32959
301	C	0.16037	0.4955	0.32959
302	C	0.9955	0.33963	0.17041
303	C	0.0045	0.66037	0.17041
304	C	0.15254	0.04065	0.93965
305	C	0.84746	0.95935	0.93965
306	C	0.04065	0.84746	0.06035
307	C	0.95935	0.15254	0.06035
308	C	0.34746	0.04065	0.81035
309	C	0.65254	0.95935	0.81035
310	C	0.45935	0.84746	0.68965
311	C	0.54065	0.15254	0.68965
312	C	0.65254	0.54065	0.43965
313	C	0.34746	0.45935	0.43965
314	C	0.54065	0.34746	0.56035
315	C	0.45935	0.65254	0.56035
316	C	0.84746	0.54065	0.31035
317	C	0.15254	0.45935	0.31035
318	C	0.95935	0.34746	0.18965
319	C	0.04065	0.65254	0.18965
320	H	0.17536	0.06893	0.93998
321	H	0.82464	0.93107	0.93998
322	H	0.06893	0.82464	0.06002
323	H	0.93107	0.17536	0.06002
324	H	0.32464	0.06893	0.81002

325	H	0.67536	0.93107	0.81002
326	H	0.43107	0.82464	0.68998
327	H	0.56893	0.17536	0.68998
328	H	0.67536	0.56893	0.43998
329	H	0.32464	0.43107	0.43998
330	H	0.56893	0.32464	0.56002
331	H	0.43107	0.67536	0.56002
332	H	0.82464	0.56893	0.31002
333	H	0.17536	0.43107	0.31002
334	H	0.93107	0.32464	0.18998
335	H	0.06893	0.67536	0.18998
336	C	0.11518	0.04074	0.95862
337	C	0.88482	0.95926	0.95862
338	C	0.04074	0.88482	0.04138
339	C	0.95926	0.11518	0.04138
340	C	0.38482	0.04074	0.79138
341	C	0.61518	0.95926	0.79138
342	C	0.45926	0.88482	0.70862
343	C	0.54074	0.11518	0.70862
344	C	0.61518	0.54074	0.45862
345	C	0.38482	0.45926	0.45862
346	C	0.54074	0.38482	0.54138
347	C	0.45926	0.61518	0.54138
348	C	0.88482	0.54074	0.29138
349	C	0.11518	0.45926	0.29138
350	C	0.95926	0.38482	0.20862
351	C	0.04074	0.61518	0.20862
352	H	0.11091	0.06969	0.97289
353	H	0.88909	0.93031	0.97289
354	H	0.06969	0.88909	0.02711
355	H	0.93031	0.11091	0.02711
356	H	0.38909	0.06969	0.77711
357	H	0.61091	0.93031	0.77711
358	H	0.43031	0.88909	0.72289
359	H	0.56969	0.11091	0.72289
360	H	0.61091	0.56969	0.47289
361	H	0.38909	0.43031	0.47289
362	H	0.56969	0.38909	0.52711
363	H	0.43031	0.61091	0.52711
364	H	0.88909	0.56969	0.27711
365	H	0.11091	0.43031	0.27711
366	H	0.93031	0.38909	0.22289
367	H	0.06969	0.61091	0.22289
368	C	0.19888	0.00455	0.9009
369	C	0.80112	0.99545	0.9009
370	C	0.00455	0.80112	0.0991
371	C	0.99545	0.19888	0.0991
372	C	0.30112	0.00455	0.8491
373	C	0.69888	0.99545	0.8491
374	C	0.49545	0.80112	0.6509
375	C	0.50455	0.19888	0.6509
376	C	0.69888	0.50455	0.4009
377	C	0.30112	0.49545	0.4009
378	C	0.50455	0.30112	0.5991
379	C	0.49545	0.69888	0.5991
380	C	0.80112	0.50455	0.3491
381	C	0.19888	0.49545	0.3491
382	C	0.99545	0.30112	0.1509
383	C	0.00455	0.69888	0.1509
384	C	0.23112	0.00458	0.88456

385	C	0.76888	0.99542	0.88456
386	C	0.00458	0.76888	0.11544
387	C	0.99542	0.23112	0.11544
388	C	0.26888	0.00458	0.86544
389	C	0.73112	0.99542	0.86544
390	C	0.49542	0.76888	0.63456
391	C	0.50458	0.23112	0.63456
392	C	0.73112	0.50458	0.38456
393	C	0.26888	0.49542	0.38456
394	C	0.50458	0.26888	0.61544
395	C	0.49542	0.73112	0.61544
396	C	0.76888	0.50458	0.36544
397	C	0.23112	0.49542	0.36544
398	C	0.99542	0.26888	0.13456
399	C	0.00458	0.73112	0.13456

\*\*\*\*\*

#

# CIF file created by Zeo++  
 # Zeo++ is an open source package to  
 # analyze micro-porous materials

#

\*\*\*\*\*

data\_DIA\_5-fold-PPN-2.cif

_cell_length_a	29.419(0)
_cell_length_b	29.642(0)
_cell_length_c	44.082(0)
_cell_angle_alpha	90(0)
_cell_angle_beta	90(0)
_cell_angle_gamma	90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'
_symmetry_Int_Tables_number	1
_stmmetry_cell_setting	Orthorhombic

loop\_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'+x,+y,+z'
----------------------------	------------

loop\_

_atom_site_label	_atom_site_type_symbol	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
0	C	0.00455488	0.046117	0.983667
1	C	0.0483021	0.00944606	0.940157
2	C	0.509501	0.0454423	0.688013
3	C	0.503416	0.959854	0.688716
4	C	0.462762	0.00651103	0.729073
5	C	0.548965	0.000337359	0.729686
6	C	0.502838	0.545948	0.479652
7	C	0.508719	0.460327	0.480015
8	C	0.549305	0.505533	0.438932
9	C	0.463	0.499966	0.438614
10	C	0.00751215	0.547703	0.186403
11	C	0.00149563	0.462418	0.185926
12	C	0.964955	0.507354	0.22871

13	C	0.0512934	0.501282	0.224922
14	C	0.0456848	0.0505701	0.961572
15	C	0.466705	0.0486472	0.70852
16	C	0.545634	0.957392	0.709814
17	C	0.460179	0.964071	0.708589
18	C	0.552126	0.0419675	0.708475
19	C	0.545396	0.548377	0.458917
20	C	0.466467	0.45756	0.459031
21	C	0.551718	0.463599	0.459916
22	C	0.460179	0.542339	0.459235
23	C	0.966892	0.550267	0.208747
24	C	0.0459227	0.459112	0.2048
25	C	0.960366	0.465657	0.207704
26	C	0.0523811	0.543587	0.204528
27	H	0.0775349	0.0534377	0.974774
28	H	0.435841	0.051987	0.694388
29	H	0.576872	0.953512	0.696134
30	H	0.456338	0.933473	0.722744
31	H	0.555627	0.0731057	0.722154
32	H	0.576396	0.552055	0.472914
33	H	0.435263	0.454254	0.472869
34	H	0.555287	0.432663	0.446123
35	H	0.456848	0.573038	0.445193
36	H	0.934838	0.554146	0.19593
37	H	0.0756314	0.455738	0.189579
38	H	0.957986	0.434552	0.221519
39	H	0.0575818	0.574185	0.218525
40	H	0.0424895	0.082147	0.948437
41	H	0.468779	0.0796168	0.722449
42	H	0.543152	0.926962	0.724241
43	H	0.429552	0.96596	0.694116
44	H	0.583161	0.0395048	0.694433
45	H	0.543458	0.578841	0.444512
46	H	0.468541	0.426793	0.444944
47	H	0.582583	0.465792	0.474184
48	H	0.429076	0.540382	0.473277
49	H	0.970325	0.580696	0.223084
50	H	0.0450049	0.428109	0.218774
51	H	0.928346	0.467883	0.19466
52	H	0.0817159	0.541765	0.188875
53	C	0.0895	0.011369	0.918947
54	C	0.510622	0.0871061	0.667551
55	C	0.502668	0.917617	0.668754
56	C	0.42119	0.00816409	0.749898
57	C	0.501785	0.587207	0.500499
58	C	0.509569	0.41927	0.501044
59	C	0.591726	0.505971	0.41881
60	C	0.42119	0.498887	0.417971
61	C	0.0069003	0.589974	0.166712
62	C	0.924946	0.507995	0.250896
63	C	0.0939529	0.499629	0.244794
64	C	0.476223	0.0930099	0.645728
65	C	0.537408	0.91114	0.647226
66	C	0.539957	0.596788	0.51867
67	C	0.471464	0.409959	0.519305
68	C	0.597743	0.471493	0.397214
69	C	0.415446	0.533162	0.396193
70	C	0.917196	0.47038	0.269679
71	C	0.105238	0.537514	0.262533
72	H	0.449607	0.0676068	0.643346

73	H	0.564363	0.936205	0.64498
74	H	0.56987	0.574961	0.517536
75	H	0.441721	0.432056	0.518352
76	H	0.572079	0.445179	0.394878
77	H	0.440532	0.560117	0.394424
78	H	0.940107	0.441401	0.268636
79	H	0.0843672	0.567944	0.261218
80	C	0.475373	0.130828	0.626945
81	C	0.538054	0.873288	0.628488
82	C	0.540535	0.633695	0.538202
83	C	0.470682	0.372883	0.538723
84	C	0.635984	0.470245	0.378567
85	C	0.378293	0.533331	0.376571
86	C	0.880519	0.46903	0.289665
87	C	0.142527	0.537076	0.281997
88	H	0.448452	0.134842	0.610181
89	H	0.565179	0.868936	0.611905
90	H	0.570516	0.640713	0.551926
91	H	0.440702	0.366035	0.552516
92	H	0.639995	0.443324	0.361962
93	H	0.374554	0.56005	0.359784
94	H	0.874843	0.439377	0.303775
95	H	0.150719	0.56673	0.295517
96	C	0.0102315	0.843229	0.0381562
97	C	0.165369	0.0112678	0.879543
98	C	0.509365	0.164058	0.629622
99	C	0.503586	0.840497	0.630892
100	C	0.345627	0.00890628	0.789551
101	C	0.502328	0.662236	0.540198
102	C	0.508617	0.344005	0.540493
103	C	0.669601	0.503913	0.381108
104	C	0.345491	0.498786	0.37834
105	C	0.0048948	0.666386	0.129146
106	C	0.850403	0.505904	0.291502
107	C	0.169822	0.498111	0.284266
108	C	0.048948	0.853181	0.0207795
109	C	0.16078	0.0447676	0.901933
110	C	0.5439	0.158424	0.651332
111	C	0.468949	0.846468	0.652511
112	C	0.355892	0.0468929	0.771721
113	C	0.463918	0.652722	0.522345
114	C	0.547061	0.35335	0.52264
115	C	0.663959	0.538358	0.402727
116	C	0.350658	0.464712	0.400254
117	C	0.0379687	0.662742	0.152035
118	C	0.858357	0.543992	0.273218
119	C	0.158979	0.460192	0.266549
120	H	0.0788266	0.831557	0.022254
121	H	0.186682	0.0708117	0.904156
122	H	0.570346	0.183962	0.653623
123	H	0.442231	0.821233	0.654734
124	H	0.33441	0.0767829	0.773127
125	H	0.434141	0.674516	0.523729
126	H	0.576668	0.33132	0.52391
127	H	0.689826	0.564469	0.404995
128	H	0.325334	0.437993	0.401978
129	H	0.0628845	0.689528	0.15512
130	H	0.83548	0.572836	0.274579
131	H	0.179986	0.429964	0.267978
132	C	0.048948	0.890729	0.00163332

133	C	0.12322	0.0445989	0.921328
134	C	0.544308	0.12037	0.670024
135	C	0.468745	0.884589	0.671181
136	C	0.393249	0.0463194	0.752189
137	C	0.46385	0.615613	0.50279
138	C	0.547333	0.390561	0.503221
139	C	0.62548	0.539201	0.421283
140	C	0.388049	0.464982	0.419786
141	C	0.0386825	0.624755	0.170682
142	C	0.89517	0.544801	0.25321
143	C	0.121486	0.46117	0.247085
144	H	0.120908	0.0709466	0.938524
145	H	0.571501	0.117266	0.68672
146	H	0.441449	0.887929	0.687764
147	H	0.400116	0.0763444	0.738646
148	H	0.433495	0.609372	0.489247
149	H	0.577688	0.396701	0.489633
150	H	0.622421	0.566325	0.437843
151	H	0.390802	0.438095	0.43655
152	H	0.0644142	0.622731	0.188422
153	H	0.900031	0.574793	0.239259
154	H	0.114076	0.431145	0.233655
155	C	0.00951766	0.805344	0.0575292
156	C	0.20378	0.0108292	0.86017
157	C	0.508753	0.202652	0.61068
158	C	0.503654	0.802139	0.611724
159	C	0.307284	0.0092099	0.80897
160	C	0.50277	0.700088	0.559843
161	C	0.508141	0.305816	0.559843
162	C	0.708488	0.50334	0.362143
163	C	0.307896	0.498381	0.358241
164	C	0.00523471	0.704203	0.109727
165	C	0.812264	0.504656	0.311147
166	C	0.207519	0.497571	0.304274
167	C	0.00805602	0.772924	0.0742253
168	C	0.236888	0.0102895	0.843746
169	C	0.508379	0.235747	0.594438
170	C	0.50345	0.769348	0.595209
171	C	0.274075	0.00971594	0.825303
172	C	0.503144	0.732677	0.576539
173	C	0.508141	0.272822	0.576154
174	C	0.741834	0.503374	0.345924
175	C	0.275774	0.497908	0.340933
176	C	0.00652639	0.73659	0.0929631
177	C	0.779122	0.503846	0.327549
178	C	0.239675	0.497605	0.321537
179	H	0.00261736	0.0402469	0.907082
180	H	0.477005	0.00354227	0.652965
181	H	0.536898	0.000472303	0.653351
182	H	0.507053	0.0338034	0.764258
183	H	0.535572	0.505027	0.514995
184	H	0.475509	0.501822	0.514859
185	H	0.507869	0.472708	0.403725
186	H	0.505082	0.532117	0.403453
187	H	0.0310344	0.504183	0.149698
188	H	0.00961963	0.473855	0.261649
189	H	0.0130528	0.533466	0.262034
190	C	0.00428295	0.00907496	0.920784
191	C	0.506747	0.00229404	0.668277
192	C	0.505558	0.00374469	0.749399

193	C	0.505626	0.503306	0.499864
194	C	0.506339	0.502564	0.41872
195	C	0.00258336	0.505398	0.166077
196	C	0.00989157	0.503947	0.246813
197	C	0.00958564	0.960934	0.98006
198	C	0.0515313	0.965522	0.959008
199	H	0.0538428	0.935868	0.943877
200	H	0.0832115	0.96596	0.972506
201	C	0.0106394	0.918629	0.999637
202	C	0.962065	0.00472303	0.941677
203	C	0.960604	0.0446664	0.964271
204	H	0.956457	0.0767155	0.951772
205	H	0.930385	0.0411916	0.979039
206	C	0.919066	0.00570137	0.922145
207	C	0.913559	0.0398759	0.900277
208	C	0.598797	0.0384589	0.76884
209	H	0.939563	0.0658862	0.897827
210	H	0.576634	0.0679441	0.767048
211	C	0.875591	0.0410229	0.881403
212	C	0.635406	0.0398759	0.788803
213	H	0.872055	0.0675393	0.864434
214	H	0.641932	0.0700695	0.802232
215	C	0.841701	0.00769179	0.88408
216	C	0.664333	0.00219283	0.791638
217	C	0.803528	0.00752311	0.864503
218	C	0.701961	0.00364348	0.811646
219	C	0.77093	0.00651103	0.847648
220	C	0.734389	0.00512786	0.828638
221	C	0.966688	0.960057	0.959462
222	H	0.93596	0.954558	0.973481
223	H	0.968694	0.931078	0.943741
224	C	0.00492879	0.0853856	0.00592078
225	C	0.0441211	0.0930774	0.023479
226	C	0.0332098	0.415525	0.143256
227	H	0.0735919	0.0709129	0.0211651
228	H	0.0582277	0.442143	0.139581
229	C	0.0460587	0.128871	0.0438955
230	C	0.0352493	0.376594	0.12572
231	H	0.0766172	0.134944	0.0572342
232	H	0.0615589	0.372478	0.108548
233	C	0.00822598	0.157513	0.0470714
234	C	0.00309324	0.34215	0.130439
235	C	0.00958564	0.195263	0.0665578
236	C	0.0057106	0.301869	0.11347
237	C	0.00927972	0.228864	0.0821877
238	C	0.00792005	0.267121	0.0990881
239	C	0.589925	0.999933	0.751055
240	C	0.655461	0.963397	0.774284
241	H	0.677521	0.934046	0.776394
242	C	0.618614	0.962486	0.754253
243	H	0.612801	0.931955	0.741051
244	C	0.999592	0.420788	0.165691
245	C	0.968524	0.347649	0.152103
246	H	0.943336	0.321166	0.155347
247	C	0.96696	0.386883	0.16957
248	H	0.940039	0.390257	0.186403
249	C	0.972025	0.908407	0.0172406
250	H	0.941976	0.929998	0.0160156
251	C	0.971515	0.871095	0.0363187
252	H	0.9415	0.863235	0.0497936

253	C	0.0942588	0.978207	0.896307
254	H	0.0683912	0.952095	0.893857
255	C	0.131514	0.977937	0.876798
256	H	0.134641	0.951994	0.859421
257	C	0.410993	0.970481	0.768137
258	H	0.43251	0.94049	0.767048
259	C	0.373772	0.970549	0.787668
260	H	0.36626	0.940962	0.801438
261	C	0.973351	0.594461	0.144209
262	H	0.947993	0.567978	0.141169
263	C	0.972161	0.632211	0.125448
264	H	0.946259	0.635416	0.107913
265	C	0.968558	0.149518	0.0301257
266	H	0.939223	0.171581	0.0328706
267	C	0.967164	0.113656	0.00970918
268	C	0.846324	0.974057	0.906379
269	H	0.820014	0.948452	0.908897
270	C	0.88453	0.973349	0.925162
271	H	0.88691	0.946967	0.942312
272	H	0.93613	0.108259	0.996688
273	H	0.0793025	0.897814	0.988317
274	H	0.0390224	0.001788	0.0161517
275	C	0.008124	0.001788	0.00179211
276	H	0.978755	0.999089	0.0174221
277	H	0.00462286	0.980905	0.90436
278	H	0.503586	0.974125	0.764643
279	H	0.971243	0.507186	0.152262
280	C	0.00333118	0.0444302	0.139172
281	C	0.0100615	0.959011	0.13974
282	C	0.0496278	0.0044194	0.0984075
283	C	0.510079	0.0457122	0.847194
284	C	0.503178	0.960293	0.846967
285	C	0.463646	0.00627488	0.888072
286	C	0.549679	0.999292	0.888027
287	C	0.504742	0.545645	0.639399
288	C	0.51086	0.460124	0.639422
289	C	0.550665	0.505803	0.598294
290	C	0.46453	0.499865	0.598476
291	C	0.0110133	0.544295	0.346536
292	C	0.00499677	0.45891	0.346309
293	C	0.964411	0.504453	0.387165
294	C	0.0505796	0.498313	0.387619
295	C	0.0456168	0.0472978	0.118257
296	C	0.052891	0.962621	0.119459
297	C	0.467691	0.0489171	0.868019
298	C	0.5456	0.956886	0.867746
299	C	0.460315	0.964341	0.867134
300	C	0.55301	0.0414614	0.867315
301	C	0.547027	0.548445	0.618461
302	C	0.468371	0.45729	0.618665
303	C	0.553656	0.463734	0.619119
304	C	0.461742	0.541967	0.619255
305	C	0.96832	0.547095	0.367089
306	C	0.0471804	0.455873	0.367293
307	C	0.961759	0.462553	0.366204
308	C	0.0537068	0.540517	0.366907
309	H	0.0767191	0.051481	0.132072
310	H	0.0566641	0.931617	0.105757
311	H	0.436623	0.0529317	0.854158
312	H	0.576634	0.953073	0.853863



313	H	0.456338	0.933439	0.880972
314	H	0.556987	0.0721949	0.881312
315	H	0.578164	0.552055	0.632299
316	H	0.437336	0.453681	0.632594
317	H	0.557191	0.432866	0.605258
318	H	0.458105	0.572836	0.605372
319	H	0.937387	0.550671	0.353001
320	H	0.0784187	0.452399	0.353523
321	H	0.95785	0.431617	0.379996
322	H	0.0571399	0.571318	0.380904
323	H	0.0429994	0.0776938	0.103784
324	H	0.0838234	0.965252	0.133592
325	H	0.470308	0.0795156	0.882288
326	H	0.542982	0.926118	0.881857
327	H	0.42945	0.967006	0.852933
328	H	0.58384	0.0389312	0.853069
329	H	0.544716	0.579077	0.604238
330	H	0.470614	0.426624	0.604442
331	H	0.584622	0.466028	0.633252
332	H	0.430878	0.539741	0.633501
333	H	0.970393	0.577761	0.381312
334	H	0.044767	0.425073	0.381357
335	H	0.931099	0.464948	0.351776
336	H	0.0847412	0.538324	0.352842
337	C	0.00217546	0.0859591	0.159702
338	C	0.0114892	0.918089	0.160769
339	C	0.0912336	0.00543148	0.0776961
340	C	0.511472	0.0872748	0.826687
341	C	0.501785	0.918865	0.826324
342	C	0.422312	0.00748937	0.908988
343	C	0.591013	0.997571	0.908988
344	C	0.503586	0.586836	0.660224
345	C	0.512016	0.418933	0.660247
346	C	0.59227	0.506713	0.577537
347	C	0.42272	0.498853	0.5779
348	C	0.012203	0.585723	0.325938
349	C	0.00418097	0.417651	0.32553
350	C	0.922771	0.505566	0.407876
351	C	0.0917434	0.497166	0.408738
352	C	0.0402461	0.0954389	0.177986
353	C	0.475203	0.0950341	0.806497
354	C	0.538122	0.911275	0.806157
355	C	0.541589	0.596282	0.678599
356	C	0.474217	0.409858	0.678871
357	C	0.599205	0.470751	0.557189
358	C	0.415276	0.534917	0.557711
359	C	0.0398042	0.411544	0.304591
360	C	0.913457	0.467985	0.426387
361	C	0.100751	0.534883	0.427204
362	H	0.0697848	0.0731395	0.177419
363	H	0.446718	0.0713852	0.805635
364	H	0.566471	0.935058	0.805249
365	H	0.571331	0.574219	0.677782
366	H	0.444679	0.432225	0.678281
367	H	0.575003	0.442784	0.556463
368	H	0.43924	0.563086	0.556962
369	H	0.0674734	0.43607	0.303457
370	H	0.935722	0.438466	0.425593
371	H	0.0785207	0.564402	0.42616
372	C	0.0410619	0.133021	0.196906

373	C	0.474761	0.132548	0.787487
374	C	0.538767	0.873659	0.787215
375	C	0.542133	0.633459	0.697904
376	C	0.473538	0.372613	0.698108
377	C	0.636595	0.469941	0.537816
378	C	0.377647	0.535558	0.538542
379	C	0.040586	0.374469	0.285196
380	C	0.876236	0.46758	0.445874
381	C	0.137734	0.535456	0.446894
382	H	0.0708726	0.140206	0.210744
383	H	0.44631	0.138216	0.772129
384	H	0.567286	0.868059	0.771902
385	H	0.571943	0.64051	0.711787
386	H	0.443863	0.365832	0.712173
387	H	0.641626	0.441738	0.522345
388	H	0.372208	0.563862	0.523184
389	H	0.0684932	0.370049	0.269203
390	H	0.869336	0.438128	0.459938
391	H	0.144464	0.565043	0.460891
392	C	0.00322921	0.162135	0.198017
393	C	0.0110133	0.842791	0.199832
394	C	0.166865	0.00502665	0.0383603
395	C	0.511132	0.163451	0.788213
396	C	0.5026	0.842554	0.787986
397	C	0.346715	0.00667971	0.948301
398	C	0.666304	0.996998	0.948573
399	C	0.504096	0.662236	0.699424
400	C	0.511268	0.343398	0.699288
401	C	0.668208	0.505634	0.53836
402	C	0.346341	0.499595	0.539109
403	C	0.0112512	0.661595	0.287419
404	C	0.0052687	0.342487	0.286353
405	C	0.847208	0.50533	0.447371
406	C	0.166763	0.49774	0.448664
407	C	0.0491859	0.851933	0.181684
408	C	0.160407	0.0407867	0.0588676
409	C	0.547571	0.155927	0.808198
410	C	0.465991	0.850078	0.807858
411	C	0.355858	0.0447338	0.930289
412	C	0.656514	0.959078	0.930584
413	C	0.465753	0.652756	0.681457
414	C	0.549407	0.352507	0.681094
415	C	0.661511	0.541765	0.558527
416	C	0.353581	0.463363	0.559117
417	C	0.0477922	0.654477	0.307382
418	C	0.856351	0.543114	0.429087
419	C	0.157755	0.459719	0.430584
420	H	0.0786227	0.829634	0.182569
421	H	0.184847	0.068349	0.0596615
422	H	0.575784	0.179745	0.80897
423	H	0.43788	0.826159	0.808607
424	H	0.333424	0.0739491	0.931401
425	H	0.678303	0.929391	0.931832
426	H	0.436147	0.67482	0.682523
427	H	0.578776	0.330106	0.681911
428	H	0.685917	0.569395	0.559162
429	H	0.329413	0.435531	0.559775
430	H	0.0757334	0.678564	0.308085
431	H	0.834053	0.572431	0.430062
432	H	0.179986	0.430403	0.431854

433	C	0.0491859	0.889245	0.162357
434	C	0.122914	0.040753	0.0782859
435	C	0.547571	0.118177	0.82714
436	C	0.465787	0.887896	0.826755
437	C	0.393351	0.0449362	0.910871
438	C	0.619192	0.959551	0.911029
439	C	0.465719	0.615444	0.66213
440	C	0.549577	0.38992	0.661835
441	C	0.623883	0.542102	0.577832
442	C	0.391414	0.463194	0.578241
443	C	0.0480982	0.616794	0.326369
444	C	0.893776	0.543013	0.4096
445	C	0.120568	0.459652	0.410871
446	H	0.0792005	0.895284	0.148428
447	H	0.119039	0.0687875	0.0940747
448	H	0.576226	0.113454	0.842498
449	H	0.43703	0.892551	0.842022
450	H	0.399402	0.0748263	0.897055
451	H	0.612597	0.929694	0.897282
452	H	0.435535	0.609169	0.648428
453	H	0.579591	0.395857	0.647906
454	H	0.619838	0.570508	0.593326
455	H	0.395867	0.434687	0.593576
456	H	0.0768211	0.612307	0.341704
457	H	0.899793	0.572802	0.395626
458	H	0.114654	0.429728	0.397033
459	C	0.004045	0.200762	0.216823
460	C	0.0105714	0.804298	0.218819
461	C	0.205004	0.00492544	0.0188285
462	C	0.51086	0.201876	0.769135
463	C	0.503212	0.803961	0.769067
464	C	0.308304	0.00607246	0.967583
465	C	0.704579	0.996761	0.967991
466	C	0.5043	0.700493	0.718638
467	C	0.510826	0.305108	0.718457
468	C	0.706414	0.505195	0.518829
469	C	0.30793	0.499764	0.519781
470	C	0.0106394	0.700121	0.2685
471	C	0.00564261	0.304399	0.267048
472	C	0.809035	0.505128	0.466925
473	C	0.204868	0.498347	0.468264
474	C	0.00482681	0.234094	0.232771
475	C	0.0103674	0.770899	0.234699
476	C	0.237975	0.00512786	0.00233655
477	C	0.51069	0.234903	0.752915
478	C	0.503756	0.770764	0.753006
479	C	0.275094	0.00553269	0.983894
480	C	0.737721	0.996424	0.984325
481	C	0.50413	0.733554	0.734858
482	C	0.51069	0.272013	0.734676
483	C	0.739284	0.505027	0.502223
484	C	0.274822	0.499494	0.50338
485	C	0.0104014	0.733486	0.252575
486	C	0.00537068	0.271304	0.250851
487	C	0.776165	0.504993	0.483531
488	C	0.237772	0.498988	0.484846
489	H	0.0369149	0.00411578	0.174493
490	H	0.00472484	0.0305647	0.0632911
491	H	0.476529	0.00506039	0.811987
492	H	0.53666	0.00134944	0.811941

493	H	0.508685	0.0324877	0.923189
494	H	0.53802	0.504588	0.674448
495	H	0.477854	0.501282	0.674561
496	H	0.508957	0.473011	0.563268
497	H	0.505898	0.53269	0.563268
498	H	0.0385125	0.50027	0.311442
499	H	0.00540467	0.471358	0.422417
500	H	0.00873585	0.531071	0.422576
501	C	0.00679833	0.00202415	0.159521
502	C	0.00652639	0.000843398	0.0784674
503	C	0.506611	0.0031037	0.827004
504	C	0.506679	0.00269887	0.908126
505	C	0.507869	0.502901	0.659453
506	C	0.507495	0.502834	0.578331
507	C	0.00825997	0.501721	0.326324
508	C	0.00724022	0.501282	0.407445
509	C	0.963527	0.997841	0.0985663
510	C	0.967572	0.95557	0.119028
511	H	0.936572	0.951994	0.132979
512	H	0.969985	0.924701	0.105054
513	C	0.922057	0.996087	0.0777415
514	C	0.84646	0.995682	0.038383
515	C	0.854958	0.95864	0.0574611
516	H	0.832081	0.929762	0.0571889
517	C	0.89245	0.959078	0.0768795
518	H	0.898025	0.929897	0.0914886
519	C	0.808083	0.995817	0.0190554
520	C	0.774907	0.996087	0.00269951
521	C	0.960366	0.0402132	0.119096
522	H	0.956491	0.0708454	0.105032
523	H	0.929501	0.0379529	0.133342
524	C	0.973758	0.909048	0.179438
525	H	0.944186	0.931347	0.178849
526	C	0.973215	0.871871	0.198743
527	H	0.943642	0.865056	0.212876
528	C	0.0980659	0.969739	0.0570981
529	H	0.0738978	0.941772	0.0562361
530	C	0.135287	0.969334	0.037589
531	H	0.140216	0.941434	0.021823
532	C	0.913457	0.032825	0.0583231
533	H	0.936266	0.0619729	0.0584139
534	C	0.876202	0.0328925	0.0388594
535	H	0.869744	0.0616693	0.0240915
536	C	0.413236	0.969773	0.927476
537	H	0.435637	0.940422	0.926637
538	C	0.375914	0.969098	0.946872
539	H	0.369081	0.939545	0.960846
540	C	0.600734	0.0351866	0.927385
541	H	0.578946	0.0649754	0.926433
542	C	0.637921	0.0351866	0.94694
543	H	0.645263	0.064638	0.960891
544	C	0.975968	0.592942	0.305658
545	H	0.947755	0.568922	0.30475
546	C	0.975186	0.630356	0.286602
547	H	0.946769	0.63572	0.271176
548	C	0.964819	0.152588	0.180187
549	H	0.935416	0.174921	0.181026
550	C	0.964513	0.114803	0.161245
551	H	0.934294	0.108461	0.147589
552	C	0.969476	0.348357	0.307109

553	H	0.942146	0.323629	0.308153
554	C	0.969136	0.385635	0.32646
555	H	0.941092	0.389076	0.34243
556	H	0.976784	0.000371095	0.174629
557	H	0.00822598	0.970785	0.0636087
558	H	0.504742	0.972843	0.923121
559	H	0.978381	0.50334	0.311079
560	C	0.00336517	0.045611	0.29833
561	C	0.0101635	0.960225	0.298308
562	C	0.0497298	0.00630862	0.257293
563	C	0.510079	0.0456447	0.00587541
564	C	0.46368	0.00637609	0.0469126
565	C	0.503654	0.545678	0.798285
566	C	0.509807	0.460192	0.798262
567	C	0.549815	0.506039	0.757271
568	C	0.46368	0.499933	0.757271
569	C	0.00999354	0.54551	0.505354
570	C	0.00353513	0.460124	0.505512
571	C	0.963663	0.506207	0.546391
572	C	0.0497638	0.499764	0.546436
573	C	0.0457188	0.0488496	0.277483
574	C	0.053027	0.964274	0.278095
575	C	0.467691	0.0488833	0.0267002
576	C	0.552976	0.0416976	0.0260877
577	C	0.546042	0.548613	0.77746
578	C	0.467419	0.457324	0.777438
579	C	0.552738	0.463936	0.778073
580	C	0.460757	0.541967	0.778118
581	C	0.967572	0.548681	0.526133
582	C	0.0459227	0.457122	0.526337
583	C	0.960604	0.464071	0.525634
584	C	0.052891	0.541765	0.525543
585	H	0.0768211	0.0527292	0.291343
586	H	0.056902	0.933439	0.264212
587	H	0.436623	0.0526618	0.012817
588	H	0.556783	0.072566	0.0399483
589	H	0.577178	0.552223	0.791343
590	H	0.436317	0.453681	0.791321
591	H	0.556409	0.433102	0.764189
592	H	0.457086	0.57287	0.764235
593	H	0.936538	0.552358	0.512205
594	H	0.0769911	0.453377	0.512454
595	H	0.956831	0.433237	0.539563
596	H	0.0566641	0.572667	0.539358
597	H	0.0431354	0.0795156	0.263305
598	H	0.0839254	0.96677	0.292296
599	H	0.470206	0.079583	0.0408784
600	H	0.58384	0.0391337	0.0118869
601	H	0.543696	0.579279	0.763259
602	H	0.469764	0.426658	0.763214
603	H	0.583602	0.466264	0.792296
604	H	0.429858	0.53964	0.792319
605	H	0.969985	0.579414	0.540289
606	H	0.0434753	0.426489	0.540583
607	H	0.929739	0.466433	0.511411
608	H	0.0837894	0.539235	0.511342
609	C	0.00200551	0.08687	0.319087
610	C	0.0115232	0.918899	0.319019
611	C	0.0911316	0.00772552	0.2364
612	C	0.511438	0.0869712	0.985187

613	C	0.501989	0.918764	0.985368
614	C	0.422244	0.00775926	0.0677601
615	C	0.502532	0.587005	0.819042
616	C	0.510928	0.418831	0.818951
617	C	0.591353	0.507118	0.736468
618	C	0.422108	0.498853	0.736468
619	C	0.0112172	0.586634	0.484483
620	C	0.00234542	0.418865	0.484756
621	C	0.922091	0.507489	0.567125
622	C	0.0913015	0.498583	0.567238
623	C	0.0393623	0.0955401	0.338188
624	C	0.474285	0.0954726	0.965859
625	C	0.539209	0.910094	0.966131
626	C	0.539855	0.595506	0.838211
627	C	0.473809	0.410532	0.838324
628	C	0.599646	0.470144	0.717186
629	C	0.413814	0.535861	0.717232
630	C	0.0397022	0.410397	0.465632
631	C	0.913831	0.470717	0.586589
632	C	0.0997655	0.535659	0.58643
633	H	0.0685951	0.0727684	0.338097
634	H	0.445222	0.0724985	0.965746
635	H	0.56834	0.932967	0.966041
636	H	0.568986	0.5726	0.838143
637	H	0.444849	0.433641	0.838483
638	H	0.576566	0.441266	0.717345
639	H	0.436963	0.564739	0.717368
640	H	0.0688671	0.43327	0.465791
641	H	0.93698	0.441873	0.586634
642	H	0.0767871	0.564638	0.586203
643	C	0.0399402	0.132886	0.357334
644	C	0.473741	0.132886	0.946758
645	C	0.539753	0.872613	0.947099
646	C	0.540501	0.632818	0.857402
647	C	0.473096	0.373119	0.857425
648	C	0.636969	0.46957	0.697768
649	C	0.376423	0.536536	0.697859
650	C	0.0403821	0.373153	0.446418
651	C	0.876406	0.470279	0.605939
652	C	0.137088	0.536165	0.605826
653	H	0.069207	0.139363	0.37183
654	H	0.444577	0.139161	0.932104
655	H	0.568952	0.86617	0.932535
656	H	0.569802	0.639127	0.871921
657	H	0.443931	0.367013	0.872102
658	H	0.643088	0.440591	0.683113
659	H	0.370271	0.565549	0.683272
660	H	0.0696829	0.366811	0.431922
661	H	0.870288	0.441434	0.620707
662	H	0.143377	0.565212	0.620389
663	C	0.00258336	0.162607	0.357833
664	C	0.0108093	0.842959	0.357584
665	C	0.166525	0.00759058	0.196906
666	C	0.51086	0.162877	0.946486
667	C	0.502532	0.842689	0.946804
668	C	0.346613	0.00738817	0.10705
669	C	0.50328	0.662708	0.857924
670	C	0.510045	0.342959	0.857674
671	C	0.667052	0.506511	0.697133
672	C	0.346307	0.499629	0.697246

673	C	0.0103335	0.662	0.44542
674	C	0.00309324	0.343364	0.445851
675	C	0.846188	0.507118	0.606302
676	C	0.167035	0.499089	0.606551
677	C	0.0482681	0.85136	0.338642
678	C	0.158027	0.04497	0.215689
679	C	0.548285	0.154477	0.965496
680	C	0.46504	0.851326	0.9657
681	C	0.355009	0.0446664	0.0881539
682	C	0.465685	0.654274	0.839073
683	C	0.547435	0.351123	0.838596
684	C	0.658928	0.543688	0.716188
685	C	0.354465	0.462384	0.716233
686	C	0.0478942	0.653903	0.464385
687	C	0.854312	0.544093	0.587088
688	C	0.158673	0.461811	0.587655
689	H	0.077093	0.82825	0.33871
690	H	0.180836	0.0739154	0.215122
691	H	0.577144	0.177518	0.965428
692	H	0.436113	0.828352	0.96561
693	H	0.331996	0.0734768	0.0885849
694	H	0.436759	0.677248	0.839322
695	H	0.576158	0.327913	0.838619
696	H	0.682178	0.57233	0.715893
697	H	0.331249	0.433743	0.715916
698	H	0.0766511	0.677012	0.464135
699	H	0.831028	0.572701	0.587201
700	H	0.181719	0.433034	0.58804
701	C	0.0484041	0.888975	0.319586
702	C	0.120602	0.0448013	0.235198
703	C	0.548387	0.116827	0.984552
704	C	0.464972	0.889009	0.984733
705	C	0.392501	0.0446664	0.0687582
706	C	0.465515	0.61676	0.819904
707	C	0.547673	0.388705	0.819495
708	C	0.621401	0.543789	0.735584
709	C	0.39206	0.462216	0.735584
710	C	0.0481322	0.616524	0.483644
711	C	0.891907	0.544093	0.56776
712	C	0.121146	0.461743	0.568259
713	H	0.0778748	0.894373	0.305022
714	H	0.115062	0.074219	0.24958
715	H	0.577824	0.11143	0.999115
716	H	0.435467	0.894542	0.999229
717	H	0.397974	0.0739829	0.0542852
718	H	0.435909	0.611329	0.805476
719	H	0.57711	0.393934	0.804886
720	H	0.6162	0.573072	0.750125
721	H	0.397294	0.432899	0.750102
722	H	0.0776369	0.611295	0.498185
723	H	0.897107	0.573173	0.553038
724	H	0.115776	0.432427	0.553786
725	C	0.00309324	0.2011	0.376798
726	C	0.0102655	0.804365	0.376458
727	C	0.204766	0.00735443	0.177465
728	C	0.510384	0.201268	0.927385
729	C	0.502974	0.804264	0.927748
730	C	0.308236	0.00711828	0.126355
731	C	0.503586	0.700999	0.877115
732	C	0.509705	0.304568	0.876775

733	C	0.705225	0.506275	0.677578
734	C	0.308032	0.499933	0.677782
735	C	0.00985758	0.700324	0.426319
736	C	0.00353513	0.304973	0.426796
737	C	0.807913	0.506815	0.62572
738	C	0.205242	0.49946	0.626038
739	C	0.00346715	0.234397	0.392791
740	C	0.00985758	0.770933	0.392337
741	C	0.237873	0.00715201	0.161041
742	C	0.509977	0.23433	0.911166
743	C	0.503348	0.771136	0.911574
744	C	0.275026	0.00708454	0.142643
745	C	0.503552	0.734026	0.893358
746	C	0.509739	0.271439	0.89295
747	C	0.73806	0.506342	0.660927
748	C	0.275094	0.499933	0.661245
749	C	0.00972161	0.733587	0.410281
750	C	0.00363711	0.271709	0.41078
751	C	0.774941	0.506511	0.64228
752	C	0.238145	0.499764	0.642621
753	H	0.0369149	0.00475676	0.333401
754	H	0.00479282	0.0327913	0.222222
755	H	0.508515	0.0329937	0.0820063
756	H	0.53683	0.504554	0.833379
757	H	0.476665	0.501282	0.833379
758	H	0.508379	0.473146	0.722154
759	H	0.505116	0.532859	0.722177
760	H	0.0369149	0.500945	0.470351
761	H	0.00496278	0.473281	0.581575
762	H	0.00842993	0.532994	0.581462
763	C	0.00679833	0.00290129	0.318384
764	C	0.00666236	0.00293502	0.237262
765	C	0.506679	0.0031037	0.0669888
766	C	0.506747	0.502935	0.818339
767	C	0.506747	0.503002	0.737217
768	C	0.00679833	0.502733	0.485345
769	C	0.00669635	0.50307	0.56649
770	C	0.963697	0.999561	0.257339
771	C	0.503348	0.960192	0.00598884
772	C	0.549713	0.999696	0.0469353
773	C	0.967742	0.956987	0.277528
774	C	0.545702	0.957054	0.0268137
775	C	0.460451	0.964274	0.0261558
776	H	0.936708	0.953107	0.291411
777	H	0.576804	0.953208	0.0129531
778	H	0.45661	0.933473	0.0400844
779	H	0.970291	0.926354	0.263327
780	H	0.543152	0.926456	0.0410598
781	H	0.429552	0.966736	0.011955
782	C	0.922227	0.998145	0.236514
783	C	0.591081	0.998347	0.0678508
784	C	0.846596	0.998347	0.197178
785	C	0.666508	0.998684	0.1073
786	C	0.855162	0.961001	0.215961
787	C	0.657942	0.961204	0.088653
788	H	0.832285	0.93209	0.215462
789	H	0.680751	0.932258	0.0893108
790	C	0.892654	0.961102	0.235402
791	C	0.620517	0.961237	0.0691666
792	H	0.898229	0.931752	0.249807



793	H	0.614909	0.931752	0.054875
794	C	0.808253	0.998617	0.177828
795	C	0.704783	0.99892	0.126718
796	C	0.775077	0.998819	0.161494
797	C	0.737924	0.998954	0.143097
798	C	0.960468	0.0415964	0.278163
799	H	0.956525	0.072431	0.264303
800	H	0.929569	0.0390662	0.292387
801	C	0.974404	0.910499	0.338392
802	H	0.945409	0.933574	0.338574
803	C	0.973792	0.873052	0.357447
804	H	0.944662	0.866811	0.372147
805	C	0.0996975	0.97065	0.217254
806	H	0.0769571	0.941502	0.217594
807	C	0.13685	0.970312	0.197722
808	H	0.143241	0.9413	0.183159
809	C	0.913627	0.0351866	0.217345
810	H	0.936402	0.0643007	0.217617
811	C	0.876338	0.0355577	0.197904
812	H	0.869914	0.0645705	0.18334
813	C	0.413814	0.970751	0.086997
814	H	0.436793	0.941772	0.0868155
815	C	0.376525	0.970312	0.106415
816	H	0.370203	0.941333	0.121024
817	C	0.59968	0.0355577	0.0868835
818	H	0.57694	0.0647055	0.0864752
819	C	0.636901	0.0359962	0.10637
820	H	0.64336	0.0651441	0.12082
821	C	0.973996	0.59473	0.46511
822	H	0.945036	0.571655	0.465133
823	C	0.973317	0.631907	0.445806
824	H	0.944152	0.637946	0.431128
825	C	0.964887	0.153937	0.339141
826	H	0.935858	0.176742	0.339504
827	C	0.964819	0.116389	0.320017
828	H	0.935144	0.110721	0.305703
829	C	0.965397	0.351832	0.464589
830	H	0.936436	0.328925	0.46418
831	C	0.965193	0.389279	0.48378
832	H	0.935518	0.394811	0.498117
833	H	0.97675	0.00104581	0.333447
834	H	0.00849791	0.973079	0.222222
835	H	0.476665	0.00465556	0.970804
836	H	0.53683	0.000978342	0.97085
837	C	0.506747	0.00286755	0.985867
838	H	0.504844	0.973281	0.0820743
839	H	0.97675	0.504386	0.470283
840	C	0.00343316	0.0456784	0.457307
841	C	0.0100955	0.960259	0.457284
842	C	0.0497298	0.00637609	0.416292
843	C	0.509943	0.0457122	0.164829
844	C	0.46368	0.00613994	0.205821
845	C	0.503688	0.545712	0.95708
846	C	0.509773	0.460192	0.957035
847	C	0.549747	0.506072	0.91602
848	C	0.463612	0.499933	0.916066
849	C	0.0101295	0.545611	0.664285
850	C	0.00336517	0.460225	0.66433
851	C	0.963663	0.506275	0.705254
852	C	0.0497298	0.499663	0.705299

853	C	0.0457867	0.0489171	0.436482
854	C	0.052993	0.964307	0.437117
855	C	0.467521	0.0487147	0.185631
856	C	0.552806	0.0420012	0.185042
857	C	0.54611	0.548613	0.936232
858	C	0.467317	0.457358	0.936232
859	C	0.55267	0.464004	0.936845
860	C	0.460757	0.541967	0.936913
861	C	0.967742	0.548816	0.685087
862	C	0.0457188	0.457054	0.685178
863	C	0.960468	0.464172	0.684474
864	C	0.052993	0.541698	0.684474
865	H	0.0768551	0.052763	0.450343
866	H	0.056936	0.933507	0.423211
867	H	0.436453	0.0523919	0.171725
868	H	0.556409	0.0728696	0.198947
869	H	0.577212	0.552189	0.950093
870	H	0.436215	0.453782	0.950138
871	H	0.556375	0.433169	0.922939
872	H	0.457052	0.572836	0.92303
873	H	0.936708	0.552695	0.671158
874	H	0.0767871	0.453208	0.671272
875	H	0.956593	0.433338	0.698358
876	H	0.056868	0.572566	0.698335
877	H	0.0432374	0.079583	0.422327
878	H	0.0838574	0.966838	0.451341
879	H	0.4699	0.0793806	0.199855
880	H	0.583738	0.0396734	0.170886
881	H	0.543764	0.579313	0.922054
882	H	0.469594	0.426692	0.922054
883	H	0.583534	0.466298	0.951068
884	H	0.429892	0.53964	0.951159
885	H	0.970257	0.579482	0.69931
886	H	0.0431694	0.426456	0.699401
887	H	0.929603	0.466669	0.670251
888	H	0.0838914	0.539167	0.670274
889	C	0.00210748	0.0870049	0.477996
890	C	0.0114212	0.918831	0.477905
891	C	0.0911316	0.00775926	0.395377
892	C	0.5112	0.0869037	0.143982
893	C	0.422142	0.00732069	0.2266
894	C	0.502668	0.587207	0.977678
895	C	0.510792	0.418663	0.977565
896	C	0.591115	0.507219	0.895059
897	C	0.42221	0.498819	0.89515
898	C	0.0114552	0.586735	0.643415
899	C	0.0020395	0.419068	0.643505
900	C	0.921921	0.507523	0.725875
901	C	0.0913695	0.498381	0.726011
902	C	0.0383086	0.0942919	0.498321
903	C	0.4733	0.0962148	0.125493
904	C	0.539107	0.59473	0.997777
905	C	0.474659	0.411342	0.997913
906	C	0.600224	0.469536	0.876594
907	C	0.412998	0.536536	0.87673
908	C	0.0400082	0.40979	0.625062
909	C	0.914715	0.471763	0.746336
910	C	0.0988137	0.534478	0.7462
911	H	0.0666236	0.0704743	0.499183
912	H	0.443557	0.0740841	0.126265

913	H	0.56749	0.570947	0.998525
914	H	0.446514	0.435362	0.998934
915	H	0.577994	0.440018	0.877546
916	H	0.435229	0.566055	0.877683
917	H	0.0696149	0.431988	0.625743
918	H	0.938849	0.443728	0.747266
919	H	0.0749516	0.562715	0.746858
920	C	0.0387845	0.131604	0.517513
921	C	0.472756	0.133324	0.106143
922	C	0.473877	0.37376	0.0168776
923	C	0.637309	0.468997	0.856971
924	C	0.375812	0.53711	0.857198
925	C	0.04062	0.372478	0.605894
926	C	0.877154	0.471257	0.765528
927	C	0.136306	0.534984	0.76546
928	H	0.0670995	0.137002	0.533007
929	H	0.443047	0.14024	0.0921691
930	H	0.445494	0.368464	0.0323261
931	H	0.644108	0.439444	0.842974
932	H	0.368945	0.566662	0.843247
933	H	0.0703627	0.365461	0.591942
934	H	0.871852	0.443222	0.78109
935	H	0.141779	0.563255	0.780818
936	C	0.00261736	0.162708	0.516742
937	C	0.0108773	0.842993	0.516537
938	C	0.166627	0.00752311	0.35595
939	C	0.510724	0.162236	0.104759
940	C	0.346511	0.00688213	0.265914
941	C	0.509773	0.342352	0.0159476
942	C	0.666304	0.506747	0.855315
943	C	0.346885	0.499325	0.855519
944	C	0.0108093	0.662135	0.604442
945	C	0.00271933	0.343533	0.604669
946	C	0.845644	0.507017	0.764666
947	C	0.167443	0.498887	0.764983
948	C	0.0470104	0.849875	0.496189
949	C	0.157313	0.045476	0.37403
950	C	0.548931	0.152959	0.122839
951	C	0.353581	0.0431482	0.245928
952	C	0.467011	0.655927	0.996393
953	C	0.54611	0.34947	0.995803
954	C	0.657228	0.5447	0.87344
955	C	0.356062	0.461305	0.873577
956	C	0.0490839	0.652891	0.622522
957	C	0.852578	0.542946	0.744385
958	C	0.160203	0.462621	0.744998
959	H	0.0748156	0.825619	0.495236
960	H	0.17951	0.07486	0.372919
961	H	0.57847	0.175089	0.121886
962	H	0.329515	0.0711153	0.245497
963	H	0.4389	0.67988	0.995735
964	H	0.573949	0.325214	0.994851
965	H	0.679527	0.574017	0.872261
966	H	0.333832	0.431955	0.872374
967	H	0.0784867	0.675191	0.621569
968	H	0.82824	0.570609	0.743501
969	H	0.184235	0.434654	0.744431
970	C	0.0470444	0.887457	0.477134
971	C	0.119855	0.0453748	0.393494
972	C	0.548965	0.115613	0.14219

973	C	0.391074	0.043182	0.226532
974	C	0.466705	0.618244	0.977406
975	C	0.546416	0.387255	0.976884
976	C	0.619939	0.544734	0.89304
977	C	0.393419	0.461271	0.893131
978	C	0.0491859	0.615478	0.641759
979	C	0.890411	0.54298	0.725217
980	C	0.122506	0.462587	0.725761
981	H	0.0753935	0.89164	0.461436
982	H	0.113634	0.0752311	0.407309
983	H	0.579048	0.109507	0.156027
984	H	0.395459	0.0716888	0.211175
985	H	0.43788	0.61369	0.962161
986	H	0.575003	0.391573	0.96139
987	H	0.613923	0.574658	0.906878
988	H	0.399504	0.431314	0.906901
989	H	0.0793025	0.609338	0.655574
990	H	0.89466	0.571183	0.709609
991	H	0.117985	0.43408	0.710426
992	C	0.00302526	0.2011	0.535774
993	C	0.0104354	0.8045	0.535502
994	C	0.204936	0.00721949	0.336577
995	C	0.510248	0.200493	0.0854998
996	C	0.30827	0.00664598	0.285332
997	C	0.509365	0.303859	0.0349576
998	C	0.704375	0.506477	0.835693
999	C	0.308712	0.499595	0.835987
1000	C	0.0103674	0.70056	0.585432
1001	C	0.00316122	0.30504	0.585704
1002	C	0.807233	0.506713	0.783993
1003	C	0.205785	0.499224	0.784356
1004	C	0.0032632	0.234363	0.55179
1005	C	0.0101975	0.771169	0.551472
1006	C	0.238043	0.00691586	0.320153
1007	C	0.509773	0.233486	0.0692346
1008	C	0.275128	0.00671345	0.30171
1009	C	0.509467	0.27063	0.0510412
1010	C	0.737245	0.50641	0.819064
1011	C	0.275774	0.499629	0.819427
1012	C	0.0101635	0.733824	0.569416
1013	C	0.00333118	0.271709	0.569756
1014	C	0.774194	0.506477	0.80044
1015	C	0.238791	0.499494	0.800848
1016	H	0.0369149	0.00468929	0.492355
1017	H	0.00475883	0.0328588	0.381244
1018	H	0.476665	0.00468929	0.129735
1019	H	0.53683	0.00114702	0.129758
1020	H	0.508311	0.03296	0.240915
1021	H	0.536864	0.504487	0.992128
1022	H	0.476699	0.501383	0.992151
1023	H	0.508311	0.47318	0.880926
1024	H	0.504946	0.532893	0.880949
1025	H	0.0368809	0.501012	0.629214
1026	H	0.0048948	0.473146	0.740393
1027	H	0.00839593	0.532859	0.74037
1028	C	0.00679833	0.00293502	0.47736
1029	C	0.00666236	0.0030025	0.396262
1030	C	0.506747	0.00293502	0.144776
1031	C	0.506679	0.00306997	0.225897
1032	C	0.506747	0.502935	0.977111

1033	C	0.506645	0.503036	0.895989
1034	C	0.00679833	0.502901	0.644231
1035	C	0.00666236	0.503002	0.725353
1036	C	0.963663	0.999561	0.416338
1037	C	0.503518	0.960225	0.164875
1038	C	0.549747	0.999933	0.205844
1039	C	0.967674	0.95702	0.436527
1040	C	0.545906	0.95729	0.185722
1041	C	0.460655	0.964004	0.185064
1042	H	0.93664	0.953141	0.450411
1043	H	0.577008	0.953579	0.171839
1044	H	0.457018	0.933169	0.198993
1045	H	0.970189	0.926354	0.422327
1046	H	0.543492	0.926658	0.199968
1047	H	0.429722	0.966298	0.170909
1048	C	0.922227	0.998178	0.39549
1049	C	0.502294	0.918966	0.144095
1050	C	0.591217	0.998718	0.226714
1051	C	0.540229	0.909588	0.125652
1052	H	0.569938	0.931719	0.126378
1053	C	0.540773	0.872377	0.10637
1054	C	0.539855	0.632211	0.0168096
1055	H	0.570516	0.865394	0.0924187
1056	H	0.568476	0.63771	0.0320539
1057	C	0.846562	0.998414	0.3562
1058	C	0.502804	0.843465	0.105009
1059	C	0.666644	0.999123	0.266163
1060	C	0.503654	0.663316	0.0162425
1061	C	0.856011	0.960428	0.374212
1062	C	0.464564	0.852844	0.123043
1063	C	0.659302	0.962553	0.246472
1064	H	0.833849	0.931044	0.373123
1065	H	0.435025	0.830747	0.122091
1066	H	0.683062	0.93435	0.246314
1067	C	0.893538	0.960529	0.39363
1068	C	0.46453	0.890257	0.142326
1069	C	0.621877	0.962553	0.226986
1070	H	0.899793	0.930673	0.407423
1071	H	0.434413	0.896431	0.156141
1072	H	0.617254	0.93381	0.211878
1073	C	0.808151	0.998718	0.336895
1074	C	0.50328	0.805141	0.08584
1075	C	0.704817	0.999292	0.285672
1076	C	0.504062	0.701741	0.0353205
1077	C	0.775009	0.999022	0.320539
1078	C	0.503722	0.772046	0.0696429
1079	C	0.73789	0.999224	0.302119
1080	C	0.503994	0.734903	0.0514496
1081	C	0.960468	0.0416301	0.437185
1082	H	0.956525	0.072431	0.423302
1083	H	0.929637	0.0390999	0.451431
1084	C	0.97556	0.911814	0.498525
1085	H	0.947449	0.935868	0.499637
1086	C	0.97505	0.874435	0.517649
1087	H	0.946939	0.869273	0.53337
1088	C	0.100479	0.97011	0.376911
1089	H	0.0783167	0.940557	0.377773
1090	C	0.1377	0.969705	0.357447
1091	H	0.144702	0.94022	0.343428
1092	C	0.912777	0.0358275	0.377047

1093	H	0.93494	0.0654139	0.377887
1094	C	0.875455	0.0362324	0.357652
1095	H	0.86835	0.0657176	0.343678
1096	C	0.414902	0.971257	0.246813
1097	H	0.438764	0.942986	0.24738
1098	C	0.377647	0.970751	0.266276
1099	H	0.37231	0.942514	0.281657
1100	C	0.598695	0.0350854	0.246654
1101	H	0.575105	0.0635585	0.246972
1102	C	0.635916	0.0355239	0.266186
1103	H	0.641456	0.063997	0.281362
1104	C	0.973588	0.595877	0.624881
1105	H	0.944016	0.573578	0.625539
1106	C	0.972977	0.633088	0.605644
1107	H	0.943302	0.63997	0.591602
1108	C	0.966178	0.155523	0.496711
1109	H	0.938101	0.179509	0.496007
1110	C	0.966144	0.118008	0.477565
1111	H	0.937523	0.113555	0.462139
1112	C	0.964377	0.352945	0.62259
1113	H	0.934872	0.330747	0.621614
1114	C	0.964241	0.390426	0.641781
1115	H	0.93409	0.396667	0.655528
1116	H	0.97675	0.00118076	0.492401
1117	H	0.00856589	0.973146	0.381199
1118	H	0.505048	0.973247	0.24096
1119	H	0.97675	0.504757	0.629168
1120	C	0.004045	0.0457796	0.616079
1121	C	0.00951766	0.960259	0.616102
1122	C	0.0498317	0.00583631	0.57511
1123	C	0.509399	0.0457796	0.323556
1124	C	0.504062	0.960158	0.323601
1125	C	0.463646	0.00560016	0.364548
1126	C	0.549815	0.000472303	0.364571
1127	C	0.504232	0.54578	0.115784
1128	C	0.509263	0.460158	0.115762
1129	C	0.549815	0.505566	0.0747697
1130	C	0.463612	0.500405	0.0747924
1131	C	0.00965363	0.545712	0.823125
1132	C	0.00387505	0.460259	0.823148
1133	C	0.0497977	0.500236	0.864117
1134	C	0.0465006	0.048411	0.595322
1135	C	0.0524831	0.963801	0.595958
1136	C	0.467011	0.0482086	0.344381
1137	C	0.54645	0.957796	0.344449
1138	C	0.461199	0.963329	0.343859
1139	C	0.552262	0.0426759	0.343814
1140	C	0.546722	0.548141	0.0949821
1141	C	0.466739	0.45783	0.0950048
1142	C	0.552228	0.463531	0.0955946
1143	C	0.461233	0.54244	0.0956399
1144	C	0.0462286	0.457594	0.843995
1145	C	0.0525171	0.542372	0.843315
1146	H	0.0776029	0.0518521	0.609206
1147	H	0.0560182	0.932933	0.582029
1148	H	0.435909	0.0515147	0.330452
1149	H	0.577586	0.954457	0.33052
1150	H	0.458003	0.932528	0.357833
1151	H	0.555491	0.0735106	0.357765
1152	H	0.577824	0.551346	0.108865

1153	H	0.435637	0.454625	0.108911
1154	H	0.555627	0.432629	0.0816887
1155	H	0.457867	0.573342	0.081734
1156	H	0.077331	0.454085	0.830089
1157	H	0.0560182	0.573241	0.857198
1158	H	0.0444271	0.0791445	0.581144
1159	H	0.0833475	0.965758	0.610204
1160	H	0.468847	0.0788746	0.358627
1161	H	0.544614	0.927198	0.358718
1162	H	0.430198	0.965151	0.329726
1163	H	0.583297	0.0407867	0.329681
1164	H	0.544818	0.578875	0.0808266
1165	H	0.468575	0.427097	0.0808266
1166	H	0.583093	0.465353	0.109863
1167	H	0.430402	0.540584	0.109909
1168	H	0.0441551	0.426995	0.858264
1169	H	0.0834835	0.540213	0.829137
1170	C	0.00339916	0.0876122	0.636337
1171	C	0.0101635	0.918393	0.636314
1172	C	0.0910976	0.00671345	0.554081
1173	C	0.51018	0.0868362	0.302595
1174	C	0.503314	0.919068	0.302686
1175	C	0.421598	0.00613994	0.384896
1176	C	0.50379	0.587781	0.135928
1177	C	0.509705	0.418089	0.135815
1178	C	0.591047	0.506241	0.0536727
1179	C	0.422346	0.49973	0.0537408
1180	C	0.0105034	0.586701	0.802141
1181	C	0.00299126	0.419236	0.80221
1182	C	0.0919134	0.499528	0.884397
1183	C	0.0377647	0.0930774	0.658251
1184	C	0.471906	0.0959787	0.284424
1185	C	0.541623	0.909858	0.284561
1186	C	0.538631	0.593786	0.157434
1187	C	0.475271	0.412388	0.157683
1188	C	0.600122	0.468086	0.0356154
1189	C	0.413202	0.537885	0.0357289
1190	C	0.0415038	0.40979	0.784334
1191	C	0.0978619	0.534208	0.905857
1192	H	0.0641422	0.0674381	0.660632
1193	H	0.442129	0.0739829	0.285649
1194	H	0.571365	0.931853	0.28574
1195	H	0.565213	0.568349	0.159702
1196	H	0.449064	0.438128	0.160292
1197	H	0.578096	0.438499	0.0371127
1198	H	0.435229	0.567506	0.0372034
1199	H	0.0713145	0.431685	0.785604
1200	H	0.0724022	0.560758	0.907899
1201	C	0.0387505	0.130727	0.677124
1202	C	0.47109	0.132717	0.264779
1203	C	0.542439	0.873018	0.264961
1204	C	0.539889	0.631772	0.176013
1205	C	0.474013	0.374334	0.176194
1206	C	0.636867	0.467276	0.0157434
1207	C	0.376389	0.538729	0.0159022
1208	C	0.0424556	0.372748	0.764915
1209	C	0.135797	0.535187	0.924754
1210	H	0.0655019	0.134539	0.694025
1211	H	0.441109	0.139464	0.250987
1212	H	0.572453	0.866203	0.251214

1213	H	0.567082	0.635922	0.19255
1214	H	0.447126	0.370387	0.193004
1215	H	0.643598	0.43742	0.00204165
1216	H	0.369557	0.568619	0.00222313
1217	H	0.0725721	0.365596	0.751395
1218	H	0.139978	0.562175	0.941291
1219	C	0.00492879	0.164091	0.674334
1220	C	0.0085319	0.841745	0.674175
1221	C	0.165981	0.00580258	0.514133
1222	C	0.509127	0.16146	0.26276
1223	C	0.504402	0.844275	0.262964
1224	C	0.344947	0.00462182	0.423279
1225	C	0.50583	0.664935	0.173472
1226	C	0.507597	0.340733	0.173223
1227	C	0.665556	0.505162	0.0133615
1228	C	0.347734	0.500843	0.0135429
1229	C	0.00921173	0.661561	0.762692
1230	C	0.00424895	0.344241	0.762896
1231	C	0.168972	0.50108	0.922463
1232	C	0.0425235	0.846502	0.651989
1233	C	0.156803	0.0441266	0.531872
1234	C	0.547673	0.152385	0.280591
1235	C	0.465821	0.853451	0.280772
1236	C	0.349842	0.0387963	0.401411
1237	C	0.470954	0.659335	0.151989
1238	C	0.541963	0.346029	0.151354
1239	C	0.656548	0.543553	0.0311011
1240	C	0.35681	0.462418	0.0312146
1241	C	0.0480642	0.652149	0.78016
1242	C	0.163432	0.466433	0.901025
1243	H	0.0683232	0.820424	0.649403
1244	H	0.178864	0.073578	0.530239
1245	H	0.577246	0.174415	0.279139
1246	H	0.436215	0.831455	0.27932
1247	H	0.323872	0.0648404	0.399301
1248	H	0.444577	0.684907	0.149789
1249	H	0.567932	0.320086	0.148791
1250	H	0.678575	0.573005	0.0293317
1251	H	0.334818	0.432933	0.0294678
1252	H	0.0777049	0.67401	0.778526
1253	H	0.189027	0.440018	0.899074
1254	C	0.0430674	0.884488	0.633274
1255	C	0.119651	0.0443965	0.551586
1256	C	0.547979	0.115444	0.300259
1257	C	0.465515	0.890459	0.300372
1258	C	0.387845	0.0393361	0.382446
1259	C	0.470172	0.621112	0.133479
1260	C	0.542778	0.38432	0.132911
1261	C	0.6196	0.54389	0.0509959
1262	C	0.393827	0.462081	0.0510639
1263	C	0.0485061	0.615006	0.799623
1264	C	0.125225	0.465859	0.88222
1265	H	0.0696489	0.887052	0.616124
1266	H	0.113498	0.0745564	0.565083
1267	H	0.578334	0.109439	0.313847
1268	H	0.435127	0.896498	0.313938
1269	H	0.39053	0.0661561	0.365614
1270	H	0.442775	0.617974	0.116964
1271	H	0.569768	0.387221	0.116079
1272	H	0.613549	0.574152	0.0644481



1273	H	0.399946	0.431786	0.0645161
1274	H	0.0790306	0.608596	0.81294
1275	H	0.12203	0.438634	0.865728
1276	C	0.00550665	0.202584	0.693299
1277	C	0.00795404	0.803185	0.693072
1278	C	0.203916	0.00519533	0.494419
1279	C	0.508379	0.199312	0.24316
1280	C	0.505116	0.80639	0.243455
1281	C	0.306571	0.00428446	0.442607
1282	C	0.506339	0.703529	0.192414
1283	C	0.507087	0.302105	0.192074
1284	C	0.309936	0.501383	0.993716
1285	C	0.00842993	0.699717	0.743455
1286	C	0.00503076	0.306018	0.743705
1287	C	0.207485	0.501586	0.941677
1288	C	0.00564261	0.235747	0.709428
1289	C	0.00781808	0.769955	0.709133
1290	C	0.236684	0.00468929	0.477746
1291	C	0.507699	0.232002	0.226623
1292	C	0.505762	0.773598	0.226986
1293	C	0.273565	0.00438567	0.459099
1294	C	0.506203	0.736624	0.208611
1295	C	0.507257	0.268943	0.208226
1296	C	0.27727	0.501687	0.976929
1297	C	0.00798803	0.732778	0.727236
1298	C	0.00547265	0.27289	0.727553
1299	C	0.240423	0.501754	0.958214
1300	H	0.0368129	0.00435193	0.651286
1301	H	0.00513274	0.0328925	0.540062
1302	H	0.476665	0.00435193	0.288508
1303	H	0.53683	0.00151812	0.288508
1304	H	0.507937	0.032825	0.399755
1305	H	0.536728	0.50415	0.150991
1306	H	0.476835	0.501754	0.151014
1307	H	0.508073	0.473146	0.0396761
1308	H	0.50532	0.532859	0.0396761
1309	H	0.0368469	0.501383	0.788054
1310	H	0.00533669	0.473349	0.899369
1311	H	0.00809001	0.532758	0.899324
1312	C	0.00683232	0.00303623	0.636201
1313	C	0.00673034	0.0030025	0.555102
1314	C	0.506747	0.00296876	0.303548
1315	C	0.506713	0.00306997	0.384669
1316	C	0.506781	0.502969	0.135883
1317	C	0.506713	0.503002	0.0547389
1318	C	0.00676434	0.502969	0.803072
1319	C	0.00673034	0.503036	0.884216
1320	C	0.963629	0.00016868	0.575155
1321	C	0.961046	0.0422374	0.59598
1322	H	0.95751	0.0731057	0.582052
1323	H	0.930215	0.0402807	0.610249
1324	C	0.963663	0.505769	0.864094
1325	C	0.967266	0.548411	0.84395
1326	C	0.960978	0.463633	0.843337
1327	H	0.936164	0.55192	0.830044
1328	H	0.957476	0.432798	0.857243
1329	H	0.969306	0.579043	0.858219
1330	H	0.930045	0.465724	0.829137
1331	C	0.921445	0.506444	0.884307
1332	C	0.915837	0.472235	0.906107

1333	H	0.941602	0.446023	0.908489
1334	C	0.8778	0.471223	0.924913
1335	H	0.873891	0.444538	0.941722
1336	C	0.844216	0.504824	0.92219
1337	C	0.849417	0.539032	0.900367
1338	H	0.823447	0.565043	0.898076
1339	C	0.887692	0.539606	0.881652
1340	H	0.890615	0.566426	0.864843
1341	C	0.703253	0.504588	0.993467
1342	C	0.805636	0.504318	0.941359
1343	C	0.735851	0.504284	0.976589
1344	C	0.77263	0.504183	0.957851
1345	C	0.966994	0.957628	0.595368
1346	H	0.93596	0.95422	0.609296
1347	H	0.969034	0.926894	0.581212
1348	C	0.922329	0.999292	0.554172
1349	C	0.856589	0.961811	0.532031
1350	H	0.834563	0.932326	0.530443
1351	C	0.893776	0.961609	0.551722
1352	H	0.900031	0.931415	0.565197
1353	C	0.591794	0.999899	0.384964
1354	C	0.663041	0.966703	0.402001
1355	H	0.688637	0.940287	0.400231
1356	C	0.625106	0.96623	0.382968
1357	H	0.622149	0.939005	0.366453
1358	C	0.97624	0.913265	0.658568
1359	H	0.950202	0.939174	0.661268
1360	C	0.97522	0.875514	0.677374
1361	H	0.948809	0.872006	0.694547
1362	C	0.100309	0.968659	0.535978
1363	H	0.0782488	0.939073	0.537317
1364	C	0.137258	0.967917	0.516265
1365	H	0.144159	0.938128	0.502518
1366	C	0.913015	0.0373119	0.536069
1367	C	0.597505	0.0345456	0.40647
1368	H	0.935076	0.0669321	0.537362
1369	H	0.572011	0.0611632	0.408375
1370	C	0.875999	0.0380541	0.516424
1371	C	0.635134	0.0354902	0.425616
1372	H	0.86903	0.0678429	0.5027
1373	H	0.639111	0.0624452	0.442199
1374	C	0.847276	0.000134944	0.514337
1375	C	0.668276	0.0013157	0.423529
1376	C	0.809273	0.00074219	0.494714
1377	C	0.706584	0.00165306	0.442902
1378	C	0.776403	0.00121449	0.478086
1379	C	0.739522	0.00155185	0.459462
1380	C	0.416262	0.971932	0.406742
1381	H	0.442061	0.945719	0.408988
1382	C	0.378497	0.970987	0.425797
1383	H	0.374826	0.944369	0.442675
1384	C	0.972025	0.596012	0.784175
1385	H	0.942248	0.57405	0.785468
1386	C	0.971107	0.632987	0.764711
1387	H	0.940991	0.640004	0.751123
1388	C	0.970495	0.158997	0.652489
1389	H	0.944322	0.184772	0.650243
1390	C	0.969985	0.121112	0.633728
1391	H	0.942996	0.118278	0.616873
1392	C	0.965363	0.353822	0.78025

1393	H	0.935654	0.331995	0.778594
1394	C	0.964955	0.391033	0.799669
1395	H	0.934362	0.39751	0.812917
1396	H	0.976886	0.00172053	0.651332
1397	H	0.00825997	0.973146	0.540062
1398	H	0.50549	0.973382	0.399823
1399	H	0.976716	0.504521	0.788009

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_DIA\_6-fold-PPN-2.cif

```

_cell_length_a      29.296(0)
_cell_length_b      29.523(0)
_cell_length_c      44.309(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number         1
_stmmetry_cell_setting              Orthorhombic

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
0      C      0.00737302  0.0479626  0.978515
1      C      0.0532155  0.00762118  0.937394
2      C      0.512732   0.0487417   0.682254
3      C      0.506554   0.963215    0.680765
4      C      0.465115   0.00751956  0.721817
5      C      0.552191   0.00138875  0.72263
6      C      0.505632   0.547878    0.47584
7      C      0.512152   0.462114    0.475863
8      C      0.552157   0.508248    0.435419
9      C      0.4659     0.501778    0.435284
10     C      0.0112302  0.548962    0.186305
11     C      0.00604178 0.462826    0.186057
12     C      0.965456   0.508214    0.226749
13     C      0.0519525  0.503133    0.226726
14     C      0.0509285  0.0493852   0.958496
15     C      0.469074   0.050503    0.701979
16     C      0.549153   0.95993     0.70137
17     C      0.462964   0.966162    0.700377
18     C      0.555127   0.0445754   0.702882
19     C      0.548164   0.551028    0.455325
20     C      0.469791   0.45893     0.455167

```

21	C	0.555093	0.465637	0.455867
22	C	0.462794	0.544389	0.455709
23	C	0.968494	0.551163	0.206978
24	C	0.0488121	0.460455	0.206685
25	C	0.96293	0.466145	0.206098
26	C	0.0543078	0.545541	0.206346
27	H	0.0817859	0.0501304	0.972917
28	H	0.438524	0.0536192	0.687558
29	H	0.580421	0.957762	0.687513
30	H	0.4588	0.934763	0.713738
31	H	0.557926	0.0748569	0.717484
32	H	0.579328	0.554856	0.469273
33	H	0.438524	0.455001	0.468979
34	H	0.558506	0.434847	0.441829
35	H	0.459585	0.575179	0.441648
36	H	0.937329	0.554957	0.193189
37	H	0.0799427	0.457 0.19285	
38	H	0.95979	0.435186	0.220046
39	H	0.0573457	0.57633	0.220474
40	H	0.0513381	0.0809877	0.945135
41	H	0.469928	0.0811232	0.716378
42	H	0.547652	0.928327	0.714776
43	H	0.432448	0.96877	0.685865
44	H	0.586531	0.0435593	0.689115
45	H	0.546013	0.581682	0.441039
46	H	0.472181	0.428344	0.440859
47	H	0.586155	0.467534	0.470017
48	H	0.431663	0.54256	0.469747
49	H	0.970542	0.581682	0.221377
50	H	0.0469006	0.429767	0.220926
51	H	0.931902	0.467602	0.192015
52	H	0.0854042	0.544389	0.192286
53	C	0.00696341	0.0882363	9.02751e-05
54	C	0.0958151	0.00812926	0.917173
55	C	0.513824	0.0919961	0.663387
56	C	0.506247	0.921282	0.660633
57	C	0.423129	0.00856959	0.742445
58	C	0.504745	0.588355	0.497145
59	C	0.513005	0.421671	0.49719
60	C	0.595269	0.509298	0.416123
61	C	0.422959	0.500627	0.415785
62	C	0.0117422	0.592047	0.167099
63	C	0.00529082	0.419774	0.166806
64	C	0.924631	0.508078	0.248008
65	C	0.092743	0.502761	0.247986
66	C	0.0462179	0.0978559	0.0172651
67	C	0.478427	0.0992785	0.642488
68	C	0.541576	0.915693	0.639464
69	C	0.543692	0.596891	0.514862
70	C	0.474126	0.413339	0.515042
71	C	0.602164	0.474478	0.394954
72	C	0.416098	0.535379	0.39457
73	C	0.0396641	0.412695	0.145162
74	C	0.916849	0.469024	0.265499
75	C	0.10114	0.541578	0.265589
76	H	0.0766316	0.0767876	0.0148503
77	H	0.451632	0.0739424	0.639802
78	H	0.567825	0.941673	0.637207
79	H	0.573525	0.574874	0.513011
80	H	0.444156	0.435051	0.512898

81	H	0.576393	0.448159	0.392087
82	H	0.441664	0.561867	0.391817
83	H	0.0657769	0.438438	0.141574
84	H	0.939138	0.439623	0.263107
85	H	0.07926	0.571317	0.26331
86	C	0.0469689	0.133997	0.0374416
87	C	0.477028	0.13857	0.625223
88	C	0.543658	0.877248	0.621364
89	C	0.544818	0.6331	0.53488
90	C	0.473375	0.377807	0.535602
91	C	0.641623	0.473055	0.377531
92	C	0.376775	0.536599	0.376966
93	C	0.0412002	0.373065	0.1281
94	C	0.88111	0.467432	0.286059
95	C	0.136981	0.542526	0.286127
96	H	0.0777581	0.141076	0.0502832
97	H	0.449345	0.143989	0.609154
98	H	0.571307	0.87315	0.605137
99	H	0.5753	0.639637	0.548376
100	H	0.442996	0.371473	0.549211
101	H	0.646914	0.445788	0.361258
102	H	0.371518	0.563798	0.360649
103	H	0.0682346	0.368154	0.11158
104	H	0.875034	0.436981	0.299375
105	H	0.143467	0.572808	0.299533
106	C	0.00808984	0.161433	0.041188
107	C	0.00856772	0.846052	0.0378027
108	C	0.171559	0.00833249	0.87709
109	C	0.511469	0.171426	0.628676
110	C	0.510001	0.843546	0.624252
111	C	0.346498	0.00900992	0.781986
112	C	0.506383	0.661484	0.537498
113	C	0.512118	0.349897	0.538672
114	C	0.675007	0.506961	0.381119
115	C	0.343528	0.502523	0.380374
116	C	0.00890907	0.672086	0.131892
117	C	0.0079533	0.339159	0.132095
118	C	0.852676	0.505538	0.289467
119	C	0.164903	0.504014	0.289399
120	C	0.0478905	0.855672	0.0208536
121	C	0.166644	0.0422044	0.899163
122	C	0.54673	0.164617	0.649665
123	C	0.47457	0.848796	0.645377
124	C	0.357353	0.047319	0.76454
125	C	0.466924	0.65261	0.520459
126	C	0.551202	0.358161	0.521113
127	C	0.668658	0.541781	0.402311
128	C	0.349911	0.467737	0.401589
129	C	0.0430434	0.666023	0.153784
130	C	0.86022	0.544694	0.272157
131	C	0.156711	0.465095	0.271976
132	H	0.0780653	0.834468	0.0233135
133	H	0.192176	0.0688277	0.900855
134	H	0.573116	0.190326	0.652599
135	H	0.448662	0.822545	0.647769
136	H	0.336053	0.077465	0.76612
137	H	0.436988	0.674322	0.522806
138	H	0.58124	0.336517	0.523573
139	H	0.694771	0.567761	0.40529
140	H	0.323935	0.441554	0.40441

141	H	0.0684735	0.692443	0.157282
142	H	0.837964	0.574027	0.27482
143	H	0.178557	0.435423	0.274549
144	C	0.0484025	0.892253	0.000857614
145	C	0.129369	0.0419673	0.918888
146	C	0.547754	0.125021	0.666885
147	C	0.472863	0.887478	0.663387
148	C	0.395037	0.0468448	0.745198
149	C	0.466378	0.616164	0.500395
150	C	0.551372	0.393896	0.500508
151	C	0.628925	0.542696	0.419666
152	C	0.389473	0.46706	0.419147
153	C	0.0443064	0.626427	0.171049
154	C	0.896129	0.545778	0.251506
155	C	0.120733	0.464689	0.251371
156	H	0.127321	0.0688277	0.935724
157	H	0.575403	0.120652	0.683089
158	H	0.445214	0.890594	0.679726
159	H	0.402069	0.0773295	0.732131
160	H	0.43552	0.609897	0.48735
161	H	0.581991	0.399688	0.487125
162	H	0.624863	0.569895	0.436097
163	H	0.393433	0.439894	0.435577
164	H	0.0713067	0.623175	0.187863
165	H	0.901591	0.576398	0.238304
166	H	0.114862	0.434204	0.238123
167	C	0.00873839	0.198218	0.0616353
168	C	0.00812398	0.809708	0.0586337
169	C	0.208595	0.00890831	0.85644
170	C	0.510684	0.210886	0.610643
171	C	0.51123	0.804322	0.606017
172	C	0.30854	0.00924703	0.801914
173	C	0.508022	0.699455	0.556907
174	C	0.511367	0.31318	0.559119
175	C	0.714569	0.505843	0.362929
176	C	0.304001	0.503404	0.362139
177	C	0.00819224	0.710971	0.113228
178	C	0.00880666	0.299597	0.11404
179	C	0.816221	0.504556	0.310298
180	C	0.201563	0.504556	0.310072
181	C	0.00914801	0.229956	0.0790133
182	C	0.00781677	0.778783	0.076621
183	C	0.240306	0.0092809	0.838769
184	C	0.510343	0.244318	0.594732
185	C	0.51106	0.770382	0.590602
186	C	0.276249	0.00941639	0.819134
187	C	0.509967	0.732717	0.572931
188	C	0.510616	0.281069	0.576203
189	C	0.747918	0.504759	0.346724
190	C	0.270446	0.504251	0.346092
191	C	0.00778263	0.743217	0.0962333
192	C	0.00921628	0.26647	0.0978357
193	C	0.784373	0.504319	0.327766
194	C	0.233684	0.504657	0.327338
195	H	0.0100014	0.0379365	0.902503
196	H	0.480816	0.0090438	0.645986
197	H	0.540859	0.00552112	0.646821
198	H	0.509626	0.0331945	0.757295
199	H	0.539152	0.50669	0.510596
200	H	0.478325	0.503303	0.510461

201	H	0.51106	0.475257	0.400167
202	H	0.507271	0.534973	0.400257
203	H	0.0386742	0.504624	0.151211
204	H	0.00750956	0.475324	0.261324
205	H	0.00989896	0.535549	0.261527
206	C	0.00819224	0.00403076	0.997405
207	C	0.0100696	0.00724859	0.916857
208	C	0.510309	0.00674051	0.661423
209	C	0.508192	0.00365816	0.741949
210	C	0.508807	0.504996	0.495701
211	C	0.509114	0.505064	0.415198
212	C	0.00860186	0.505978	0.166196
213	C	0.00870426	0.505538	0.246564
214	C	0.010172	0.961691	0.976912
215	C	0.0531813	0.963723	0.956442
216	H	0.0537957	0.933645	0.941569
217	H	0.0846191	0.961996	0.970232
218	C	0.00989896	0.919995	0.997337
219	C	0.966105	0.0051824	0.936401
220	C	0.965422	0.04759	0.956826
221	H	0.965797	0.0787522	0.942946
222	H	0.933336	0.0486062	0.969984
223	C	0.923846	0.00565661	0.915841
224	C	0.918521	0.0402059	0.89422
225	H	0.943712	0.0673373	0.892843
226	C	0.881588	0.0405447	0.874337
227	H	0.878482	0.0676083	0.857862
228	C	0.848375	0.00613081	0.875465
229	C	0.811442	0.00501304	0.85477
230	C	0.779492	0.00318396	0.837324
231	C	0.743071	0.00138875	0.818118
232	C	0.967709	0.961725	0.956013
233	H	0.936237	0.959455	0.969735
234	H	0.968255	0.931274	0.941434
235	C	0.593665	0.999492	0.743664
236	C	0.671423	0.999221	0.782211
237	C	0.660193	0.960878	0.764924
238	H	0.681697	0.930867	0.766165
239	C	0.62186	0.961217	0.746079
240	H	0.614487	0.930732	0.733102
241	C	0.710233	0.999932	0.801395
242	C	0.970406	0.909765	0.0140829
243	H	0.939855	0.930698	0.0116455
244	C	0.969552	0.873285	0.0339886
245	H	0.938695	0.865833	0.0466497
246	C	0.10172	0.973512	0.895642
247	H	0.0768364	0.946076	0.894265
248	C	0.138722	0.973478	0.875894
249	H	0.142238	0.946381	0.859442
250	C	0.41207	0.970362	0.760049
251	H	0.433165	0.939945	0.758807
252	C	0.374488	0.970362	0.779368
253	H	0.366466	0.94025	0.792548
254	C	0.604724	0.0374284	0.761493
255	H	0.583254	0.0676422	0.760726
256	C	0.642921	0.0375978	0.78027
257	H	0.651045	0.0676083	0.793518
258	C	0.977232	0.598787	0.145478
259	H	0.951154	0.572943	0.142093
260	C	0.975594	0.638147	0.128168

261	H	0.948491	0.642855	0.11167
262	C	0.968733	0.151882	0.0242163
263	H	0.938524	0.172984	0.026902
264	C	0.968323	0.115673	0.00394954
265	C	0.852642	0.972361	0.897696
266	H	0.826734	0.94611	0.899411
267	C	0.889678	0.972361	0.917556
268	H	0.891077	0.945703	0.934573
269	C	0.973648	0.345764	0.153829
270	H	0.948048	0.319514	0.157395
271	C	0.972556	0.385564	0.170868
272	H	0.945453	0.389053	0.187592
273	H	0.937193	0.109237	0.991153
274	H	0.0795672	0.898825	0.988129
275	H	0.038367	0.00413237	0.0125482
276	H	0.977301	0.00274362	0.0118486
277	H	0.0108547	0.978017	0.901284
278	H	0.50611	0.973072	0.756302
279	H	0.978598	0.507536	0.151211
280	C	0.00549563	0.0474207	0.129229
281	C	0.0110254	0.96142	0.129522
282	C	0.051577	0.00684212	0.0885825
283	C	0.511435	0.0474207	0.835022
284	C	0.505018	0.961793	0.835203
285	C	0.465012	0.00809538	0.875849
286	C	0.551645	0.00152424	0.875759
287	C	0.505769	0.547641	0.628811
288	C	0.51222	0.462013	0.628811
289	C	0.552089	0.508011	0.588188
290	C	0.465729	0.501643	0.588233
291	C	0.0119129	0.54737	0.33808
292	C	0.00617832	0.461301	0.338171
293	C	0.965797	0.507266	0.378727
294	C	0.0522597	0.501541	0.378704
295	C	0.0483001	0.0495546	0.108736
296	C	0.0537275	0.96413	0.108985
297	C	0.468426	0.0502659	0.855312
298	C	0.548095	0.95915	0.855424
299	C	0.462179	0.965654	0.855424
300	C	0.554478	0.0437625	0.855108
301	C	0.548437	0.550622	0.608341
302	C	0.469484	0.459066	0.608387
303	C	0.554922	0.465264	0.608477
304	C	0.462998	0.544389	0.608545
305	C	0.968801	0.549707	0.358392
306	C	0.0492559	0.458998	0.358505
307	C	0.963374	0.464722	0.358415
308	C	0.0547174	0.543983	0.358347
309	H	0.0793965	0.0519595	0.122864
310	H	0.0555025	0.933306	0.094834
311	H	0.437568	0.0525353	0.841026
312	H	0.578919	0.956746	0.841093
313	H	0.458697	0.934797	0.869394
314	H	0.558131	0.0747553	0.868921
315	H	0.57967	0.553839	0.622244
316	H	0.438285	0.455848	0.622334
317	H	0.557516	0.434509	0.594304
318	H	0.460404	0.575145	0.594349
319	H	0.937875	0.552383	0.344242
320	H	0.0802157	0.456254	0.344354



321	H	0.96078	0.433933	0.372565
322	H	0.0573457	0.57484	0.372407
323	H	0.0471395	0.0805474	0.0947212
324	H	0.0853017	0.964807	0.122661
325	H	0.469518	0.0815974	0.868853
326	H	0.547105	0.927954	0.869124
327	H	0.431219	0.967551	0.841229
328	H	0.585268	0.0415947	0.840822
329	H	0.546491	0.581377	0.594123
330	H	0.471395	0.42831	0.594168
331	H	0.586258	0.466619	0.622311
332	H	0.431697	0.543102	0.622402
333	H	0.969996	0.580734	0.372272
334	H	0.0480612	0.428073	0.37243
335	H	0.932175	0.465772	0.344422
336	H	0.0859162	0.542831	0.344332
337	C	0.00477881	0.0885073	0.150263
338	C	0.0120836	0.920604	0.150759
339	C	0.0939377	0.00792602	0.0683608
340	C	0.51263	0.0894896	0.815004
341	C	0.503618	0.919554	0.815365
342	C	0.423607	0.00989059	0.896793
343	C	0.504506	0.588118	0.650161
344	C	0.513347	0.421502	0.650116
345	C	0.594518	0.50967	0.568214
346	C	0.423164	0.499983	0.568395
347	C	0.0136879	0.589777	0.318265
348	C	0.00443747	0.41886	0.318355
349	C	0.925041	0.507875	0.400099
350	C	0.0929478	0.501101	0.400167
351	C	0.0441016	0.098364	0.167347
352	C	0.475628	0.0976865	0.795527
353	C	0.540756	0.910748	0.796114
354	C	0.543453	0.596891	0.667833
355	C	0.474331	0.412898	0.667788
356	C	0.603598	0.472852	0.548986
357	C	0.413811	0.53687	0.549279
358	C	0.0412343	0.409037	0.299014
359	C	0.916849	0.468956	0.417658
360	C	0.101174	0.540189	0.417568
361	H	0.0745494	0.0773634	0.16482
362	H	0.447331	0.0737052	0.794489
363	H	0.569361	0.934424	0.795143
364	H	0.573594	0.575382	0.665553
365	H	0.444395	0.434678	0.665644
366	H	0.579943	0.444298	0.548105
367	H	0.437329	0.565457	0.548331
368	H	0.0702144	0.432205	0.297705
369	H	0.938592	0.439183	0.41495
370	H	0.0796013	0.57003	0.414611
371	C	0.0448867	0.134438	0.187547
372	C	0.474331	0.136334	0.777562
373	C	0.541849	0.87193	0.778352
374	C	0.544136	0.632456	0.688393
375	C	0.473341	0.377062	0.688122
376	C	0.642613	0.471971	0.531111
377	C	0.37459	0.537682	0.531585
378	C	0.0417122	0.369847	0.281478
379	C	0.88152	0.467906	0.438579
380	C	0.136264	0.541273	0.438647

381	H	0.07571	0.141517	0.200388
382	H	0.445214	0.142635	0.762802
383	H	0.571068	0.865122	0.763795
384	H	0.574652	0.638959	0.701866
385	H	0.442791	0.37066	0.701573
386	H	0.649543	0.442977	0.516486
387	H	0.367388	0.566711	0.517073
388	H	0.0706581	0.362633	0.266876
389	H	0.875478	0.437523	0.451917
390	H	0.142306	0.571791	0.451895
391	C	0.00593938	0.161806	0.191316
392	C	0.011435	0.847441	0.191857
393	C	0.171764	0.00731633	0.0304001
394	C	0.510582	0.167564	0.778736
395	C	0.505223	0.841107	0.779458
396	C	0.348478	0.0102632	0.937011
397	C	0.505257	0.660096	0.691575
398	C	0.511913	0.348982	0.691124
399	C	0.673539	0.508451	0.532127
400	C	0.343801	0.501067	0.532646
401	C	0.0131417	0.669478	0.282606
402	C	0.00494948	0.339159	0.282629
403	C	0.853598	0.506317	0.442235
404	C	0.163913	0.502727	0.442619
405	C	0.0505188	0.856891	0.174615
406	C	0.16364	0.0437964	0.0500124
407	C	0.547822	0.159604	0.798032
408	C	0.467743	0.849744	0.798416
409	C	0.358957	0.0488771	0.919813
410	C	0.4659	0.651153	0.674423
411	C	0.551372	0.357857	0.674062
412	C	0.664664	0.545642	0.551017
413	C	0.353052	0.463774	0.551378
414	C	0.0501775	0.659926	0.301722
415	C	0.861653	0.545371	0.424902
416	C	0.155926	0.463571	0.425376
417	H	0.0806936	0.835687	0.177097
418	H	0.187739	0.0718423	0.0507798
419	H	0.575744	0.183992	0.79916
420	H	0.439446	0.825763	0.799476
421	H	0.337828	0.0790909	0.921912
422	H	0.435623	0.672357	0.677176
423	H	0.581445	0.336314	0.676702
424	H	0.688695	0.573925	0.551965
425	H	0.329158	0.435389	0.552326
426	H	0.0786455	0.683636	0.303054
427	H	0.839944	0.575077	0.427791
428	H	0.177499	0.433865	0.428536
429	C	0.0507236	0.8931	0.154303
430	C	0.125137	0.0439996	0.0686091
431	C	0.548676	0.120686	0.815884
432	C	0.467129	0.888866	0.816087
433	C	0.396095	0.0484368	0.899975
434	C	0.465763	0.615351	0.65384
435	C	0.55185	0.393896	0.65366
436	C	0.625307	0.546049	0.568756
437	C	0.392545	0.463469	0.568981
438	C	0.0502799	0.620465	0.319123
439	C	0.897187	0.545981	0.403913
440	C	0.120631	0.462961	0.404229

441	H	0.0817176	0.899367	0.141281
442	H	0.120358	0.0729939	0.0834819
443	H	0.577895	0.115469	0.830666
444	H	0.437705	0.894692	0.830621
445	H	0.403024	0.0789893	0.886976
446	H	0.434906	0.609152	0.640773
447	H	0.582742	0.399993	0.640637
448	H	0.619402	0.575314	0.583222
449	H	0.398655	0.43417	0.583335
450	H	0.0797378	0.614436	0.333612
451	H	0.902717	0.576601	0.390666
452	H	0.115135	0.432239	0.391117
453	C	0.00648553	0.198489	0.211876
454	C	0.0111619	0.810622	0.212327
455	C	0.209892	0.00751956	0.0106976
456	C	0.509694	0.206822	0.760455
457	C	0.506042	0.80168	0.76138
458	C	0.310725	0.00985672	0.957029
459	C	0.506076	0.69749	0.711503
460	C	0.51065	0.311249	0.710781
461	C	0.713306	0.507435	0.514026
462	C	0.303898	0.502015	0.514681
463	C	0.0125956	0.708939	0.264461
464	C	0.0054615	0.299766	0.264393
465	C	0.816903	0.505606	0.462931
466	C	0.200369	0.50354	0.463518
467	C	0.00651966	0.230193	0.229299
468	C	0.0112985	0.778715	0.22957
469	C	0.242183	0.00806151	0.993523
470	C	0.50925	0.240524	0.744792
471	C	0.506656	0.767876	0.745785
472	C	0.278434	0.00887444	0.974226
473	C	0.506656	0.730481	0.727843
474	C	0.509592	0.278021	0.726873
475	C	0.747201	0.506215	0.498319
476	C	0.2699	0.503099	0.499086
477	C	0.0117422	0.742133	0.248302
478	C	0.00617832	0.26664	0.248166
479	C	0.784407	0.505606	0.479903
480	C	0.232728	0.503641	0.480625
481	H	0.0389473	0.00616469	0.164075
482	H	0.00631486	0.034109	0.0540071
483	H	0.477915	0.00623243	0.800244
484	H	0.538469	0.00264201	0.800221
485	H	0.510343	0.0350913	0.910492
486	H	0.539391	0.506588	0.663657
487	H	0.478734	0.503099	0.663703
488	H	0.510718	0.474715	0.553364
489	H	0.506963	0.535007	0.553364
490	H	0.039391	0.502591	0.303437
491	H	0.00761196	0.474478	0.413595
492	H	0.0104451	0.534532	0.413505
493	C	0.00836292	0.00457271	0.149292
494	C	0.0079533	0.00389527	0.0688573
495	C	0.508192	0.00450496	0.815117
496	C	0.508363	0.0049453	0.895687
497	C	0.509011	0.504827	0.648762
498	C	0.508875	0.504861	0.568192
499	C	0.00901147	0.504285	0.318242
500	C	0.0090456	0.504454	0.39861

501	C	0.964569	0.001321	0.0888081
502	C	0.962555	0.0443383	0.108962
503	H	0.960575	0.0749924	0.0946309
504	H	0.931151	0.0438302	0.122797
505	C	0.967914	0.958981	0.109301
506	H	0.936988	0.956983	0.123609
507	H	0.968801	0.927717	0.0955562
508	C	0.922105	0.999932	0.0686768
509	C	0.853052	0.963317	0.0498996
510	H	0.829499	0.934797	0.0503509
511	C	0.891623	0.963249	0.0684511
512	H	0.897119	0.933848	0.0828726
513	C	0.59305	0.999831	0.89668
514	C	0.667907	0.999187	0.937146
515	C	0.657359	0.960539	0.919971
516	H	0.678284	0.930224	0.922205
517	C	0.620392	0.961115	0.90002
518	H	0.61336	0.930529	0.887066
519	C	0.705386	0.999289	0.957345
520	C	0.737473	0.999763	0.9747
521	C	0.973068	0.910917	0.16816
522	H	0.942586	0.931985	0.165835
523	C	0.972522	0.874843	0.188382
524	H	0.941903	0.867866	0.201449
525	C	0.102779	0.971175	0.0489968
526	H	0.0794648	0.94235	0.048568
527	C	0.141043	0.970633	0.0303099
528	H	0.14729	0.941673	0.015753
529	C	0.912616	0.037022	0.0497416
530	H	0.935486	0.0662196	0.0496287
531	C	0.874317	0.0374284	0.0311223
532	H	0.86749	0.0666599	0.016904
533	C	0.844177	0.000270975	0.030829
534	C	0.80598	0.000203231	0.0112167
535	C	0.413026	0.97148	0.914306
536	H	0.434018	0.941063	0.912523
537	C	0.376058	0.971412	0.934077
538	H	0.368344	0.941232	0.947234
539	C	0.603803	0.0382414	0.914126
540	H	0.582981	0.0687938	0.912162
541	C	0.640599	0.0382075	0.934009
542	H	0.648416	0.0684212	0.947121
543	C	0.976857	0.5996	0.298946
544	H	0.947877	0.576432	0.29766
545	C	0.976413	0.63879	0.28141
546	H	0.947433	0.646005	0.266808
547	C	0.966651	0.152288	0.174276
548	H	0.936544	0.173492	0.176939
549	C	0.966207	0.116011	0.154009
550	H	0.935042	0.109779	0.14119
551	C	0.967914	0.348711	0.301767
552	H	0.939446	0.325035	0.303054
553	C	0.967845	0.388138	0.31919
554	H	0.938387	0.394133	0.333702
555	C	0.773655	6.77438e-05	0.994064
556	H	0.978052	0.00321783	0.164256
557	H	0.00938695	0.973512	0.0541876
558	H	0.50652	0.97507	0.910695
559	H	0.9787	0.505945	0.303437
560	C	0.00638312	0.0480303	0.283509

561	C	0.0114009	0.962165	0.283554
562	C	0.0522256	0.00755343	0.242682
563	C	0.965524	0.00254039	0.242705
564	C	0.511879	0.0477932	0.989641
565	C	0.505871	0.962199	0.989663
566	C	0.465627	0.00806151	0.0303776
567	C	0.552089	0.00199844	0.0304001
568	C	0.505837	0.547742	0.78343
569	C	0.511947	0.46225	0.783385
570	C	0.551952	0.508045	0.742671
571	C	0.465729	0.502015	0.742716
572	C	0.0115715	0.547878	0.492202
573	C	0.00617832	0.461979	0.492315
574	C	0.965763	0.50774	0.533029
575	C	0.0520549	0.502388	0.532984
576	C	0.0493241	0.0500627	0.263084
577	C	0.0541371	0.964807	0.263062
578	C	0.963579	0.0453206	0.263062
579	C	0.468904	0.0503675	0.00993026
580	C	0.554752	0.0444399	0.00983999
581	C	0.548641	0.550554	0.762938
582	C	0.469108	0.459472	0.76296
583	C	0.554717	0.465434	0.763073
584	C	0.463032	0.544592	0.763141
585	C	0.968631	0.550147	0.51265
586	C	0.0491193	0.459811	0.51274
587	C	0.963408	0.465197	0.512695
588	C	0.0543419	0.544829	0.51256
589	H	0.0804205	0.0519256	0.277212
590	H	0.0558779	0.933984	0.248888
591	H	0.961872	0.076144	0.248866
592	H	0.558063	0.075365	0.0237198
593	H	0.579874	0.553467	0.776862
594	H	0.437944	0.456525	0.776908
595	H	0.557516	0.434543	0.749035
596	H	0.460268	0.575484	0.749103
597	H	0.937534	0.552891	0.498612
598	H	0.0802157	0.457 0.498702	
599	H	0.961019	0.434373	0.526823
600	H	0.0567996	0.575687	0.52662
601	H	0.0485049	0.0812248	0.249272
602	H	0.0857455	0.965417	0.276738
603	H	0.932039	0.0447448	0.276761
604	H	0.469859	0.0815974	0.0236069
605	H	0.547037	0.581479	0.7489
606	H	0.470713	0.428581	0.7489
607	H	0.586053	0.466856	0.77693
608	H	0.431731	0.543237	0.77702
609	H	0.969825	0.581174	0.52653
610	H	0.0479588	0.428886	0.52671
611	H	0.932107	0.46601	0.498815
612	H	0.0856431	0.543915	0.498657
613	C	0.00563217	0.089117	0.304543
614	C	0.012186	0.921078	0.304566
615	C	0.0941767	0.00846797	0.222144
616	C	0.923505	0.00152424	0.222212
617	C	0.512869	0.0892863	0.969126
618	C	0.504779	0.920638	0.969216
619	C	0.424085	0.00955187	0.0512086
620	C	0.593494	0.000474207	0.0513214

621	C	0.504642	0.588423	0.8046
622	C	0.513108	0.421502	0.804487
623	C	0.593665	0.509366	0.722065
624	C	0.423915	0.500593	0.722223
625	C	0.0130393	0.589811	0.471913
626	C	0.00464227	0.41991	0.472184
627	C	0.924802	0.508282	0.554244
628	C	0.092982	0.501846	0.554244
629	C	0.0446819	0.098635	0.321944
630	C	0.91405	0.0393253	0.203864
631	C	0.474843	0.0976188	0.950529
632	C	0.542736	0.912102	0.950597
633	C	0.603734	0.0388172	0.0689702
634	C	0.543351	0.596958	0.822564
635	C	0.474399	0.413068	0.822474
636	C	0.602232	0.471768	0.703379
637	C	0.415074	0.538191	0.703582
638	C	0.0425314	0.409545	0.453926
639	C	0.917019	0.469702	0.572209
640	C	0.100969	0.540528	0.572051
641	H	0.074959	0.0772957	0.319709
642	H	0.936681	0.0687261	0.204473
643	H	0.445965	0.0742472	0.950755
644	H	0.571716	0.935372	0.950755
645	H	0.582332	0.0689971	0.0673678
646	H	0.57315	0.574908	0.820781
647	H	0.444736	0.435288	0.820849
648	H	0.578816	0.442977	0.703582
649	H	0.438319	0.567083	0.703762
650	H	0.07216	0.432002	0.453745
651	H	0.93948	0.440335	0.57011
652	H	0.0788162	0.570064	0.569771
653	C	0.0454328	0.134878	0.341985
654	C	0.876161	0.0401382	0.184906
655	C	0.473409	0.135386	0.93182
656	C	0.544033	0.874268	0.931933
657	C	0.640804	0.0390882	0.0886276
658	C	0.544238	0.633066	0.842673
659	C	0.473307	0.376757	0.842447
660	C	0.640258	0.470582	0.684579
661	C	0.376912	0.539274	0.684917
662	C	0.0432141	0.370796	0.435984
663	C	0.881178	0.468448	0.592701
664	C	0.136674	0.541612	0.592701
665	H	0.0760855	0.14172	0.355052
666	H	0.869368	0.0698439	0.171139
667	H	0.443576	0.141686	0.917714
668	H	0.573833	0.867764	0.917805
669	H	0.64828	0.0691325	0.101943
670	H	0.574549	0.639434	0.85635
671	H	0.442996	0.370457	0.856124
672	H	0.646641	0.44108	0.67036
673	H	0.370255	0.568743	0.670744
674	H	0.0730134	0.363141	0.422239
675	H	0.87541	0.438268	0.606333
676	H	0.142579	0.571825	0.606265
677	C	0.0067586	0.162687	0.345302
678	C	0.0108889	0.847204	0.345144
679	C	0.170911	0.00724859	0.183416
680	C	0.846532	0.00264201	0.183665

681	C	0.510548	0.165634	0.931391
682	C	0.506827	0.844088	0.931594
683	C	0.348512	0.00938252	0.090907
684	C	0.668829	0.000508078	0.0912681
685	C	0.505837	0.661518	0.845133
686	C	0.511537	0.348034	0.844727
687	C	0.670672	0.507536	0.684195
688	C	0.346668	0.502185	0.684556
689	C	0.0120836	0.668259	0.435081
690	C	0.00552977	0.341158	0.435645
691	C	0.852267	0.506283	0.595567
692	C	0.165176	0.503506	0.595838
693	C	0.0499044	0.856349	0.327744
694	C	0.162002	0.0450835	0.20172
695	C	0.548949	0.157267	0.949536
696	C	0.468392	0.852725	0.949694
697	C	0.358547	0.0478949	0.0735291
698	C	0.466617	0.652711	0.8278
699	C	0.550758	0.356739	0.827371
700	C	0.661865	0.54571	0.702228
701	C	0.355748	0.463977	0.702521
702	C	0.0502799	0.658165	0.453023
703	C	0.860015	0.5451	0.577919
704	C	0.157291	0.464655	0.578235
705	H	0.0797037	0.834604	0.32982
706	H	0.185076	0.0739424	0.201065
707	H	0.577758	0.18074	0.949153
708	H	0.43948	0.829421	0.949378
709	H	0.336872	0.0777699	0.075312
710	H	0.436715	0.674525	0.830012
711	H	0.580523	0.334722	0.82947
712	H	0.685179	0.574569	0.701731
713	H	0.332571	0.435017	0.702024
714	H	0.0795672	0.680927	0.452933
715	H	0.837623	0.5744	0.580176
716	H	0.17941	0.435186	0.580717
717	C	0.0504164	0.892897	0.307703
718	C	0.123976	0.0455916	0.220723
719	C	0.549973	0.119195	0.968201
720	C	0.467538	0.890865	0.968291
721	C	0.395958	0.0477594	0.0539394
722	C	0.466309	0.616333	0.807669
723	C	0.55127	0.393287	0.807375
724	C	0.623498	0.546421	0.720937
725	C	0.394218	0.463435	0.721118
726	C	0.0505871	0.619348	0.471056
727	C	0.896129	0.545913	0.557381
728	C	0.121348	0.464011	0.557562
729	H	0.0812739	0.898791	0.2945
730	H	0.118378	0.0756359	0.23449
731	H	0.580113	0.113572	0.982058
732	H	0.437398	0.896725	0.982126
733	H	0.402546	0.0782102	0.0407592
734	H	0.435588	0.610338	0.794444
735	H	0.581957	0.39918	0.794128
736	H	0.617627	0.576398	0.734704
737	H	0.400294	0.433425	0.734839
738	H	0.0809326	0.61281	0.484619
739	H	0.901386	0.576296	0.543885
740	H	0.115989	0.43356	0.544178

741	C	0.00733889	0.199675	0.365614
742	C	0.0102744	0.810013	0.365298
743	C	0.208971	0.00687599	0.163714
744	C	0.808336	0.00291298	0.164075
745	C	0.509216	0.20462	0.912862
746	C	0.507987	0.804999	0.913178
747	C	0.310452	0.00873895	0.110655
748	C	0.706752	0.0010839	0.111106
749	C	0.5071	0.699624	0.864452
750	C	0.510138	0.309826	0.863933
751	C	0.710131	0.50608	0.665824
752	C	0.307073	0.503506	0.666298
753	C	0.0112302	0.70755	0.416755
754	C	0.00634899	0.301799	0.417387
755	C	0.814889	0.505132	0.615744
756	C	0.202348	0.504522	0.616173
757	C	0.00747542	0.231752	0.382721
758	C	0.0100696	0.777733	0.382225
759	C	0.241432	0.00707923	0.146697
760	C	0.775771	0.00270975	0.147171
761	C	0.508636	0.238424	0.897312
762	C	0.508499	0.771026	0.897786
763	C	0.277956	0.00772279	0.127626
764	C	0.739214	0.00206619	0.128123
765	C	0.508192	0.733191	0.880227
766	C	0.508943	0.276191	0.879686
767	C	0.744197	0.504894	0.650297
768	C	0.27287	0.504624	0.650861
769	C	0.010411	0.740846	0.400709
770	C	0.00713408	0.268503	0.401341
771	C	0.781847	0.504556	0.632242
772	C	0.235254	0.504962	0.632806
773	H	0.0393228	0.00646953	0.318468
774	H	0.00750956	0.0351929	0.207858
775	H	0.478768	0.00657115	0.954592
776	H	0.539084	0.00338719	0.954614
777	H	0.510548	0.0349219	0.0654269
778	H	0.539118	0.506554	0.818524
779	H	0.478768	0.503404	0.818547
780	H	0.510411	0.475053	0.707644
781	H	0.5071	0.535074	0.707689
782	H	0.0390497	0.503303	0.457334
783	H	0.00768023	0.475324	0.568146
784	H	0.0102403	0.53504	0.568034
785	C	0.00890907	0.00511466	0.30355
786	C	0.0088408	0.00501304	0.222731
787	C	0.508909	0.00497917	0.969622
788	C	0.508841	0.00501304	0.0503961
789	C	0.508943	0.504996	0.803471
790	C	0.508807	0.50503	0.722652
791	C	0.0088408	0.504861	0.472297
792	C	0.0089432	0.505132	0.553003
793	C	0.968392	0.960133	0.263175
794	H	0.937329	0.958338	0.27737
795	H	0.969143	0.928869	0.24943
796	C	0.548846	0.959659	0.0099754
797	H	0.547959	0.928395	0.0236295
798	C	0.462998	0.965586	0.00986256
799	H	0.459721	0.934661	0.0237875
800	H	0.437978	0.0527385	0.995735



801	H	0.579806	0.957321	0.995757
802	H	0.43197	0.96728	0.995757
803	H	0.58578	0.0426786	0.995735
804	C	0.973273	0.91173	0.322147
805	H	0.943098	0.93334	0.320161
806	C	0.972419	0.875385	0.34212
807	H	0.941869	0.868679	0.355323
808	C	0.103427	0.970633	0.203773
809	H	0.0807619	0.9413	0.204428
810	C	0.141248	0.969786	0.184725
811	H	0.14787	0.940047	0.170936
812	C	0.413947	0.971277	0.068925
813	H	0.435486	0.941165	0.0674806
814	C	0.376741	0.970904	0.0884696
815	H	0.3693	0.940894	0.10183
816	C	0.975253	0.599871	0.453497
817	H	0.945761	0.577279	0.453339
818	C	0.974536	0.638451	0.435419
819	H	0.944805	0.645835	0.42154
820	C	0.967675	0.153406	0.328015
821	H	0.937739	0.174948	0.330317
822	C	0.967231	0.116994	0.307883
823	H	0.936271	0.110964	0.294816
824	C	0.85568	0.964739	0.201878
825	H	0.832708	0.935779	0.201246
826	C	0.893808	0.964333	0.22079
827	H	0.899611	0.934255	0.234512
828	C	0.658691	0.961894	0.0739579
829	H	0.680161	0.931884	0.0758988
830	C	0.621416	0.962131	0.0542779
831	H	0.614726	0.931613	0.041188
832	C	0.967231	0.351556	0.453452
833	H	0.937875	0.328896	0.453339
834	C	0.966992	0.390543	0.471326
835	H	0.936578	0.397283	0.484777
836	H	0.978632	0.0038614	0.318513
837	H	0.010172	0.974833	0.207881
838	H	0.507134	0.975172	0.0654495
839	H	0.9787	0.506351	0.457334
840	C	0.00638312	0.0480303	0.440181
841	C	0.011435	0.961996	0.440227
842	C	0.0521914	0.00751956	0.399377
843	C	0.965661	0.00247265	0.399355
844	C	0.511776	0.047861	0.14672
845	C	0.465558	0.0079599	0.187434
846	C	0.552123	0.0021678	0.187479
847	C	0.505905	0.547776	0.940486
848	C	0.511947	0.462216	0.940464
849	C	0.551918	0.508045	0.899749
850	C	0.465797	0.502015	0.899795
851	C	0.0116739	0.547844	0.649304
852	C	0.00600765	0.462047	0.649394
853	C	0.965729	0.507841	0.690108
854	C	0.0520208	0.502252	0.690086
855	C	0.0494607	0.0499949	0.419824
856	C	0.0542054	0.964875	0.419779
857	C	0.963579	0.0451174	0.419757
858	C	0.468938	0.0503675	0.167099
859	C	0.554615	0.0447786	0.167009
860	C	0.548812	0.550486	0.920039

861	C	0.468972	0.45954	0.920061
862	C	0.554752	0.465569	0.920174
863	C	0.463032	0.544491	0.920265
864	C	0.968904	0.550317	0.669819
865	C	0.048778	0.459676	0.669909
866	C	0.96334	0.465163	0.669841
867	C	0.0543419	0.544863	0.669728
868	H	0.0804888	0.0516546	0.43402
869	H	0.056151	0.934018	0.405629
870	H	0.961701	0.0759747	0.405606
871	H	0.43791	0.0529756	0.152971
872	H	0.557585	0.0756359	0.181002
873	H	0.579977	0.55323	0.934054
874	H	0.437875	0.456763	0.934122
875	H	0.557721	0.43461	0.906204
876	H	0.460097	0.575416	0.906294
877	H	0.937705	0.553399	0.655916
878	H	0.0799768	0.456525	0.655984
879	H	0.961087	0.434441	0.68406
880	H	0.0566289	0.575619	0.683902
881	H	0.0488463	0.0812926	0.406148
882	H	0.0856772	0.965688	0.433569
883	H	0.932141	0.0443722	0.433546
884	H	0.47003	0.0814619	0.180956
885	H	0.585814	0.043356	0.153061
886	H	0.547413	0.581547	0.906159
887	H	0.470371	0.428479	0.906159
888	H	0.58595	0.467127	0.934189
889	H	0.431868	0.542967	0.934302
890	H	0.970406	0.581174	0.683879
891	H	0.0472761	0.428886	0.684037
892	H	0.931868	0.465874	0.656142
893	H	0.0858138	0.544084	0.656029
894	C	0.00542736	0.0897944	0.460674
895	C	0.0123908	0.920232	0.460674
896	C	0.093494	0.00829861	0.378298
897	C	0.92429	0.00159198	0.378343
898	C	0.512459	0.0885073	0.125528
899	C	0.4233	0.00955187	0.207655
900	C	0.594245	0.000508078	0.207791
901	C	0.504437	0.589303	0.960979
902	C	0.513347	0.420621	0.960866
903	C	0.592777	0.509061	0.878445
904	C	0.424836	0.500898	0.878603
905	C	0.0130052	0.589066	0.628428
906	C	0.00460814	0.420723	0.628631
907	C	0.92388	0.508654	0.710623
908	C	0.0938012	0.50144	0.710623
909	C	0.0435896	0.0992108	0.478955
910	C	0.914732	0.0402398	0.36083
911	C	0.473546	0.0965349	0.107653
912	C	0.604519	0.038072	0.226139
913	C	0.542292	0.598245	0.979575
914	C	0.475526	0.411781	0.97953
915	C	0.601004	0.470582	0.86048
916	C	0.416371	0.539376	0.86066
917	C	0.0432824	0.41046	0.61105
918	C	0.915688	0.470955	0.729288
919	C	0.102198	0.539241	0.72913
920	H	0.0731158	0.0766182	0.478413

921	H	0.936203	0.0703181	0.362951
922	H	0.443849	0.0744166	0.109729
923	H	0.582093	0.0676083	0.226049
924	H	0.571375	0.575179	0.979508
925	H	0.446614	0.435085	0.979643
926	H	0.578748	0.441046	0.862466
927	H	0.43849	0.56898	0.862601
928	H	0.0735937	0.431901	0.612472
929	H	0.939343	0.442367	0.729039
930	H	0.0788162	0.567998	0.728723
931	C	0.0445112	0.137012	0.497732
932	C	0.878277	0.0409173	0.340698
933	C	0.472385	0.132236	0.0872283
934	C	0.643091	0.0385123	0.24451
935	C	0.543351	0.636317	0.998104
936	C	0.474229	0.373539	0.997856
937	C	0.637015	0.469566	0.840078
938	C	0.380223	0.540257	0.840371
939	C	0.0437602	0.373302	0.591708
940	C	0.877697	0.469464	0.748065
941	C	0.140087	0.540595	0.74802
942	H	0.0745153	0.143752	0.511454
943	H	0.871382	0.0711987	0.327541
944	H	0.441937	0.138163	0.0736194
945	H	0.650669	0.0680148	0.258322
946	H	0.643091	0.43942	0.826378
947	H	0.373942	0.570369	0.826672
948	H	0.0741057	0.365783	0.57846
949	H	0.871518	0.43986	0.762193
950	H	0.146471	0.570233	0.76208
951	C	0.006861	0.166548	0.498905
952	C	0.0107523	0.843275	0.49877
953	C	0.167258	0.00738407	0.33729
954	C	0.850287	0.00243878	0.337494
955	C	0.510616	0.16079	0.0844072
956	C	0.344689	0.00900992	0.244781
957	C	0.672617	0.000846797	0.245187
958	C	0.506008	0.666328	0.998285
959	C	0.511333	0.343224	0.997833
960	C	0.665722	0.507604	0.837324
961	C	0.351686	0.502083	0.837663
962	C	0.012459	0.664363	0.588865
963	C	0.00512015	0.345155	0.589293
964	C	0.847078	0.506182	0.748516
965	C	0.17033	0.50354	0.748742
966	C	0.0489145	0.852285	0.480512
967	C	0.158144	0.0460658	0.354759
968	C	0.549734	0.152864	0.101988
969	C	0.35469	0.046811	0.226703
970	C	0.46747	0.657047	0.980433
971	C	0.54987	0.352369	0.979936
972	C	0.657394	0.546489	0.85477
973	C	0.360288	0.463232	0.855063
974	C	0.0513722	0.654303	0.606152
975	C	0.855304	0.544288	0.730281
976	C	0.161933	0.4654	0.730619
977	H	0.0778946	0.829218	0.480873
978	H	0.179922	0.0757376	0.352457
979	H	0.579362	0.175016	0.099754
980	H	0.331786	0.075873	0.226816

981	H	0.438251	0.680012	0.980862
982	H	0.578919	0.329133	0.980185
983	H	0.679478	0.576093	0.852423
984	H	0.338306	0.433526	0.852739
985	H	0.0814446	0.67588	0.604369
986	H	0.831581	0.57274	0.730642
987	H	0.185384	0.436744	0.731206
988	C	0.0496313	0.890391	0.461802
989	C	0.121621	0.0464045	0.375003
990	C	0.550485	0.116892	0.122436
991	C	0.393637	0.0468787	0.20849
992	C	0.46689	0.618704	0.962017
993	C	0.550655	0.390882	0.961678
994	C	0.621075	0.546997	0.875195
995	C	0.396675	0.462859	0.87542
996	C	0.0514405	0.617078	0.625629
997	C	0.893603	0.545371	0.711548
998	C	0.123771	0.464451	0.711797
999	H	0.0798744	0.896047	0.44799
1000	H	0.115715	0.0770247	0.388138
1001	H	0.581103	0.11154	0.135887
1002	H	0.400089	0.0768215	0.194791
1003	H	0.436613	0.612472	0.948408
1004	H	0.580898	0.397012	0.948002
1005	H	0.615374	0.577482	0.88851
1006	H	0.402512	0.432409	0.888691
1007	H	0.0822638	0.610473	0.638696
1008	H	0.899133	0.57528	0.697646
1009	H	0.118105	0.434475	0.69803
1010	C	0.00744129	0.204823	0.518157
1011	C	0.010172	0.804898	0.517908
1012	C	0.204123	0.00697761	0.31664
1013	C	0.813217	0.0027775	0.316978
1014	C	0.509421	0.198117	0.0644113
1015	C	0.305502	0.00836636	0.263536
1016	C	0.711667	0.00142262	0.264032
1017	C	0.509831	0.303424	0.015595
1018	C	0.703475	0.506249	0.817486
1019	C	0.313797	0.503336	0.817915
1020	C	0.0116398	0.702435	0.569433
1021	C	0.00587111	0.307015	0.569907
1022	C	0.808028	0.504928	0.767226
1023	C	0.209244	0.504657	0.767587
1024	C	0.00737302	0.237544	0.534722
1025	C	0.010172	0.772008	0.534338
1026	C	0.235971	0.00704535	0.299149
1027	C	0.781233	0.00270975	0.299601
1028	C	0.50867	0.231142	0.0481166
1029	C	0.27246	0.00748569	0.280056
1030	C	0.744675	0.00226942	0.280575
1031	C	0.508773	0.268977	0.0305356
1032	C	0.736653	0.504928	0.801124
1033	C	0.280516	0.504556	0.80162
1034	C	0.0106841	0.735156	0.552845
1035	C	0.006861	0.274295	0.553341
1036	C	0.774201	0.504488	0.783024
1037	C	0.242968	0.50503	0.783498
1038	H	0.0393569	0.00640179	0.47505
1039	H	0.00761196	0.0351252	0.364418
1040	H	0.478837	0.0065034	0.11158

1041	H	0.539016	0.00365816	0.111603
1042	H	0.510479	0.0350235	0.222348
1043	H	0.53922	0.506622	0.975468
1044	H	0.478734	0.503336	0.975513
1045	H	0.510343	0.475121	0.86461
1046	H	0.507236	0.535007	0.864655
1047	H	0.0389473	0.503303	0.614322
1048	H	0.00747542	0.475223	0.725135
1049	H	0.0103427	0.53504	0.725067
1050	C	0.00890907	0.00504691	0.460155
1051	C	0.00890907	0.00497917	0.379359
1052	C	0.508909	0.00508078	0.126679
1053	C	0.508807	0.00504691	0.207407
1054	C	0.508943	0.504996	0.960505
1055	C	0.508807	0.505064	0.879686
1056	C	0.0088408	0.504894	0.629353
1057	C	0.00887493	0.505098	0.710104
1058	C	0.505974	0.962301	0.14672
1059	C	0.548812	0.95976	0.167099
1060	C	0.463135	0.965383	0.166986
1061	H	0.579874	0.957254	0.152994
1062	H	0.460165	0.934526	0.181002
1063	H	0.547754	0.928666	0.180956
1064	H	0.431936	0.966738	0.153039
1065	C	0.505154	0.921553	0.125573
1066	C	0.543999	0.91339	0.107631
1067	H	0.573764	0.935474	0.109617
1068	C	0.545023	0.877553	0.087296
1069	H	0.575403	0.87149	0.0736645
1070	C	0.506724	0.849067	0.0846104
1071	C	0.467641	0.85723	0.102169
1072	H	0.43791	0.835179	0.100002
1073	C	0.46706	0.893304	0.122526
1074	H	0.436442	0.898859	0.135977
1075	C	0.507817	0.811537	0.0647724
1076	C	0.507373	0.706026	0.0161592
1077	C	0.508465	0.778342	0.0486583
1078	C	0.508329	0.740406	0.0311449
1079	C	0.968323	0.960099	0.41987
1080	H	0.937295	0.958473	0.434088
1081	H	0.968869	0.928734	0.406238
1082	C	0.974399	0.911052	0.479158
1083	H	0.94501	0.933848	0.478797
1084	C	0.973375	0.873184	0.497867
1085	H	0.943474	0.866579	0.511724
1086	C	0.102949	0.969617	0.360807
1087	H	0.0814787	0.939573	0.363019
1088	C	0.139268	0.968906	0.340585
1089	H	0.146061	0.93859	0.327428
1090	C	0.413162	0.97209	0.226071
1091	H	0.435725	0.942655	0.226162
1092	C	0.374454	0.971514	0.24433
1093	H	0.36691	0.942045	0.258209
1094	C	0.974399	0.599092	0.610734
1095	H	0.944156	0.57755	0.612178
1096	C	0.973887	0.636114	0.591279
1097	H	0.943576	0.643363	0.577941
1098	H	0.573082	0.643024	0.0122548
1099	H	0.444532	0.3669	0.0120292
1100	C	0.968631	0.157335	0.480805

1101	H	0.93948	0.180232	0.481369
1102	C	0.967982	0.119331	0.462028
1103	H	0.937602	0.113505	0.448374
1104	C	0.859571	0.963723	0.354894
1105	H	0.837862	0.933984	0.35266
1106	C	0.896232	0.963452	0.375048
1107	H	0.902307	0.932832	0.388183
1108	C	0.662445	0.962944	0.227222
1109	H	0.685111	0.933713	0.227538
1110	C	0.623635	0.963012	0.208897
1111	H	0.617047	0.932968	0.19531
1112	C	0.966139	0.355452	0.606468
1113	H	0.935998	0.333943	0.604685
1114	C	0.966105	0.392779	0.625855
1115	H	0.935247	0.399553	0.638832
1116	H	0.978529	0.00372591	0.475073
1117	H	0.0102062	0.974867	0.364418
1118	H	0.507134	0.975104	0.222348
1119	H	0.978734	0.506419	0.6143
1120	C	0.00614418	0.0480981	0.594281
1121	C	0.0116739	0.96186	0.594281
1122	C	0.0522938	0.00775666	0.55359
1123	C	0.965593	0.00220167	0.553544
1124	C	0.511913	0.0479626	0.30091
1125	C	0.505837	0.962267	0.300887
1126	C	0.465456	0.00812926	0.341488
1127	C	0.552191	0.00206619	0.341511
1128	C	0.505803	0.547844	0.0948114
1129	C	0.512049	0.462148	0.0947889
1130	C	0.552021	0.508146	0.0541876
1131	C	0.465695	0.501914	0.0542328
1132	C	0.0118788	0.547946	0.803719
1133	C	0.00573457	0.461979	0.803787
1134	C	0.0520549	0.502049	0.844388
1135	C	0.0493583	0.0501982	0.574014
1136	C	0.0545467	0.965112	0.573947
1137	C	0.963271	0.0448464	0.573924
1138	C	0.469108	0.0506046	0.321267
1139	C	0.548641	0.959625	0.321244
1140	C	0.462964	0.965451	0.321109
1141	C	0.554786	0.0447448	0.321131
1142	C	0.54888	0.550554	0.0744995
1143	C	0.468904	0.459472	0.0745221
1144	C	0.554922	0.465705	0.0746124
1145	C	0.462896	0.544288	0.0746801
1146	C	0.0485049	0.459405	0.824279
1147	C	0.0545126	0.544796	0.824144
1148	H	0.080284	0.0519934	0.588278
1149	H	0.0568337	0.934356	0.559728
1150	H	0.961053	0.0756359	0.559706
1151	H	0.43808	0.0533821	0.307139
1152	H	0.57967	0.956949	0.307139
1153	H	0.459995	0.934695	0.335214
1154	H	0.557789	0.0755005	0.335237
1155	H	0.579909	0.553094	0.0886276
1156	H	0.437944	0.456898	0.0886953
1157	H	0.558063	0.43478	0.0606423
1158	H	0.459756	0.575246	0.06071
1159	H	0.0796354	0.456085	0.810355
1160	H	0.0566972	0.575416	0.83843

1161	H	0.048778	0.0814619	0.560315
1162	H	0.0859162	0.966128	0.587849
1163	H	0.931902	0.0438641	0.587804
1164	H	0.470474	0.0815635	0.335259
1165	H	0.547344	0.928632	0.335214
1166	H	0.4318	0.966907	0.307139
1167	H	0.58595	0.0432544	0.307184
1168	H	0.547583	0.581648	0.0606423
1169	H	0.470167	0.428412	0.0606649
1170	H	0.58595	0.4675	0.088763
1171	H	0.431868	0.542526	0.0888533
1172	H	0.0467299	0.42875	0.838498
1173	H	0.0860186	0.54405	0.81049
1174	C	0.00498362	0.0903702	0.614345
1175	C	0.0128345	0.919554	0.6143
1176	C	0.093494	0.00867121	0.53242
1177	C	0.924324	0.00121939	0.53242
1178	C	0.512561	0.0884734	0.279582
1179	C	0.505052	0.921722	0.279605
1180	C	0.422788	0.00992447	0.361349
1181	C	0.594723	0.000203231	0.361507
1182	C	0.50413	0.589947	0.114785
1183	C	0.513654	0.419944	0.114649
1184	C	0.592709	0.509128	0.0327699
1185	C	0.424904	0.500796	0.0329053
1186	C	0.0134148	0.5891	0.782776
1187	C	0.00423266	0.420757	0.782933
1188	C	0.0944839	0.500931	0.864384
1189	C	0.0419853	0.0992785	0.633709
1190	C	0.914459	0.0400027	0.51511
1191	C	0.473307	0.096772	0.262091
1192	C	0.544238	0.913254	0.262046
1193	C	0.604554	0.0368188	0.380758
1194	C	0.5412	0.59916	0.133968
1195	C	0.476652	0.4109	0.133923
1196	C	0.601345	0.470277	0.0152114
1197	C	0.416098	0.539613	0.0153693
1198	C	0.0430776	0.410121	0.765601
1199	C	0.103256	0.538021	0.883455
1200	H	0.0708288	0.075873	0.634408
1201	H	0.935554	0.0703181	0.517525
1202	H	0.443269	0.0751617	0.264732
1203	H	0.574276	0.934864	0.264529
1204	H	0.581547	0.0658808	0.381661
1205	H	0.569975	0.575687	0.134939
1206	H	0.448116	0.434576	0.135119
1207	H	0.57967	0.440402	0.0177842
1208	H	0.437602	0.569556	0.0178745
1209	H	0.0736619	0.431088	0.767406
1210	H	0.079533	0.566474	0.884109
1211	C	0.0427021	0.137655	0.651967
1212	C	0.878209	0.0405108	0.494843
1213	C	0.472181	0.131999	0.241328
1214	C	0.545194	0.877858	0.241373
1215	C	0.643535	0.037022	0.398768
1216	C	0.542088	0.638045	0.151707
1217	C	0.47556	0.371812	0.151482
1218	C	0.380496	0.540392	0.994651
1219	C	0.0433165	0.373234	0.746011
1220	C	0.142101	0.539105	0.90151

1221	H	0.0718869	0.143989	0.666501
1222	H	0.871075	0.0709278	0.481821
1223	H	0.441494	0.13813	0.22799
1224	H	0.575812	0.871558	0.228012
1225	H	0.650806	0.065847	0.413302
1226	H	0.571238	0.645056	0.166287
1227	H	0.446443	0.364902	0.166129
1228	H	0.373976	0.570775	0.981268
1229	H	0.0737985	0.365512	0.732989
1230	H	0.148826	0.568269	0.915954
1231	C	0.00600765	0.168411	0.651538
1232	C	0.0116398	0.841378	0.65138
1233	C	0.166815	0.00809538	0.491006
1234	C	0.850765	0.00172747	0.491209
1235	C	0.510855	0.159774	0.23774
1236	C	0.506486	0.850117	0.237965
1237	C	0.343255	0.00975511	0.397684
1238	C	0.674017	0.000101616	0.398136
1239	C	0.505291	0.668699	0.150534
1240	C	0.512049	0.340853	0.15006
1241	C	0.352779	0.501744	0.99113
1242	C	0.0133124	0.663821	0.742716
1243	C	0.00426679	0.345764	0.743077
1244	C	0.172993	0.502591	0.900855
1245	C	0.0483001	0.849507	0.6317
1246	C	0.157394	0.0469126	0.508294
1247	C	0.55028	0.151644	0.255005
1248	C	0.467094	0.858483	0.25523
1249	C	0.35254	0.0464045	0.378411
1250	C	0.467675	0.65952	0.131824
1251	C	0.549597	0.349863	0.131237
1252	C	0.656096	0.547031	0.00801192
1253	C	0.361585	0.462622	0.00826017
1254	C	0.052328	0.653457	0.7598
1255	C	0.164528	0.465366	0.881875
1256	H	0.0762903	0.825323	0.630459
1257	H	0.178727	0.0768215	0.505653
1258	H	0.580182	0.173255	0.252161
1259	H	0.43709	0.836941	0.252499
1260	H	0.328714	0.0746875	0.37726
1261	H	0.43907	0.68323	0.130899
1262	H	0.577963	0.325882	0.130109
1263	H	0.677567	0.576974	0.00505541
1264	H	0.340217	0.432612	0.00532623
1265	H	0.0827417	0.674525	0.757656
1266	H	0.188729	0.437286	0.881085
1267	C	0.0488463	0.888223	0.613555
1268	C	0.121109	0.0470481	0.528741
1269	C	0.550928	0.116147	0.275813
1270	C	0.466582	0.894116	0.275948
1271	C	0.391897	0.046269	0.360627
1272	C	0.467299	0.62033	0.114243
1273	C	0.550177	0.389222	0.113814
1274	C	0.620289	0.547438	0.0288429
1275	C	0.39746	0.462419	0.029046
1276	C	0.0521914	0.616536	0.779548
1277	C	0.12541	0.464689	0.863933
1278	H	0.077997	0.8931	0.598592
1279	H	0.11493	0.0778037	0.541718
1280	H	0.58182	0.110524	0.288971



1281	H	0.435759	0.899909	0.289106
1282	H	0.397665	0.0752972	0.345934
1283	H	0.437739	0.614233	0.0999346
1284	H	0.579704	0.395183	0.0994155
1285	H	0.61435	0.578159	0.0418877
1286	H	0.403536	0.431731	0.0420682
1287	H	0.0831171	0.609593	0.792458
1288	H	0.119812	0.435389	0.849466
1289	C	0.00621245	0.206788	0.670699
1290	C	0.011435	0.802899	0.670428
1291	C	0.203372	0.00792602	0.47013
1292	C	0.813968	0.00189683	0.470491
1293	C	0.509899	0.196525	0.217315
1294	C	0.507305	0.813129	0.217698
1295	C	0.304035	0.00945026	0.416394
1296	C	0.713135	0.000372591	0.416936
1297	C	0.506315	0.7086	0.168183
1298	C	0.510855	0.300816	0.167573
1299	C	0.315572	0.502625	0.970796
1300	C	0.0128004	0.701487	0.722878
1301	C	0.00477881	0.308031	0.723284
1302	C	0.212213	0.503303	0.919429
1303	C	0.00604178	0.239305	0.687445
1304	C	0.0115374	0.770213	0.687061
1305	C	0.234947	0.00812926	0.452369
1306	C	0.782257	0.00165972	0.452865
1307	C	0.509489	0.229076	0.200591
1308	C	0.507612	0.780408	0.201156
1309	C	0.271129	0.00863733	0.43305
1310	C	0.745972	0.00115164	0.433614
1311	C	0.507305	0.742845	0.183326
1312	C	0.509797	0.266538	0.182649
1313	C	0.282871	0.503438	0.954005
1314	C	0.0120153	0.733767	0.705906
1315	C	0.0055639	0.275717	0.706358
1316	C	0.245767	0.503675	0.935498
1317	H	0.039391	0.00657115	0.628947
1318	H	0.00747542	0.0352268	0.518834
1319	H	0.478666	0.00667276	0.265996
1320	H	0.539186	0.00359042	0.266041
1321	H	0.510616	0.035159	0.376199
1322	H	0.539391	0.506757	0.12959
1323	H	0.478632	0.503167	0.129635
1324	H	0.510479	0.474952	0.0193189
1325	H	0.5071	0.535176	0.019364
1326	H	0.0390838	0.503133	0.768986
1327	H	0.00720235	0.475053	0.879212
1328	H	0.0104792	0.535176	0.879144
1329	C	0.00887493	0.00497917	0.614164
1330	C	0.0089432	0.0049453	0.533661
1331	C	0.508909	0.00511466	0.280981
1332	C	0.508807	0.00504691	0.361394
1333	C	0.508977	0.504962	0.114785
1334	C	0.508807	0.50503	0.0342594
1335	C	0.00880666	0.504928	0.783859
1336	C	0.0088408	0.505098	0.864339
1337	C	0.965593	0.508045	0.844388
1338	C	0.969143	0.550588	0.824189
1339	C	0.963135	0.46523	0.824212
1340	H	0.938012	0.553873	0.810242

1341	H	0.96095	0.434644	0.838543
1342	H	0.970918	0.581309	0.838385
1343	H	0.931629	0.465942	0.810558
1344	C	0.923095	0.509162	0.864339
1345	C	0.91463	0.472242	0.883613
1346	H	0.938661	0.443993	0.88447
1347	C	0.636845	0.469363	0.994426
1348	C	0.875683	0.470955	0.901555
1349	H	0.643194	0.438946	0.981065
1350	H	0.869197	0.441927	0.916134
1351	C	0.664664	0.507909	0.99086
1352	C	0.844416	0.50713	0.900607
1353	C	0.852574	0.544186	0.881469
1354	H	0.828168	0.572029	0.880408
1355	C	0.891794	0.545067	0.863617
1356	H	0.897256	0.57423	0.84897
1357	C	0.701768	0.506893	0.970457
1358	C	0.805059	0.506283	0.919068
1359	C	0.734366	0.506012	0.953576
1360	C	0.771471	0.505809	0.93507
1361	C	0.968494	0.959794	0.574014
1362	H	0.937534	0.958033	0.5883
1363	H	0.96904	0.928496	0.560338
1364	C	0.976038	0.910883	0.633889
1365	H	0.947365	0.934492	0.634792
1366	C	0.975253	0.872472	0.652102
1367	H	0.946204	0.866308	0.666795
1368	C	0.103325	0.969854	0.515155
1369	H	0.0822638	0.939539	0.51766
1370	C	0.139405	0.969312	0.49473
1371	H	0.146436	0.938861	0.481731
1372	C	0.413094	0.973411	0.380713
1373	H	0.436305	0.944552	0.381819
1374	C	0.373976	0.973106	0.398587
1375	H	0.366808	0.944348	0.413212
1376	C	0.974604	0.599533	0.765352
1377	H	0.944054	0.578498	0.76718
1378	C	0.974331	0.63625	0.745672
1379	H	0.943849	0.643837	0.73256
1380	C	0.969143	0.160045	0.632039
1381	H	0.940982	0.18406	0.631046
1382	C	0.968699	0.121397	0.613848
1383	H	0.939377	0.11635	0.599088
1384	C	0.860322	0.96291	0.508452
1385	H	0.839057	0.932934	0.505902
1386	C	0.896744	0.962809	0.528786
1387	H	0.903093	0.932053	0.541741
1388	C	0.664562	0.963351	0.378997
1389	H	0.688149	0.93483	0.37805
1390	C	0.625307	0.963588	0.361078
1391	H	0.619402	0.934424	0.346544
1392	C	0.965183	0.356332	0.760049
1393	H	0.934769	0.335332	0.757905
1394	C	0.965388	0.393388	0.779729
1395	H	0.934428	0.400434	0.792548
1396	H	0.978393	0.00345493	0.628947
1397	H	0.0104451	0.974765	0.518811
1398	H	0.506998	0.974969	0.376176
1399	H	0.978598	0.506656	0.768941
1400	C	0.0067586	0.0481658	0.746688

1401	C	0.0110254	0.96186	0.746711
1402	C	0.0524304	0.00714697	0.706019
1403	C	0.96549	0.00281137	0.705974
1404	C	0.511435	0.0479965	0.453316
1405	C	0.506349	0.962233	0.453294
1406	C	0.465456	0.00765505	0.493873
1407	C	0.55226	0.00250652	0.493895
1408	C	0.506247	0.547912	0.247399
1409	C	0.51164	0.462114	0.247399
1410	C	0.552123	0.507706	0.206798
1411	C	0.465627	0.502354	0.206865
1412	C	0.0112643	0.548115	0.956059
1413	C	0.00638312	0.461911	0.956126
1414	C	0.052089	0.502659	0.99675
1415	C	0.049802	0.0497917	0.726286
1416	C	0.0541029	0.964604	0.726512
1417	C	0.963715	0.0453883	0.726444
1418	C	0.468869	0.0504353	0.473854
1419	C	0.548915	0.959794	0.473809
1420	C	0.463203	0.965247	0.473222
1421	C	0.554581	0.044948	0.473245
1422	C	0.549153	0.550351	0.226884
1423	C	0.468699	0.459709	0.226952
1424	C	0.554786	0.465501	0.227403
1425	C	0.463067	0.544558	0.227448
1426	C	0.0489828	0.459879	0.976709
1427	C	0.0541029	0.545236	0.976303
1428	H	0.0808984	0.0519934	0.740346
1429	H	0.0562534	0.93378	0.712316
1430	H	0.961633	0.0762456	0.712271
1431	H	0.437739	0.0535176	0.459839
1432	H	0.580045	0.956813	0.459771
1433	H	0.459619	0.934322	0.487034
1434	H	0.558199	0.075873	0.487057
1435	H	0.580284	0.553365	0.240831
1436	H	0.437602	0.456763	0.240944
1437	H	0.558199	0.434475	0.213478
1438	H	0.459653	0.575551	0.213523
1439	H	0.0801816	0.456729	0.962762
1440	H	0.0566289	0.576059	0.990341
1441	H	0.0491535	0.0808522	0.712316
1442	H	0.0854724	0.96518	0.740414
1443	H	0.93238	0.0448125	0.740346
1444	H	0.470303	0.0812587	0.487914
1445	H	0.547549	0.928903	0.487824
1446	H	0.432312	0.967212	0.458914
1447	H	0.585438	0.0429496	0.458936
1448	H	0.547515	0.581208	0.212733
1449	H	0.470235	0.428852	0.212824
1450	H	0.585745	0.467331	0.241599
1451	H	0.432141	0.542729	0.241666
1452	H	0.0475492	0.429191	0.990905
1453	H	0.0853359	0.54422	0.962333
1454	C	0.0066562	0.0907089	0.766503
1455	C	0.0110937	0.919283	0.766481
1456	C	0.0938012	0.0075873	0.685008
1457	C	0.924085	0.00233716	0.684985
1458	C	0.511469	0.0884734	0.432012
1459	C	0.506144	0.921688	0.432012
1460	C	0.422344	0.0084341	0.513372

1461	C	0.595235	0.00162585	0.513507
1462	C	0.505496	0.590319	0.267101
1463	C	0.512323	0.419605	0.266989
1464	C	0.592811	0.508146	0.185335
1465	C	0.42487	0.501778	0.18547
1466	C	0.012186	0.589506	0.935318
1467	C	0.0054615	0.420418	0.935453
1468	C	0.922652	0.507536	0.0163398
1469	C	0.0948935	0.502557	0.0164301
1470	C	0.0414391	0.0963655	0.788102
1471	C	0.914152	0.0410527	0.667652
1472	C	0.472283	0.0963317	0.414363
1473	C	0.545228	0.913694	0.414318
1474	C	0.602198	0.0363107	0.534812
1475	C	0.540825	0.596857	0.288158
1476	C	0.477232	0.413305	0.288271
1477	C	0.601072	0.469329	0.167686
1478	C	0.416439	0.540494	0.167776
1479	C	0.0444088	0.409579	0.918324
1480	C	0.916712	0.47231	0.0373739
1481	C	0.10114	0.538089	0.0371933
1482	H	0.067825	0.0705213	0.790471
1483	H	0.935588	0.0711987	0.669616
1484	H	0.442688	0.0740778	0.416507
1485	H	0.574891	0.93588	0.416304
1486	H	0.576871	0.0630356	0.53743
1487	H	0.567415	0.571317	0.290686
1488	H	0.450983	0.439183	0.29107
1489	H	0.578987	0.439725	0.169943
1490	H	0.438387	0.570166	0.169943
1491	H	0.0748225	0.430851	0.919768
1492	H	0.942688	0.446059	0.0395856
1493	H	0.0754711	0.564678	0.0391117
1494	C	0.0427362	0.134438	0.806608
1495	C	0.877287	0.0417979	0.647837
1496	C	0.470713	0.1321	0.394006
1497	C	0.546628	0.87779	0.394051
1498	C	0.64118	0.0372591	0.552822
1499	C	0.542429	0.635674	0.305942
1500	C	0.475355	0.374318	0.305852
1501	C	0.636913	0.46811	0.147148
1502	C	0.380461	0.541544	0.147329
1503	C	0.0450232	0.371947	0.899388
1504	C	0.877901	0.470379	0.0554289
1505	C	0.139814	0.53985	0.0553838
1506	H	0.0700096	0.13813	0.823061
1507	H	0.869914	0.072181	0.63486
1508	H	0.440128	0.13813	0.380577
1509	H	0.577144	0.871592	0.380577
1510	H	0.646095	0.0644243	0.569094
1511	H	0.570112	0.640551	0.322124
1512	H	0.447809	0.36961	0.322169
1513	H	0.643091	0.437727	0.13372
1514	H	0.374113	0.571859	0.133855
1515	H	0.0756417	0.363818	0.886592
1516	H	0.8736	0.442807	0.0715205
1517	H	0.144354	0.567625	0.0712948
1518	C	0.00901147	0.168174	0.804103
1519	C	0.00853359	0.841615	0.803877
1520	C	0.168214	0.00663889	0.644406

1521	C	0.849433	0.00321783	0.644587
1522	C	0.508943	0.160621	0.390959
1523	C	0.508329	0.84927	0.391162
1524	C	0.342845	0.00670664	0.549617
1525	C	0.674495	0.00308234	0.550046
1526	C	0.508226	0.668868	0.302896
1527	C	0.509046	0.340751	0.302444
1528	C	0.665347	0.506283	0.143853
1529	C	0.35213	0.503269	0.144124
1530	C	0.0114009	0.665583	0.896387
1531	C	0.00621245	0.344071	0.896748
1532	C	0.844143	0.504048	0.0527432
1533	C	0.173129	0.50564	0.0531043
1534	C	0.0423949	0.846255	0.781625
1535	C	0.158827	0.0453883	0.661762
1536	C	0.548403	0.152796	0.408247
1537	C	0.468938	0.857365	0.40845
1538	C	0.348887	0.0408156	0.527861
1539	C	0.472658	0.662636	0.282019
1540	C	0.544409	0.346747	0.281365
1541	C	0.65695	0.545439	0.161028
1542	C	0.360766	0.46418	0.161299
1543	C	0.050553	0.654981	0.913291
1544	C	0.849536	0.539037	0.0315286
1545	C	0.167463	0.470413	0.0320928
1546	H	0.0676884	0.819666	0.778713
1547	H	0.180537	0.0751279	0.65955
1548	H	0.577997	0.174914	0.405741
1549	H	0.439275	0.835349	0.406057
1550	H	0.322706	0.066626	0.524927
1551	H	0.446204	0.688412	0.279582
1552	H	0.570487	0.320631	0.278657
1553	H	0.678727	0.575179	0.15832
1554	H	0.339091	0.434373	0.158636
1555	H	0.0807619	0.67632	0.911508
1556	H	0.823184	0.564814	0.029046
1557	H	0.193542	0.444298	0.0299488
1558	C	0.0435554	0.884632	0.763208
1559	C	0.121962	0.0456932	0.681735
1560	C	0.549461	0.11679	0.428649
1561	C	0.468084	0.893473	0.428762
1562	C	0.38821	0.0414253	0.510032
1563	C	0.471532	0.623548	0.264326
1564	C	0.545808	0.38597	0.263829
1565	C	0.620836	0.54615	0.181611
1566	C	0.396948	0.463672	0.181837
1567	C	0.0507578	0.617315	0.932407
1568	C	0.888551	0.540595	0.0134736
1569	C	0.128584	0.469058	0.0139475
1570	H	0.0702826	0.8868	0.746124
1571	H	0.115715	0.076415	0.694712
1572	H	0.580318	0.111235	0.441806
1573	H	0.437261	0.899231	0.441942
1574	H	0.391419	0.0683196	0.493331
1575	H	0.443644	0.619754	0.248234
1576	H	0.573457	0.389595	0.247579
1577	H	0.614965	0.576872	0.194656
1578	H	0.402956	0.433018	0.194881
1579	H	0.08182	0.610101	0.945068
1580	C	0.00921628	0.205907	0.823783

1581	C	0.00832878	0.803746	0.823444
1582	C	0.204874	0.0062663	0.62362
1583	C	0.812602	0.00355655	0.623914
1584	C	0.507612	0.197643	0.37076
1585	C	0.509523	0.812113	0.371121
1586	C	0.304035	0.00633404	0.568688
1587	C	0.713203	0.00342106	0.569185
1588	C	0.509558	0.708363	0.320883
1589	C	0.507544	0.301121	0.320319
1590	C	0.702587	0.504962	0.123564
1591	C	0.314753	0.504522	0.123948
1592	C	0.0106499	0.703452	0.876774
1593	C	0.00696341	0.3061	0.877226
1594	C	0.805195	0.503099	0.0715882
1595	C	0.211974	0.506486	0.0720621
1596	C	0.00880666	0.237916	0.840958
1597	C	0.00873839	0.771602	0.840529
1598	C	0.236039	0.0060292	0.605565
1599	C	0.781267	0.00375978	0.606017
1600	C	0.506759	0.230058	0.353946
1601	C	0.510274	0.77946	0.354488
1602	C	0.271709	0.00599533	0.58584
1603	C	0.745494	0.00375978	0.586359
1604	C	0.510309	0.742201	0.33641
1605	C	0.506724	0.267249	0.335801
1606	C	0.735083	0.503641	0.106592
1607	C	0.28212	0.505775	0.107089
1608	C	0.00955762	0.735562	0.85969
1609	C	0.00802157	0.273956	0.860164
1610	C	0.771914	0.502998	0.0878828
1611	C	0.245187	0.506453	0.0884019
1612	H	0.039118	0.00606307	0.781625
1613	H	0.00781677	0.0352606	0.671353
1614	H	0.478529	0.00630017	0.418561
1615	H	0.539255	0.00396301	0.418561
1616	H	0.510309	0.0348881	0.528854
1617	H	0.539186	0.506486	0.282448
1618	H	0.478939	0.50354	0.282539
1619	H	0.510206	0.474816	0.172132
1620	H	0.507441	0.535244	0.172155
1621	H	0.0391862	0.503573	0.921528
1622	C	0.00887493	0.00501304	0.766661
1623	C	0.0089432	0.00497917	0.686181
1624	C	0.508909	0.00511466	0.433456
1625	C	0.508841	0.00504691	0.513869
1626	C	0.509011	0.504996	0.267485
1627	C	0.508841	0.50503	0.186982
1628	C	0.00880666	0.504962	0.936311
1629	C	0.965524	0.507469	0.99675
1630	C	0.968596	0.550181	0.976619
1631	C	0.96351	0.464824	0.976348
1632	H	0.937432	0.553264	0.962626
1633	H	0.960984	0.434068	0.990431
1634	H	0.969996	0.580937	0.990769
1635	H	0.932277	0.465806	0.962355
1636	C	0.96805	0.960234	0.726263
1637	H	0.93692	0.958033	0.740324
1638	H	0.968699	0.92914	0.712316
1639	C	0.976652	0.913864	0.788327
1640	H	0.950539	0.939979	0.790945

1641	C	0.975218	0.87569	0.806744
1642	H	0.948218	0.872167	0.823377
1643	C	0.103632	0.968804	0.667697
1644	H	0.0822638	0.938692	0.669728
1645	C	0.14036	0.968059	0.647769
1646	H	0.147631	0.937642	0.634769
1647	C	0.415586	0.97402	0.53488
1648	H	0.441152	0.947566	0.537769
1649	C	0.376468	0.972936	0.552732
1650	H	0.371655	0.94594	0.569185
1651	C	0.973239	0.600176	0.91812
1652	H	0.942825	0.578871	0.91961
1653	C	0.97259	0.637672	0.899072
1654	H	0.94204	0.645666	0.886208
1655	C	0.974877	0.163296	0.782076
1656	H	0.949242	0.189649	0.779413
1657	C	0.973785	0.124987	0.763569
1658	H	0.94675	0.122718	0.746711
1659	C	0.858991	0.964468	0.661875
1660	H	0.837282	0.934661	0.659708
1661	C	0.895958	0.964197	0.681758
1662	H	0.902342	0.933476	0.694712
1663	C	0.668214	0.968668	0.528538
1664	H	0.694122	0.942519	0.525898
1665	C	0.629028	0.968194	0.510573
1666	H	0.625614	0.940995	0.494098
1667	C	0.966992	0.35491	0.913516
1668	H	0.936783	0.33357	0.911734
1669	C	0.966821	0.392643	0.932542
1670	H	0.935725	0.399993	0.945135
1671	H	0.891726	0.567964	0.997089
1672	H	0.125273	0.441452	0.997766
1673	H	0.978632	0.00399688	0.781602
1674	H	0.0101379	0.974732	0.671331
1675	H	0.507373	0.97524	0.528854
1676	H	0.978529	0.506317	0.921483
1677	H	0.00757783	0.475392	0.0318445
1678	H	0.0100014	0.534973	0.0317543
1679	C	0.00880666	0.505132	0.0167686

\*\*\*\*\*

#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials  
#  
\*\*\*\*\*

data\_DIA\_PPN-3.cif

_cell_length_a	43.103(0)
_cell_length_b	43.103(0)
_cell_length_c	31.85(0)
_cell_angle_alpha	90(0)
_cell_angle_beta	90(0)
_cell_angle_gamma	90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'
_symmetry_Int_Tables_number	1
_stmmetry_cell_setting	Tetragonal

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'+x,+y,+z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_type\_symbol  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z

0	C	0.470408	0.00243603	0.471177
1	C	0.470408	0.502424	0.471177
2	C	0.970396	0.00243603	0.471177
3	C	0.970396	0.502424	0.471177
4	C	0.0295803	0.497552	0.471177
5	C	0.0295803	0.997564	0.471177
6	C	0.529592	0.497552	0.471177
7	C	0.529592	0.997564	0.471177
8	C	0.00243603	0.0295803	0.528823
9	C	0.00243603	0.529592	0.528823
10	C	0.502424	0.0295803	0.528823
11	C	0.502424	0.529592	0.528823
12	C	0.497552	0.470408	0.528823
13	C	0.497552	0.970396	0.528823
14	C	0.997564	0.470408	0.528823
15	C	0.997564	0.970396	0.528823
16	C	0.279586	0.00243603	0.278838
17	C	0.279586	0.502424	0.278838
18	C	0.779575	0.00243603	0.278838
19	C	0.779575	0.502424	0.278838
20	C	0.220402	0.497552	0.278838
21	C	0.220402	0.997564	0.278838
22	C	0.720414	0.497552	0.278838
23	C	0.720414	0.997564	0.278838
24	C	0.24757	0.0295803	0.221162
25	C	0.24757	0.529592	0.221162
26	C	0.747558	0.0295803	0.221162
27	C	0.747558	0.529592	0.221162
28	C	0.252442	0.470408	0.221162
29	C	0.252442	0.970396	0.221162
30	C	0.75243	0.470408	0.221162
31	C	0.75243	0.970396	0.221162
32	C	0.220402	0.252442	0.971177
33	C	0.220402	0.75243	0.971177
34	C	0.720414	0.252442	0.971177
35	C	0.720414	0.75243	0.971177
36	C	0.279586	0.24757	0.971177
37	C	0.279586	0.747558	0.971177
38	C	0.779575	0.24757	0.971177
39	C	0.779575	0.747558	0.971177
40	C	0.252442	0.279586	0.0288226
41	C	0.252442	0.779575	0.0288226
42	C	0.75243	0.279586	0.0288226
43	C	0.75243	0.779575	0.0288226
44	C	0.24757	0.220402	0.0288226
45	C	0.24757	0.720414	0.0288226
46	C	0.747558	0.220402	0.0288226
47	C	0.747558	0.720414	0.0288226
48	C	0.0295803	0.252442	0.778838



49	C	0.0295803	0.75243	0.778838
50	C	0.529592	0.252442	0.778838
51	C	0.529592	0.75243	0.778838
52	C	0.470408	0.24757	0.778838
53	C	0.470408	0.747558	0.778838
54	C	0.970396	0.24757	0.778838
55	C	0.970396	0.747558	0.778838
56	C	0.497552	0.279586	0.721193
57	C	0.497552	0.779575	0.721193
58	C	0.997564	0.279586	0.721193
59	C	0.997564	0.779575	0.721193
60	C	0.00243603	0.220402	0.721193
61	C	0.00243603	0.720414	0.721193
62	C	0.502424	0.220402	0.721193
63	C	0.502424	0.720414	0.721193
64	C	0.473633	0.0316451	0.499623
65	C	0.473633	0.531634	0.499623
66	C	0.973621	0.0316451	0.499623
67	C	0.973621	0.531634	0.499623
68	C	0.0263555	0.468343	0.499623
69	C	0.0263555	0.968332	0.499623
70	C	0.526367	0.468343	0.499623
71	C	0.526367	0.968332	0.499623
72	C	0.0316451	0.0263555	0.500377
73	C	0.0316451	0.526367	0.500377
74	C	0.531634	0.0263555	0.500377
75	C	0.531634	0.526367	0.500377
76	C	0.468343	0.473633	0.500377
77	C	0.468343	0.973621	0.500377
78	C	0.968332	0.473633	0.500377
79	C	0.968332	0.973621	0.500377
80	C	0.276361	0.0316451	0.250392
81	C	0.276361	0.531634	0.250392
82	C	0.77635	0.0316451	0.250392
83	C	0.77635	0.531634	0.250392
84	C	0.223627	0.468343	0.250392
85	C	0.223627	0.968332	0.250392
86	C	0.723639	0.468343	0.250392
87	C	0.723639	0.968332	0.250392
88	C	0.218337	0.0263555	0.249608
89	C	0.218337	0.526367	0.249608
90	C	0.718349	0.0263555	0.249608
91	C	0.718349	0.526367	0.249608
92	C	0.281651	0.473633	0.249608
93	C	0.281651	0.973621	0.249608
94	C	0.781639	0.473633	0.249608
95	C	0.781639	0.973621	0.249608
96	C	0.223627	0.281651	0.999623
97	C	0.223627	0.781639	0.999623
98	C	0.723639	0.281651	0.999623
99	C	0.723639	0.781639	0.999623
100	C	0.276361	0.218337	0.999623
101	C	0.276361	0.718349	0.999623
102	C	0.77635	0.218337	0.999623
103	C	0.77635	0.718349	0.999623
104	C	0.281651	0.276361	0.000376766
105	C	0.281651	0.77635	0.000376766
106	C	0.781639	0.276361	0.000376766
107	C	0.781639	0.77635	0.000376766
108	C	0.218337	0.223627	0.000376766

109	C	0.218337	0.723639	0.000376766
110	C	0.718349	0.223627	0.000376766
111	C	0.718349	0.723639	0.000376766
112	C	0.0263555	0.281651	0.750392
113	C	0.0263555	0.781639	0.750392
114	C	0.526367	0.281651	0.750392
115	C	0.526367	0.781639	0.750392
116	C	0.473633	0.218337	0.750392
117	C	0.473633	0.718349	0.750392
118	C	0.973621	0.218337	0.750392
119	C	0.973621	0.718349	0.750392
120	C	0.468343	0.276361	0.749639
121	C	0.468343	0.77635	0.749639
122	C	0.968332	0.276361	0.749639
123	C	0.968332	0.77635	0.749639
124	C	0.0316451	0.223627	0.749639
125	C	0.0316451	0.723639	0.749639
126	C	0.531634	0.223627	0.749639
127	C	0.531634	0.723639	0.749639
128	C	0.441547	0.00366564	0.442386
129	C	0.441547	0.503654	0.442386
130	C	0.941535	0.00366564	0.442386
131	C	0.941535	0.503654	0.442386
132	C	0.0584414	0.496346	0.442386
133	C	0.0584414	0.996334	0.442386
134	C	0.558453	0.496346	0.442386
135	C	0.558453	0.996334	0.442386
136	C	0.00366564	0.0584414	0.557645
137	C	0.00366564	0.558453	0.557645
138	C	0.503654	0.0584414	0.557645
139	C	0.503654	0.558453	0.557645
140	C	0.496346	0.441547	0.557645
141	C	0.496346	0.941535	0.557645
142	C	0.996334	0.441547	0.557645
143	C	0.996334	0.941535	0.557645
144	C	0.308447	0.00366564	0.30763
145	C	0.308447	0.503654	0.30763
146	C	0.808436	0.00366564	0.30763
147	C	0.808436	0.503654	0.30763
148	C	0.191541	0.496346	0.30763
149	C	0.191541	0.996334	0.30763
150	C	0.691553	0.496346	0.30763
151	C	0.691553	0.996334	0.30763
152	C	0.24634	0.0584414	0.19237
153	C	0.24634	0.558453	0.19237
154	C	0.746329	0.0584414	0.19237
155	C	0.746329	0.558453	0.19237
156	C	0.253648	0.441547	0.19237
157	C	0.253648	0.941535	0.19237
158	C	0.753637	0.441547	0.19237
159	C	0.753637	0.941535	0.19237
160	C	0.191541	0.253648	0.942386
161	C	0.191541	0.753637	0.942386
162	C	0.691553	0.253648	0.942386
163	C	0.691553	0.753637	0.942386
164	C	0.308447	0.24634	0.942386
165	C	0.308447	0.746329	0.942386
166	C	0.808436	0.24634	0.942386
167	C	0.808436	0.746329	0.942386
168	C	0.253648	0.308447	0.0576452

169	C	0.253648	0.808436	0.0576452
170	C	0.753637	0.308447	0.0576452
171	C	0.753637	0.808436	0.0576452
172	C	0.24634	0.191541	0.0576452
173	C	0.24634	0.691553	0.0576452
174	C	0.746329	0.191541	0.0576452
175	C	0.746329	0.691553	0.0576452
176	C	0.0584414	0.253648	0.80763
177	C	0.0584414	0.753637	0.80763
178	C	0.558453	0.253648	0.80763
179	C	0.558453	0.753637	0.80763
180	C	0.441547	0.24634	0.80763
181	C	0.441547	0.746329	0.80763
182	C	0.941535	0.24634	0.80763
183	C	0.941535	0.746329	0.80763
184	C	0.496346	0.308447	0.69237
185	C	0.496346	0.808436	0.69237
186	C	0.996334	0.308447	0.69237
187	C	0.996334	0.808436	0.69237
188	C	0.00366564	0.191541	0.69237
189	C	0.00366564	0.691553	0.69237
190	C	0.503654	0.191541	0.69237
191	C	0.503654	0.691553	0.69237
192	C	0.434865	0.478343	0.415667
193	C	0.934877	0.478343	0.415667
194	C	0.0651231	0.521634	0.415667
195	C	0.565111	0.521634	0.415667
196	C	0.478343	0.0651231	0.584364
197	C	0.478343	0.565111	0.584364
198	C	0.521634	0.434865	0.584364
199	C	0.521634	0.934877	0.584364
200	C	0.315129	0.478343	0.334349
201	C	0.815117	0.478343	0.334349
202	C	0.184883	0.521634	0.334349
203	C	0.684871	0.521634	0.334349
204	C	0.271652	0.0651231	0.165651
205	C	0.271652	0.565111	0.165651
206	C	0.77164	0.0651231	0.165651
207	C	0.77164	0.565111	0.165651
208	C	0.228337	0.434865	0.165651
209	C	0.228337	0.934877	0.165651
210	C	0.728348	0.434865	0.165651
211	C	0.728348	0.934877	0.165651
212	C	0.184883	0.228337	0.915667
213	C	0.184883	0.728348	0.915667
214	C	0.684871	0.228337	0.915667
215	C	0.684871	0.728348	0.915667
216	C	0.315129	0.271652	0.915667
217	C	0.315129	0.77164	0.915667
218	C	0.815117	0.271652	0.915667
219	C	0.815117	0.77164	0.915667
220	C	0.228337	0.315129	0.0843642
221	C	0.228337	0.815117	0.0843642
222	C	0.728348	0.315129	0.0843642
223	C	0.728348	0.815117	0.0843642
224	C	0.271652	0.184883	0.0843642
225	C	0.271652	0.684871	0.0843642
226	C	0.77164	0.184883	0.0843642
227	C	0.77164	0.684871	0.0843642
228	C	0.0651231	0.228337	0.834349

229	C	0.0651231	0.728348	0.834349
230	C	0.565111	0.228337	0.834349
231	C	0.565111	0.728348	0.834349
232	C	0.434865	0.271652	0.834349
233	C	0.434865	0.77164	0.834349
234	C	0.934877	0.271652	0.834349
235	C	0.934877	0.77164	0.834349
236	C	0.521634	0.315129	0.665651
237	C	0.521634	0.815117	0.665651
238	C	0.478343	0.184883	0.665651
239	C	0.478343	0.684871	0.665651
240	C	0.408811	0.478459	0.389576
241	C	0.9088	0.478459	0.389576
242	C	0.0911769	0.521541	0.389576
243	C	0.591189	0.521541	0.389576
244	C	0.478459	0.0911769	0.610424
245	C	0.478459	0.591189	0.610424
246	C	0.521541	0.408811	0.610424
247	C	0.521541	0.9088	0.610424
248	C	0.341183	0.478459	0.36044
249	C	0.841171	0.478459	0.36044
250	C	0.158806	0.521541	0.36044
251	C	0.658817	0.521541	0.36044
252	C	0.271536	0.0911769	0.13956
253	C	0.271536	0.591189	0.13956
254	C	0.771524	0.0911769	0.13956
255	C	0.771524	0.591189	0.13956
256	C	0.228453	0.408811	0.13956
257	C	0.228453	0.9088	0.13956
258	C	0.728464	0.408811	0.13956
259	C	0.728464	0.9088	0.13956
260	C	0.158806	0.228453	0.889576
261	C	0.158806	0.728464	0.889576
262	C	0.658817	0.228453	0.889576
263	C	0.658817	0.728464	0.889576
264	C	0.341183	0.271536	0.889576
265	C	0.341183	0.771524	0.889576
266	C	0.841171	0.271536	0.889576
267	C	0.841171	0.771524	0.889576
268	C	0.228453	0.341183	0.110424
269	C	0.228453	0.841171	0.110424
270	C	0.728464	0.341183	0.110424
271	C	0.728464	0.841171	0.110424
272	C	0.271536	0.158806	0.110424
273	C	0.271536	0.658817	0.110424
274	C	0.771524	0.158806	0.110424
275	C	0.771524	0.658817	0.110424
276	C	0.0911769	0.228453	0.86044
277	C	0.0911769	0.728464	0.86044
278	C	0.591189	0.228453	0.86044
279	C	0.591189	0.728464	0.86044
280	C	0.408811	0.271536	0.86044
281	C	0.408811	0.771524	0.86044
282	C	0.9088	0.271536	0.86044
283	C	0.9088	0.771524	0.86044
284	C	0.521541	0.341183	0.639592
285	C	0.521541	0.841171	0.639592
286	C	0.478459	0.158806	0.639592
287	C	0.478459	0.658817	0.639592
288	C	0.388813	0.00403684	0.388823

289	C	0.388813	0.504048	0.388823
290	C	0.888801	0.00403684	0.388823
291	C	0.888801	0.504048	0.388823
292	C	0.111176	0.495952	0.388823
293	C	0.111176	0.99594	0.388823
294	C	0.611187	0.495952	0.388823
295	C	0.611187	0.99594	0.388823
296	C	0.00403684	0.111176	0.611177
297	C	0.00403684	0.611187	0.611177
298	C	0.504048	0.111176	0.611177
299	C	0.504048	0.611187	0.611177
300	C	0.495952	0.388813	0.611177
301	C	0.495952	0.888801	0.611177
302	C	0.99594	0.388813	0.611177
303	C	0.99594	0.888801	0.611177
304	C	0.361181	0.00403684	0.361193
305	C	0.361181	0.504048	0.361193
306	C	0.86117	0.00403684	0.361193
307	C	0.86117	0.504048	0.361193
308	C	0.138807	0.495952	0.361193
309	C	0.138807	0.99594	0.361193
310	C	0.638819	0.495952	0.361193
311	C	0.638819	0.99594	0.361193
312	C	0.245946	0.111176	0.138807
313	C	0.245946	0.611187	0.138807
314	C	0.745957	0.111176	0.138807
315	C	0.745957	0.611187	0.138807
316	C	0.254043	0.388813	0.138807
317	C	0.254043	0.888801	0.138807
318	C	0.754031	0.388813	0.138807
319	C	0.754031	0.888801	0.138807
320	C	0.138807	0.254043	0.888823
321	C	0.138807	0.754031	0.888823
322	C	0.638819	0.254043	0.888823
323	C	0.638819	0.754031	0.888823
324	C	0.361181	0.245946	0.888823
325	C	0.361181	0.745957	0.888823
326	C	0.86117	0.245946	0.888823
327	C	0.86117	0.745957	0.888823
328	C	0.254043	0.361181	0.111177
329	C	0.254043	0.86117	0.111177
330	C	0.754031	0.361181	0.111177
331	C	0.754031	0.86117	0.111177
332	C	0.245946	0.138807	0.111177
333	C	0.245946	0.638819	0.111177
334	C	0.745957	0.138807	0.111177
335	C	0.745957	0.638819	0.111177
336	C	0.111176	0.254043	0.861193
337	C	0.111176	0.754031	0.861193
338	C	0.611187	0.254043	0.861193
339	C	0.611187	0.754031	0.861193
340	C	0.388813	0.245946	0.861193
341	C	0.388813	0.745957	0.861193
342	C	0.888801	0.245946	0.861193
343	C	0.888801	0.745957	0.861193
344	C	0.495952	0.361181	0.638838
345	C	0.495952	0.86117	0.638838
346	C	0.99594	0.361181	0.638838
347	C	0.99594	0.86117	0.638838
348	C	0.00403684	0.138807	0.638838

349	C	0.00403684	0.638819	0.638838
350	C	0.504048	0.138807	0.638838
351	C	0.504048	0.638819	0.638838
352	C	0.395309	0.0295571	0.414568
353	C	0.395309	0.529569	0.414568
354	C	0.895297	0.0295571	0.414568
355	C	0.895297	0.529569	0.414568
356	C	0.104679	0.470431	0.414568
357	C	0.104679	0.97042	0.414568
358	C	0.604668	0.470431	0.414568
359	C	0.604668	0.97042	0.414568
360	C	0.0295571	0.104679	0.585432
361	C	0.0295571	0.604668	0.585432
362	C	0.529569	0.104679	0.585432
363	C	0.529569	0.604668	0.585432
364	C	0.470431	0.395309	0.585432
365	C	0.470431	0.895297	0.585432
366	C	0.97042	0.395309	0.585432
367	C	0.97042	0.895297	0.585432
368	C	0.354685	0.0295571	0.335447
369	C	0.354685	0.529569	0.335447
370	C	0.854674	0.0295571	0.335447
371	C	0.854674	0.529569	0.335447
372	C	0.145303	0.470431	0.335447
373	C	0.145303	0.97042	0.335447
374	C	0.645315	0.470431	0.335447
375	C	0.645315	0.97042	0.335447
376	C	0.220425	0.104679	0.164584
377	C	0.220425	0.604668	0.164584
378	C	0.720437	0.104679	0.164584
379	C	0.720437	0.604668	0.164584
380	C	0.279563	0.395309	0.164584
381	C	0.279563	0.895297	0.164584
382	C	0.779551	0.395309	0.164584
383	C	0.779551	0.895297	0.164584
384	C	0.145303	0.279563	0.914568
385	C	0.145303	0.779551	0.914568
386	C	0.645315	0.279563	0.914568
387	C	0.645315	0.779551	0.914568
388	C	0.354685	0.220425	0.914568
389	C	0.354685	0.720437	0.914568
390	C	0.854674	0.220425	0.914568
391	C	0.854674	0.720437	0.914568
392	C	0.279563	0.354685	0.0854317
393	C	0.279563	0.854674	0.0854317
394	C	0.779551	0.354685	0.0854317
395	C	0.779551	0.854674	0.0854317
396	C	0.220425	0.145303	0.0854317
397	C	0.220425	0.645315	0.0854317
398	C	0.720437	0.145303	0.0854317
399	C	0.720437	0.645315	0.0854317
400	C	0.104679	0.279563	0.835447
401	C	0.104679	0.779551	0.835447
402	C	0.604668	0.279563	0.835447
403	C	0.604668	0.779551	0.835447
404	C	0.395309	0.220425	0.835447
405	C	0.395309	0.720437	0.835447
406	C	0.895297	0.220425	0.835447
407	C	0.895297	0.720437	0.835447
408	C	0.470431	0.354685	0.664584

409	C	0.470431	0.854674	0.664584
410	C	0.97042	0.354685	0.664584
411	C	0.97042	0.854674	0.664584
412	C	0.0295571	0.145303	0.664584
413	C	0.0295571	0.645315	0.664584
414	C	0.529569	0.145303	0.664584
415	C	0.529569	0.645315	0.664584
416	C	0.4212	0.0294179	0.441099
417	C	0.4212	0.529406	0.441099
418	C	0.921189	0.0294179	0.441099
419	C	0.921189	0.529406	0.441099
420	C	0.0788112	0.470594	0.441099
421	C	0.0788112	0.970582	0.441099
422	C	0.5788	0.470594	0.441099
423	C	0.5788	0.970582	0.441099
424	C	0.0294179	0.0788112	0.558932
425	C	0.0294179	0.5788	0.558932
426	C	0.529406	0.0788112	0.558932
427	C	0.529406	0.5788	0.558932
428	C	0.470594	0.4212	0.558932
429	C	0.470594	0.921189	0.558932
430	C	0.970582	0.4212	0.558932
431	C	0.970582	0.921189	0.558932
432	C	0.328794	0.0294179	0.308917
433	C	0.328794	0.529406	0.308917
434	C	0.828805	0.0294179	0.308917
435	C	0.828805	0.529406	0.308917
436	C	0.171195	0.470594	0.308917
437	C	0.171195	0.970582	0.308917
438	C	0.671183	0.470594	0.308917
439	C	0.671183	0.970582	0.308917
440	C	0.220588	0.0788112	0.191083
441	C	0.220588	0.5788	0.191083
442	C	0.720576	0.0788112	0.191083
443	C	0.720576	0.5788	0.191083
444	C	0.279401	0.4212	0.191083
445	C	0.279401	0.921189	0.191083
446	C	0.779412	0.4212	0.191083
447	C	0.779412	0.921189	0.191083
448	C	0.171195	0.279401	0.941099
449	C	0.171195	0.779412	0.941099
450	C	0.671183	0.279401	0.941099
451	C	0.671183	0.779412	0.941099
452	C	0.328794	0.220588	0.941099
453	C	0.328794	0.720576	0.941099
454	C	0.828805	0.220588	0.941099
455	C	0.828805	0.720576	0.941099
456	C	0.279401	0.328794	0.0589325
457	C	0.279401	0.828805	0.0589325
458	C	0.779412	0.328794	0.0589325
459	C	0.779412	0.828805	0.0589325
460	C	0.220588	0.171195	0.0589325
461	C	0.220588	0.671183	0.0589325
462	C	0.720576	0.171195	0.0589325
463	C	0.720576	0.671183	0.0589325
464	C	0.0788112	0.279401	0.808917
465	C	0.0788112	0.779412	0.808917
466	C	0.5788	0.279401	0.808917
467	C	0.5788	0.779412	0.808917
468	C	0.4212	0.220588	0.808917

469	C	0.4212	0.720576	0.808917
470	C	0.921189	0.220588	0.808917
471	C	0.921189	0.720576	0.808917
472	C	0.470594	0.328794	0.691083
473	C	0.470594	0.828805	0.691083
474	C	0.970582	0.328794	0.691083
475	C	0.970582	0.828805	0.691083
476	C	0.0294179	0.171195	0.691083
477	C	0.0294179	0.671183	0.691083
478	C	0.529406	0.171195	0.691083
479	C	0.529406	0.671183	0.691083
480	H	0.00111361	0.52066	0.42292
481	H	0.501102	0.0206714	0.42292
482	H	0.501102	0.52066	0.42292
483	H	0.498875	0.47934	0.42292
484	H	0.0206714	0.498875	0.57708
485	H	0.52066	0.498875	0.57708
486	H	0.47934	0.00111361	0.57708
487	H	0.47934	0.501102	0.57708
488	H	0.248892	0.0206714	0.327096
489	H	0.248892	0.52066	0.327096
490	H	0.748881	0.0206714	0.327096
491	H	0.748881	0.52066	0.327096
492	H	0.251096	0.47934	0.327096
493	H	0.751108	0.47934	0.327096
494	H	0.229334	0.498875	0.172936
495	H	0.729323	0.498875	0.172936
496	H	0.270654	0.00111361	0.172936
497	H	0.270654	0.501102	0.172936
498	H	0.770666	0.00111361	0.172936
499	H	0.770666	0.501102	0.172936
500	H	0.251096	0.270654	0.92292
501	H	0.251096	0.770666	0.92292
502	H	0.751108	0.270654	0.92292
503	H	0.751108	0.770666	0.92292
504	H	0.248892	0.229334	0.92292
505	H	0.248892	0.729323	0.92292
506	H	0.748881	0.229334	0.92292
507	H	0.748881	0.729323	0.92292
508	H	0.270654	0.248892	0.0770801
509	H	0.270654	0.748881	0.0770801
510	H	0.770666	0.248892	0.0770801
511	H	0.770666	0.748881	0.0770801
512	H	0.229334	0.251096	0.0770801
513	H	0.229334	0.751108	0.0770801
514	H	0.729323	0.251096	0.0770801
515	H	0.729323	0.751108	0.0770801
516	H	0.498875	0.270654	0.827096
517	H	0.498875	0.770666	0.827096
518	H	0.00111361	0.229334	0.827096
519	H	0.00111361	0.729323	0.827096
520	H	0.501102	0.229334	0.827096
521	H	0.501102	0.729323	0.827096
522	H	0.47934	0.248892	0.672936
523	H	0.47934	0.748881	0.672936
524	H	0.0206714	0.251096	0.672936
525	H	0.0206714	0.751108	0.672936
526	H	0.52066	0.251096	0.672936
527	H	0.52066	0.751108	0.672936
528	H	0.452219	0.0338956	0.518713



529	H	0.452219	0.533884	0.518713
530	H	0.952208	0.0338956	0.518713
531	H	0.952208	0.533884	0.518713
532	H	0.0477925	0.466093	0.518713
533	H	0.0477925	0.966081	0.518713
534	H	0.547781	0.466093	0.518713
535	H	0.547781	0.966081	0.518713
536	H	0.0338956	0.0477925	0.481287
537	H	0.0338956	0.547781	0.481287
538	H	0.533884	0.0477925	0.481287
539	H	0.533884	0.547781	0.481287
540	H	0.466093	0.452219	0.481287
541	H	0.466093	0.952208	0.481287
542	H	0.966081	0.452219	0.481287
543	H	0.966081	0.952208	0.481287
544	H	0.297775	0.0338956	0.231272
545	H	0.297775	0.533884	0.231272
546	H	0.797787	0.0338956	0.231272
547	H	0.797787	0.533884	0.231272
548	H	0.202213	0.466093	0.231272
549	H	0.202213	0.966081	0.231272
550	H	0.702202	0.466093	0.231272
551	H	0.702202	0.966081	0.231272
552	H	0.216087	0.0477925	0.268728
553	H	0.216087	0.547781	0.268728
554	H	0.716099	0.0477925	0.268728
555	H	0.716099	0.547781	0.268728
556	H	0.283901	0.452219	0.268728
557	H	0.283901	0.952208	0.268728
558	H	0.78389	0.452219	0.268728
559	H	0.78389	0.952208	0.268728
560	H	0.0477925	0.283901	0.731303
561	H	0.0477925	0.78389	0.731303
562	H	0.547781	0.283901	0.731303
563	H	0.547781	0.78389	0.731303
564	H	0.452219	0.216087	0.731303
565	H	0.452219	0.716099	0.731303
566	H	0.952208	0.216087	0.731303
567	H	0.952208	0.716099	0.731303
568	H	0.466093	0.297775	0.768728
569	H	0.466093	0.797787	0.768728
570	H	0.966081	0.297775	0.768728
571	H	0.966081	0.797787	0.768728
572	H	0.0338956	0.202213	0.768728
573	H	0.0338956	0.702202	0.768728
574	H	0.533884	0.202213	0.768728
575	H	0.533884	0.702202	0.768728
576	H	0.475814	0.0528501	0.479906
577	H	0.475814	0.552839	0.479906
578	H	0.975825	0.0528501	0.479906
579	H	0.975825	0.552839	0.479906
580	H	0.0241747	0.447161	0.479906
581	H	0.0241747	0.94715	0.479906
582	H	0.524163	0.447161	0.479906
583	H	0.524163	0.94715	0.479906
584	H	0.0528501	0.0241747	0.520126
585	H	0.0528501	0.524163	0.520126
586	H	0.552839	0.0241747	0.520126
587	H	0.552839	0.524163	0.520126
588	H	0.447161	0.475814	0.520126

589	H	0.447161	0.975825	0.520126
590	H	0.94715	0.475814	0.520126
591	H	0.94715	0.975825	0.520126
592	H	0.27418	0.0528501	0.27011
593	H	0.27418	0.552839	0.27011
594	H	0.774169	0.0528501	0.27011
595	H	0.774169	0.552839	0.27011
596	H	0.225831	0.447161	0.27011
597	H	0.225831	0.94715	0.27011
598	H	0.72582	0.447161	0.27011
599	H	0.72582	0.94715	0.27011
600	H	0.197156	0.0241747	0.22989
601	H	0.197156	0.524163	0.22989
602	H	0.697144	0.0241747	0.22989
603	H	0.697144	0.524163	0.22989
604	H	0.302833	0.475814	0.22989
605	H	0.302833	0.975825	0.22989
606	H	0.802844	0.475814	0.22989
607	H	0.802844	0.975825	0.22989
608	H	0.225831	0.302833	0.979906
609	H	0.225831	0.802844	0.979906
610	H	0.72582	0.302833	0.979906
611	H	0.72582	0.802844	0.979906
612	H	0.27418	0.197156	0.979906
613	H	0.27418	0.697144	0.979906
614	H	0.774169	0.197156	0.979906
615	H	0.774169	0.697144	0.979906
616	H	0.302833	0.27418	0.0201256
617	H	0.302833	0.774169	0.0201256
618	H	0.802844	0.27418	0.0201256
619	H	0.802844	0.774169	0.0201256
620	H	0.197156	0.225831	0.0201256
621	H	0.197156	0.72582	0.0201256
622	H	0.697144	0.225831	0.0201256
623	H	0.697144	0.72582	0.0201256
624	H	0.0241747	0.302833	0.77011
625	H	0.0241747	0.802844	0.77011
626	H	0.524163	0.302833	0.77011
627	H	0.524163	0.802844	0.77011
628	H	0.475814	0.197156	0.77011
629	H	0.475814	0.697144	0.77011
630	H	0.975825	0.197156	0.77011
631	H	0.975825	0.697144	0.77011
632	H	0.447161	0.27418	0.72989
633	H	0.447161	0.774169	0.72989
634	H	0.94715	0.27418	0.72989
635	H	0.94715	0.774169	0.72989
636	H	0.0528501	0.225831	0.72989
637	H	0.0528501	0.72582	0.72989
638	H	0.552839	0.225831	0.72989
639	H	0.552839	0.72582	0.72989
640	H	0.449876	0.458274	0.414725
641	H	0.949887	0.458274	0.414725
642	H	0.0501125	0.541726	0.414725
643	H	0.550101	0.541726	0.414725
644	H	0.458274	0.0501125	0.585306
645	H	0.458274	0.550101	0.585306
646	H	0.541726	0.449876	0.585306
647	H	0.541726	0.949887	0.585306
648	H	0.300118	0.458274	0.33529

649	H	0.800107	0.458274	0.33529
650	H	0.199893	0.541726	0.33529
651	H	0.699882	0.541726	0.33529
652	H	0.29172	0.0501125	0.16471
653	H	0.29172	0.550101	0.16471
654	H	0.791708	0.0501125	0.16471
655	H	0.791708	0.550101	0.16471
656	H	0.208269	0.449876	0.16471
657	H	0.208269	0.949887	0.16471
658	H	0.70828	0.449876	0.16471
659	H	0.70828	0.949887	0.16471
660	H	0.199893	0.208269	0.914725
661	H	0.199893	0.70828	0.914725
662	H	0.699882	0.208269	0.914725
663	H	0.699882	0.70828	0.914725
664	H	0.300118	0.29172	0.914725
665	H	0.300118	0.791708	0.914725
666	H	0.800107	0.29172	0.914725
667	H	0.800107	0.791708	0.914725
668	H	0.208269	0.300118	0.0853061
669	H	0.208269	0.800107	0.0853061
670	H	0.70828	0.300118	0.0853061
671	H	0.70828	0.800107	0.0853061
672	H	0.29172	0.199893	0.0853061
673	H	0.29172	0.699882	0.0853061
674	H	0.791708	0.199893	0.0853061
675	H	0.791708	0.699882	0.0853061
676	H	0.0501125	0.208269	0.83529
677	H	0.0501125	0.70828	0.83529
678	H	0.550101	0.208269	0.83529
679	H	0.550101	0.70828	0.83529
680	H	0.449876	0.29172	0.83529
681	H	0.449876	0.791708	0.83529
682	H	0.949887	0.29172	0.83529
683	H	0.949887	0.791708	0.83529
684	H	0.541726	0.300118	0.66471
685	H	0.541726	0.800107	0.66471
686	H	0.458274	0.199893	0.66471
687	H	0.458274	0.699882	0.66471
688	H	0.40445	0.458715	0.369356
689	H	0.904461	0.458715	0.369356
690	H	0.0955386	0.541285	0.369356
691	H	0.595527	0.541285	0.369356
692	H	0.458715	0.0955386	0.630644
693	H	0.458715	0.595527	0.630644
694	H	0.541285	0.40445	0.630644
695	H	0.541285	0.904461	0.630644
696	H	0.345521	0.458715	0.380659
697	H	0.845533	0.458715	0.380659
698	H	0.154467	0.541285	0.380659
699	H	0.654456	0.541285	0.380659
700	H	0.291279	0.0955386	0.119372
701	H	0.291279	0.595527	0.119372
702	H	0.791267	0.0955386	0.119372
703	H	0.791267	0.595527	0.119372
704	H	0.208709	0.40445	0.119372
705	H	0.208709	0.904461	0.119372
706	H	0.708721	0.40445	0.119372
707	H	0.708721	0.904461	0.119372
708	H	0.154467	0.208709	0.869356

709	H	0.154467	0.708721	0.869356
710	H	0.654456	0.208709	0.869356
711	H	0.654456	0.708721	0.869356
712	H	0.345521	0.291279	0.869356
713	H	0.345521	0.791267	0.869356
714	H	0.845533	0.291279	0.869356
715	H	0.845533	0.791267	0.869356
716	H	0.208709	0.345521	0.130644
717	H	0.208709	0.845533	0.130644
718	H	0.708721	0.345521	0.130644
719	H	0.708721	0.845533	0.130644
720	H	0.291279	0.154467	0.130644
721	H	0.291279	0.654456	0.130644
722	H	0.791267	0.154467	0.130644
723	H	0.791267	0.654456	0.130644
724	H	0.0955386	0.208709	0.880659
725	H	0.0955386	0.708721	0.880659
726	H	0.595527	0.208709	0.880659
727	H	0.595527	0.708721	0.880659
728	H	0.40445	0.291279	0.880659
729	H	0.40445	0.791267	0.880659
730	H	0.904461	0.291279	0.880659
731	H	0.904461	0.791267	0.880659
732	H	0.541285	0.345521	0.619372
733	H	0.541285	0.845533	0.619372
734	H	0.458715	0.154467	0.619372
735	H	0.458715	0.654456	0.619372
736	H	0.379974	0.0494629	0.414631
737	H	0.379974	0.549475	0.414631
738	H	0.879962	0.0494629	0.414631
739	H	0.879962	0.549475	0.414631
740	H	0.120015	0.450525	0.414631
741	H	0.120015	0.950514	0.414631
742	H	0.620026	0.450525	0.414631
743	H	0.620026	0.950514	0.414631
744	H	0.0494629	0.120015	0.5854
745	H	0.0494629	0.620026	0.5854
746	H	0.549475	0.120015	0.5854
747	H	0.549475	0.620026	0.5854
748	H	0.450525	0.379974	0.5854
749	H	0.450525	0.879962	0.5854
750	H	0.950514	0.379974	0.5854
751	H	0.950514	0.879962	0.5854
752	H	0.370021	0.0494629	0.335385
753	H	0.370021	0.549475	0.335385
754	H	0.870009	0.0494629	0.335385
755	H	0.870009	0.549475	0.335385
756	H	0.129968	0.450525	0.335385
757	H	0.129968	0.950514	0.335385
758	H	0.629979	0.450525	0.335385
759	H	0.629979	0.950514	0.335385
760	H	0.20052	0.120015	0.164615
761	H	0.20052	0.620026	0.164615
762	H	0.700531	0.120015	0.164615
763	H	0.700531	0.620026	0.164615
764	H	0.299469	0.379974	0.164615
765	H	0.299469	0.879962	0.164615
766	H	0.799457	0.379974	0.164615
767	H	0.799457	0.879962	0.164615
768	H	0.129968	0.299469	0.914631

769	H	0.129968	0.799457	0.914631
770	H	0.629979	0.299469	0.914631
771	H	0.629979	0.799457	0.914631
772	H	0.370021	0.20052	0.914631
773	H	0.370021	0.700531	0.914631
774	H	0.870009	0.20052	0.914631
775	H	0.870009	0.700531	0.914631
776	H	0.299469	0.370021	0.0853689
777	H	0.299469	0.870009	0.0853689
778	H	0.799457	0.370021	0.0853689
779	H	0.799457	0.870009	0.0853689
780	H	0.20052	0.129968	0.0853689
781	H	0.20052	0.629979	0.0853689
782	H	0.700531	0.129968	0.0853689
783	H	0.700531	0.629979	0.0853689
784	H	0.120015	0.299469	0.835385
785	H	0.120015	0.799457	0.835385
786	H	0.620026	0.299469	0.835385
787	H	0.620026	0.799457	0.835385
788	H	0.379974	0.20052	0.835385
789	H	0.379974	0.700531	0.835385
790	H	0.879962	0.20052	0.835385
791	H	0.879962	0.700531	0.835385
792	H	0.450525	0.370021	0.664615
793	H	0.450525	0.870009	0.664615
794	H	0.950514	0.370021	0.664615
795	H	0.950514	0.870009	0.664615
796	H	0.0494629	0.129968	0.664615
797	H	0.0494629	0.629979	0.664615
798	H	0.549475	0.129968	0.664615
799	H	0.549475	0.629979	0.664615
800	H	0.42482	0.0496949	0.460314
801	H	0.42482	0.549683	0.460314
802	H	0.924831	0.0496949	0.460314
803	H	0.924831	0.549683	0.460314
804	H	0.0751688	0.450317	0.460314
805	H	0.0751688	0.950305	0.460314
806	H	0.575157	0.450317	0.460314
807	H	0.575157	0.950305	0.460314
808	H	0.0496949	0.0751688	0.539686
809	H	0.0496949	0.575157	0.539686
810	H	0.549683	0.0751688	0.539686
811	H	0.549683	0.575157	0.539686
812	H	0.450317	0.42482	0.539686
813	H	0.450317	0.924831	0.539686
814	H	0.950305	0.42482	0.539686
815	H	0.950305	0.924831	0.539686
816	H	0.325175	0.0496949	0.28967
817	H	0.325175	0.549683	0.28967
818	H	0.825163	0.0496949	0.28967
819	H	0.825163	0.549683	0.28967
820	H	0.174837	0.450317	0.28967
821	H	0.174837	0.950305	0.28967
822	H	0.674825	0.450317	0.28967
823	H	0.674825	0.950305	0.28967
824	H	0.200311	0.0751688	0.21033
825	H	0.200311	0.575157	0.21033
826	H	0.700299	0.0751688	0.21033
827	H	0.700299	0.575157	0.21033
828	H	0.299678	0.42482	0.21033

829	H	0.299678	0.924831	0.21033
830	H	0.799689	0.42482	0.21033
831	H	0.799689	0.924831	0.21033
832	H	0.174837	0.299678	0.960345
833	H	0.174837	0.799689	0.960345
834	H	0.674825	0.299678	0.960345
835	H	0.674825	0.799689	0.960345
836	H	0.325175	0.200311	0.960345
837	H	0.325175	0.700299	0.960345
838	H	0.825163	0.200311	0.960345
839	H	0.825163	0.700299	0.960345
840	H	0.299678	0.325175	0.039686
841	H	0.299678	0.825163	0.039686
842	H	0.799689	0.325175	0.039686
843	H	0.799689	0.825163	0.039686
844	H	0.200311	0.174837	0.039686
845	H	0.200311	0.674825	0.039686
846	H	0.700299	0.174837	0.039686
847	H	0.700299	0.674825	0.039686
848	H	0.0751688	0.299678	0.789702
849	H	0.0751688	0.799689	0.789702
850	H	0.575157	0.299678	0.789702
851	H	0.575157	0.799689	0.789702
852	H	0.42482	0.200311	0.789702
853	H	0.42482	0.700299	0.789702
854	H	0.924831	0.200311	0.789702
855	H	0.924831	0.700299	0.789702
856	H	0.450317	0.325175	0.71033
857	H	0.450317	0.825163	0.71033
858	H	0.950305	0.325175	0.71033
859	H	0.950305	0.825163	0.71033
860	H	0.0496949	0.174837	0.71033
861	H	0.0496949	0.674825	0.71033
862	H	0.549683	0.174837	0.71033
863	H	0.549683	0.674825	0.71033
864	C	1	0.499988	0.443736
865	C	0.499988	1	0.443736
866	C	0.499988	0.499988	0.443736
867	C	1	1	0.556295
868	C	1	0.499988	0.556295
869	C	0.499988	1	0.556295
870	C	0.499988	0.499988	0.556295
871	C	0.250006	1	0.306279
872	C	0.250006	0.499988	0.306279
873	C	0.749994	1	0.306279
874	C	0.749994	0.499988	0.306279
875	C	0.250006	1	0.193721
876	C	0.250006	0.499988	0.193721
877	C	0.749994	1	0.193721
878	C	0.749994	0.499988	0.193721
879	C	0.250006	0.250006	0.943736
880	C	0.250006	0.749994	0.943736
881	C	0.749994	0.250006	0.943736
882	C	0.749994	0.749994	0.943736
883	C	0.250006	0.250006	0.0562951
884	C	0.250006	0.749994	0.0562951
885	C	0.749994	0.250006	0.0562951
886	C	0.749994	0.749994	0.0562951
887	C	1	0.250006	0.806279
888	C	1	0.749994	0.806279

889	C	0.499988	0.250006	0.806279
890	C	0.499988	0.749994	0.806279
891	C	1	0.250006	0.693721
892	C	1	0.749994	0.693721
893	C	0.499988	0.250006	0.693721
894	C	0.499988	0.749994	0.693721
895	C	0.434865	0.978331	0.415667
896	C	0.408811	0.978447	0.389576
897	H	0.449876	0.958263	0.414725
898	H	0.40445	0.958704	0.369356
899	C	0.934877	0.978331	0.415667
900	C	0.9088	0.978447	0.389576
901	H	0.949887	0.958263	0.414725
902	H	0.904461	0.958704	0.369356
903	C	0.0651231	0.0216458	0.415667
904	C	0.0911769	0.0215298	0.389576
905	H	0.0501125	0.041714	0.414725
906	H	0.0955386	0.0412732	0.369356
907	C	0.565111	0.0216458	0.415667
908	C	0.591189	0.0215298	0.389576
909	H	0.550101	0.041714	0.414725
910	H	0.595527	0.0412732	0.369356
911	C	0.978331	0.0651231	0.584364
912	C	0.978447	0.0911769	0.610424
913	H	0.958263	0.0501125	0.585306
914	H	0.958704	0.0955386	0.630644
915	C	0.978331	0.565111	0.584364
916	C	0.978447	0.591189	0.610424
917	H	0.958263	0.550101	0.585306
918	H	0.958704	0.595527	0.630644
919	C	0.0216458	0.434865	0.584364
920	C	0.0215298	0.408811	0.610424
921	H	0.041714	0.449876	0.585306
922	H	0.0412732	0.40445	0.630644
923	C	0.0216458	0.934877	0.584364
924	C	0.0215298	0.9088	0.610424
925	H	0.041714	0.949887	0.585306
926	H	0.0412732	0.904461	0.630644
927	C	0.315129	0.978331	0.334349
928	C	0.341183	0.978447	0.36044
929	H	0.300118	0.958263	0.33529
930	H	0.345521	0.958704	0.380659
931	C	0.815117	0.978331	0.334349
932	C	0.841171	0.978447	0.36044
933	H	0.800107	0.958263	0.33529
934	H	0.845533	0.958704	0.380659
935	C	0.184883	0.0216458	0.334349
936	C	0.158806	0.0215298	0.36044
937	H	0.199893	0.041714	0.33529
938	H	0.154467	0.0412732	0.380659
939	C	0.684871	0.0216458	0.334349
940	C	0.658817	0.0215298	0.36044
941	H	0.699882	0.041714	0.33529
942	H	0.654456	0.0412732	0.380659
943	C	0.0216458	0.315129	0.665651
944	C	0.0215298	0.341183	0.639592
945	H	0.041714	0.300118	0.66471
946	H	0.0412732	0.345521	0.619372
947	C	0.0216458	0.815117	0.665651
948	C	0.0215298	0.841171	0.639592

949	H	0.041714	0.800107	0.66471
950	H	0.0412732	0.845533	0.619372
951	C	0.978331	0.184883	0.665651
952	C	0.978447	0.158806	0.639592
953	H	0.958263	0.199893	0.66471
954	H	0.958704	0.154467	0.619372
955	C	0.978331	0.684871	0.665651
956	C	0.978447	0.658817	0.639592
957	H	0.958263	0.699882	0.66471
958	H	0.958704	0.654456	0.619372
959	H	0.00111361	0.0206714	0.42292
960	C	1	1	0.443736
961	H	0.498875	0.979329	0.42292
962	H	0.998886	0.47934	0.42292
963	H	0.998886	0.979329	0.42292
964	H	0.0206714	0.998886	0.57708
965	H	0.52066	0.998886	0.57708
966	H	0.979329	0.00111361	0.57708
967	H	0.979329	0.501102	0.57708
968	H	0.251096	0.979329	0.327096
969	H	0.751108	0.979329	0.327096
970	H	0.229334	0.998886	0.172936
971	H	0.729323	0.998886	0.172936
972	H	0.998886	0.270654	0.827096
973	H	0.998886	0.770666	0.827096
974	H	0.979329	0.248892	0.672936
975	H	0.979329	0.748881	0.672936
976	H	0.202213	0.283901	0.0187127
977	H	0.202213	0.78389	0.0187127
978	H	0.702202	0.283901	0.0187127
979	H	0.702202	0.78389	0.0187127
980	H	0.297775	0.216087	0.0187127
981	H	0.297775	0.716099	0.0187127
982	H	0.797787	0.216087	0.0187127
983	H	0.797787	0.716099	0.0187127
984	H	0.283901	0.297775	0.981287
985	H	0.283901	0.797787	0.981287
986	H	0.78389	0.297775	0.981287
987	H	0.78389	0.797787	0.981287
988	H	0.216087	0.202213	0.981287
989	H	0.216087	0.702202	0.981287
990	H	0.716099	0.202213	0.981287
991	H	0.716099	0.702202	0.981287

#\*\*\*\*\*

#

# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials

#

#\*\*\*\*\*

data\_DIA-C\_2-fold-PPN-3.cif

_cell_length_a	21.5513(0)
_cell_length_b	21.5513(0)
_cell_length_c	31.8504(0)
_cell_angle_alpha	90(0)
_cell_angle_beta	90(0)
_cell_angle_gamma	90(0)



\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M 'P1'  
\_symmetry\_Int\_Tables\_number 1  
\_stmmetry\_cell\_setting Tetragonal

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'+x,+y,+z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_type\_symbol  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z

1	C	0.94082	0.00487	0.47117
2	C	0.05918	0.99513	0.47117
3	C	0.00487	0.05918	0.52883
4	C	0.99513	0.94082	0.52883
5	C	0.55918	0.00487	0.27883
6	C	0.44082	0.99513	0.27883
7	C	0.49513	0.05918	0.22117
8	C	0.50487	0.94082	0.22117
9	C	0.44082	0.50487	0.97117
10	C	0.55918	0.49513	0.97117
11	C	0.50487	0.55918	0.02883
12	C	0.49513	0.44082	0.02883
13	C	0.05918	0.50487	0.77883
14	C	0.94082	0.49513	0.77883
15	C	0.99513	0.55918	0.72117
16	C	0.00487	0.44082	0.72117
17	C	0.94727	0.0633	0.49962
18	C	0.05273	0.9367	0.49962
19	C	0.0633	0.05273	0.50038
20	C	0.9367	0.94727	0.50038
21	C	0.55273	0.0633	0.25038
22	C	0.44727	0.9367	0.25038
23	C	0.4367	0.05273	0.24962
24	C	0.5633	0.94727	0.24962
25	C	0.44727	0.5633	0.99962
26	C	0.55273	0.4367	0.99962
27	C	0.5633	0.55273	0.00038
28	C	0.4367	0.44727	0.00038
29	C	0.05273	0.5633	0.75038
30	C	0.94727	0.4367	0.75038
31	C	0.9367	0.55273	0.74962
32	C	0.0633	0.44727	0.74962
33	C	0.8831	0.00731	0.44237
34	C	0.1169	0.99269	0.44237
35	C	0.00731	0.1169	0.55763
36	C	0.99269	0.8831	0.55763
37	C	0.6169	0.00731	0.30763
38	C	0.3831	0.99269	0.30763
39	C	0.49269	0.1169	0.19237
40	C	0.50731	0.8831	0.19237
41	C	0.3831	0.50731	0.94237
42	C	0.6169	0.49269	0.94237
43	C	0.50731	0.6169	0.05763
44	C	0.49269	0.3831	0.05763
45	C	0.1169	0.50731	0.80763

46	C	0.8831	0.49269	0.80763
47	C	0.99269	0.6169	0.69237
48	C	0.00731	0.3831	0.69237
49	C	0.86975	0.9567	0.41565
50	C	0.13025	0.0433	0.41565
51	C	0.9567	0.13025	0.58435
52	C	0.0433	0.86975	0.58435
53	C	0.63025	0.9567	0.33435
54	C	0.36975	0.0433	0.33435
55	C	0.5433	0.13025	0.16565
56	C	0.4567	0.86975	0.16565
57	C	0.36975	0.4567	0.91565
58	C	0.63025	0.5433	0.91565
59	C	0.4567	0.63025	0.08435
60	C	0.5433	0.36975	0.08435
61	C	0.13025	0.4567	0.83435
62	C	0.86975	0.5433	0.83435
63	C	0.0433	0.63025	0.66565
64	C	0.9567	0.36975	0.66565
65	C	0.81763	0.95693	0.38957
66	C	0.18237	0.04307	0.38957
67	C	0.95693	0.18237	0.61043
68	C	0.04307	0.81763	0.61043
69	C	0.68237	0.95693	0.36043
70	C	0.31763	0.04307	0.36043
71	C	0.54307	0.18237	0.13957
72	C	0.45693	0.81763	0.13957
73	C	0.31763	0.45693	0.88957
74	C	0.68237	0.54307	0.88957
75	C	0.45693	0.68237	0.11043
76	C	0.54307	0.31763	0.11043
77	C	0.18237	0.45693	0.86043
78	C	0.81763	0.54307	0.86043
79	C	0.04307	0.68237	0.63957
80	C	0.95693	0.31763	0.63957
81	C	0.77763	0.00809	0.38882
82	C	0.22237	0.99191	0.38882
83	C	0.00809	0.22237	0.61118
84	C	0.99191	0.77763	0.61118
85	C	0.72237	0.00809	0.36118
86	C	0.27763	0.99191	0.36118
87	C	0.49191	0.22237	0.13882
88	C	0.50809	0.77763	0.13882
89	C	0.27763	0.50809	0.88882
90	C	0.72237	0.49191	0.88882
91	C	0.50809	0.72237	0.11118
92	C	0.49191	0.27763	0.11118
93	C	0.22237	0.50809	0.86118
94	C	0.77763	0.49191	0.86118
95	C	0.99191	0.72237	0.63882
96	C	0.00809	0.27763	0.63882
97	C	0.79063	0.05913	0.41457
98	C	0.20937	0.94087	0.41457
99	C	0.05913	0.20937	0.58543
100	C	0.94087	0.79063	0.58543
101	C	0.70937	0.05913	0.33543
102	C	0.29063	0.94087	0.33543
103	C	0.44087	0.20937	0.16457
104	C	0.55913	0.79063	0.16457
105	C	0.29063	0.55913	0.91457

106	C	0.70937	0.44087	0.91457
107	C	0.55913	0.70937	0.08543
108	C	0.44087	0.29063	0.08543
109	C	0.20937	0.55913	0.83543
110	C	0.79063	0.44087	0.83543
111	C	0.94087	0.70937	0.66457
112	C	0.05913	0.29063	0.66457
113	C	0.84239	0.05882	0.44108
114	C	0.15761	0.94118	0.44108
115	C	0.05882	0.15761	0.55892
116	C	0.94118	0.84239	0.55892
117	C	0.65761	0.05882	0.30892
118	C	0.34239	0.94118	0.30892
119	C	0.44118	0.15761	0.19108
120	C	0.55882	0.84239	0.19108
121	C	0.34239	0.55882	0.94108
122	C	0.65761	0.44118	0.94108
123	C	0.55882	0.65761	0.05892
124	C	0.44118	0.34239	0.05892
125	C	0.15761	0.55882	0.80892
126	C	0.84239	0.44118	0.80892
127	C	0.94118	0.65761	0.69108
128	C	0.05882	0.34239	0.69108
129	H	0.00222	0.04133	0.42292
130	H	0.99778	0.95867	0.42292
131	H	0.04133	0.99778	0.57708
132	H	0.95867	0.00222	0.57708
133	H	0.49778	0.04133	0.32708
134	H	0.50222	0.95867	0.32708
135	H	0.45867	0.99778	0.17292
136	H	0.54133	0.00222	0.17292
137	H	0.50222	0.54133	0.92292
138	H	0.49778	0.45867	0.92292
139	H	0.54133	0.49778	0.07708
140	H	0.45867	0.50222	0.07708
141	H	0.99778	0.54133	0.82708
142	H	0.00222	0.45867	0.82708
143	H	0.95867	0.49778	0.67292
144	H	0.04133	0.50222	0.67292
145	H	0.90443	0.0678	0.51872
146	H	0.09557	0.9322	0.51872
147	H	0.0678	0.09557	0.48128
148	H	0.9322	0.90443	0.48128
149	H	0.59557	0.0678	0.23128
150	H	0.40443	0.9322	0.23128
151	H	0.4322	0.09557	0.26872
152	H	0.5678	0.90443	0.26872
153	H	0.40443	0.5678	0.01872
154	H	0.59557	0.4322	0.01872
155	H	0.5678	0.59557	0.98128
156	H	0.4322	0.40443	0.98128
157	H	0.09557	0.5678	0.73128
158	H	0.90443	0.4322	0.73128
159	H	0.9322	0.59557	0.76872
160	H	0.0678	0.40443	0.76872
161	H	0.95165	0.10569	0.47989
162	H	0.04835	0.89431	0.47989
163	H	0.10569	0.04835	0.52011
164	H	0.89431	0.95165	0.52011
165	H	0.54835	0.10569	0.27011

166	H	0.45165	0.89431	0.27011
167	H	0.39431	0.04835	0.22989
168	H	0.60569	0.95165	0.22989
169	H	0.45165	0.60569	0.97989
170	H	0.54835	0.39431	0.97989
171	H	0.60569	0.54835	0.02011
172	H	0.39431	0.45165	0.02011
173	H	0.04835	0.60569	0.77011
174	H	0.95165	0.39431	0.77011
175	H	0.89431	0.54835	0.72989
176	H	0.10569	0.45165	0.72989
177	H	0.89978	0.91656	0.41471
178	H	0.10022	0.08344	0.41471
179	H	0.91656	0.10022	0.58529
180	H	0.08344	0.89978	0.58529
181	H	0.60022	0.91656	0.33529
182	H	0.39978	0.08344	0.33529
183	H	0.58344	0.10022	0.16471
184	H	0.41656	0.89978	0.16471
185	H	0.39978	0.41656	0.91471
186	H	0.60022	0.58344	0.91471
187	H	0.41656	0.60022	0.08529
188	H	0.58344	0.39978	0.08529
189	H	0.10022	0.41656	0.83529
190	H	0.89978	0.58344	0.83529
191	H	0.08344	0.60022	0.66471
192	H	0.91656	0.39978	0.66471
193	H	0.80893	0.91744	0.36936
194	H	0.19107	0.08256	0.36936
195	H	0.91744	0.19107	0.63064
196	H	0.08256	0.80893	0.63064
197	H	0.69107	0.91744	0.38064
198	H	0.30893	0.08256	0.38064
199	H	0.58256	0.19107	0.11936
200	H	0.41744	0.80893	0.11936
201	H	0.30893	0.41744	0.86936
202	H	0.69107	0.58256	0.86936
203	H	0.41744	0.69107	0.13064
204	H	0.58256	0.30893	0.13064
205	H	0.19107	0.41744	0.88064
206	H	0.80893	0.58256	0.88064
207	H	0.08256	0.69107	0.61936
208	H	0.91744	0.30893	0.61936
209	H	0.75995	0.09894	0.41462
210	H	0.24005	0.90106	0.41462
211	H	0.09894	0.24005	0.58538
212	H	0.90106	0.75995	0.58538
213	H	0.74005	0.09894	0.33538
214	H	0.25995	0.90106	0.33538
215	H	0.40106	0.24005	0.16462
216	H	0.59894	0.75995	0.16462
217	H	0.25995	0.59894	0.91462
218	H	0.74005	0.40106	0.91462
219	H	0.59894	0.74005	0.08538
220	H	0.40106	0.25995	0.08538
221	H	0.24005	0.59894	0.83538
222	H	0.75995	0.40106	0.83538
223	H	0.90106	0.74005	0.66462
224	H	0.09894	0.25995	0.66462
225	H	0.84966	0.09937	0.46032

226	H	0.15034	0.90063	0.46032
227	H	0.09937	0.15034	0.53968
228	H	0.90063	0.84966	0.53968
229	H	0.65034	0.09937	0.28968
230	H	0.34966	0.90063	0.28968
231	H	0.40063	0.15034	0.21032
232	H	0.59937	0.84966	0.21032
233	H	0.34966	0.59937	0.96032
234	H	0.65034	0.40063	0.96032
235	H	0.59937	0.65034	0.03968
236	H	0.40063	0.34966	0.03968
237	H	0.15034	0.59937	0.78968
238	H	0.84966	0.40063	0.78968
239	H	0.90063	0.65034	0.71032
240	H	0.09937	0.34966	0.71032
241	C	0 0	0.44372	
242	C	0 0	0.55628	
243	C	0.5 0	0.30628	
244	C	0.5 0	0.19372	
245	C	0.5 0.5	0.94372	
246	C	0.5 0.5	0.05628	
247	C	0 0.5	0.80628	
248	C	0 0.5	0.69372	
249	C	0.94082	0.00487	0.97117
250	C	0.05918	0.99513	0.97117
251	C	0.00487	0.05918	0.02883
252	C	0.99513	0.94082	0.02883
253	C	0.55918	0.00487	0.77883
254	C	0.44082	0.99513	0.77883
255	C	0.49513	0.05918	0.72117
256	C	0.50487	0.94082	0.72117
257	C	0.44082	0.50487	0.47117
258	C	0.55918	0.49513	0.47117
259	C	0.50487	0.55918	0.52883
260	C	0.49513	0.44082	0.52883
261	C	0.05918	0.50487	0.27883
262	C	0.94082	0.49513	0.27883
263	C	0.99513	0.55918	0.22117
264	C	0.00487	0.44082	0.22117
265	C	0.94727	0.0633	0.99962
266	C	0.05273	0.9367	0.99962
267	C	0.0633	0.05273	0.00038
268	C	0.9367	0.94727	0.00038
269	C	0.55273	0.0633	0.75038
270	C	0.44727	0.9367	0.75038
271	C	0.4367	0.05273	0.74962
272	C	0.5633	0.94727	0.74962
273	C	0.44727	0.5633	0.49962
274	C	0.55273	0.4367	0.49962
275	C	0.5633	0.55273	0.50038
276	C	0.4367	0.44727	0.50038
277	C	0.05273	0.5633	0.25038
278	C	0.94727	0.4367	0.25038
279	C	0.9367	0.55273	0.24962
280	C	0.0633	0.44727	0.24962
281	C	0.8831	0.00731	0.94237
282	C	0.1169	0.99269	0.94237
283	C	0.00731	0.1169	0.05763
284	C	0.99269	0.8831	0.05763
285	C	0.6169	0.00731	0.80763

286	C	0.3831	0.99269	0.80763
287	C	0.49269	0.1169	0.69237
288	C	0.50731	0.8831	0.69237
289	C	0.3831	0.50731	0.44237
290	C	0.6169	0.49269	0.44237
291	C	0.50731	0.6169	0.55763
292	C	0.49269	0.3831	0.55763
293	C	0.1169	0.50731	0.30763
294	C	0.8831	0.49269	0.30763
295	C	0.99269	0.6169	0.19237
296	C	0.00731	0.3831	0.19237
297	C	0.86975	0.9567	0.91565
298	C	0.13025	0.0433	0.91565
299	C	0.9567	0.13025	0.08435
300	C	0.0433	0.86975	0.08435
301	C	0.63025	0.9567	0.83435
302	C	0.36975	0.0433	0.83435
303	C	0.5433	0.13025	0.66565
304	C	0.4567	0.86975	0.66565
305	C	0.36975	0.4567	0.41565
306	C	0.63025	0.5433	0.41565
307	C	0.4567	0.63025	0.58435
308	C	0.5433	0.36975	0.58435
309	C	0.13025	0.4567	0.33435
310	C	0.86975	0.5433	0.33435
311	C	0.0433	0.63025	0.16565
312	C	0.9567	0.36975	0.16565
313	C	0.81763	0.95693	0.88957
314	C	0.18237	0.04307	0.88957
315	C	0.95693	0.18237	0.11043
316	C	0.04307	0.81763	0.11043
317	C	0.68237	0.95693	0.86043
318	C	0.31763	0.04307	0.86043
319	C	0.54307	0.18237	0.63957
320	C	0.45693	0.81763	0.63957
321	C	0.31763	0.45693	0.38957
322	C	0.68237	0.54307	0.38957
323	C	0.45693	0.68237	0.61043
324	C	0.54307	0.31763	0.61043
325	C	0.18237	0.45693	0.36043
326	C	0.81763	0.54307	0.36043
327	C	0.04307	0.68237	0.13957
328	C	0.95693	0.31763	0.13957
329	C	0.77763	0.00809	0.88882
330	C	0.22237	0.99191	0.88882
331	C	0.00809	0.22237	0.11118
332	C	0.99191	0.77763	0.11118
333	C	0.72237	0.00809	0.86118
334	C	0.27763	0.99191	0.86118
335	C	0.49191	0.22237	0.63882
336	C	0.50809	0.77763	0.63882
337	C	0.27763	0.50809	0.38882
338	C	0.72237	0.49191	0.38882
339	C	0.50809	0.72237	0.61118
340	C	0.49191	0.27763	0.61118
341	C	0.22237	0.50809	0.36118
342	C	0.77763	0.49191	0.36118
343	C	0.99191	0.72237	0.13882
344	C	0.00809	0.27763	0.13882
345	C	0.79063	0.05913	0.91457

346	C	0.20937	0.94087	0.91457
347	C	0.05913	0.20937	0.08543
348	C	0.94087	0.79063	0.08543
349	C	0.70937	0.05913	0.83543
350	C	0.29063	0.94087	0.83543
351	C	0.44087	0.20937	0.66457
352	C	0.55913	0.79063	0.66457
353	C	0.29063	0.55913	0.41457
354	C	0.70937	0.44087	0.41457
355	C	0.55913	0.70937	0.58543
356	C	0.44087	0.29063	0.58543
357	C	0.20937	0.55913	0.33543
358	C	0.79063	0.44087	0.33543
359	C	0.94087	0.70937	0.16457
360	C	0.05913	0.29063	0.16457
361	C	0.84239	0.05882	0.94108
362	C	0.15761	0.94118	0.94108
363	C	0.05882	0.15761	0.05892
364	C	0.94118	0.84239	0.05892
365	C	0.65761	0.05882	0.80892
366	C	0.34239	0.94118	0.80892
367	C	0.44118	0.15761	0.69108
368	C	0.55882	0.84239	0.69108
369	C	0.34239	0.55882	0.44108
370	C	0.65761	0.44118	0.44108
371	C	0.55882	0.65761	0.55892
372	C	0.44118	0.34239	0.55892
373	C	0.15761	0.55882	0.30892
374	C	0.84239	0.44118	0.30892
375	C	0.94118	0.65761	0.19108
376	C	0.05882	0.34239	0.19108
377	H	0.00222	0.04133	0.92292
378	H	0.99778	0.95867	0.92292
379	H	0.04133	0.99778	0.07708
380	H	0.95867	0.00222	0.07708
381	H	0.49778	0.04133	0.82708
382	H	0.50222	0.95867	0.82708
383	H	0.45867	0.99778	0.67292
384	H	0.54133	0.00222	0.67292
385	H	0.50222	0.54133	0.42292
386	H	0.49778	0.45867	0.42292
387	H	0.54133	0.49778	0.57708
388	H	0.45867	0.50222	0.57708
389	H	0.99778	0.54133	0.32708
390	H	0.00222	0.45867	0.32708
391	H	0.95867	0.49778	0.17292
392	H	0.04133	0.50222	0.17292
393	H	0.90443	0.0678	0.01872
394	H	0.09557	0.9322	0.01872
395	H	0.0678	0.09557	0.98128
396	H	0.9322	0.90443	0.98128
397	H	0.59557	0.0678	0.73128
398	H	0.40443	0.9322	0.73128
399	H	0.4322	0.09557	0.76872
400	H	0.5678	0.90443	0.76872
401	H	0.40443	0.5678	0.51872
402	H	0.59557	0.4322	0.51872
403	H	0.5678	0.59557	0.48128
404	H	0.4322	0.40443	0.48128
405	H	0.09557	0.5678	0.23128

406	H	0.90443	0.4322	0.23128
407	H	0.9322	0.59557	0.26872
408	H	0.0678	0.40443	0.26872
409	H	0.95165	0.10569	0.97989
410	H	0.04835	0.89431	0.97989
411	H	0.10569	0.04835	0.02011
412	H	0.89431	0.95165	0.02011
413	H	0.54835	0.10569	0.77011
414	H	0.45165	0.89431	0.77011
415	H	0.39431	0.04835	0.72989
416	H	0.60569	0.95165	0.72989
417	H	0.45165	0.60569	0.47989
418	H	0.54835	0.39431	0.47989
419	H	0.60569	0.54835	0.52011
420	H	0.39431	0.45165	0.52011
421	H	0.04835	0.60569	0.27011
422	H	0.95165	0.39431	0.27011
423	H	0.89431	0.54835	0.22989
424	H	0.10569	0.45165	0.22989
425	H	0.89978	0.91656	0.91471
426	H	0.10022	0.08344	0.91471
427	H	0.91656	0.10022	0.08529
428	H	0.08344	0.89978	0.08529
429	H	0.60022	0.91656	0.83529
430	H	0.39978	0.08344	0.83529
431	H	0.58344	0.10022	0.66471
432	H	0.41656	0.89978	0.66471
433	H	0.39978	0.41656	0.41471
434	H	0.60022	0.58344	0.41471
435	H	0.41656	0.60022	0.58529
436	H	0.58344	0.39978	0.58529
437	H	0.10022	0.41656	0.33529
438	H	0.89978	0.58344	0.33529
439	H	0.08344	0.60022	0.16471
440	H	0.91656	0.39978	0.16471
441	H	0.80893	0.91744	0.86936
442	H	0.19107	0.08256	0.86936
443	H	0.91744	0.19107	0.13064
444	H	0.08256	0.80893	0.13064
445	H	0.69107	0.91744	0.88064
446	H	0.30893	0.08256	0.88064
447	H	0.58256	0.19107	0.61936
448	H	0.41744	0.80893	0.61936
449	H	0.30893	0.41744	0.36936
450	H	0.69107	0.58256	0.36936
451	H	0.41744	0.69107	0.63064
452	H	0.58256	0.30893	0.63064
453	H	0.19107	0.41744	0.38064
454	H	0.80893	0.58256	0.38064
455	H	0.08256	0.69107	0.11936
456	H	0.91744	0.30893	0.11936
457	H	0.75995	0.09894	0.91462
458	H	0.24005	0.90106	0.91462
459	H	0.09894	0.24005	0.08538
460	H	0.90106	0.75995	0.08538
461	H	0.74005	0.09894	0.83538
462	H	0.25995	0.90106	0.83538
463	H	0.40106	0.24005	0.66462
464	H	0.59894	0.75995	0.66462
465	H	0.25995	0.59894	0.41462



466	H	0.74005	0.40106	0.41462
467	H	0.59894	0.74005	0.58538
468	H	0.40106	0.25995	0.58538
469	H	0.24005	0.59894	0.33538
470	H	0.75995	0.40106	0.33538
471	H	0.90106	0.74005	0.16462
472	H	0.09894	0.25995	0.16462
473	H	0.84966	0.09937	0.96032
474	H	0.15034	0.90063	0.96032
475	H	0.09937	0.15034	0.03968
476	H	0.90063	0.84966	0.03968
477	H	0.65034	0.09937	0.78968
478	H	0.34966	0.90063	0.78968
479	H	0.40063	0.15034	0.71032
480	H	0.59937	0.84966	0.71032
481	H	0.34966	0.59937	0.46032
482	H	0.65034	0.40063	0.46032
483	H	0.59937	0.65034	0.53968
484	H	0.40063	0.34966	0.53968
485	H	0.15034	0.59937	0.28968
486	H	0.84966	0.40063	0.28968
487	H	0.90063	0.65034	0.21032
488	H	0.09937	0.34966	0.21032
489	C	0	0	0.94372
490	C	0	0	0.05628
491	C	0.5	0	0.80628
492	C	0.5	0	0.69372
493	C	0.5	0.5	0.44372
494	C	0.5	0.5	0.55628
495	C	0	0.5	0.30628
496	C	0	0.5	0.19372

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_DIA\_2-fold-PPN-3.cif

```

_cell_length_a      43.102(0)
_cell_length_b      43.102(0)
_cell_length_c      31.85(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number          1
_symmetry_cell_setting               Tetragonal

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol

```

	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	
0	C	0.470419	0.00243608	0.471177
1	C	0.470419	0.502436	0.471177
2	C	0.970419	0.00243608	0.471177
3	C	0.970419	0.502436	0.471177
4	C	0.029581	0.497564	0.471177
5	C	0.029581	0.997564	0.471177
6	C	0.529581	0.497564	0.471177
7	C	0.529581	0.997564	0.471177
8	C	0.00243608	0.029581	0.528823
9	C	0.00243608	0.529581	0.528823
10	C	0.502436	0.029581	0.528823
11	C	0.502436	0.529581	0.528823
12	C	0.497564	0.470419	0.528823
13	C	0.497564	0.970419	0.528823
14	C	0.997564	0.470419	0.528823
15	C	0.997564	0.970419	0.528823
16	C	0.279593	0.00243608	0.278838
17	C	0.279593	0.502436	0.278838
18	C	0.779593	0.00243608	0.278838
19	C	0.779593	0.502436	0.278838
20	C	0.220407	0.497564	0.278838
21	C	0.220407	0.997564	0.278838
22	C	0.720407	0.497564	0.278838
23	C	0.720407	0.997564	0.278838
24	C	0.247576	0.029581	0.221162
25	C	0.247576	0.529581	0.221162
26	C	0.747576	0.029581	0.221162
27	C	0.747576	0.529581	0.221162
28	C	0.252424	0.470419	0.221162
29	C	0.252424	0.970419	0.221162
30	C	0.752424	0.470419	0.221162
31	C	0.752424	0.970419	0.221162
32	C	0.220407	0.252424	0.971177
33	C	0.220407	0.752424	0.971177
34	C	0.720407	0.252424	0.971177
35	C	0.720407	0.752424	0.971177
36	C	0.279593	0.247576	0.971177
37	C	0.279593	0.747576	0.971177
38	C	0.779593	0.247576	0.971177
39	C	0.779593	0.747576	0.971177
40	C	0.252424	0.279593	0.0288226
41	C	0.252424	0.779593	0.0288226
42	C	0.752424	0.279593	0.0288226
43	C	0.752424	0.779593	0.0288226
44	C	0.247576	0.220407	0.0288226
45	C	0.247576	0.720407	0.0288226
46	C	0.747576	0.220407	0.0288226
47	C	0.747576	0.720407	0.0288226
48	C	0.029581	0.252424	0.778838
49	C	0.029581	0.752424	0.778838
50	C	0.529581	0.252424	0.778838
51	C	0.529581	0.752424	0.778838
52	C	0.470419	0.247576	0.778838
53	C	0.470419	0.747576	0.778838
54	C	0.970419	0.247576	0.778838
55	C	0.970419	0.747576	0.778838
56	C	0.497564	0.279593	0.721162

57	C	0.497564	0.779593	0.721162
58	C	0.997564	0.279593	0.721162
59	C	0.997564	0.779593	0.721162
60	C	0.00243608	0.220407	0.721162
61	C	0.00243608	0.720407	0.721162
62	C	0.502436	0.220407	0.721162
63	C	0.502436	0.720407	0.721162
64	C	0.473644	0.0316459	0.499623
65	C	0.473644	0.531646	0.499623
66	C	0.973644	0.0316459	0.499623
67	C	0.973644	0.531646	0.499623
68	C	0.0263561	0.468354	0.499623
69	C	0.0263561	0.968354	0.499623
70	C	0.526356	0.468354	0.499623
71	C	0.526356	0.968354	0.499623
72	C	0.0316459	0.0263561	0.500377
73	C	0.0316459	0.526356	0.500377
74	C	0.531646	0.0263561	0.500377
75	C	0.531646	0.526356	0.500377
76	C	0.468354	0.473644	0.500377
77	C	0.468354	0.973644	0.500377
78	C	0.968354	0.473644	0.500377
79	C	0.968354	0.973644	0.500377
80	C	0.276368	0.0316459	0.250392
81	C	0.276368	0.531646	0.250392
82	C	0.776368	0.0316459	0.250392
83	C	0.776368	0.531646	0.250392
84	C	0.223632	0.468354	0.250392
85	C	0.223632	0.968354	0.250392
86	C	0.723632	0.468354	0.250392
87	C	0.723632	0.968354	0.250392
88	C	0.218343	0.0263561	0.249608
89	C	0.218343	0.526356	0.249608
90	C	0.718343	0.0263561	0.249608
91	C	0.718343	0.526356	0.249608
92	C	0.281657	0.473644	0.249608
93	C	0.281657	0.973644	0.249608
94	C	0.781657	0.473644	0.249608
95	C	0.781657	0.973644	0.249608
96	C	0.223632	0.281657	0.999623
97	C	0.223632	0.781657	0.999623
98	C	0.723632	0.281657	0.999623
99	C	0.723632	0.781657	0.999623
100	C	0.276368	0.218343	0.999623
101	C	0.276368	0.718343	0.999623
102	C	0.776368	0.218343	0.999623
103	C	0.776368	0.718343	0.999623
104	C	0.281657	0.276368	0.000376766
105	C	0.281657	0.776368	0.000376766
106	C	0.781657	0.276368	0.000376766
107	C	0.781657	0.776368	0.000376766
108	C	0.218343	0.223632	0.000376766
109	C	0.218343	0.723632	0.000376766
110	C	0.718343	0.223632	0.000376766
111	C	0.718343	0.723632	0.000376766
112	C	0.0263561	0.281657	0.750392
113	C	0.0263561	0.781657	0.750392
114	C	0.526356	0.281657	0.750392
115	C	0.526356	0.781657	0.750392
116	C	0.473644	0.218343	0.750392

117	C	0.473644	0.718343	0.750392
118	C	0.973644	0.218343	0.750392
119	C	0.973644	0.718343	0.750392
120	C	0.468354	0.276368	0.749608
121	C	0.468354	0.776368	0.749608
122	C	0.968354	0.276368	0.749608
123	C	0.968354	0.776368	0.749608
124	C	0.0316459	0.223632	0.749608
125	C	0.0316459	0.723632	0.749608
126	C	0.531646	0.223632	0.749608
127	C	0.531646	0.723632	0.749608
128	C	0.441557	0.00366572	0.442355
129	C	0.441557	0.503666	0.442355
130	C	0.941557	0.00366572	0.442355
131	C	0.941557	0.503666	0.442355
132	C	0.0584428	0.496334	0.442355
133	C	0.0584428	0.996334	0.442355
134	C	0.558443	0.496334	0.442355
135	C	0.558443	0.996334	0.442355
136	C	0.00366572	0.0584428	0.557645
137	C	0.00366572	0.558443	0.557645
138	C	0.503666	0.0584428	0.557645
139	C	0.503666	0.558443	0.557645
140	C	0.496334	0.441557	0.557645
141	C	0.496334	0.941557	0.557645
142	C	0.996334	0.441557	0.557645
143	C	0.996334	0.941557	0.557645
144	C	0.308454	0.00366572	0.30763
145	C	0.308454	0.503666	0.30763
146	C	0.808454	0.00366572	0.30763
147	C	0.808454	0.503666	0.30763
148	C	0.191546	0.496334	0.30763
149	C	0.191546	0.996334	0.30763
150	C	0.691546	0.496334	0.30763
151	C	0.691546	0.996334	0.30763
152	C	0.246346	0.0584428	0.19237
153	C	0.246346	0.558443	0.19237
154	C	0.746346	0.0584428	0.19237
155	C	0.746346	0.558443	0.19237
156	C	0.253654	0.441557	0.19237
157	C	0.253654	0.941557	0.19237
158	C	0.753654	0.441557	0.19237
159	C	0.753654	0.941557	0.19237
160	C	0.191546	0.253654	0.942355
161	C	0.191546	0.753654	0.942355
162	C	0.691546	0.253654	0.942355
163	C	0.691546	0.753654	0.942355
164	C	0.308454	0.246346	0.942355
165	C	0.308454	0.746346	0.942355
166	C	0.808454	0.246346	0.942355
167	C	0.808454	0.746346	0.942355
168	C	0.253654	0.308454	0.0576452
169	C	0.253654	0.808454	0.0576452
170	C	0.753654	0.308454	0.0576452
171	C	0.753654	0.808454	0.0576452
172	C	0.246346	0.191546	0.0576452
173	C	0.246346	0.691546	0.0576452
174	C	0.746346	0.191546	0.0576452
175	C	0.746346	0.691546	0.0576452
176	C	0.0584428	0.253654	0.80763

177	C	0.0584428	0.753654	0.80763
178	C	0.558443	0.253654	0.80763
179	C	0.558443	0.753654	0.80763
180	C	0.441557	0.246346	0.80763
181	C	0.441557	0.746346	0.80763
182	C	0.941557	0.246346	0.80763
183	C	0.941557	0.746346	0.80763
184	C	0.496334	0.308454	0.69237
185	C	0.496334	0.808454	0.69237
186	C	0.996334	0.308454	0.69237
187	C	0.996334	0.808454	0.69237
188	C	0.00366572	0.191546	0.69237
189	C	0.00366572	0.691546	0.69237
190	C	0.503666	0.191546	0.69237
191	C	0.503666	0.691546	0.69237
192	C	0.434875	0.478354	0.415636
193	C	0.934875	0.478354	0.415636
194	C	0.0651246	0.521646	0.415636
195	C	0.565125	0.521646	0.415636
196	C	0.478354	0.0651246	0.584364
197	C	0.478354	0.565125	0.584364
198	C	0.521646	0.434875	0.584364
199	C	0.521646	0.934875	0.584364
200	C	0.315136	0.478354	0.334349
201	C	0.815136	0.478354	0.334349
202	C	0.184864	0.521646	0.334349
203	C	0.684864	0.521646	0.334349
204	C	0.271658	0.0651246	0.165651
205	C	0.271658	0.565125	0.165651
206	C	0.771658	0.0651246	0.165651
207	C	0.771658	0.565125	0.165651
208	C	0.228342	0.434875	0.165651
209	C	0.228342	0.934875	0.165651
210	C	0.728342	0.434875	0.165651
211	C	0.728342	0.934875	0.165651
212	C	0.184864	0.228342	0.915636
213	C	0.184864	0.728342	0.915636
214	C	0.684864	0.228342	0.915636
215	C	0.684864	0.728342	0.915636
216	C	0.315136	0.271658	0.915636
217	C	0.315136	0.771658	0.915636
218	C	0.815136	0.271658	0.915636
219	C	0.815136	0.771658	0.915636
220	C	0.228342	0.315136	0.0843642
221	C	0.228342	0.815136	0.0843642
222	C	0.728342	0.315136	0.0843642
223	C	0.728342	0.815136	0.0843642
224	C	0.271658	0.184864	0.0843642
225	C	0.271658	0.684864	0.0843642
226	C	0.771658	0.184864	0.0843642
227	C	0.771658	0.684864	0.0843642
228	C	0.0651246	0.228342	0.834349
229	C	0.0651246	0.728342	0.834349
230	C	0.565125	0.228342	0.834349
231	C	0.565125	0.728342	0.834349
232	C	0.434875	0.271658	0.834349
233	C	0.434875	0.771658	0.834349
234	C	0.934875	0.271658	0.834349
235	C	0.934875	0.771658	0.834349
236	C	0.521646	0.315136	0.665651

237	C	0.521646	0.815136	0.665651
238	C	0.478354	0.184864	0.665651
239	C	0.478354	0.684864	0.665651
240	C	0.408821	0.47847	0.389576
241	C	0.908821	0.47847	0.389576
242	C	0.0911791	0.52153	0.389576
243	C	0.591179	0.52153	0.389576
244	C	0.47847	0.0911791	0.610424
245	C	0.47847	0.591179	0.610424
246	C	0.52153	0.408821	0.610424
247	C	0.52153	0.908821	0.610424
248	C	0.341191	0.47847	0.36044
249	C	0.841191	0.47847	0.36044
250	C	0.158809	0.52153	0.36044
251	C	0.658809	0.52153	0.36044
252	C	0.271542	0.0911791	0.13956
253	C	0.271542	0.591179	0.13956
254	C	0.771542	0.0911791	0.13956
255	C	0.771542	0.591179	0.13956
256	C	0.228458	0.408821	0.13956
257	C	0.228458	0.908821	0.13956
258	C	0.728458	0.408821	0.13956
259	C	0.728458	0.908821	0.13956
260	C	0.158809	0.228458	0.889576
261	C	0.158809	0.728458	0.889576
262	C	0.658809	0.228458	0.889576
263	C	0.658809	0.728458	0.889576
264	C	0.341191	0.271542	0.889576
265	C	0.341191	0.771542	0.889576
266	C	0.841191	0.271542	0.889576
267	C	0.841191	0.771542	0.889576
268	C	0.228458	0.341191	0.110424
269	C	0.228458	0.841191	0.110424
270	C	0.728458	0.341191	0.110424
271	C	0.728458	0.841191	0.110424
272	C	0.271542	0.158809	0.110424
273	C	0.271542	0.658809	0.110424
274	C	0.771542	0.158809	0.110424
275	C	0.771542	0.658809	0.110424
276	C	0.0911791	0.228458	0.86044
277	C	0.0911791	0.728458	0.86044
278	C	0.591179	0.228458	0.86044
279	C	0.591179	0.728458	0.86044
280	C	0.408821	0.271542	0.86044
281	C	0.408821	0.771542	0.86044
282	C	0.908821	0.271542	0.86044
283	C	0.908821	0.771542	0.86044
284	C	0.52153	0.341191	0.63956
285	C	0.52153	0.841191	0.63956
286	C	0.47847	0.158809	0.63956
287	C	0.47847	0.658809	0.63956
288	C	0.388822	0.00403694	0.388823
289	C	0.388822	0.504037	0.388823
290	C	0.888822	0.00403694	0.388823
291	C	0.888822	0.504037	0.388823
292	C	0.111178	0.495963	0.388823
293	C	0.111178	0.995963	0.388823
294	C	0.611178	0.495963	0.388823
295	C	0.611178	0.995963	0.388823
296	C	0.00403694	0.111178	0.611177

297	C	0.00403694	0.611178	0.611177
298	C	0.504037	0.111178	0.611177
299	C	0.504037	0.611178	0.611177
300	C	0.495963	0.388822	0.611177
301	C	0.495963	0.888822	0.611177
302	C	0.995963	0.388822	0.611177
303	C	0.995963	0.888822	0.611177
304	C	0.36119	0.00403694	0.361193
305	C	0.36119	0.504037	0.361193
306	C	0.86119	0.00403694	0.361193
307	C	0.86119	0.504037	0.361193
308	C	0.13881	0.495963	0.361193
309	C	0.13881	0.995963	0.361193
310	C	0.63881	0.495963	0.361193
311	C	0.63881	0.995963	0.361193
312	C	0.245951	0.111178	0.138807
313	C	0.245951	0.611178	0.138807
314	C	0.745951	0.111178	0.138807
315	C	0.745951	0.611178	0.138807
316	C	0.254049	0.388822	0.138807
317	C	0.254049	0.888822	0.138807
318	C	0.754049	0.388822	0.138807
319	C	0.754049	0.888822	0.138807
320	C	0.13881	0.254049	0.888823
321	C	0.13881	0.754049	0.888823
322	C	0.63881	0.254049	0.888823
323	C	0.63881	0.754049	0.888823
324	C	0.36119	0.245951	0.888823
325	C	0.36119	0.745951	0.888823
326	C	0.86119	0.245951	0.888823
327	C	0.86119	0.745951	0.888823
328	C	0.254049	0.36119	0.111177
329	C	0.254049	0.86119	0.111177
330	C	0.754049	0.36119	0.111177
331	C	0.754049	0.86119	0.111177
332	C	0.245951	0.13881	0.111177
333	C	0.245951	0.63881	0.111177
334	C	0.745951	0.13881	0.111177
335	C	0.745951	0.63881	0.111177
336	C	0.111178	0.254049	0.861193
337	C	0.111178	0.754049	0.861193
338	C	0.611178	0.254049	0.861193
339	C	0.611178	0.754049	0.861193
340	C	0.388822	0.245951	0.861193
341	C	0.388822	0.745951	0.861193
342	C	0.888822	0.245951	0.861193
343	C	0.888822	0.745951	0.861193
344	C	0.495963	0.36119	0.638807
345	C	0.495963	0.86119	0.638807
346	C	0.995963	0.36119	0.638807
347	C	0.995963	0.86119	0.638807
348	C	0.00403694	0.13881	0.638807
349	C	0.00403694	0.63881	0.638807
350	C	0.504037	0.13881	0.638807
351	C	0.504037	0.63881	0.638807
352	C	0.395318	0.0295578	0.414568
353	C	0.395318	0.529558	0.414568
354	C	0.895318	0.0295578	0.414568
355	C	0.895318	0.529558	0.414568
356	C	0.104682	0.470442	0.414568

357	C	0.104682	0.970442	0.414568
358	C	0.604682	0.470442	0.414568
359	C	0.604682	0.970442	0.414568
360	C	0.0295578	0.104682	0.585432
361	C	0.0295578	0.604682	0.585432
362	C	0.529558	0.104682	0.585432
363	C	0.529558	0.604682	0.585432
364	C	0.470442	0.395318	0.585432
365	C	0.470442	0.895318	0.585432
366	C	0.970442	0.395318	0.585432
367	C	0.970442	0.895318	0.585432
368	C	0.354694	0.0295578	0.335416
369	C	0.354694	0.529558	0.335416
370	C	0.854694	0.0295578	0.335416
371	C	0.854694	0.529558	0.335416
372	C	0.145306	0.470442	0.335416
373	C	0.145306	0.970442	0.335416
374	C	0.645306	0.470442	0.335416
375	C	0.645306	0.970442	0.335416
376	C	0.220431	0.104682	0.164584
377	C	0.220431	0.604682	0.164584
378	C	0.720431	0.104682	0.164584
379	C	0.720431	0.604682	0.164584
380	C	0.279569	0.395318	0.164584
381	C	0.279569	0.895318	0.164584
382	C	0.779569	0.395318	0.164584
383	C	0.779569	0.895318	0.164584
384	C	0.145306	0.279569	0.914568
385	C	0.145306	0.779569	0.914568
386	C	0.645306	0.279569	0.914568
387	C	0.645306	0.779569	0.914568
388	C	0.354694	0.220431	0.914568
389	C	0.354694	0.720431	0.914568
390	C	0.854694	0.220431	0.914568
391	C	0.854694	0.720431	0.914568
392	C	0.279569	0.354694	0.0854317
393	C	0.279569	0.854694	0.0854317
394	C	0.779569	0.354694	0.0854317
395	C	0.779569	0.854694	0.0854317
396	C	0.220431	0.145306	0.0854317
397	C	0.220431	0.645306	0.0854317
398	C	0.720431	0.145306	0.0854317
399	C	0.720431	0.645306	0.0854317
400	C	0.104682	0.279569	0.835416
401	C	0.104682	0.779569	0.835416
402	C	0.604682	0.279569	0.835416
403	C	0.604682	0.779569	0.835416
404	C	0.395318	0.220431	0.835416
405	C	0.395318	0.720431	0.835416
406	C	0.895318	0.220431	0.835416
407	C	0.895318	0.720431	0.835416
408	C	0.470442	0.354694	0.664584
409	C	0.470442	0.854694	0.664584
410	C	0.970442	0.354694	0.664584
411	C	0.970442	0.854694	0.664584
412	C	0.0295578	0.145306	0.664584
413	C	0.0295578	0.645306	0.664584
414	C	0.529558	0.145306	0.664584
415	C	0.529558	0.645306	0.664584
416	C	0.421187	0.0294186	0.441068



417	C	0.421187	0.529419	0.441068
418	C	0.921187	0.0294186	0.441068
419	C	0.921187	0.529419	0.441068
420	C	0.078813	0.470581	0.441068
421	C	0.078813	0.970581	0.441068
422	C	0.578813	0.470581	0.441068
423	C	0.578813	0.970581	0.441068
424	C	0.0294186	0.078813	0.558932
425	C	0.0294186	0.578813	0.558932
426	C	0.529419	0.078813	0.558932
427	C	0.529419	0.578813	0.558932
428	C	0.470581	0.421187	0.558932
429	C	0.470581	0.921187	0.558932
430	C	0.970581	0.421187	0.558932
431	C	0.970581	0.921187	0.558932
432	C	0.328801	0.0294186	0.308917
433	C	0.328801	0.529419	0.308917
434	C	0.828801	0.0294186	0.308917
435	C	0.828801	0.529419	0.308917
436	C	0.171199	0.470581	0.308917
437	C	0.171199	0.970581	0.308917
438	C	0.671199	0.470581	0.308917
439	C	0.671199	0.970581	0.308917
440	C	0.220593	0.078813	0.191083
441	C	0.220593	0.578813	0.191083
442	C	0.720593	0.078813	0.191083
443	C	0.720593	0.578813	0.191083
444	C	0.279407	0.421187	0.191083
445	C	0.279407	0.921187	0.191083
446	C	0.779407	0.421187	0.191083
447	C	0.779407	0.921187	0.191083
448	C	0.171199	0.279407	0.941068
449	C	0.171199	0.779407	0.941068
450	C	0.671199	0.279407	0.941068
451	C	0.671199	0.779407	0.941068
452	C	0.328801	0.220593	0.941068
453	C	0.328801	0.720593	0.941068
454	C	0.828801	0.220593	0.941068
455	C	0.828801	0.720593	0.941068
456	C	0.279407	0.328801	0.0589325
457	C	0.279407	0.828801	0.0589325
458	C	0.779407	0.328801	0.0589325
459	C	0.779407	0.828801	0.0589325
460	C	0.220593	0.171199	0.0589325
461	C	0.220593	0.671199	0.0589325
462	C	0.720593	0.171199	0.0589325
463	C	0.720593	0.671199	0.0589325
464	C	0.078813	0.279407	0.808917
465	C	0.078813	0.779407	0.808917
466	C	0.578813	0.279407	0.808917
467	C	0.578813	0.779407	0.808917
468	C	0.421187	0.220593	0.808917
469	C	0.421187	0.720593	0.808917
470	C	0.921187	0.220593	0.808917
471	C	0.921187	0.720593	0.808917
472	C	0.470581	0.328801	0.691083
473	C	0.470581	0.828801	0.691083
474	C	0.970581	0.328801	0.691083
475	C	0.970581	0.828801	0.691083
476	C	0.0294186	0.171199	0.691083

477	C	0.0294186	0.671199	0.691083
478	C	0.529419	0.171199	0.691083
479	C	0.529419	0.671199	0.691083
480	H	0.00111364	0.520672	0.42292
481	H	0.501114	0.0206719	0.42292
482	H	0.501114	0.520672	0.42292
483	H	0.498886	0.479328	0.42292
484	H	0.0206719	0.498886	0.57708
485	H	0.520672	0.498886	0.57708
486	H	0.479328	0.00111364	0.57708
487	H	0.479328	0.501114	0.57708
488	H	0.248898	0.0206719	0.327064
489	H	0.248898	0.520672	0.327064
490	H	0.748898	0.0206719	0.327064
491	H	0.748898	0.520672	0.327064
492	H	0.251102	0.479328	0.327064
493	H	0.751102	0.479328	0.327064
494	H	0.22934	0.498886	0.172936
495	H	0.72934	0.498886	0.172936
496	H	0.27066	0.00111364	0.172936
497	H	0.27066	0.501114	0.172936
498	H	0.77066	0.00111364	0.172936
499	H	0.77066	0.501114	0.172936
500	H	0.251102	0.27066	0.92292
501	H	0.251102	0.77066	0.92292
502	H	0.751102	0.27066	0.92292
503	H	0.751102	0.77066	0.92292
504	H	0.248898	0.22934	0.92292
505	H	0.248898	0.72934	0.92292
506	H	0.748898	0.22934	0.92292
507	H	0.748898	0.72934	0.92292
508	H	0.27066	0.248898	0.0770801
509	H	0.27066	0.748898	0.0770801
510	H	0.77066	0.248898	0.0770801
511	H	0.77066	0.748898	0.0770801
512	H	0.22934	0.251102	0.0770801
513	H	0.22934	0.751102	0.0770801
514	H	0.72934	0.251102	0.0770801
515	H	0.72934	0.751102	0.0770801
516	H	0.498886	0.27066	0.827064
517	H	0.498886	0.77066	0.827064
518	H	0.00111364	0.22934	0.827064
519	H	0.00111364	0.72934	0.827064
520	H	0.501114	0.22934	0.827064
521	H	0.501114	0.72934	0.827064
522	H	0.479328	0.248898	0.672936
523	H	0.479328	0.748898	0.672936
524	H	0.0206719	0.251102	0.672936
525	H	0.0206719	0.751102	0.672936
526	H	0.520672	0.251102	0.672936
527	H	0.520672	0.751102	0.672936
528	H	0.452206	0.0338963	0.518713
529	H	0.452206	0.533896	0.518713
530	H	0.952206	0.0338963	0.518713
531	H	0.952206	0.533896	0.518713
532	H	0.0477936	0.466104	0.518713
533	H	0.0477936	0.966104	0.518713
534	H	0.547794	0.466104	0.518713
535	H	0.547794	0.966104	0.518713
536	H	0.0338963	0.0477936	0.481287

537	H	0.0338963	0.547794	0.481287
538	H	0.533896	0.0477936	0.481287
539	H	0.533896	0.547794	0.481287
540	H	0.466104	0.452206	0.481287
541	H	0.466104	0.952206	0.481287
542	H	0.966104	0.452206	0.481287
543	H	0.966104	0.952206	0.481287
544	H	0.297782	0.0338963	0.231272
545	H	0.297782	0.533896	0.231272
546	H	0.797782	0.0338963	0.231272
547	H	0.797782	0.533896	0.231272
548	H	0.202218	0.466104	0.231272
549	H	0.202218	0.966104	0.231272
550	H	0.702218	0.466104	0.231272
551	H	0.702218	0.966104	0.231272
552	H	0.216092	0.0477936	0.268728
553	H	0.216092	0.547794	0.268728
554	H	0.716092	0.0477936	0.268728
555	H	0.716092	0.547794	0.268728
556	H	0.283908	0.452206	0.268728
557	H	0.283908	0.952206	0.268728
558	H	0.783908	0.452206	0.268728
559	H	0.783908	0.952206	0.268728
560	H	0.0477936	0.283908	0.731272
561	H	0.0477936	0.783908	0.731272
562	H	0.547794	0.283908	0.731272
563	H	0.547794	0.783908	0.731272
564	H	0.452206	0.216092	0.731272
565	H	0.452206	0.716092	0.731272
566	H	0.952206	0.216092	0.731272
567	H	0.952206	0.716092	0.731272
568	H	0.466104	0.297782	0.768728
569	H	0.466104	0.797782	0.768728
570	H	0.966104	0.297782	0.768728
571	H	0.966104	0.797782	0.768728
572	H	0.0338963	0.202218	0.768728
573	H	0.0338963	0.702218	0.768728
574	H	0.533896	0.202218	0.768728
575	H	0.533896	0.702218	0.768728
576	H	0.475825	0.0528514	0.479874
577	H	0.475825	0.552851	0.479874
578	H	0.975825	0.0528514	0.479874
579	H	0.975825	0.552851	0.479874
580	H	0.0241752	0.447149	0.479874
581	H	0.0241752	0.947149	0.479874
582	H	0.524175	0.447149	0.479874
583	H	0.524175	0.947149	0.479874
584	H	0.0528514	0.0241752	0.520126
585	H	0.0528514	0.524175	0.520126
586	H	0.552851	0.0241752	0.520126
587	H	0.552851	0.524175	0.520126
588	H	0.447149	0.475825	0.520126
589	H	0.447149	0.975825	0.520126
590	H	0.947149	0.475825	0.520126
591	H	0.947149	0.975825	0.520126
592	H	0.274164	0.0528514	0.27011
593	H	0.274164	0.552851	0.27011
594	H	0.774164	0.0528514	0.27011
595	H	0.774164	0.552851	0.27011
596	H	0.225836	0.447149	0.27011

597	H	0.225836	0.947149	0.27011
598	H	0.725836	0.447149	0.27011
599	H	0.725836	0.947149	0.27011
600	H	0.19716	0.0241752	0.22989
601	H	0.19716	0.524175	0.22989
602	H	0.69716	0.0241752	0.22989
603	H	0.69716	0.524175	0.22989
604	H	0.30284	0.475825	0.22989
605	H	0.30284	0.975825	0.22989
606	H	0.80284	0.475825	0.22989
607	H	0.80284	0.975825	0.22989
608	H	0.225836	0.30284	0.979874
609	H	0.225836	0.80284	0.979874
610	H	0.725836	0.30284	0.979874
611	H	0.725836	0.80284	0.979874
612	H	0.274164	0.19716	0.979874
613	H	0.274164	0.69716	0.979874
614	H	0.774164	0.19716	0.979874
615	H	0.774164	0.69716	0.979874
616	H	0.30284	0.274164	0.0201256
617	H	0.30284	0.774164	0.0201256
618	H	0.80284	0.274164	0.0201256
619	H	0.80284	0.774164	0.0201256
620	H	0.19716	0.225836	0.0201256
621	H	0.19716	0.725836	0.0201256
622	H	0.69716	0.225836	0.0201256
623	H	0.69716	0.725836	0.0201256
624	H	0.0241752	0.30284	0.77011
625	H	0.0241752	0.80284	0.77011
626	H	0.524175	0.30284	0.77011
627	H	0.524175	0.80284	0.77011
628	H	0.475825	0.19716	0.77011
629	H	0.475825	0.69716	0.77011
630	H	0.975825	0.19716	0.77011
631	H	0.975825	0.69716	0.77011
632	H	0.447149	0.274164	0.72989
633	H	0.447149	0.774164	0.72989
634	H	0.947149	0.274164	0.72989
635	H	0.947149	0.774164	0.72989
636	H	0.0528514	0.225836	0.72989
637	H	0.0528514	0.725836	0.72989
638	H	0.552851	0.225836	0.72989
639	H	0.552851	0.725836	0.72989
640	H	0.449886	0.458285	0.414725
641	H	0.949886	0.458285	0.414725
642	H	0.0501137	0.541715	0.414725
643	H	0.550114	0.541715	0.414725
644	H	0.458285	0.0501137	0.585275
645	H	0.458285	0.550114	0.585275
646	H	0.541715	0.449886	0.585275
647	H	0.541715	0.949886	0.585275
648	H	0.300102	0.458285	0.33529
649	H	0.800102	0.458285	0.33529
650	H	0.199898	0.541715	0.33529
651	H	0.699898	0.541715	0.33529
652	H	0.291727	0.0501137	0.16471
653	H	0.291727	0.550114	0.16471
654	H	0.791727	0.0501137	0.16471
655	H	0.791727	0.550114	0.16471
656	H	0.208273	0.449886	0.16471

657	H	0.208273	0.949886	0.16471
658	H	0.708273	0.449886	0.16471
659	H	0.708273	0.949886	0.16471
660	H	0.199898	0.208273	0.914725
661	H	0.199898	0.708273	0.914725
662	H	0.699898	0.208273	0.914725
663	H	0.699898	0.708273	0.914725
664	H	0.300102	0.291727	0.914725
665	H	0.300102	0.791727	0.914725
666	H	0.800102	0.291727	0.914725
667	H	0.800102	0.791727	0.914725
668	H	0.208273	0.300102	0.0852747
669	H	0.208273	0.800102	0.0852747
670	H	0.708273	0.300102	0.0852747
671	H	0.708273	0.800102	0.0852747
672	H	0.291727	0.199898	0.0852747
673	H	0.291727	0.699898	0.0852747
674	H	0.791727	0.199898	0.0852747
675	H	0.791727	0.699898	0.0852747
676	H	0.0501137	0.208273	0.83529
677	H	0.0501137	0.708273	0.83529
678	H	0.550114	0.208273	0.83529
679	H	0.550114	0.708273	0.83529
680	H	0.449886	0.291727	0.83529
681	H	0.449886	0.791727	0.83529
682	H	0.949886	0.291727	0.83529
683	H	0.949886	0.791727	0.83529
684	H	0.541715	0.300102	0.66471
685	H	0.541715	0.800102	0.66471
686	H	0.458285	0.199898	0.66471
687	H	0.458285	0.699898	0.66471
688	H	0.404459	0.458726	0.369356
689	H	0.904459	0.458726	0.369356
690	H	0.0955408	0.541274	0.369356
691	H	0.595541	0.541274	0.369356
692	H	0.458726	0.0955408	0.630644
693	H	0.458726	0.595541	0.630644
694	H	0.541274	0.404459	0.630644
695	H	0.541274	0.904459	0.630644
696	H	0.345529	0.458726	0.380628
697	H	0.845529	0.458726	0.380628
698	H	0.154471	0.541274	0.380628
699	H	0.654471	0.541274	0.380628
700	H	0.291286	0.0955408	0.119372
701	H	0.291286	0.595541	0.119372
702	H	0.791286	0.0955408	0.119372
703	H	0.791286	0.595541	0.119372
704	H	0.208714	0.404459	0.119372
705	H	0.208714	0.904459	0.119372
706	H	0.708714	0.404459	0.119372
707	H	0.708714	0.904459	0.119372
708	H	0.154471	0.208714	0.869356
709	H	0.154471	0.708714	0.869356
710	H	0.654471	0.208714	0.869356
711	H	0.654471	0.708714	0.869356
712	H	0.345529	0.291286	0.869356
713	H	0.345529	0.791286	0.869356
714	H	0.845529	0.291286	0.869356
715	H	0.845529	0.791286	0.869356
716	H	0.208714	0.345529	0.130644

717	H	0.208714	0.845529	0.130644
718	H	0.708714	0.345529	0.130644
719	H	0.708714	0.845529	0.130644
720	H	0.291286	0.154471	0.130644
721	H	0.291286	0.654471	0.130644
722	H	0.791286	0.154471	0.130644
723	H	0.791286	0.654471	0.130644
724	H	0.0955408	0.208714	0.880628
725	H	0.0955408	0.708714	0.880628
726	H	0.595541	0.208714	0.880628
727	H	0.595541	0.708714	0.880628
728	H	0.404459	0.291286	0.880628
729	H	0.404459	0.791286	0.880628
730	H	0.904459	0.291286	0.880628
731	H	0.904459	0.791286	0.880628
732	H	0.541274	0.345529	0.619372
733	H	0.541274	0.845529	0.619372
734	H	0.458726	0.154471	0.619372
735	H	0.458726	0.654471	0.619372
736	H	0.379982	0.0494641	0.414631
737	H	0.379982	0.549464	0.414631
738	H	0.879982	0.0494641	0.414631
739	H	0.879982	0.549464	0.414631
740	H	0.120018	0.450536	0.414631
741	H	0.120018	0.950536	0.414631
742	H	0.620018	0.450536	0.414631
743	H	0.620018	0.950536	0.414631
744	H	0.0494641	0.120018	0.585369
745	H	0.0494641	0.620018	0.585369
746	H	0.549464	0.120018	0.585369
747	H	0.549464	0.620018	0.585369
748	H	0.450536	0.379982	0.585369
749	H	0.450536	0.879982	0.585369
750	H	0.950536	0.379982	0.585369
751	H	0.950536	0.879982	0.585369
752	H	0.370029	0.0494641	0.335385
753	H	0.370029	0.549464	0.335385
754	H	0.870029	0.0494641	0.335385
755	H	0.870029	0.549464	0.335385
756	H	0.129971	0.450536	0.335385
757	H	0.129971	0.950536	0.335385
758	H	0.629971	0.450536	0.335385
759	H	0.629971	0.950536	0.335385
760	H	0.200524	0.120018	0.164615
761	H	0.200524	0.620018	0.164615
762	H	0.700524	0.120018	0.164615
763	H	0.700524	0.620018	0.164615
764	H	0.299476	0.379982	0.164615
765	H	0.299476	0.879982	0.164615
766	H	0.799476	0.379982	0.164615
767	H	0.799476	0.879982	0.164615
768	H	0.129971	0.299476	0.914631
769	H	0.129971	0.799476	0.914631
770	H	0.629971	0.299476	0.914631
771	H	0.629971	0.799476	0.914631
772	H	0.370029	0.200524	0.914631
773	H	0.370029	0.700524	0.914631
774	H	0.870029	0.200524	0.914631
775	H	0.870029	0.700524	0.914631
776	H	0.299476	0.370029	0.0853689

777	H	0.299476	0.870029	0.0853689
778	H	0.799476	0.370029	0.0853689
779	H	0.799476	0.870029	0.0853689
780	H	0.200524	0.129971	0.0853689
781	H	0.200524	0.629971	0.0853689
782	H	0.700524	0.129971	0.0853689
783	H	0.700524	0.629971	0.0853689
784	H	0.120018	0.299476	0.835385
785	H	0.120018	0.799476	0.835385
786	H	0.620018	0.299476	0.835385
787	H	0.620018	0.799476	0.835385
788	H	0.379982	0.200524	0.835385
789	H	0.379982	0.700524	0.835385
790	H	0.879982	0.200524	0.835385
791	H	0.879982	0.700524	0.835385
792	H	0.450536	0.370029	0.664615
793	H	0.450536	0.870029	0.664615
794	H	0.950536	0.370029	0.664615
795	H	0.950536	0.870029	0.664615
796	H	0.0494641	0.129971	0.664615
797	H	0.0494641	0.629971	0.664615
798	H	0.549464	0.129971	0.664615
799	H	0.549464	0.629971	0.664615
800	H	0.424829	0.0496961	0.460314
801	H	0.424829	0.549696	0.460314
802	H	0.924829	0.0496961	0.460314
803	H	0.924829	0.549696	0.460314
804	H	0.0751705	0.450304	0.460314
805	H	0.0751705	0.950304	0.460314
806	H	0.575171	0.450304	0.460314
807	H	0.575171	0.950304	0.460314
808	H	0.0496961	0.0751705	0.539686
809	H	0.0496961	0.575171	0.539686
810	H	0.549696	0.0751705	0.539686
811	H	0.549696	0.575171	0.539686
812	H	0.450304	0.424829	0.539686
813	H	0.450304	0.924829	0.539686
814	H	0.950304	0.424829	0.539686
815	H	0.950304	0.924829	0.539686
816	H	0.325159	0.0496961	0.28967
817	H	0.325159	0.549696	0.28967
818	H	0.825159	0.0496961	0.28967
819	H	0.825159	0.549696	0.28967
820	H	0.174841	0.450304	0.28967
821	H	0.174841	0.950304	0.28967
822	H	0.674841	0.450304	0.28967
823	H	0.674841	0.950304	0.28967
824	H	0.200316	0.0751705	0.21033
825	H	0.200316	0.575171	0.21033
826	H	0.700316	0.0751705	0.21033
827	H	0.700316	0.575171	0.21033
828	H	0.299684	0.424829	0.21033
829	H	0.299684	0.924829	0.21033
830	H	0.799684	0.424829	0.21033
831	H	0.799684	0.924829	0.21033
832	H	0.174841	0.299684	0.960314
833	H	0.174841	0.799684	0.960314
834	H	0.674841	0.299684	0.960314
835	H	0.674841	0.799684	0.960314
836	H	0.325159	0.200316	0.960314

837	H	0.325159	0.700316	0.960314
838	H	0.825159	0.200316	0.960314
839	H	0.825159	0.700316	0.960314
840	H	0.299684	0.325159	0.039686
841	H	0.299684	0.825159	0.039686
842	H	0.799684	0.325159	0.039686
843	H	0.799684	0.825159	0.039686
844	H	0.200316	0.174841	0.039686
845	H	0.200316	0.674841	0.039686
846	H	0.700316	0.174841	0.039686
847	H	0.700316	0.674841	0.039686
848	H	0.0751705	0.299684	0.78967
849	H	0.0751705	0.799684	0.78967
850	H	0.575171	0.299684	0.78967
851	H	0.575171	0.799684	0.78967
852	H	0.424829	0.200316	0.78967
853	H	0.424829	0.700316	0.78967
854	H	0.924829	0.200316	0.78967
855	H	0.924829	0.700316	0.78967
856	H	0.450304	0.325159	0.71033
857	H	0.450304	0.825159	0.71033
858	H	0.950304	0.325159	0.71033
859	H	0.950304	0.825159	0.71033
860	H	0.0496961	0.174841	0.71033
861	H	0.0496961	0.674841	0.71033
862	H	0.549696	0.174841	0.71033
863	H	0.549696	0.674841	0.71033
864	C	1 0.5	0.443705	
865	C	0.5 1	0.443705	
866	C	0.5 0.5	0.443705	
867	C	1 1	0.556295	
868	C	1 0.5	0.556295	
869	C	0.5 1	0.556295	
870	C	0.5 0.5	0.556295	
871	C	0.249988	1 0.306279	
872	C	0.250012	0.5 0.306279	
873	C	0.749988	1 0.306279	
874	C	0.749988	0.5 0.306279	
875	C	0.249988	1 0.193721	
876	C	0.250012	0.5 0.193721	
877	C	0.749988	1 0.193721	
878	C	0.749988	0.5 0.193721	
879	C	0.250012	0.250012 0.943705	
880	C	0.250012	0.749988 0.943705	
881	C	0.749988	0.250012 0.943705	
882	C	0.749988	0.749988 0.943705	
883	C	0.249988	0.249988 0.0562951	
884	C	0.250012	0.749988 0.0562951	
885	C	0.749988	0.249988 0.0562951	
886	C	0.749988	0.749988 0.0562951	
887	C	1 0.250012	0.806279	
888	C	1 0.749988	0.806279	
889	C	0.5 0.250012	0.806279	
890	C	0.5 0.749988	0.806279	
891	C	1 0.250012	0.693721	
892	C	1 0.749988	0.693721	
893	C	0.5 0.250012	0.693721	
894	C	0.5 0.749988	0.693721	
895	C	0.434875	0.978354 0.415636	
896	C	0.408821	0.97847 0.389576	



897	H	0.449886	0.958285	0.414725
898	H	0.404459	0.958726	0.369356
899	C	0.934875	0.978354	0.415636
900	C	0.908821	0.97847	0.389576
901	H	0.949886	0.958285	0.414725
902	H	0.904459	0.958726	0.369356
903	C	0.0651246	0.0216463	0.415636
904	C	0.0911791	0.0215303	0.389576
905	H	0.0501137	0.041715	0.414725
906	H	0.0955408	0.0412742	0.369356
907	C	0.565125	0.0216463	0.415636
908	C	0.591179	0.0215303	0.389576
909	H	0.550114	0.041715	0.414725
910	H	0.595541	0.0412742	0.369356
911	C	0.978354	0.0651246	0.584364
912	C	0.97847	0.0911791	0.610424
913	H	0.958285	0.0501137	0.585275
914	H	0.958726	0.0955408	0.630644
915	C	0.978354	0.565125	0.584364
916	C	0.97847	0.591179	0.610424
917	H	0.958285	0.550114	0.585275
918	H	0.958726	0.595541	0.630644
919	C	0.0216463	0.434875	0.584364
920	C	0.0215303	0.408821	0.610424
921	H	0.041715	0.449886	0.585275
922	H	0.0412742	0.404459	0.630644
923	C	0.0216463	0.934875	0.584364
924	C	0.0215303	0.908821	0.610424
925	H	0.041715	0.949886	0.585275
926	H	0.0412742	0.904459	0.630644
927	C	0.315136	0.978354	0.334349
928	C	0.341191	0.97847	0.36044
929	H	0.300102	0.958285	0.33529
930	H	0.345529	0.958726	0.380628
931	C	0.815136	0.978354	0.334349
932	C	0.841191	0.97847	0.36044
933	H	0.800102	0.958285	0.33529
934	H	0.845529	0.958726	0.380628
935	C	0.184864	0.0216463	0.334349
936	C	0.158809	0.0215303	0.36044
937	H	0.199898	0.041715	0.33529
938	H	0.154471	0.0412742	0.380628
939	C	0.684864	0.0216463	0.334349
940	C	0.658809	0.0215303	0.36044
941	H	0.699898	0.041715	0.33529
942	H	0.654471	0.0412742	0.380628
943	C	0.0216463	0.315136	0.665651
944	C	0.0215303	0.341191	0.63956
945	H	0.041715	0.300102	0.66471
946	H	0.0412742	0.345529	0.619372
947	C	0.0216463	0.815136	0.665651
948	C	0.0215303	0.841191	0.63956
949	H	0.041715	0.800102	0.66471
950	H	0.0412742	0.845529	0.619372
951	C	0.978354	0.184864	0.665651
952	C	0.97847	0.158809	0.63956
953	H	0.958285	0.199898	0.66471
954	H	0.958726	0.154471	0.619372
955	C	0.978354	0.684864	0.665651
956	C	0.97847	0.658809	0.63956

957	H	0.958285	0.699898	0.66471
958	H	0.958726	0.654471	0.619372
959	H	0.00111364	0.0206719	0.42292
960	C	1 1	0.443705	
961	H	0.498886	0.979328	0.42292
962	H	0.998886	0.479328	0.42292
963	H	0.998886	0.979328	0.42292
964	H	0.0206719	0.998886	0.57708
965	H	0.520672	0.998886	0.57708
966	H	0.979328	0.00111364	0.57708
967	H	0.979328	0.501114	0.57708
968	H	0.251102	0.979328	0.327064
969	H	0.751102	0.979328	0.327064
970	H	0.22934	0.998886	0.172936
971	H	0.72934	0.998886	0.172936
972	H	0.998886	0.27066	0.827064
973	H	0.998886	0.77066	0.827064
974	H	0.979328	0.248898	0.672936
975	H	0.979328	0.748898	0.672936
976	H	0.202218	0.283908	0.0187127
977	H	0.202218	0.783908	0.0187127
978	H	0.702218	0.283908	0.0187127
979	H	0.702218	0.783908	0.0187127
980	H	0.297782	0.216092	0.0187127
981	H	0.297782	0.716092	0.0187127
982	H	0.797782	0.216092	0.0187127
983	H	0.797782	0.716092	0.0187127
984	H	0.283908	0.297782	0.981287
985	H	0.283908	0.797782	0.981287
986	H	0.783908	0.297782	0.981287
987	H	0.783908	0.797782	0.981287
988	H	0.216092	0.202218	0.981287
989	H	0.216092	0.702218	0.981287
990	H	0.716092	0.202218	0.981287
991	H	0.716092	0.702218	0.981287
992	C	0.470419	0.00243608	0.671177
993	C	0.470419	0.502436	0.671177
994	C	0.970419	0.00243608	0.671177
995	C	0.970419	0.502436	0.671177
996	C	0.029581	0.497564	0.671177
997	C	0.029581	0.997564	0.671177
998	C	0.529581	0.497564	0.671177
999	C	0.529581	0.997564	0.671177
1000	C	0.00243608	0.529581	0.728823
1001	C	0.502436	0.029581	0.728823
1002	C	0.502436	0.529581	0.728823
1003	C	0.497564	0.470419	0.728823
1004	C	0.497564	0.970419	0.728823
1005	C	0.997564	0.470419	0.728823
1006	C	0.279593	0.00243608	0.478838
1007	C	0.279593	0.502436	0.478838
1008	C	0.779593	0.00243608	0.478838
1009	C	0.779593	0.502436	0.478838
1010	C	0.220407	0.497564	0.478838
1011	C	0.220407	0.997564	0.478838
1012	C	0.720407	0.497564	0.478838
1013	C	0.720407	0.997564	0.478838
1014	C	0.247576	0.029581	0.421162
1015	C	0.247576	0.529581	0.421162
1016	C	0.747576	0.029581	0.421162

1017	C	0.747576	0.529581	0.421162
1018	C	0.252424	0.470419	0.421162
1019	C	0.252424	0.970419	0.421162
1020	C	0.752424	0.470419	0.421162
1021	C	0.752424	0.970419	0.421162
1022	C	0.220407	0.252424	0.171177
1023	C	0.220407	0.752424	0.171177
1024	C	0.720407	0.252424	0.171177
1025	C	0.720407	0.752424	0.171177
1026	C	0.279593	0.247576	0.171177
1027	C	0.279593	0.747576	0.171177
1028	C	0.779593	0.247576	0.171177
1029	C	0.779593	0.747576	0.171177
1030	C	0.252424	0.279593	0.228823
1031	C	0.252424	0.779593	0.228823
1032	C	0.752424	0.279593	0.228823
1033	C	0.752424	0.779593	0.228823
1034	C	0.247576	0.220407	0.228823
1035	C	0.247576	0.720407	0.228823
1036	C	0.747576	0.220407	0.228823
1037	C	0.747576	0.720407	0.228823
1038	C	0.029581	0.752424	0.978838
1039	C	0.529581	0.252424	0.978838
1040	C	0.529581	0.752424	0.978838
1041	C	0.470419	0.247576	0.978838
1042	C	0.470419	0.747576	0.978838
1043	C	0.970419	0.247576	0.978838
1044	C	0.497564	0.279593	0.921162
1045	C	0.497564	0.779593	0.921162
1046	C	0.997564	0.279593	0.921162
1047	C	0.00243608	0.720407	0.921162
1048	C	0.502436	0.220407	0.921162
1049	C	0.502436	0.720407	0.921162
1050	C	0.473644	0.0316459	0.699623
1051	C	0.473644	0.531646	0.699623
1052	C	0.973644	0.0316459	0.699623
1053	C	0.973644	0.531646	0.699623
1054	C	0.0263561	0.468354	0.699623
1055	C	0.0263561	0.968354	0.699623
1056	C	0.526356	0.468354	0.699623
1057	C	0.526356	0.968354	0.699623
1058	C	0.0316459	0.526356	0.700377
1059	C	0.531646	0.0263561	0.700377
1060	C	0.531646	0.526356	0.700377
1061	C	0.468354	0.473644	0.700377
1062	C	0.468354	0.973644	0.700377
1063	C	0.968354	0.473644	0.700377
1064	C	0.276368	0.0316459	0.450392
1065	C	0.276368	0.531646	0.450392
1066	C	0.776368	0.0316459	0.450392
1067	C	0.776368	0.531646	0.450392
1068	C	0.223632	0.468354	0.450392
1069	C	0.223632	0.968354	0.450392
1070	C	0.723632	0.468354	0.450392
1071	C	0.723632	0.968354	0.450392
1072	C	0.218343	0.0263561	0.449608
1073	C	0.218343	0.526356	0.449608
1074	C	0.718343	0.0263561	0.449608
1075	C	0.718343	0.526356	0.449608
1076	C	0.281657	0.473644	0.449608

1077	C	0.281657	0.973644	0.449608
1078	C	0.781657	0.473644	0.449608
1079	C	0.781657	0.973644	0.449608
1080	C	0.223632	0.281657	0.199623
1081	C	0.223632	0.781657	0.199623
1082	C	0.723632	0.281657	0.199623
1083	C	0.723632	0.781657	0.199623
1084	C	0.276368	0.218343	0.199623
1085	C	0.276368	0.718343	0.199623
1086	C	0.776368	0.218343	0.199623
1087	C	0.776368	0.718343	0.199623
1088	C	0.281657	0.276368	0.200377
1089	C	0.281657	0.776368	0.200377
1090	C	0.781657	0.276368	0.200377
1091	C	0.781657	0.776368	0.200377
1092	C	0.218343	0.223632	0.200377
1093	C	0.218343	0.723632	0.200377
1094	C	0.718343	0.223632	0.200377
1095	C	0.718343	0.723632	0.200377
1096	C	0.0263561	0.781657	0.950392
1097	C	0.526356	0.281657	0.950392
1098	C	0.526356	0.781657	0.950392
1099	C	0.473644	0.218343	0.950392
1100	C	0.473644	0.718343	0.950392
1101	C	0.973644	0.218343	0.950392
1102	C	0.468354	0.276368	0.949608
1103	C	0.468354	0.776368	0.949608
1104	C	0.968354	0.276368	0.949608
1105	C	0.0316459	0.723632	0.949608
1106	C	0.531646	0.223632	0.949608
1107	C	0.531646	0.723632	0.949608
1108	C	0.441557	0.00366572	0.642355
1109	C	0.441557	0.503666	0.642355
1110	C	0.941557	0.00366572	0.642355
1111	C	0.941557	0.503666	0.642355
1112	C	0.0584428	0.496334	0.642355
1113	C	0.0584428	0.996334	0.642355
1114	C	0.558443	0.496334	0.642355
1115	C	0.558443	0.996334	0.642355
1116	C	0.00366572	0.558443	0.757645
1117	C	0.503666	0.0584428	0.757645
1118	C	0.503666	0.558443	0.757645
1119	C	0.496334	0.441557	0.757645
1120	C	0.496334	0.941557	0.757645
1121	C	0.996334	0.441557	0.757645
1122	C	0.308454	0.00366572	0.50763
1123	C	0.308454	0.503666	0.50763
1124	C	0.808454	0.00366572	0.50763
1125	C	0.808454	0.503666	0.50763
1126	C	0.191546	0.496334	0.50763
1127	C	0.191546	0.996334	0.50763
1128	C	0.691546	0.496334	0.50763
1129	C	0.691546	0.996334	0.50763
1130	C	0.246346	0.0584428	0.39237
1131	C	0.246346	0.558443	0.39237
1132	C	0.746346	0.0584428	0.39237
1133	C	0.746346	0.558443	0.39237
1134	C	0.253654	0.441557	0.39237
1135	C	0.253654	0.941557	0.39237
1136	C	0.753654	0.441557	0.39237

1137	C	0.753654	0.941557	0.39237
1138	C	0.191546	0.253654	0.142355
1139	C	0.191546	0.753654	0.142355
1140	C	0.691546	0.253654	0.142355
1141	C	0.691546	0.753654	0.142355
1142	C	0.308454	0.246346	0.142355
1143	C	0.308454	0.746346	0.142355
1144	C	0.808454	0.246346	0.142355
1145	C	0.808454	0.746346	0.142355
1146	C	0.253654	0.308454	0.257645
1147	C	0.253654	0.808454	0.257645
1148	C	0.753654	0.308454	0.257645
1149	C	0.753654	0.808454	0.257645
1150	C	0.246346	0.191546	0.257645
1151	C	0.246346	0.691546	0.257645
1152	C	0.746346	0.191546	0.257645
1153	C	0.746346	0.691546	0.257645
1154	C	0.0584428	0.253654	0.00762951
1155	C	0.0584428	0.753654	0.00762951
1156	C	0.558443	0.253654	0.00762951
1157	C	0.558443	0.753654	0.00762951
1158	C	0.441557	0.246346	0.00762951
1159	C	0.441557	0.746346	0.00762951
1160	C	0.941557	0.246346	0.00762951
1161	C	0.941557	0.746346	0.00762951
1162	C	0.496334	0.308454	0.89237
1163	C	0.496334	0.808454	0.89237
1164	C	0.996334	0.308454	0.89237
1165	C	0.00366572	0.691546	0.89237
1166	C	0.503666	0.191546	0.89237
1167	C	0.503666	0.691546	0.89237
1168	C	0.434875	0.478354	0.615636
1169	C	0.934875	0.478354	0.615636
1170	C	0.0651246	0.521646	0.615636
1171	C	0.565125	0.521646	0.615636
1172	C	0.478354	0.0651246	0.784364
1173	C	0.478354	0.565125	0.784364
1174	C	0.521646	0.434875	0.784364
1175	C	0.521646	0.934875	0.784364
1176	C	0.315136	0.478354	0.534349
1177	C	0.815136	0.478354	0.534349
1178	C	0.184864	0.521646	0.534349
1179	C	0.684864	0.521646	0.534349
1180	C	0.271658	0.0651246	0.365651
1181	C	0.271658	0.565125	0.365651
1182	C	0.771658	0.0651246	0.365651
1183	C	0.771658	0.565125	0.365651
1184	C	0.228342	0.434875	0.365651
1185	C	0.228342	0.934875	0.365651
1186	C	0.728342	0.434875	0.365651
1187	C	0.728342	0.934875	0.365651
1188	C	0.184864	0.228342	0.115636
1189	C	0.184864	0.728342	0.115636
1190	C	0.684864	0.228342	0.115636
1191	C	0.684864	0.728342	0.115636
1192	C	0.315136	0.271658	0.115636
1193	C	0.315136	0.771658	0.115636
1194	C	0.815136	0.271658	0.115636
1195	C	0.815136	0.771658	0.115636
1196	C	0.228342	0.315136	0.284364

1197	C	0.228342	0.815136	0.284364
1198	C	0.728342	0.315136	0.284364
1199	C	0.728342	0.815136	0.284364
1200	C	0.271658	0.184864	0.284364
1201	C	0.271658	0.684864	0.284364
1202	C	0.771658	0.184864	0.284364
1203	C	0.771658	0.684864	0.284364
1204	C	0.0651246	0.228342	0.0343485
1205	C	0.0651246	0.728342	0.0343485
1206	C	0.565125	0.228342	0.0343485
1207	C	0.565125	0.728342	0.0343485
1208	C	0.434875	0.271658	0.0343485
1209	C	0.434875	0.771658	0.0343485
1210	C	0.934875	0.271658	0.0343485
1211	C	0.934875	0.771658	0.0343485
1212	C	0.521646	0.315136	0.865651
1213	C	0.521646	0.815136	0.865651
1214	C	0.478354	0.184864	0.865651
1215	C	0.478354	0.684864	0.865651
1216	C	0.408821	0.47847	0.589576
1217	C	0.908821	0.47847	0.589576
1218	C	0.0911791	0.52153	0.589576
1219	C	0.591179	0.52153	0.589576
1220	C	0.47847	0.0911791	0.810424
1221	C	0.47847	0.591179	0.810424
1222	C	0.52153	0.408821	0.810424
1223	C	0.52153	0.908821	0.810424
1224	C	0.341191	0.47847	0.56044
1225	C	0.841191	0.47847	0.56044
1226	C	0.158809	0.52153	0.56044
1227	C	0.658809	0.52153	0.56044
1228	C	0.271542	0.0911791	0.33956
1229	C	0.271542	0.591179	0.33956
1230	C	0.771542	0.0911791	0.33956
1231	C	0.771542	0.591179	0.33956
1232	C	0.228458	0.408821	0.33956
1233	C	0.228458	0.908821	0.33956
1234	C	0.728458	0.408821	0.33956
1235	C	0.728458	0.908821	0.33956
1236	C	0.158809	0.228458	0.0895761
1237	C	0.158809	0.728458	0.0895761
1238	C	0.658809	0.228458	0.0895761
1239	C	0.658809	0.728458	0.0895761
1240	C	0.341191	0.271542	0.0895761
1241	C	0.341191	0.771542	0.0895761
1242	C	0.841191	0.271542	0.0895761
1243	C	0.841191	0.771542	0.0895761
1244	C	0.228458	0.341191	0.310424
1245	C	0.228458	0.841191	0.310424
1246	C	0.728458	0.341191	0.310424
1247	C	0.728458	0.841191	0.310424
1248	C	0.271542	0.158809	0.310424
1249	C	0.271542	0.658809	0.310424
1250	C	0.771542	0.158809	0.310424
1251	C	0.771542	0.658809	0.310424
1252	C	0.0911791	0.228458	0.0604396
1253	C	0.0911791	0.728458	0.0604396
1254	C	0.591179	0.228458	0.0604396
1255	C	0.591179	0.728458	0.0604396
1256	C	0.408821	0.271542	0.0604396

1257	C	0.408821	0.771542	0.0604396
1258	C	0.908821	0.271542	0.0604396
1259	C	0.908821	0.771542	0.0604396
1260	C	0.52153	0.341191	0.83956
1261	C	0.52153	0.841191	0.83956
1262	C	0.47847	0.158809	0.83956
1263	C	0.47847	0.658809	0.83956
1264	C	0.388822	0.00403694	0.588823
1265	C	0.388822	0.504037	0.588823
1266	C	0.888822	0.00403694	0.588823
1267	C	0.888822	0.504037	0.588823
1268	C	0.111178	0.495963	0.588823
1269	C	0.111178	0.995963	0.588823
1270	C	0.611178	0.495963	0.588823
1271	C	0.611178	0.995963	0.588823
1272	C	0.00403694	0.611178	0.811177
1273	C	0.504037	0.111178	0.811177
1274	C	0.504037	0.611178	0.811177
1275	C	0.495963	0.388822	0.811177
1276	C	0.495963	0.888822	0.811177
1277	C	0.995963	0.388822	0.811177
1278	C	0.36119	0.00403694	0.561193
1279	C	0.36119	0.504037	0.561193
1280	C	0.86119	0.00403694	0.561193
1281	C	0.86119	0.504037	0.561193
1282	C	0.13881	0.495963	0.561193
1283	C	0.13881	0.995963	0.561193
1284	C	0.63881	0.495963	0.561193
1285	C	0.63881	0.995963	0.561193
1286	C	0.245951	0.111178	0.338807
1287	C	0.245951	0.611178	0.338807
1288	C	0.745951	0.111178	0.338807
1289	C	0.745951	0.611178	0.338807
1290	C	0.254049	0.388822	0.338807
1291	C	0.254049	0.888822	0.338807
1292	C	0.754049	0.388822	0.338807
1293	C	0.754049	0.888822	0.338807
1294	C	0.13881	0.254049	0.0888226
1295	C	0.13881	0.754049	0.0888226
1296	C	0.63881	0.254049	0.0888226
1297	C	0.63881	0.754049	0.0888226
1298	C	0.36119	0.245951	0.0888226
1299	C	0.36119	0.745951	0.0888226
1300	C	0.86119	0.245951	0.0888226
1301	C	0.86119	0.745951	0.0888226
1302	C	0.254049	0.36119	0.311177
1303	C	0.254049	0.86119	0.311177
1304	C	0.754049	0.36119	0.311177
1305	C	0.754049	0.86119	0.311177
1306	C	0.245951	0.13881	0.311177
1307	C	0.245951	0.63881	0.311177
1308	C	0.745951	0.13881	0.311177
1309	C	0.745951	0.63881	0.311177
1310	C	0.111178	0.254049	0.0611931
1311	C	0.111178	0.754049	0.0611931
1312	C	0.611178	0.254049	0.0611931
1313	C	0.611178	0.754049	0.0611931
1314	C	0.388822	0.245951	0.0611931
1315	C	0.388822	0.745951	0.0611931
1316	C	0.888822	0.245951	0.0611931

1317	C	0.888822	0.745951	0.0611931
1318	C	0.495963	0.36119	0.838807
1319	C	0.495963	0.86119	0.838807
1320	C	0.995963	0.36119	0.838807
1321	C	0.00403694	0.63881	0.838807
1322	C	0.504037	0.13881	0.838807
1323	C	0.504037	0.63881	0.838807
1324	C	0.395318	0.0295578	0.614568
1325	C	0.395318	0.529558	0.614568
1326	C	0.895318	0.0295578	0.614568
1327	C	0.895318	0.529558	0.614568
1328	C	0.104682	0.470442	0.614568
1329	C	0.104682	0.970442	0.614568
1330	C	0.604682	0.470442	0.614568
1331	C	0.604682	0.970442	0.614568
1332	C	0.0295578	0.604682	0.785432
1333	C	0.529558	0.104682	0.785432
1334	C	0.529558	0.604682	0.785432
1335	C	0.470442	0.395318	0.785432
1336	C	0.470442	0.895318	0.785432
1337	C	0.970442	0.395318	0.785432
1338	C	0.354694	0.0295578	0.535416
1339	C	0.354694	0.529558	0.535416
1340	C	0.854694	0.0295578	0.535416
1341	C	0.854694	0.529558	0.535416
1342	C	0.145306	0.470442	0.535416
1343	C	0.145306	0.970442	0.535416
1344	C	0.645306	0.470442	0.535416
1345	C	0.645306	0.970442	0.535416
1346	C	0.220431	0.104682	0.364584
1347	C	0.220431	0.604682	0.364584
1348	C	0.720431	0.104682	0.364584
1349	C	0.720431	0.604682	0.364584
1350	C	0.279569	0.395318	0.364584
1351	C	0.279569	0.895318	0.364584
1352	C	0.779569	0.395318	0.364584
1353	C	0.779569	0.895318	0.364584
1354	C	0.145306	0.279569	0.114568
1355	C	0.145306	0.779569	0.114568
1356	C	0.645306	0.279569	0.114568
1357	C	0.645306	0.779569	0.114568
1358	C	0.354694	0.220431	0.114568
1359	C	0.354694	0.720431	0.114568
1360	C	0.854694	0.220431	0.114568
1361	C	0.854694	0.720431	0.114568
1362	C	0.279569	0.354694	0.285432
1363	C	0.279569	0.854694	0.285432
1364	C	0.779569	0.354694	0.285432
1365	C	0.779569	0.854694	0.285432
1366	C	0.220431	0.145306	0.285432
1367	C	0.220431	0.645306	0.285432
1368	C	0.720431	0.145306	0.285432
1369	C	0.720431	0.645306	0.285432
1370	C	0.104682	0.279569	0.035416
1371	C	0.104682	0.779569	0.035416
1372	C	0.604682	0.279569	0.035416
1373	C	0.604682	0.779569	0.035416
1374	C	0.395318	0.220431	0.035416
1375	C	0.395318	0.720431	0.035416
1376	C	0.895318	0.220431	0.035416



1377	C	0.895318	0.720431	0.035416
1378	C	0.470442	0.354694	0.864584
1379	C	0.470442	0.854694	0.864584
1380	C	0.970442	0.354694	0.864584
1381	C	0.0295578	0.645306	0.864584
1382	C	0.529558	0.145306	0.864584
1383	C	0.529558	0.645306	0.864584
1384	C	0.421187	0.0294186	0.641068
1385	C	0.421187	0.529419	0.641068
1386	C	0.921187	0.0294186	0.641068
1387	C	0.921187	0.529419	0.641068
1388	C	0.078813	0.470581	0.641068
1389	C	0.078813	0.970581	0.641068
1390	C	0.578813	0.470581	0.641068
1391	C	0.578813	0.970581	0.641068
1392	C	0.0294186	0.578813	0.758932
1393	C	0.529419	0.078813	0.758932
1394	C	0.529419	0.578813	0.758932
1395	C	0.470581	0.421187	0.758932
1396	C	0.470581	0.921187	0.758932
1397	C	0.970581	0.421187	0.758932
1398	C	0.328801	0.0294186	0.508917
1399	C	0.328801	0.529419	0.508917
1400	C	0.828801	0.0294186	0.508917
1401	C	0.828801	0.529419	0.508917
1402	C	0.171199	0.470581	0.508917
1403	C	0.171199	0.970581	0.508917
1404	C	0.671199	0.470581	0.508917
1405	C	0.671199	0.970581	0.508917
1406	C	0.220593	0.078813	0.391083
1407	C	0.220593	0.578813	0.391083
1408	C	0.720593	0.078813	0.391083
1409	C	0.720593	0.578813	0.391083
1410	C	0.279407	0.421187	0.391083
1411	C	0.279407	0.921187	0.391083
1412	C	0.779407	0.421187	0.391083
1413	C	0.779407	0.921187	0.391083
1414	C	0.171199	0.279407	0.141068
1415	C	0.171199	0.779407	0.141068
1416	C	0.671199	0.279407	0.141068
1417	C	0.671199	0.779407	0.141068
1418	C	0.328801	0.220593	0.141068
1419	C	0.328801	0.720593	0.141068
1420	C	0.828801	0.220593	0.141068
1421	C	0.828801	0.720593	0.141068
1422	C	0.279407	0.328801	0.258932
1423	C	0.279407	0.828801	0.258932
1424	C	0.779407	0.328801	0.258932
1425	C	0.779407	0.828801	0.258932
1426	C	0.220593	0.171199	0.258932
1427	C	0.220593	0.671199	0.258932
1428	C	0.720593	0.171199	0.258932
1429	C	0.720593	0.671199	0.258932
1430	C	0.078813	0.279407	0.0089168
1431	C	0.078813	0.779407	0.0089168
1432	C	0.578813	0.279407	0.0089168
1433	C	0.578813	0.779407	0.0089168
1434	C	0.421187	0.220593	0.0089168
1435	C	0.421187	0.720593	0.0089168
1436	C	0.921187	0.220593	0.0089168

1437	C	0.921187	0.720593	0.0089168
1438	C	0.470581	0.328801	0.891083
1439	C	0.470581	0.828801	0.891083
1440	C	0.970581	0.328801	0.891083
1441	C	0.0294186	0.671199	0.891083
1442	C	0.529419	0.171199	0.891083
1443	C	0.529419	0.671199	0.891083
1444	H	0.00111364	0.520672	0.62292
1445	H	0.501114	0.0206719	0.62292
1446	H	0.501114	0.520672	0.62292
1447	H	0.498886	0.479328	0.62292
1448	H	0.0206719	0.498886	0.77708
1449	H	0.520672	0.498886	0.77708
1450	H	0.479328	0.00111364	0.77708
1451	H	0.479328	0.501114	0.77708
1452	H	0.248898	0.0206719	0.527064
1453	H	0.248898	0.520672	0.527064
1454	H	0.748898	0.0206719	0.527064
1455	H	0.748898	0.520672	0.527064
1456	H	0.251102	0.479328	0.527064
1457	H	0.751102	0.479328	0.527064
1458	H	0.22934	0.498886	0.372936
1459	H	0.72934	0.498886	0.372936
1460	H	0.27066	0.00111364	0.372936
1461	H	0.27066	0.501114	0.372936
1462	H	0.77066	0.00111364	0.372936
1463	H	0.77066	0.501114	0.372936
1464	H	0.251102	0.27066	0.12292
1465	H	0.251102	0.77066	0.12292
1466	H	0.751102	0.27066	0.12292
1467	H	0.751102	0.77066	0.12292
1468	H	0.248898	0.22934	0.12292
1469	H	0.248898	0.72934	0.12292
1470	H	0.748898	0.22934	0.12292
1471	H	0.748898	0.72934	0.12292
1472	H	0.27066	0.248898	0.27708
1473	H	0.27066	0.748898	0.27708
1474	H	0.77066	0.248898	0.27708
1475	H	0.77066	0.748898	0.27708
1476	H	0.22934	0.251102	0.27708
1477	H	0.22934	0.751102	0.27708
1478	H	0.72934	0.251102	0.27708
1479	H	0.72934	0.751102	0.27708
1480	H	0.479328	0.248898	0.872936
1481	H	0.479328	0.748898	0.872936
1482	H	0.0206719	0.751102	0.872936
1483	H	0.520672	0.251102	0.872936
1484	H	0.520672	0.751102	0.872936
1485	H	0.452206	0.0338963	0.718713
1486	H	0.452206	0.533896	0.718713
1487	H	0.952206	0.0338963	0.718713
1488	H	0.952206	0.533896	0.718713
1489	H	0.0477936	0.466104	0.718713
1490	H	0.0477936	0.966104	0.718713
1491	H	0.547794	0.466104	0.718713
1492	H	0.547794	0.966104	0.718713
1493	H	0.0338963	0.547794	0.681287
1494	H	0.533896	0.0477936	0.681287
1495	H	0.533896	0.547794	0.681287
1496	H	0.466104	0.452206	0.681287

1497	H	0.466104	0.952206	0.681287
1498	H	0.966104	0.452206	0.681287
1499	H	0.297782	0.0338963	0.431272
1500	H	0.297782	0.533896	0.431272
1501	H	0.797782	0.0338963	0.431272
1502	H	0.797782	0.533896	0.431272
1503	H	0.202218	0.466104	0.431272
1504	H	0.202218	0.966104	0.431272
1505	H	0.702218	0.466104	0.431272
1506	H	0.702218	0.966104	0.431272
1507	H	0.216092	0.0477936	0.468728
1508	H	0.216092	0.547794	0.468728
1509	H	0.716092	0.0477936	0.468728
1510	H	0.716092	0.547794	0.468728
1511	H	0.283908	0.452206	0.468728
1512	H	0.283908	0.952206	0.468728
1513	H	0.783908	0.452206	0.468728
1514	H	0.783908	0.952206	0.468728
1515	H	0.202218	0.283908	0.218713
1516	H	0.202218	0.783908	0.218713
1517	H	0.702218	0.283908	0.218713
1518	H	0.702218	0.783908	0.218713
1519	H	0.297782	0.216092	0.218713
1520	H	0.297782	0.716092	0.218713
1521	H	0.797782	0.216092	0.218713
1522	H	0.797782	0.716092	0.218713
1523	H	0.283908	0.297782	0.181287
1524	H	0.283908	0.797782	0.181287
1525	H	0.783908	0.297782	0.181287
1526	H	0.783908	0.797782	0.181287
1527	H	0.216092	0.202218	0.181287
1528	H	0.216092	0.702218	0.181287
1529	H	0.716092	0.202218	0.181287
1530	H	0.716092	0.702218	0.181287
1531	H	0.0477936	0.783908	0.931272
1532	H	0.547794	0.283908	0.931272
1533	H	0.547794	0.783908	0.931272
1534	H	0.452206	0.216092	0.931272
1535	H	0.452206	0.716092	0.931272
1536	H	0.952206	0.216092	0.931272
1537	H	0.466104	0.297782	0.968728
1538	H	0.466104	0.797782	0.968728
1539	H	0.966104	0.297782	0.968728
1540	H	0.0338963	0.702218	0.968728
1541	H	0.533896	0.202218	0.968728
1542	H	0.533896	0.702218	0.968728
1543	H	0.475825	0.0528514	0.679874
1544	H	0.475825	0.552851	0.679874
1545	H	0.975825	0.0528514	0.679874
1546	H	0.975825	0.552851	0.679874
1547	H	0.0241752	0.447149	0.679874
1548	H	0.0241752	0.947149	0.679874
1549	H	0.524175	0.447149	0.679874
1550	H	0.524175	0.947149	0.679874
1551	H	0.0528514	0.524175	0.720126
1552	H	0.552851	0.0241752	0.720126
1553	H	0.552851	0.524175	0.720126
1554	H	0.447149	0.475825	0.720126
1555	H	0.447149	0.975825	0.720126
1556	H	0.947149	0.475825	0.720126

1557	H	0.274164	0.0528514	0.47011
1558	H	0.274164	0.552851	0.47011
1559	H	0.774164	0.0528514	0.47011
1560	H	0.774164	0.552851	0.47011
1561	H	0.225836	0.447149	0.47011
1562	H	0.225836	0.947149	0.47011
1563	H	0.725836	0.447149	0.47011
1564	H	0.725836	0.947149	0.47011
1565	H	0.19716	0.0241752	0.42989
1566	H	0.19716	0.524175	0.42989
1567	H	0.69716	0.0241752	0.42989
1568	H	0.69716	0.524175	0.42989
1569	H	0.30284	0.475825	0.42989
1570	H	0.30284	0.975825	0.42989
1571	H	0.80284	0.475825	0.42989
1572	H	0.80284	0.975825	0.42989
1573	H	0.225836	0.30284	0.179874
1574	H	0.225836	0.80284	0.179874
1575	H	0.725836	0.30284	0.179874
1576	H	0.725836	0.80284	0.179874
1577	H	0.274164	0.19716	0.179874
1578	H	0.274164	0.69716	0.179874
1579	H	0.774164	0.19716	0.179874
1580	H	0.774164	0.69716	0.179874
1581	H	0.30284	0.274164	0.220126
1582	H	0.30284	0.774164	0.220126
1583	H	0.80284	0.274164	0.220126
1584	H	0.80284	0.774164	0.220126
1585	H	0.19716	0.225836	0.220126
1586	H	0.19716	0.725836	0.220126
1587	H	0.69716	0.225836	0.220126
1588	H	0.69716	0.725836	0.220126
1589	H	0.0241752	0.80284	0.97011
1590	H	0.524175	0.30284	0.97011
1591	H	0.524175	0.80284	0.97011
1592	H	0.475825	0.19716	0.97011
1593	H	0.475825	0.69716	0.97011
1594	H	0.975825	0.19716	0.97011
1595	H	0.447149	0.274164	0.92989
1596	H	0.447149	0.774164	0.92989
1597	H	0.947149	0.274164	0.92989
1598	H	0.0528514	0.725836	0.92989
1599	H	0.552851	0.225836	0.92989
1600	H	0.552851	0.725836	0.92989
1601	H	0.449886	0.458285	0.614725
1602	H	0.949886	0.458285	0.614725
1603	H	0.0501137	0.541715	0.614725
1604	H	0.550114	0.541715	0.614725
1605	H	0.458285	0.0501137	0.785275
1606	H	0.458285	0.550114	0.785275
1607	H	0.541715	0.449886	0.785275
1608	H	0.541715	0.949886	0.785275
1609	H	0.300102	0.458285	0.53529
1610	H	0.800102	0.458285	0.53529
1611	H	0.199898	0.541715	0.53529
1612	H	0.699898	0.541715	0.53529
1613	H	0.291727	0.0501137	0.36471
1614	H	0.291727	0.550114	0.36471
1615	H	0.791727	0.0501137	0.36471
1616	H	0.791727	0.550114	0.36471

1617	H	0.208273	0.449886	0.36471
1618	H	0.208273	0.949886	0.36471
1619	H	0.708273	0.449886	0.36471
1620	H	0.708273	0.949886	0.36471
1621	H	0.199898	0.208273	0.114725
1622	H	0.199898	0.708273	0.114725
1623	H	0.699898	0.208273	0.114725
1624	H	0.699898	0.708273	0.114725
1625	H	0.300102	0.291727	0.114725
1626	H	0.300102	0.791727	0.114725
1627	H	0.800102	0.291727	0.114725
1628	H	0.800102	0.791727	0.114725
1629	H	0.208273	0.300102	0.285275
1630	H	0.208273	0.800102	0.285275
1631	H	0.708273	0.300102	0.285275
1632	H	0.708273	0.800102	0.285275
1633	H	0.291727	0.199898	0.285275
1634	H	0.291727	0.699898	0.285275
1635	H	0.791727	0.199898	0.285275
1636	H	0.791727	0.699898	0.285275
1637	H	0.0501137	0.208273	0.0352904
1638	H	0.0501137	0.708273	0.0352904
1639	H	0.550114	0.208273	0.0352904
1640	H	0.550114	0.708273	0.0352904
1641	H	0.449886	0.291727	0.0352904
1642	H	0.449886	0.791727	0.0352904
1643	H	0.949886	0.291727	0.0352904
1644	H	0.949886	0.791727	0.0352904
1645	H	0.541715	0.300102	0.86471
1646	H	0.541715	0.800102	0.86471
1647	H	0.458285	0.199898	0.86471
1648	H	0.458285	0.699898	0.86471
1649	H	0.404459	0.458726	0.569356
1650	H	0.904459	0.458726	0.569356
1651	H	0.0955408	0.541274	0.569356
1652	H	0.595541	0.541274	0.569356
1653	H	0.458726	0.0955408	0.830644
1654	H	0.458726	0.595541	0.830644
1655	H	0.541274	0.404459	0.830644
1656	H	0.541274	0.904459	0.830644
1657	H	0.345529	0.458726	0.580628
1658	H	0.845529	0.458726	0.580628
1659	H	0.154471	0.541274	0.580628
1660	H	0.654471	0.541274	0.580628
1661	H	0.291286	0.0955408	0.319372
1662	H	0.291286	0.595541	0.319372
1663	H	0.791286	0.0955408	0.319372
1664	H	0.791286	0.595541	0.319372
1665	H	0.208714	0.404459	0.319372
1666	H	0.208714	0.904459	0.319372
1667	H	0.708714	0.404459	0.319372
1668	H	0.708714	0.904459	0.319372
1669	H	0.154471	0.208714	0.0693564
1670	H	0.154471	0.708714	0.0693564
1671	H	0.654471	0.208714	0.0693564
1672	H	0.654471	0.708714	0.0693564
1673	H	0.345529	0.291286	0.0693564
1674	H	0.345529	0.791286	0.0693564
1675	H	0.845529	0.291286	0.0693564
1676	H	0.845529	0.791286	0.0693564

1677	H	0.208714	0.345529	0.330644
1678	H	0.208714	0.845529	0.330644
1679	H	0.708714	0.345529	0.330644
1680	H	0.708714	0.845529	0.330644
1681	H	0.291286	0.154471	0.330644
1682	H	0.291286	0.654471	0.330644
1683	H	0.791286	0.154471	0.330644
1684	H	0.791286	0.654471	0.330644
1685	H	0.0955408	0.208714	0.0806279
1686	H	0.0955408	0.708714	0.0806279
1687	H	0.595541	0.208714	0.0806279
1688	H	0.595541	0.708714	0.0806279
1689	H	0.404459	0.291286	0.0806279
1690	H	0.404459	0.791286	0.0806279
1691	H	0.904459	0.291286	0.0806279
1692	H	0.904459	0.791286	0.0806279
1693	H	0.541274	0.345529	0.819372
1694	H	0.541274	0.845529	0.819372
1695	H	0.458726	0.154471	0.819372
1696	H	0.458726	0.654471	0.819372
1697	H	0.379982	0.0494641	0.614631
1698	H	0.379982	0.549464	0.614631
1699	H	0.879982	0.0494641	0.614631
1700	H	0.879982	0.549464	0.614631
1701	H	0.120018	0.450536	0.614631
1702	H	0.120018	0.950536	0.614631
1703	H	0.620018	0.450536	0.614631
1704	H	0.620018	0.950536	0.614631
1705	H	0.0494641	0.620018	0.785369
1706	H	0.549464	0.120018	0.785369
1707	H	0.549464	0.620018	0.785369
1708	H	0.450536	0.379982	0.785369
1709	H	0.450536	0.879982	0.785369
1710	H	0.950536	0.379982	0.785369
1711	H	0.370029	0.0494641	0.535385
1712	H	0.370029	0.549464	0.535385
1713	H	0.870029	0.0494641	0.535385
1714	H	0.870029	0.549464	0.535385
1715	H	0.129971	0.450536	0.535385
1716	H	0.129971	0.950536	0.535385
1717	H	0.629971	0.450536	0.535385
1718	H	0.629971	0.950536	0.535385
1719	H	0.200524	0.120018	0.364615
1720	H	0.200524	0.620018	0.364615
1721	H	0.700524	0.120018	0.364615
1722	H	0.700524	0.620018	0.364615
1723	H	0.299476	0.379982	0.364615
1724	H	0.299476	0.879982	0.364615
1725	H	0.799476	0.379982	0.364615
1726	H	0.799476	0.879982	0.364615
1727	H	0.129971	0.299476	0.114631
1728	H	0.129971	0.799476	0.114631
1729	H	0.629971	0.299476	0.114631
1730	H	0.629971	0.799476	0.114631
1731	H	0.370029	0.200524	0.114631
1732	H	0.370029	0.700524	0.114631
1733	H	0.870029	0.200524	0.114631
1734	H	0.870029	0.700524	0.114631
1735	H	0.299476	0.370029	0.285369
1736	H	0.299476	0.870029	0.285369

1737	H	0.799476	0.370029	0.285369
1738	H	0.799476	0.870029	0.285369
1739	H	0.200524	0.129971	0.285369
1740	H	0.200524	0.629971	0.285369
1741	H	0.700524	0.129971	0.285369
1742	H	0.700524	0.629971	0.285369
1743	H	0.120018	0.299476	0.0353846
1744	H	0.120018	0.799476	0.0353846
1745	H	0.620018	0.299476	0.0353846
1746	H	0.620018	0.799476	0.0353846
1747	H	0.379982	0.200524	0.0353846
1748	H	0.379982	0.700524	0.0353846
1749	H	0.879982	0.200524	0.0353846
1750	H	0.879982	0.700524	0.0353846
1751	H	0.450536	0.370029	0.864615
1752	H	0.450536	0.870029	0.864615
1753	H	0.950536	0.370029	0.864615
1754	H	0.0494641	0.629971	0.864615
1755	H	0.549464	0.129971	0.864615
1756	H	0.549464	0.629971	0.864615
1757	H	0.424829	0.0496961	0.660314
1758	H	0.424829	0.549696	0.660314
1759	H	0.924829	0.0496961	0.660314
1760	H	0.924829	0.549696	0.660314
1761	H	0.0751705	0.450304	0.660314
1762	H	0.0751705	0.950304	0.660314
1763	H	0.575171	0.450304	0.660314
1764	H	0.575171	0.950304	0.660314
1765	H	0.0496961	0.575171	0.739686
1766	H	0.549696	0.0751705	0.739686
1767	H	0.549696	0.575171	0.739686
1768	H	0.450304	0.424829	0.739686
1769	H	0.450304	0.924829	0.739686
1770	H	0.950304	0.424829	0.739686
1771	H	0.325159	0.0496961	0.48967
1772	H	0.325159	0.549696	0.48967
1773	H	0.825159	0.0496961	0.48967
1774	H	0.825159	0.549696	0.48967
1775	H	0.174841	0.450304	0.48967
1776	H	0.174841	0.950304	0.48967
1777	H	0.674841	0.450304	0.48967
1778	H	0.674841	0.950304	0.48967
1779	H	0.200316	0.0751705	0.41033
1780	H	0.200316	0.575171	0.41033
1781	H	0.700316	0.0751705	0.41033
1782	H	0.700316	0.575171	0.41033
1783	H	0.299684	0.424829	0.41033
1784	H	0.299684	0.924829	0.41033
1785	H	0.799684	0.424829	0.41033
1786	H	0.799684	0.924829	0.41033
1787	H	0.174841	0.299684	0.160314
1788	H	0.174841	0.799684	0.160314
1789	H	0.674841	0.299684	0.160314
1790	H	0.674841	0.799684	0.160314
1791	H	0.325159	0.200316	0.160314
1792	H	0.325159	0.700316	0.160314
1793	H	0.825159	0.200316	0.160314
1794	H	0.825159	0.700316	0.160314
1795	H	0.299684	0.325159	0.239686
1796	H	0.299684	0.825159	0.239686

1797	H	0.799684	0.325159	0.239686
1798	H	0.799684	0.825159	0.239686
1799	H	0.200316	0.174841	0.239686
1800	H	0.200316	0.674841	0.239686
1801	H	0.700316	0.174841	0.239686
1802	H	0.700316	0.674841	0.239686
1803	H	0.450304	0.325159	0.91033
1804	H	0.450304	0.825159	0.91033
1805	H	0.950304	0.325159	0.91033
1806	H	0.0496961	0.674841	0.91033
1807	H	0.549696	0.174841	0.91033
1808	H	0.549696	0.674841	0.91033
1809	C	1 0.5	0.643705	
1810	C	0.5 1	0.643705	
1811	C	0.5 0.5	0.643705	
1812	C	1 0.5	0.756295	
1813	C	0.5 1	0.756295	
1814	C	0.5 0.5	0.756295	
1815	C	0.250012	1 0.506279	
1816	C	0.250012	0.5 0.506279	
1817	C	0.749988	1 0.506279	
1818	C	0.749988	0.5 0.506279	
1819	C	0.249988	1 0.393721	
1820	C	0.250012	0.5 0.393721	
1821	C	0.749988	1 0.393721	
1822	C	0.749988	0.5 0.393721	
1823	C	0.249988	0.249988 0.143705	
1824	C	0.250012	0.749988 0.143705	
1825	C	0.749988	0.249988 0.143705	
1826	C	0.749988	0.749988 0.143705	
1827	C	0.249988	0.249988 0.256295	
1828	C	0.250012	0.749988 0.256295	
1829	C	0.749988	0.249988 0.256295	
1830	C	0.749988	0.749988 0.256295	
1831	C	1 0.749988	0.893721	
1832	C	0.5 0.250012	0.893721	
1833	C	0.5 0.749988	0.893721	
1834	C	0.00243608	0.029581 0.728823	
1835	C	0.029581	0.252424 0.978838	
1836	C	0.00243608	0.220407 0.921162	
1837	C	0.0316459	0.0263561 0.700377	
1838	C	0.0263561	0.281657 0.950392	
1839	C	0.0316459	0.223632 0.949608	
1840	C	0.00366572	0.0584428 0.757645	
1841	C	0.00366572	0.191546 0.89237	
1842	C	0.00403694	0.111178 0.811177	
1843	C	0.00403694	0.13881 0.838807	
1844	C	0.0295578	0.104682 0.785432	
1845	C	0.0295578	0.145306 0.864584	
1846	C	0.0294186	0.078813 0.758932	
1847	C	0.0294186	0.171199 0.891083	
1848	H	0.0206719	0.251102 0.872936	
1849	H	0.0338963	0.0477936 0.681287	
1850	H	0.0477936	0.283908 0.931272	
1851	H	0.0338963	0.202218 0.968728	
1852	H	0.0528514	0.0241752 0.720126	
1853	H	0.0241752	0.30284 0.97011	
1854	H	0.0528514	0.225836 0.92989	
1855	H	0.0494641	0.120018 0.785369	
1856	H	0.0494641	0.129971 0.864615	



1857	H	0.0496961	0.0751705	0.739686
1858	H	0.0496961	0.174841	0.91033
1859	C	1	1	0.756295
1860	C	1	0.250012	0.893721
1861	C	0.997564	0.970419	0.728823
1862	C	0.970419	0.747576	0.978838
1863	C	0.997564	0.779593	0.921162
1864	C	0.968354	0.973644	0.700377
1865	C	0.973644	0.718343	0.950392
1866	C	0.968354	0.776368	0.949608
1867	C	0.996334	0.941557	0.757645
1868	C	0.996334	0.808454	0.89237
1869	C	0.995963	0.888822	0.811177
1870	C	0.995963	0.86119	0.838807
1871	C	0.970442	0.895318	0.785432
1872	C	0.970442	0.854694	0.864584
1873	C	0.970581	0.921187	0.758932
1874	C	0.970581	0.828801	0.891083
1875	H	0.966104	0.952206	0.681287
1876	H	0.952206	0.716092	0.931272
1877	H	0.966104	0.797782	0.968728
1878	H	0.947149	0.975825	0.720126
1879	H	0.975825	0.69716	0.97011
1880	H	0.947149	0.774164	0.92989
1881	H	0.950536	0.879982	0.785369
1882	H	0.950536	0.870029	0.864615
1883	H	0.950304	0.924829	0.739686
1884	H	0.950304	0.825159	0.91033
1885	C	0.434875	0.978354	0.615636
1886	C	0.408821	0.97847	0.589576
1887	H	0.449886	0.958285	0.614725
1888	H	0.404459	0.958726	0.569356
1889	C	0.934875	0.978354	0.615636
1890	C	0.908821	0.97847	0.589576
1891	H	0.949886	0.958285	0.614725
1892	H	0.904459	0.958726	0.569356
1893	C	0.0651246	0.0216463	0.615636
1894	C	0.0911791	0.0215303	0.589576
1895	H	0.0501137	0.041715	0.614725
1896	H	0.0955408	0.0412742	0.569356
1897	C	0.565125	0.0216463	0.615636
1898	C	0.591179	0.0215303	0.589576
1899	H	0.550114	0.041715	0.614725
1900	H	0.595541	0.0412742	0.569356
1901	C	0.978354	0.0651246	0.784364
1902	C	0.97847	0.0911791	0.810424
1903	H	0.958285	0.0501137	0.785275
1904	H	0.958726	0.0955408	0.830644
1905	C	0.978354	0.565125	0.784364
1906	C	0.97847	0.591179	0.810424
1907	H	0.958285	0.550114	0.785275
1908	H	0.958726	0.595541	0.830644
1909	C	0.0216463	0.434875	0.784364
1910	C	0.0215303	0.408821	0.810424
1911	H	0.041715	0.449886	0.785275
1912	H	0.0412742	0.404459	0.830644
1913	C	0.0216463	0.934875	0.784364
1914	C	0.0215303	0.908821	0.810424
1915	H	0.041715	0.949886	0.785275
1916	H	0.0412742	0.904459	0.830644

1917	C	0.315136	0.978354	0.534349
1918	C	0.341191	0.97847	0.56044
1919	H	0.300102	0.958285	0.53529
1920	H	0.345529	0.958726	0.580628
1921	C	0.815136	0.978354	0.534349
1922	C	0.841191	0.97847	0.56044
1923	H	0.800102	0.958285	0.53529
1924	H	0.845529	0.958726	0.580628
1925	C	0.184864	0.0216463	0.534349
1926	C	0.158809	0.0215303	0.56044
1927	H	0.199898	0.041715	0.53529
1928	H	0.154471	0.0412742	0.580628
1929	C	0.684864	0.0216463	0.534349
1930	C	0.658809	0.0215303	0.56044
1931	H	0.699898	0.041715	0.53529
1932	H	0.654471	0.0412742	0.580628
1933	C	0.0216463	0.315136	0.865651
1934	C	0.0215303	0.341191	0.83956
1935	H	0.041715	0.300102	0.86471
1936	H	0.0412742	0.345529	0.819372
1937	C	0.0216463	0.815136	0.865651
1938	C	0.0215303	0.841191	0.83956
1939	H	0.041715	0.800102	0.86471
1940	H	0.0412742	0.845529	0.819372
1941	C	0.978354	0.184864	0.865651
1942	C	0.97847	0.158809	0.83956
1943	H	0.958285	0.199898	0.86471
1944	H	0.958726	0.154471	0.819372
1945	C	0.978354	0.684864	0.865651
1946	C	0.97847	0.658809	0.83956
1947	H	0.958285	0.699898	0.86471
1948	H	0.958726	0.654471	0.819372
1949	H	0.00111364	0.0206719	0.62292
1950	C	1	1	0.643705
1951	H	0.498886	0.979328	0.62292
1952	H	0.998886	0.479328	0.62292
1953	H	0.998886	0.979328	0.62292
1954	H	0.0206719	0.998886	0.77708
1955	H	0.520672	0.998886	0.77708
1956	H	0.979328	0.00111364	0.77708
1957	H	0.979328	0.501114	0.77708
1958	H	0.251102	0.979328	0.527064
1959	H	0.751102	0.979328	0.527064
1960	H	0.22934	0.998886	0.372936
1961	H	0.72934	0.998886	0.372936
1962	H	0.498886	0.27066	0.0270644
1963	H	0.501114	0.22934	0.0270644
1964	C	0.5	0.249988	0.00627943
1965	H	0.498886	0.77066	0.0270644
1966	H	0.501114	0.72934	0.0270644
1967	C	0.5	0.749988	0.00627943
1968	H	0.998886	0.27066	0.0270644
1969	H	0.998886	0.77066	0.0270644
1970	H	0.00111364	0.22934	0.0270644
1971	C	1	0.249988	0.00627943
1972	H	0.00111364	0.72934	0.0270644
1973	C	1	0.749988	0.00627943
1974	H	0.979328	0.248898	0.872936
1975	H	0.979328	0.748898	0.872936
1976	H	0.0751705	0.299684	0.98967

1977	H	0.0751705	0.799684	0.98967
1978	H	0.575171	0.299684	0.98967
1979	H	0.575171	0.799684	0.98967
1980	H	0.424829	0.200316	0.98967
1981	H	0.424829	0.700316	0.98967
1982	H	0.924829	0.200316	0.98967
1983	H	0.924829	0.700316	0.98967

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_SOD\_PPN-3.cif

_cell_length_a	32.4367(0)
_cell_length_b	32.497(0)
_cell_length_c	32.5703(0)
_cell_angle_alpha	109.823(0)
_cell_angle_beta	109.397(0)
_cell_angle_gamma	109.849(0)

_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'
_symmetry_Int_Tables_number	1
_stmmetry_cell_setting	Triclinic

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

```

loop_	_atom_site_label	_atom_site_type_symbol	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
1	C	0.476675	0.208303	0.733447	
2	C	0.543757	0.292654	0.815341	
3	C	0.476505	0.289697	0.744101	
4	C	0.546209	0.275931	0.734047	
5	C	0.509026	0.234792	0.791755	
6	H	0.532483	0.218037	0.802088	
7	H	0.483994	0.228019	0.807833	
8	C	0.443144	0.231685	0.720997	
9	H	0.416838	0.223863	0.735582	
10	H	0.419013	0.213461	0.679622	
11	C	0.512456	0.218088	0.711639	
12	H	0.489755	0.198262	0.669976	
13	H	0.536581	0.201494	0.71992	
14	C	0.510109	0.315627	0.802118	
15	H	0.534125	0.356991	0.818501	
16	H	0.485816	0.311268	0.819295	
17	C	0.578541	0.301647	0.792282	
18	H	0.603791	0.286433	0.80177	
19	H	0.603569	0.342904	0.809383	
20	C	0.511771	0.298586	0.721758	
21	H	0.535931	0.339665	0.737151	

22	H	0.488611	0.28119	0.680379
23	C	0.477956	0.735601	0.198783
24	C	0.545434	0.817879	0.28198
25	C	0.546243	0.735594	0.266045
26	C	0.477804	0.747711	0.280588
27	C	0.511437	0.793981	0.224316
28	H	0.487251	0.810688	0.216936
29	H	0.53552	0.803439	0.207804
30	C	0.512501	0.71269	0.208447
31	H	0.536672	0.719907	0.191566
32	H	0.488903	0.670886	0.189114
33	C	0.444743	0.724664	0.222962
34	H	0.419788	0.683153	0.204834
35	H	0.419669	0.74057	0.215753
36	C	0.57916	0.794023	0.291199
37	H	0.603823	0.811272	0.332312
38	H	0.604646	0.802912	0.275897
39	C	0.511632	0.805888	0.305364
40	H	0.487177	0.822752	0.30028
41	H	0.535802	0.823838	0.346661
42	C	0.511971	0.724266	0.28922
43	H	0.535953	0.739527	0.329998
44	H	0.487972	0.682873	0.272317
45	C	0.739027	0.203038	0.471137
46	C	0.818469	0.287716	0.541525
47	C	0.733725	0.267175	0.537885
48	C	0.748941	0.284656	0.472067
49	C	0.797076	0.230466	0.506424
50	H	0.815922	0.225824	0.483867
51	H	0.805851	0.212898	0.529397
52	C	0.713804	0.210119	0.503825
53	H	0.721334	0.192906	0.527441
54	H	0.672085	0.189218	0.478892
55	C	0.728174	0.227375	0.43843
56	H	0.686786	0.207916	0.412283
57	H	0.745685	0.22179	0.414628
58	C	0.79198	0.29392	0.573133
59	H	0.807968	0.334747	0.598829
60	H	0.800103	0.277908	0.59778
61	C	0.806909	0.310997	0.507771
62	H	0.82597	0.307307	0.485335
63	H	0.822967	0.352296	0.531604
64	C	0.722803	0.290638	0.504092
65	H	0.736201	0.331134	0.527944
66	H	0.68142	0.272168	0.47911
67	C	0.289315	0.822395	0.541682
68	C	0.205567	0.739401	0.473819
69	C	0.274095	0.740727	0.542373
70	C	0.28687	0.752487	0.472767
71	C	0.231203	0.79769	0.507803
72	H	0.223927	0.814926	0.484198
73	H	0.21414	0.805786	0.53164
74	C	0.299285	0.799031	0.575641
75	H	0.284395	0.808211	0.601355
76	H	0.34051	0.816287	0.600327
77	C	0.311449	0.810616	0.506554
78	H	0.353115	0.828077	0.529124
79	H	0.305327	0.828195	0.483117
80	C	0.216191	0.717085	0.50875
81	H	0.198005	0.675308	0.486161

82	H	0.198664	0.724006	0.532278
83	C	0.228813	0.728326	0.439678
84	H	0.220326	0.743241	0.41404
85	H	0.211001	0.686952	0.414885
86	C	0.296543	0.729909	0.507481
87	H	0.279478	0.688403	0.483812
88	H	0.337878	0.746276	0.531019
89	C	0.819971	0.544385	0.280436
90	C	0.736764	0.474056	0.198376
91	C	0.73721	0.543305	0.265643
92	C	0.752619	0.476605	0.281536
93	C	0.794747	0.508896	0.222726
94	H	0.811827	0.485017	0.215009
95	H	0.802364	0.532024	0.205013
96	C	0.795169	0.577377	0.289006
97	H	0.80282	0.601577	0.272345
98	H	0.81256	0.603743	0.329863
99	C	0.810446	0.511452	0.30502
100	H	0.828483	0.535939	0.346339
101	H	0.828895	0.488617	0.299938
102	C	0.71231	0.507188	0.20814
103	H	0.67099	0.482593	0.19123
104	H	0.716206	0.529427	0.189036
105	C	0.727998	0.441746	0.223662
106	H	0.744136	0.416932	0.216264
107	H	0.686911	0.416296	0.206982
108	C	0.728911	0.510571	0.290538
109	H	0.687768	0.486273	0.274901
110	H	0.74597	0.535738	0.331616
111	C	0.203067	0.481767	0.732094
112	C	0.286099	0.548689	0.814795
113	C	0.272948	0.549956	0.733561
114	C	0.284515	0.480262	0.745322
115	C	0.227787	0.515641	0.790025
116	H	0.218917	0.491829	0.806837
117	H	0.211521	0.540196	0.798242
118	C	0.214901	0.517009	0.710246
119	H	0.19848	0.541575	0.717558
120	H	0.196379	0.494147	0.668569
121	C	0.226259	0.447546	0.721281
122	H	0.208303	0.422825	0.680018
123	H	0.217352	0.421965	0.736326
124	C	0.297443	0.582677	0.791584
125	H	0.338934	0.60672	0.809044
126	H	0.282532	0.608524	0.800176
127	C	0.308313	0.513674	0.803195
128	H	0.301355	0.488923	0.819432
129	H	0.350066	0.537103	0.821911
130	C	0.295261	0.514915	0.722643
131	H	0.336532	0.538459	0.73853
132	H	0.278997	0.491136	0.681533
133	C	0.443274	0.313313	0.735227
134	C	0.450774	0.346939	0.716975
135	C	0.423129	0.371867	0.714337
136	C	0.387241	0.363814	0.730054
137	C	0.378312	0.328787	0.746785
138	C	0.405792	0.303889	0.749098
139	C	0.360084	0.392315	0.730583
140	C	0.307532	0.367489	0.711659
141	C	0.282536	0.395043	0.714954

142	C	0.309275	0.448012	0.737094
143	C	0.361706	0.472484	0.754523
144	C	0.38687	0.445262	0.751517
145	H	0.478741	0.354679	0.704954
146	H	0.429766	0.397907	0.700092
147	H	0.350264	0.321632	0.75874
148	H	0.398364	0.277075	0.762439
149	H	0.285896	0.326339	0.694301
150	H	0.241773	0.374359	0.700188
151	H	0.383326	0.513572	0.771133
152	H	0.427644	0.465269	0.766097
153	C	0.57529	0.316642	0.872637
154	C	0.565765	0.347964	0.905553
155	C	0.594752	0.370252	0.957739
156	C	0.633928	0.361269	0.9786
157	C	0.642817	0.328924	0.94617
158	C	0.61379	0.307016	0.893768
159	C	0.66442	0.387761	0.03442
160	C	0.662232	0.361873	0.060978
161	C	0.686496	0.388976	0.113918
162	C	0.713369	0.44217	0.141152
163	C	0.717846	0.467776	0.114126
164	C	0.693724	0.441194	0.061608
165	H	0.535341	0.355413	0.890872
166	H	0.587014	0.394782	0.982623
167	H	0.672626	0.321134	0.961804
168	H	0.621439	0.282153	0.869126
169	H	0.640839	0.320499	0.040495
170	H	0.68338	0.367621	0.133357
171	H	0.739999	0.5092	0.134545
172	H	0.696907	0.461586	0.041235
173	C	0.315282	0.879971	0.575429
174	C	0.288876	0.9039	0.587659
175	C	0.313214	0.956886	0.616435
176	C	0.364857	0.987215	0.633949
177	C	0.392106	0.963354	0.623769
178	C	0.367623	0.91059	0.5952
179	C	0.390976	0.043363	0.661402
180	C	0.438557	0.072513	0.705989
181	C	0.465084	0.125368	0.729454
182	C	0.444929	0.150727	0.709503
183	C	0.396737	0.12146	0.665821
184	C	0.369937	0.068461	0.642073
185	H	0.248724	0.881363	0.574648
186	H	0.291884	0.974662	0.625259
187	H	0.432426	0.986305	0.637748
188	H	0.389526	0.89292	0.587689
189	H	0.454882	0.053663	0.722137
190	H	0.502311	0.147185	0.763672
191	H	0.379723	0.139835	0.649456
192	H	0.332818	0.046501	0.607874
193	C	0.707276	0.273394	0.568805
194	C	0.66193	0.232176	0.555028
195	C	0.638419	0.237021	0.583796
196	C	0.659201	0.28379	0.627185
197	C	0.703722	0.325497	0.640548
198	C	0.727266	0.320229	0.611587
199	C	0.632829	0.286611	0.65654
200	C	0.657927	0.304466	0.708498
201	C	0.630892	0.30235	0.734246

202	C	0.578345	0.282566	0.708866
203	C	0.553714	0.266241	0.656955
204	C	0.580331	0.268286	0.631166
205	H	0.644193	0.19537	0.521264
206	H	0.603794	0.204158	0.572727
207	H	0.720019	0.362287	0.67355
208	H	0.76185	0.353238	0.622801
209	H	0.698676	0.319443	0.728986
210	H	0.651664	0.31606	0.77453
211	H	0.512927	0.251325	0.636312
212	H	0.560395	0.255401	0.591009
213	C	0.445431	0.711313	0.141607
214	C	0.393965	0.673514	0.114523
215	C	0.36561	0.649713	0.061944
216	C	0.3883	0.662872	0.034971
217	C	0.439495	0.701527	0.061885
218	C	0.467554	0.725265	0.114448
219	C	0.35958	0.634956	0.97907
220	C	0.359735	0.660466	0.951972
221	C	0.335141	0.633166	0.899136
222	C	0.310091	0.579955	0.872167
223	C	0.308213	0.554564	0.899553
224	C	0.332605	0.581495	0.952165
225	H	0.375278	0.661681	0.134122
226	H	0.325644	0.620615	0.041767
227	H	0.457579	0.712519	0.041538
228	H	0.507364	0.754814	0.134545
229	H	0.379213	0.701836	0.972116
230	H	0.336178	0.654363	0.879427
231	H	0.287928	0.513135	0.879528
232	H	0.331436	0.561051	0.972628
233	C	0.578461	0.710655	0.272746
234	C	0.631215	0.737244	0.293383
235	C	0.658816	0.71226	0.295708
236	C	0.634208	0.659849	0.277374
237	C	0.581486	0.633162	0.257759
238	C	0.554211	0.658292	0.255598
239	C	0.662496	0.632456	0.27743
240	C	0.655879	0.598535	0.295439
241	C	0.680595	0.570691	0.292921
242	C	0.712623	0.575939	0.272508
243	C	0.720203	0.611087	0.255819
244	C	0.695574	0.638908	0.258125
245	H	0.651744	0.777941	0.307786
246	H	0.699785	0.733806	0.31189
247	H	0.561699	0.592452	0.243554
248	H	0.513295	0.636724	0.239947
249	H	0.631173	0.593682	0.311455
250	H	0.673978	0.54439	0.306874
251	H	0.745395	0.616563	0.240355
252	H	0.701495	0.665335	0.244256
253	C	0.715328	0.145798	0.437769
254	C	0.737355	0.119086	0.452365
255	C	0.71218	0.066048	0.424003
256	C	0.664193	0.038573	0.380364
257	C	0.642939	0.065249	0.364284
258	C	0.668166	0.118075	0.392822
259	C	0.634661	0.982429	0.353083
260	C	0.583934	0.958137	0.341556
261	C	0.55567	0.90545	0.317967

262	C	0.577156	0.875413	0.3058
263	C	0.627142	0.899719	0.315793
264	C	0.655734	0.952664	0.339297
265	H	0.774273	0.139483	0.486583
266	H	0.729526	0.045913	0.43641
267	H	0.60643	0.0445	0.329568
268	H	0.65054	0.138022	0.380206
269	H	0.566834	0.980696	0.351646
270	H	0.516301	0.887362	0.309248
271	H	0.644435	0.877463	0.30539
272	H	0.694566	0.97082	0.346873
273	C	0.445421	0.739172	0.305268
274	C	0.392778	0.718962	0.278983
275	C	0.36498	0.716585	0.303824
276	C	0.389263	0.734549	0.355885
277	C	0.441678	0.752878	0.38207
278	C	0.469153	0.754936	0.356998
279	C	0.360779	0.735613	0.383131
280	C	0.366801	0.718501	0.417679
281	C	0.342143	0.722488	0.445543
282	C	0.310848	0.743562	0.439773
283	C	0.303526	0.758942	0.403739
284	C	0.328087	0.755149	0.375852
285	H	0.372488	0.705158	0.238659
286	H	0.324132	0.700823	0.282534
287	H	0.461129	0.766281	0.422382
288	H	0.509831	0.769684	0.378225
289	H	0.390974	0.702069	0.422995
290	H	0.348262	0.709116	0.472287
291	H	0.278626	0.774557	0.397651
292	H	0.322405	0.768093	0.34875
293	C	0.87583	0.3151	0.576881
294	C	0.899644	0.289935	0.592258
295	C	0.952619	0.314257	0.620466
296	C	0.982692	0.364516	0.633973
297	C	0.959078	0.391112	0.621665
298	C	0.906347	0.366705	0.593883
299	C	0.038724	0.390289	0.659022
300	C	0.061764	0.402092	0.6317
301	C	0.114447	0.430148	0.655199
302	C	0.145558	0.447794	0.706534
303	C	0.122281	0.433407	0.732593
304	C	0.069344	0.404946	0.709207
305	H	0.876909	0.250641	0.581775
306	H	0.970494	0.293827	0.631249
307	H	0.982228	0.430798	0.633582
308	H	0.888739	0.388017	0.584665
309	H	0.038195	0.389494	0.592147
310	H	0.131627	0.439008	0.633369
311	H	0.145376	0.444806	0.771868
312	H	0.051925	0.39482	0.730315
313	C	0.741149	0.310024	0.440548
314	C	0.721583	0.283941	0.388158
315	C	0.719722	0.309145	0.360932
316	C	0.737504	0.36145	0.3855
317	C	0.755256	0.387442	0.437638
318	C	0.756849	0.361998	0.46458
319	C	0.738608	0.388792	0.357293
320	C	0.721308	0.423345	0.363405
321	C	0.72471	0.450828	0.33847



322	C	0.745252	0.444616	0.306638
323	C	0.761143	0.408798	0.299514
324	C	0.757972	0.381334	0.324382
325	H	0.70785	0.243396	0.367569
326	H	0.704463	0.287929	0.320295
327	H	0.768543	0.427926	0.457322
328	H	0.77108	0.383103	0.505038
329	H	0.705049	0.428897	0.387784
330	H	0.711216	0.477585	0.344752
331	H	0.776646	0.402535	0.274466
332	H	0.771207	0.35431	0.318701
333	C	0.148088	0.713801	0.440491
334	C	0.118657	0.660376	0.414037
335	C	0.065895	0.635136	0.385796
336	C	0.040858	0.66278	0.382775
337	C	0.069964	0.715838	0.4072
338	C	0.123007	0.740962	0.435614
339	C	0.984713	0.635242	0.355092
340	C	0.958378	0.650218	0.3778
341	C	0.905475	0.621665	0.353068
342	C	0.877453	0.577585	0.305109
343	C	0.903993	0.563664	0.282089
344	C	0.95686	0.592119	0.306516
345	H	0.137295	0.638211	0.416077
346	H	0.043846	0.593805	0.366496
347	H	0.051246	0.737741	0.404178
348	H	0.144425	0.782253	0.454066
349	H	0.979401	0.683881	0.415273
350	H	0.885842	0.633665	0.371693
351	H	0.883527	0.529883	0.244717
352	H	0.976635	0.580644	0.287851
353	C	0.281871	0.716775	0.5753
354	C	0.302595	0.685113	0.569869
355	C	0.305472	0.660486	0.597641
356	C	0.287542	0.666916	0.631705
357	C	0.268418	0.700027	0.638698
358	C	0.265727	0.724546	0.610911
359	C	0.287247	0.638371	0.658696
360	C	0.304689	0.662767	0.7107
361	C	0.301556	0.634958	0.73534
362	C	0.281128	0.582247	0.708899
363	C	0.265219	0.558274	0.65705
364	C	0.26809	0.585749	0.632204
365	H	0.316509	0.678673	0.543479
366	H	0.321664	0.636027	0.592621
367	H	0.2549	0.706023	0.665462
368	H	0.250387	0.749748	0.616726
369	H	0.320734	0.703699	0.732158
370	H	0.315027	0.655262	0.77566
371	H	0.249964	0.51745	0.635628
372	H	0.254769	0.566186	0.591867

```
#*****  
#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# annalyze micro-porous materials  
#  
#*****
```

data\_LON\_PPN-3.cif

\_cell\_length\_a 21.6615(0)  
\_cell\_length\_b 21.7314(0)  
\_cell\_length\_c 35.759(0)  
\_cell\_angle\_alpha 90(0)  
\_cell\_angle\_beta 90(0)  
\_cell\_angle\_gamma 120.424(0)

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M 'P1'  
\_symmetry\_Int\_Tables\_number 1  
\_stmmetry\_cell\_setting Monoclinic

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'+x,+y,+z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_type\_symbol  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z

1	C	0.346225	0.674337	0.108747
2	C	0.38585	0.635535	0.050649
3	C	0.383687	0.75152	0.05006
4	C	0.266502	0.632383	0.051119
5	C	0.387404	0.638224	0.093963
6	H	0.363491	0.583514	0.105461
7	H	0.443356	0.667513	0.104008
8	C	0.383272	0.751431	0.093355
9	H	0.438659	0.781795	0.104307
10	H	0.355623	0.779358	0.103453
11	C	0.26806	0.632787	0.094429
12	H	0.238065	0.657428	0.105746
13	H	0.240645	0.577486	0.105146
14	C	0.423154	0.71328	0.035873
15	H	0.424455	0.714068	0.004955
16	H	0.479727	0.742671	0.045013
17	C	0.306975	0.594915	0.037118
18	H	0.279757	0.539161	0.047152
19	H	0.305616	0.591752	0.006233
20	C	0.304944	0.710244	0.036466
21	H	0.302577	0.710048	0.005568
22	H	0.276447	0.737564	0.046029
23	C	0.674765	0.339095	0.609116
24	C	0.63514	0.377951	0.551023
25	C	0.637312	0.261941	0.550414
26	C	0.754554	0.381146	0.551493
27	C	0.633596	0.37524	0.594336
28	H	0.657522	0.429944	0.605841
29	H	0.577643	0.345954	0.60438
30	C	0.637697	0.262002	0.593709
31	H	0.582307	0.231647	0.604649
32	H	0.66532	0.234045	0.603804
33	C	0.752954	0.38064	0.594804
34	H	0.782886	0.355915	0.606098
35	H	0.780389	0.435913	0.605561
36	C	0.597848	0.300202	0.536243
37	H	0.596532	0.299428	0.505325

38	H	0.541262	0.270791	0.545393
39	C	0.714041	0.418603	0.53752
40	H	0.741221	0.474325	0.5476
41	H	0.715445	0.421851	0.506637
42	C	0.716084	0.30328	0.536826
43	H	0.718451	0.303494	0.505929
44	H	0.744573	0.275945	0.546377
45	C	0.677055	0.339678	0.893999
46	C	0.639778	0.381593	0.951641
47	C	0.755122	0.376989	0.952468
48	C	0.634682	0.261803	0.952429
49	C	0.641714	0.38184	0.908291
50	H	0.58697	0.358093	0.896716
51	H	0.671282	0.437312	0.897847
52	C	0.75453	0.374662	0.909182
53	H	0.786991	0.429447	0.897838
54	H	0.780235	0.344827	0.89926
55	C	0.634603	0.26238	0.909114
56	H	0.658322	0.23141	0.898
57	H	0.578647	0.235291	0.89896
58	C	0.718005	0.418032	0.966031
59	H	0.719285	0.420434	0.996947
60	H	0.748146	0.473983	0.956322
61	C	0.598317	0.303491	0.966052
62	H	0.542267	0.276794	0.956347
63	H	0.595916	0.303447	0.996943
64	C	0.712766	0.299254	0.967
65	H	0.712611	0.298149	0.997928
66	H	0.739195	0.269547	0.958011
67	C	0.343954	0.673773	0.393638
68	C	0.381267	0.631818	0.451261
69	C	0.265869	0.636409	0.452115
70	C	0.386366	0.751662	0.45208
71	C	0.379321	0.631612	0.407911
72	H	0.434069	0.655377	0.396335
73	H	0.349755	0.576149	0.397455
74	C	0.266468	0.638751	0.408827
75	H	0.234025	0.583961	0.39749
76	H	0.240738	0.668564	0.398906
77	C	0.386398	0.751073	0.408766
78	H	0.362649	0.782037	0.397671
79	H	0.442342	0.778185	0.398591
80	C	0.303013	0.59536	0.465641
81	H	0.30173	0.592905	0.496557
82	H	0.272876	0.539419	0.455915
83	C	0.422722	0.709933	0.465679
84	H	0.478763	0.736629	0.455965
85	H	0.425141	0.709965	0.496568
86	C	0.308269	0.714164	0.466647
87	H	0.308418	0.715252	0.497575
88	H	0.281823	0.74386	0.45767
89	C	0.343972	0.673151	0.350883
90	C	0.287541	0.617361	0.330931
91	C	0.286715	0.616951	0.291908
92	C	0.343027	0.672433	0.271817
93	C	0.400326	0.727729	0.291494
94	C	0.400789	0.727655	0.33052
95	C	0.342431	0.672493	0.230485
96	C	0.34947	0.731537	0.210789
97	C	0.350152	0.731899	0.171755

98	C	0.34473	0.674056	0.151482
99	C	0.336157	0.614549	0.171444
100	C	0.335056	0.613588	0.210452
101	H	0.243355	0.57344	0.345963
102	H	0.242016	0.573624	0.276962
103	H	0.44476	0.770676	0.276203
104	H	0.446319	0.770904	0.345134
105	H	0.354108	0.77711	0.226024
106	H	0.354879	0.778173	0.157154
107	H	0.330413	0.568301	0.156345
108	H	0.32898	0.567203	0.225449
109	C	0.677034	0.340323	0.851251
110	C	0.73347	0.396128	0.831303
111	C	0.734288	0.396521	0.792282
112	C	0.67798	0.341008	0.772202
113	C	0.620714	0.285725	0.791873
114	C	0.62023	0.285794	0.830901
115	C	0.678582	0.340936	0.730868
116	C	0.671653	0.281937	0.711174
117	C	0.670963	0.281571	0.672139
118	C	0.676245	0.339344	0.651853
119	C	0.684666	0.398786	0.671825
120	C	0.685786	0.399765	0.710831
121	H	0.777655	0.440046	0.846342
122	H	0.778977	0.439849	0.777329
123	H	0.576272	0.242734	0.77659
124	H	0.574723	0.242537	0.845522
125	H	0.667082	0.236394	0.726412
126	H	0.666308	0.235315	0.657543
127	H	0.690271	0.444972	0.656731
128	H	0.691729	0.446103	0.725827
129	C	0.42274	0.596347	0.035712
130	C	0.426291	0.544071	0.057136
131	C	0.460138	0.508491	0.043439
132	C	0.49093	0.524023	0.007648
133	C	0.486057	0.574912	0.985664
134	C	0.452222	0.61032	0.999584
135	C	0.528341	0.487657	0.993417
136	C	0.50886	0.451245	0.959126
137	C	0.544803	0.417479	0.945849
138	C	0.601409	0.419632	0.966114
139	C	0.620014	0.455499	0.000586
140	C	0.58417	0.489202	0.014111
141	H	0.402271	0.530607	0.084969
142	H	0.462379	0.468236	0.060587
143	H	0.509255	0.587201	0.957713
144	H	0.449054	0.64965	0.981989
145	H	0.465159	0.448943	0.942907
146	H	0.528297	0.389018	0.919249
147	H	0.663113	0.45737	0.017266
148	H	0.59987	0.517204	0.040791
149	C	0.422531	0.827882	0.035089
150	C	0.475829	0.88395	0.056384
151	C	0.510589	0.953968	0.043176
152	C	0.493368	0.969397	0.007915
153	C	0.441616	0.913471	0.985981
154	C	0.406765	0.843585	0.999497
155	C	0.529536	0.043724	0.994086
156	C	0.566161	0.061422	0.959831
157	C	0.599481	0.131416	0.946701

158	C	0.59669	0.18525	0.967084
159	C	0.561024	0.167328	0.001606
160	C	0.527678	0.097373	0.015005
161	H	0.490752	0.873178	0.083706
162	H	0.551449	0.996776	0.060185
163	H	0.428286	0.924828	0.95844
164	H	0.366553	0.800883	0.982069
165	H	0.568953	0.020487	0.943605
166	H	0.628261	0.144228	0.920139
167	H	0.558972	0.20813	0.018407
168	H	0.499778	0.084268	0.041743
169	C	0.189755	0.595005	0.036373
170	C	0.133819	0.591669	0.057785
171	C	0.06386	0.557744	0.044124
172	C	0.048352	0.526872	0.008375
173	C	0.104261	0.531677	0.986362
174	C	0.174016	0.565413	0.000297
175	C	0.973983	0.489334	0.994276
176	C	0.956971	0.50881	0.960069
177	C	0.886669	0.472672	0.946932
178	C	0.8319	0.415864	0.967201
179	C	0.849217	0.3973	0.001594
180	C	0.919393	0.433439	0.015015
181	H	0.144619	0.615796	0.085545
182	H	0.021105	0.55549	0.06119
183	H	0.09305	0.508511	0.958427
184	H	0.216711	0.568486	0.982769
185	H	0.99879	0.55249	0.943881
186	H	0.874384	0.489065	0.920439
187	H	0.807676	0.354083	0.018235
188	H	0.931966	0.417866	0.041608
189	C	0.598208	0.417103	0.536053
190	C	0.594302	0.469219	0.557422
191	C	0.560513	0.504783	0.543621
192	C	0.530092	0.489465	0.507737
193	C	0.53524	0.438656	0.485822
194	C	0.568986	0.403224	0.499859
195	C	0.492709	0.525797	0.493359
196	C	0.511948	0.561729	0.458932
197	C	0.475959	0.595366	0.445499
198	C	0.419603	0.593727	0.46576
199	C	0.40118	0.558249	0.500349
200	C	0.437003	0.524623	0.514012
201	H	0.617917	0.482582	0.585314
202	H	0.558042	0.544927	0.560768
203	H	0.512308	0.426405	0.45781
204	H	0.572271	0.363934	0.482289
205	H	0.555472	0.563744	0.442705
206	H	0.492281	0.62335	0.418757
207	H	0.358175	0.556618	0.517013
208	H	0.421326	0.4969	0.540777
209	C	0.598492	0.185578	0.535403
210	C	0.545527	0.129247	0.556689
211	C	0.510766	0.059282	0.543361
212	C	0.52762	0.044073	0.507948
213	C	0.57911	0.10028	0.486042
214	C	0.613964	0.170093	0.49968
215	C	0.491526	0.969785	0.494005
216	C	0.455385	0.952261	0.459606
217	C	0.422119	0.882318	0.446376

218	C	0.424401	0.82824	0.466773
219	C	0.459636	0.845983	0.501423
220	C	0.492921	0.915878	0.514925
221	H	0.530746	0.139745	0.584146
222	H	0.470123	0.016313	0.560417
223	H	0.592238	0.08917	0.458386
224	H	0.653952	0.212928	0.482228
225	H	0.452894	0.9933	0.443317
226	H	0.393707	0.869757	0.419685
227	H	0.461379	0.805039	0.518251
228	H	0.520443	0.928725	0.541775
229	C	0.831317	0.418593	0.536721
230	C	0.887453	0.422344	0.558116
231	C	0.95736	0.456211	0.54435
232	C	0.972718	0.486656	0.508496
233	C	0.91659	0.481539	0.48654
234	C	0.846896	0.44786	0.500565
235	C	0.047026	0.524116	0.494233
236	C	0.063818	0.504875	0.459901
237	C	0.13406	0.541019	0.446617
238	C	0.189091	0.597566	0.466899
239	C	0.171974	0.615926	0.501416
240	C	0.10188	0.579843	0.514952
241	H	0.876877	0.398547	0.585966
242	H	0.000193	0.458717	0.561454
243	H	0.927589	0.504412	0.458536
244	H	0.804078	0.444572	0.483055
245	H	0.021872	0.461339	0.443681
246	H	0.146069	0.524789	0.419995
247	H	0.213657	0.658987	0.518082
248	H	0.089555	0.595343	0.54164

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_DIA\_PPN-4.cif

```

_cell_length_a      17.0578(0)
_cell_length_b      17.0578(0)
_cell_length_c      26.6865(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number          1
_symmetry_cell_setting                Tetragonal

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol

```

		_atom_site_fract_x		
		_atom_site_fract_y		
		_atom_site_fract_z		
0	C	0.00206	0.08657	0.04222
1	C	0.99794	0.91343	0.04222
2	C	0.08657	0.99794	0.95778
3	C	0.91343	0.00206	0.95778
4	C	0.49794	0.08657	0.70778
5	C	0.50206	0.91343	0.70778
6	C	0.41343	0.99794	0.79222
7	C	0.58657	0.00206	0.79222
8	C	0.50206	0.58657	0.54222
9	C	0.49794	0.41343	0.54222
10	C	0.58657	0.49794	0.45778
11	C	0.41343	0.50206	0.45778
12	C	0.99794	0.58657	0.20778
13	C	0.00206	0.41343	0.20778
14	C	0.91343	0.49794	0.29222
15	C	0.08657	0.50206	0.29222
16	C	0.93733	0.10172	0.07304
17	C	0.06267	0.89828	0.07304
18	C	0.10172	0.06267	0.92696
19	C	0.89828	0.93733	0.92696
20	C	0.56267	0.10172	0.67696
21	C	0.43733	0.89828	0.67696
22	C	0.39828	0.06267	0.82304
23	C	0.60172	0.93733	0.82304
24	C	0.43733	0.60172	0.57304
25	C	0.56267	0.39828	0.57304
26	C	0.60172	0.56267	0.42696
27	C	0.39828	0.43733	0.42696
28	C	0.06267	0.60172	0.17696
29	C	0.93733	0.39828	0.17696
30	C	0.89828	0.56267	0.32304
31	C	0.10172	0.43733	0.32304
32	C	0.93749	0.16623	0.10527
33	C	0.06251	0.83377	0.10527
34	C	0.16623	0.06251	0.89473
35	C	0.83377	0.93749	0.89473
36	C	0.56251	0.16623	0.64473
37	C	0.43749	0.83377	0.64473
38	C	0.33377	0.06251	0.85527
39	C	0.66623	0.93749	0.85527
40	C	0.43749	0.66623	0.60527
41	C	0.56251	0.33377	0.60527
42	C	0.66623	0.56251	0.39473
43	C	0.33377	0.43749	0.39473
44	C	0.06251	0.66623	0.14473
45	C	0.93749	0.33377	0.14473
46	C	0.83377	0.56251	0.35527
47	C	0.16623	0.43749	0.35527
48	C	0.00318	0.21575	0.10792
49	C	0.99682	0.78425	0.10792
50	C	0.21575	0.99682	0.89208
51	C	0.78425	0.00318	0.89208
52	C	0.49682	0.21575	0.64208
53	C	0.50318	0.78425	0.64208
54	C	0.28425	0.99682	0.85792
55	C	0.71575	0.00318	0.85792
56	C	0.50318	0.71575	0.60792

57	C	0.49682	0.28425	0.60792
58	C	0.71575	0.49682	0.39208
59	C	0.28425	0.50318	0.39208
60	C	0.99682	0.71575	0.14208
61	C	0.00318	0.28425	0.14208
62	C	0.78425	0.49682	0.35792
63	C	0.21575	0.50318	0.35792
64	C	0.06875	0.19928	0.07782
65	C	0.93125	0.80072	0.07782
66	C	0.19928	0.93125	0.92218
67	C	0.80072	0.06875	0.92218
68	C	0.43125	0.19928	0.67218
69	C	0.56875	0.80072	0.67218
70	C	0.30072	0.93125	0.82782
71	C	0.69928	0.06875	0.82782
72	C	0.56875	0.69928	0.57782
73	C	0.43125	0.30072	0.57782
74	C	0.69928	0.43125	0.42218
75	C	0.30072	0.56875	0.42218
76	C	0.93125	0.69928	0.17218
77	C	0.06875	0.30072	0.17218
78	C	0.80072	0.43125	0.32782
79	C	0.19928	0.56875	0.32782
80	C	0.06816	0.13517	0.04518
81	C	0.93184	0.86483	0.04518
82	C	0.13517	0.93184	0.95482
83	C	0.86483	0.06816	0.95482
84	C	0.43184	0.13517	0.70482
85	C	0.56816	0.86483	0.70482
86	C	0.36483	0.93184	0.79518
87	C	0.63517	0.06816	0.79518
88	C	0.56816	0.63517	0.54518
89	C	0.43184	0.36483	0.54518
90	C	0.63517	0.43184	0.45482
91	C	0.36483	0.56816	0.45482
92	C	0.93184	0.63517	0.20482
93	C	0.06816	0.36483	0.20482
94	C	0.86483	0.43184	0.29518
95	C	0.13517	0.56816	0.29518
96	H	0.88638	0.06386	0.07193
97	H	0.11362	0.93614	0.07193
98	H	0.06386	0.11362	0.92807
99	H	0.93614	0.88638	0.92807
100	H	0.61362	0.06386	0.67807
101	H	0.38638	0.93614	0.67807
102	H	0.43614	0.11362	0.82193
103	H	0.56386	0.88638	0.82193
104	H	0.38638	0.56386	0.57193
105	H	0.61362	0.43614	0.57193
106	H	0.56386	0.61362	0.42807
107	H	0.43614	0.38638	0.42807
108	H	0.11362	0.56386	0.17807
109	H	0.88638	0.43614	0.17807
110	H	0.93614	0.61362	0.32193
111	H	0.06386	0.38638	0.32193
112	H	0.8867	0.17685	0.12865
113	H	0.1133	0.82315	0.12865
114	H	0.17685	0.1133	0.87135
115	H	0.82315	0.8867	0.87135
116	H	0.6133	0.17685	0.62135



117	H	0.3867	0.82315	0.62135
118	H	0.32315	0.1133	0.87865
119	H	0.67685	0.8867	0.87865
120	H	0.3867	0.67685	0.62865
121	H	0.6133	0.32315	0.62865
122	H	0.67685	0.6133	0.37135
123	H	0.32315	0.3867	0.37135
124	H	0.1133	0.67685	0.12135
125	H	0.8867	0.32315	0.12135
126	H	0.82315	0.6133	0.37865
127	H	0.17685	0.3867	0.37865
128	H	0.1201	0.23656	0.07911
129	H	0.8799	0.76344	0.07911
130	H	0.23656	0.8799	0.92089
131	H	0.76344	0.1201	0.92089
132	H	0.3799	0.23656	0.67089
133	H	0.6201	0.76344	0.67089
134	H	0.26344	0.8799	0.82911
135	H	0.73656	0.1201	0.82911
136	H	0.6201	0.73656	0.57911
137	H	0.3799	0.26344	0.57911
138	H	0.73656	0.3799	0.42089
139	H	0.26344	0.6201	0.42089
140	H	0.8799	0.73656	0.17089
141	H	0.1201	0.26344	0.17089
142	H	0.76344	0.3799	0.32911
143	H	0.23656	0.6201	0.32911
144	H	0.11964	0.12352	0.02276
145	H	0.88036	0.87648	0.02276
146	H	0.12352	0.88036	0.97724
147	H	0.87648	0.11964	0.97724
148	H	0.38036	0.12352	0.72724
149	H	0.61964	0.87648	0.72724
150	H	0.37648	0.88036	0.77276
151	H	0.62352	0.11964	0.77276
152	H	0.61964	0.62352	0.52276
153	H	0.38036	0.37648	0.52276
154	H	0.62352	0.38036	0.47724
155	H	0.37648	0.61964	0.47724
156	H	0.88036	0.62352	0.22724
157	H	0.11964	0.37648	0.22724
158	H	0.87648	0.38036	0.27276
159	H	0.12352	0.61964	0.27276
160	Si	0	0	0
164	Si	0.5	0	0.75
168	Si	0.5	0.5	0.5
172	Si	0	0.5	0.25

```
#####  
#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials  
#  
#####
```

data\_DIA\_2-fold-PPN-4.cif

\_cell\_length\_a           34.116(0)  
\_cell\_length\_b           34.116(0)

\_cell\_length\_c 26.686(0)  
\_cell\_angle\_alpha 90(0)  
\_cell\_angle\_beta 90(0)  
\_cell\_angle\_gamma 90(0)

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M 'P1'  
\_symmetry\_Int\_Tables\_number 1  
\_stmmetry\_cell\_setting Tetragonal

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'+x,+y,+z'

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_type\_symbol  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z

0	C	0.00102591	0.0432935	0.0422319
1	C	0.00102591	0.543293	0.0422319
2	C	0.501026	0.0432935	0.0422319
3	C	0.501026	0.543293	0.0422319
4	C	0.498974	0.456707	0.0422319
5	C	0.498974	0.956707	0.0422319
6	C	0.0432935	0.498974	0.957768
7	C	0.543293	0.498974	0.957768
8	C	0.456707	0.00102591	0.957768
9	C	0.456707	0.501026	0.957768
10	C	0.956707	0.00102591	0.957768
11	C	0.956707	0.501026	0.957768
12	C	0.248974	0.0432935	0.707787
13	C	0.248974	0.543293	0.707787
14	C	0.748974	0.0432935	0.707787
15	C	0.748974	0.543293	0.707787
16	C	0.251026	0.456707	0.707787
17	C	0.251026	0.956707	0.707787
18	C	0.751026	0.456707	0.707787
19	C	0.751026	0.956707	0.707787
20	C	0.206707	0.498974	0.792213
21	C	0.706707	0.498974	0.792213
22	C	0.293293	0.00102591	0.792213
23	C	0.293293	0.501026	0.792213
24	C	0.793293	0.00102591	0.792213
25	C	0.793293	0.501026	0.792213
26	C	0.251026	0.293293	0.542232
27	C	0.251026	0.793293	0.542232
28	C	0.751026	0.293293	0.542232
29	C	0.751026	0.793293	0.542232
30	C	0.248974	0.206707	0.542232
31	C	0.248974	0.706707	0.542232
32	C	0.748974	0.206707	0.542232
33	C	0.748974	0.706707	0.542232
34	C	0.293293	0.248974	0.457768
35	C	0.293293	0.748974	0.457768
36	C	0.793293	0.248974	0.457768
37	C	0.793293	0.748974	0.457768
38	C	0.206707	0.251026	0.457768
39	C	0.206707	0.751026	0.457768
40	C	0.706707	0.251026	0.457768

41	C	0.706707	0.751026	0.457768
42	C	0.498974	0.293293	0.207787
43	C	0.498974	0.793293	0.207787
44	C	0.00102591	0.206707	0.207787
45	C	0.00102591	0.706707	0.207787
46	C	0.501026	0.206707	0.207787
47	C	0.501026	0.706707	0.207787
48	C	0.456707	0.248974	0.292213
49	C	0.456707	0.748974	0.292213
50	C	0.956707	0.248974	0.292213
51	C	0.956707	0.748974	0.292213
52	C	0.0432935	0.251026	0.292213
53	C	0.0432935	0.751026	0.292213
54	C	0.543293	0.251026	0.292213
55	C	0.543293	0.751026	0.292213
56	C	0.468666	0.0508559	0.0730345
57	C	0.468666	0.550856	0.0730345
58	C	0.531334	0.449144	0.0730345
59	C	0.531334	0.949144	0.0730345
60	C	0.0508559	0.531334	0.926965
61	C	0.550856	0.531334	0.926965
62	C	0.449144	0.468666	0.926965
63	C	0.949144	0.468666	0.926965
64	C	0.281334	0.0508559	0.676947
65	C	0.281334	0.550856	0.676947
66	C	0.781334	0.0508559	0.676947
67	C	0.781334	0.550856	0.676947
68	C	0.218666	0.449144	0.676947
69	C	0.218666	0.949144	0.676947
70	C	0.718666	0.449144	0.676947
71	C	0.718666	0.949144	0.676947
72	C	0.199144	0.531334	0.823053
73	C	0.699144	0.531334	0.823053
74	C	0.300856	0.468666	0.823053
75	C	0.800856	0.468666	0.823053
76	C	0.218666	0.300856	0.573035
77	C	0.218666	0.800856	0.573035
78	C	0.718666	0.300856	0.573035
79	C	0.718666	0.800856	0.573035
80	C	0.281334	0.199144	0.573035
81	C	0.281334	0.699144	0.573035
82	C	0.781334	0.199144	0.573035
83	C	0.781334	0.699144	0.573035
84	C	0.300856	0.281334	0.426965
85	C	0.300856	0.781334	0.426965
86	C	0.800856	0.281334	0.426965
87	C	0.800856	0.781334	0.426965
88	C	0.199144	0.218666	0.426965
89	C	0.199144	0.718666	0.426965
90	C	0.699144	0.218666	0.426965
91	C	0.699144	0.718666	0.426965
92	C	0.531334	0.300856	0.176947
93	C	0.531334	0.800856	0.176947
94	C	0.468666	0.199144	0.176947
95	C	0.468666	0.699144	0.176947
96	C	0.449144	0.281334	0.323053
97	C	0.449144	0.781334	0.323053
98	C	0.949144	0.281334	0.323053
99	C	0.949144	0.781334	0.323053
100	C	0.0508559	0.218666	0.323053

101	C	0.0508559	0.718666	0.323053
102	C	0.550856	0.218666	0.323053
103	C	0.550856	0.718666	0.323053
104	C	0.468754	0.0831282	0.105261
105	C	0.468754	0.583128	0.105261
106	C	0.531246	0.416872	0.105261
107	C	0.531246	0.916872	0.105261
108	C	0.0831282	0.531246	0.894739
109	C	0.583128	0.531246	0.894739
110	C	0.416872	0.468754	0.894739
111	C	0.916872	0.468754	0.894739
112	C	0.281246	0.0831282	0.64472
113	C	0.281246	0.583128	0.64472
114	C	0.781246	0.0831282	0.64472
115	C	0.781246	0.583128	0.64472
116	C	0.218754	0.416872	0.64472
117	C	0.218754	0.916872	0.64472
118	C	0.718754	0.416872	0.64472
119	C	0.718754	0.916872	0.64472
120	C	0.166872	0.531246	0.85528
121	C	0.666872	0.531246	0.85528
122	C	0.333128	0.468754	0.85528
123	C	0.833128	0.468754	0.85528
124	C	0.218754	0.333128	0.605261
125	C	0.218754	0.833128	0.605261
126	C	0.718754	0.333128	0.605261
127	C	0.718754	0.833128	0.605261
128	C	0.281246	0.166872	0.605261
129	C	0.281246	0.666872	0.605261
130	C	0.781246	0.166872	0.605261
131	C	0.781246	0.666872	0.605261
132	C	0.333128	0.281246	0.394739
133	C	0.333128	0.781246	0.394739
134	C	0.833128	0.281246	0.394739
135	C	0.833128	0.781246	0.394739
136	C	0.166872	0.218754	0.394739
137	C	0.166872	0.718754	0.394739
138	C	0.666872	0.218754	0.394739
139	C	0.666872	0.718754	0.394739
140	C	0.531246	0.333128	0.14472
141	C	0.531246	0.833128	0.14472
142	C	0.468754	0.166872	0.14472
143	C	0.468754	0.666872	0.14472
144	C	0.416872	0.281246	0.35528
145	C	0.416872	0.781246	0.35528
146	C	0.916872	0.281246	0.35528
147	C	0.916872	0.781246	0.35528
148	C	0.0831282	0.218754	0.35528
149	C	0.0831282	0.718754	0.35528
150	C	0.583128	0.218754	0.35528
151	C	0.583128	0.718754	0.35528
152	C	0.00158284	0.107867	0.107922
153	C	0.00158284	0.607867	0.107922
154	C	0.501583	0.107867	0.107922
155	C	0.501583	0.607867	0.107922
156	C	0.498417	0.392133	0.107922
157	C	0.498417	0.892133	0.107922
158	C	0.107867	0.498417	0.892078
159	C	0.607867	0.498417	0.892078
160	C	0.392133	0.00158284	0.892078

161	C	0.392133	0.501583	0.892078
162	C	0.892133	0.00158284	0.892078
163	C	0.892133	0.501583	0.892078
164	C	0.248417	0.107867	0.642097
165	C	0.248417	0.607867	0.642097
166	C	0.748417	0.107867	0.642097
167	C	0.748417	0.607867	0.642097
168	C	0.251583	0.392133	0.642097
169	C	0.251583	0.892133	0.642097
170	C	0.751583	0.392133	0.642097
171	C	0.751583	0.892133	0.642097
172	C	0.142133	0.498417	0.857903
173	C	0.642133	0.498417	0.857903
174	C	0.357867	0.00158284	0.857903
175	C	0.357867	0.501583	0.857903
176	C	0.857867	0.00158284	0.857903
177	C	0.857867	0.501583	0.857903
178	C	0.251583	0.357867	0.607922
179	C	0.251583	0.857867	0.607922
180	C	0.751583	0.357867	0.607922
181	C	0.751583	0.857867	0.607922
182	C	0.248417	0.142133	0.607922
183	C	0.248417	0.642133	0.607922
184	C	0.748417	0.142133	0.607922
185	C	0.748417	0.642133	0.607922
186	C	0.357867	0.248417	0.392078
187	C	0.357867	0.748417	0.392078
188	C	0.857867	0.248417	0.392078
189	C	0.857867	0.748417	0.392078
190	C	0.142133	0.251583	0.392078
191	C	0.142133	0.751583	0.392078
192	C	0.642133	0.251583	0.392078
193	C	0.642133	0.751583	0.392078
194	C	0.498417	0.357867	0.142097
195	C	0.498417	0.857867	0.142097
196	C	0.00158284	0.142133	0.142097
197	C	0.00158284	0.642133	0.142097
198	C	0.501583	0.142133	0.142097
199	C	0.501583	0.642133	0.142097
200	C	0.392133	0.248417	0.357903
201	C	0.392133	0.748417	0.357903
202	C	0.892133	0.248417	0.357903
203	C	0.892133	0.748417	0.357903
204	C	0.107867	0.251583	0.357903
205	C	0.107867	0.751583	0.357903
206	C	0.607867	0.251583	0.357903
207	C	0.607867	0.751583	0.357903
208	C	0.0343827	0.0996307	0.0778311
209	C	0.0343827	0.599631	0.0778311
210	C	0.534383	0.0996307	0.0778311
211	C	0.534383	0.599631	0.0778311
212	C	0.465617	0.400369	0.0778311
213	C	0.465617	0.900369	0.0778311
214	C	0.0996307	0.465617	0.922169
215	C	0.599631	0.465617	0.922169
216	C	0.400369	0.0343827	0.922169
217	C	0.400369	0.534383	0.922169
218	C	0.900369	0.0343827	0.922169
219	C	0.900369	0.534383	0.922169
220	C	0.215617	0.0996307	0.672188

221	C	0.215617	0.599631	0.672188
222	C	0.715617	0.0996307	0.672188
223	C	0.715617	0.599631	0.672188
224	C	0.284383	0.400369	0.672188
225	C	0.284383	0.900369	0.672188
226	C	0.784383	0.400369	0.672188
227	C	0.784383	0.900369	0.672188
228	C	0.150369	0.465617	0.827812
229	C	0.650369	0.465617	0.827812
230	C	0.349631	0.0343827	0.827812
231	C	0.349631	0.534383	0.827812
232	C	0.849631	0.0343827	0.827812
233	C	0.849631	0.534383	0.827812
234	C	0.284383	0.349631	0.577831
235	C	0.284383	0.849631	0.577831
236	C	0.784383	0.349631	0.577831
237	C	0.784383	0.849631	0.577831
238	C	0.215617	0.150369	0.577831
239	C	0.215617	0.650369	0.577831
240	C	0.715617	0.150369	0.577831
241	C	0.715617	0.650369	0.577831
242	C	0.349631	0.215617	0.422169
243	C	0.349631	0.715617	0.422169
244	C	0.849631	0.215617	0.422169
245	C	0.849631	0.715617	0.422169
246	C	0.150369	0.284383	0.422169
247	C	0.150369	0.784383	0.422169
248	C	0.650369	0.284383	0.422169
249	C	0.650369	0.784383	0.422169
250	C	0.465617	0.349631	0.172188
251	C	0.465617	0.849631	0.172188
252	C	0.0343827	0.150369	0.172188
253	C	0.0343827	0.650369	0.172188
254	C	0.534383	0.150369	0.172188
255	C	0.534383	0.650369	0.172188
256	C	0.400369	0.215617	0.327812
257	C	0.400369	0.715617	0.327812
258	C	0.900369	0.215617	0.327812
259	C	0.900369	0.715617	0.327812
260	C	0.0996307	0.284383	0.327812
261	C	0.0996307	0.784383	0.327812
262	C	0.599631	0.284383	0.327812
263	C	0.599631	0.784383	0.327812
264	C	0.0340896	0.0675929	0.0451922
265	C	0.0340896	0.567593	0.0451922
266	C	0.53409	0.0675929	0.0451922
267	C	0.53409	0.567593	0.0451922
268	C	0.46591	0.432407	0.0451922
269	C	0.46591	0.932407	0.0451922
270	C	0.0675929	0.46591	0.954808
271	C	0.567593	0.46591	0.954808
272	C	0.432407	0.0340896	0.954808
273	C	0.432407	0.53409	0.954808
274	C	0.932407	0.0340896	0.954808
275	C	0.932407	0.53409	0.954808
276	C	0.21591	0.0675929	0.704827
277	C	0.21591	0.567593	0.704827
278	C	0.71591	0.0675929	0.704827
279	C	0.71591	0.567593	0.704827
280	C	0.28409	0.432407	0.704827

281	C	0.28409	0.932407	0.704827
282	C	0.78409	0.432407	0.704827
283	C	0.78409	0.932407	0.704827
284	C	0.182407	0.46591	0.795173
285	C	0.682407	0.46591	0.795173
286	C	0.317593	0.0340896	0.795173
287	C	0.317593	0.53409	0.795173
288	C	0.817593	0.0340896	0.795173
289	C	0.817593	0.53409	0.795173
290	C	0.28409	0.317593	0.545192
291	C	0.28409	0.817593	0.545192
292	C	0.78409	0.317593	0.545192
293	C	0.78409	0.817593	0.545192
294	C	0.21591	0.182407	0.545192
295	C	0.21591	0.682407	0.545192
296	C	0.71591	0.182407	0.545192
297	C	0.71591	0.682407	0.545192
298	C	0.317593	0.21591	0.454808
299	C	0.317593	0.71591	0.454808
300	C	0.817593	0.21591	0.454808
301	C	0.817593	0.71591	0.454808
302	C	0.182407	0.28409	0.454808
303	C	0.182407	0.78409	0.454808
304	C	0.682407	0.28409	0.454808
305	C	0.682407	0.78409	0.454808
306	C	0.46591	0.317593	0.204827
307	C	0.46591	0.817593	0.204827
308	C	0.0340896	0.182407	0.204827
309	C	0.0340896	0.682407	0.204827
310	C	0.53409	0.182407	0.204827
311	C	0.53409	0.682407	0.204827
312	C	0.432407	0.21591	0.295173
313	C	0.432407	0.71591	0.295173
314	C	0.932407	0.21591	0.295173
315	C	0.932407	0.71591	0.295173
316	C	0.0675929	0.28409	0.295173
317	C	0.0675929	0.78409	0.295173
318	C	0.567593	0.28409	0.295173
319	C	0.567593	0.78409	0.295173
320	H	0.443194	0.0319205	0.0719478
321	H	0.443194	0.531921	0.0719478
322	H	0.556806	0.468079	0.0719478
323	H	0.556806	0.968079	0.0719478
324	H	0.0319205	0.556806	0.928052
325	H	0.531921	0.556806	0.928052
326	H	0.468079	0.443194	0.928052
327	H	0.968079	0.443194	0.928052
328	H	0.306806	0.0319205	0.678071
329	H	0.306806	0.531921	0.678071
330	H	0.806806	0.0319205	0.678071
331	H	0.806806	0.531921	0.678071
332	H	0.193194	0.468079	0.678071
333	H	0.193194	0.968079	0.678071
334	H	0.693194	0.468079	0.678071
335	H	0.693194	0.968079	0.678071
336	H	0.218079	0.556806	0.821929
337	H	0.718079	0.556806	0.821929
338	H	0.281921	0.443194	0.821929
339	H	0.781921	0.443194	0.821929
340	H	0.193194	0.281921	0.571948

341	H	0.193194	0.781921	0.571948
342	H	0.693194	0.281921	0.571948
343	H	0.693194	0.781921	0.571948
344	H	0.306806	0.218079	0.571948
345	H	0.306806	0.718079	0.571948
346	H	0.806806	0.218079	0.571948
347	H	0.806806	0.718079	0.571948
348	H	0.281921	0.306806	0.428052
349	H	0.281921	0.806806	0.428052
350	H	0.781921	0.306806	0.428052
351	H	0.781921	0.806806	0.428052
352	H	0.218079	0.193194	0.428052
353	H	0.218079	0.693194	0.428052
354	H	0.718079	0.193194	0.428052
355	H	0.718079	0.693194	0.428052
356	H	0.556806	0.281921	0.178071
357	H	0.556806	0.781921	0.178071
358	H	0.443194	0.218079	0.178071
359	H	0.443194	0.718079	0.178071
360	H	0.468079	0.306806	0.321929
361	H	0.468079	0.806806	0.321929
362	H	0.968079	0.306806	0.321929
363	H	0.968079	0.806806	0.321929
364	H	0.0319205	0.193194	0.321929
365	H	0.0319205	0.693194	0.321929
366	H	0.531921	0.193194	0.321929
367	H	0.531921	0.693194	0.321929
368	H	0.44334	0.0884336	0.128644
369	H	0.44334	0.588434	0.128644
370	H	0.55666	0.411566	0.128644
371	H	0.55666	0.911566	0.128644
372	H	0.0884336	0.55666	0.871356
373	H	0.588434	0.55666	0.871356
374	H	0.411566	0.44334	0.871356
375	H	0.911566	0.44334	0.871356
376	H	0.30666	0.0884336	0.621337
377	H	0.30666	0.588434	0.621337
378	H	0.80666	0.0884336	0.621337
379	H	0.80666	0.588434	0.621337
380	H	0.19334	0.411566	0.621337
381	H	0.19334	0.911566	0.621337
382	H	0.69334	0.411566	0.621337
383	H	0.69334	0.911566	0.621337
384	H	0.161566	0.55666	0.878663
385	H	0.661566	0.55666	0.878663
386	H	0.338434	0.44334	0.878663
387	H	0.838434	0.44334	0.878663
388	H	0.19334	0.338434	0.628644
389	H	0.19334	0.838434	0.628644
390	H	0.69334	0.338434	0.628644
391	H	0.69334	0.838434	0.628644
392	H	0.30666	0.161566	0.628644
393	H	0.30666	0.661566	0.628644
394	H	0.80666	0.161566	0.628644
395	H	0.80666	0.661566	0.628644
396	H	0.338434	0.30666	0.371356
397	H	0.338434	0.80666	0.371356
398	H	0.838434	0.30666	0.371356
399	H	0.838434	0.80666	0.371356
400	H	0.161566	0.19334	0.371356



401	H	0.161566	0.69334	0.371356
402	H	0.661566	0.19334	0.371356
403	H	0.661566	0.69334	0.371356
404	H	0.55666	0.338434	0.121337
405	H	0.55666	0.838434	0.121337
406	H	0.44334	0.161566	0.121337
407	H	0.44334	0.661566	0.121337
408	H	0.411566	0.30666	0.378663
409	H	0.411566	0.80666	0.378663
410	H	0.911566	0.30666	0.378663
411	H	0.911566	0.80666	0.378663
412	H	0.0884336	0.19334	0.378663
413	H	0.0884336	0.69334	0.378663
414	H	0.588434	0.19334	0.378663
415	H	0.588434	0.69334	0.378663
416	H	0.0600598	0.118273	0.0791051
417	H	0.0600598	0.618273	0.0791051
418	H	0.56006	0.118273	0.0791051
419	H	0.56006	0.618273	0.0791051
420	H	0.43994	0.381727	0.0791051
421	H	0.43994	0.881727	0.0791051
422	H	0.118273	0.43994	0.920895
423	H	0.618273	0.43994	0.920895
424	H	0.381727	0.0600598	0.920895
425	H	0.381727	0.56006	0.920895
426	H	0.881727	0.0600598	0.920895
427	H	0.881727	0.56006	0.920895
428	H	0.18994	0.118273	0.670876
429	H	0.18994	0.618273	0.670876
430	H	0.68994	0.118273	0.670876
431	H	0.68994	0.618273	0.670876
432	H	0.31006	0.381727	0.670876
433	H	0.31006	0.881727	0.670876
434	H	0.81006	0.381727	0.670876
435	H	0.81006	0.881727	0.670876
436	H	0.131727	0.43994	0.829124
437	H	0.631727	0.43994	0.829124
438	H	0.368273	0.0600598	0.829124
439	H	0.368273	0.56006	0.829124
440	H	0.868273	0.0600598	0.829124
441	H	0.868273	0.56006	0.829124
442	H	0.31006	0.368273	0.579105
443	H	0.31006	0.868273	0.579105
444	H	0.81006	0.368273	0.579105
445	H	0.81006	0.868273	0.579105
446	H	0.18994	0.131727	0.579105
447	H	0.18994	0.631727	0.579105
448	H	0.68994	0.131727	0.579105
449	H	0.68994	0.631727	0.579105
450	H	0.368273	0.18994	0.420895
451	H	0.368273	0.68994	0.420895
452	H	0.868273	0.18994	0.420895
453	H	0.868273	0.68994	0.420895
454	H	0.131727	0.31006	0.420895
455	H	0.131727	0.81006	0.420895
456	H	0.631727	0.31006	0.420895
457	H	0.631727	0.81006	0.420895
458	H	0.43994	0.368273	0.170876
459	H	0.43994	0.868273	0.170876
460	H	0.0600598	0.131727	0.170876

461	H	0.0600598	0.631727	0.170876
462	H	0.56006	0.131727	0.170876
463	H	0.56006	0.631727	0.170876
464	H	0.381727	0.18994	0.329124
465	H	0.381727	0.68994	0.329124
466	H	0.881727	0.18994	0.329124
467	H	0.881727	0.68994	0.329124
468	H	0.118273	0.31006	0.329124
469	H	0.118273	0.81006	0.329124
470	H	0.618273	0.31006	0.329124
471	H	0.618273	0.81006	0.329124
472	H	0.0598253	0.0617599	0.022746
473	H	0.0598253	0.56176	0.022746
474	H	0.559825	0.0617599	0.022746
475	H	0.559825	0.56176	0.022746
476	H	0.440175	0.43824	0.022746
477	H	0.440175	0.93824	0.022746
478	H	0.0617599	0.440175	0.977254
479	H	0.56176	0.440175	0.977254
480	H	0.43824	0.0598253	0.977254
481	H	0.43824	0.559825	0.977254
482	H	0.93824	0.0598253	0.977254
483	H	0.93824	0.559825	0.977254
484	H	0.190175	0.0617599	0.727235
485	H	0.190175	0.56176	0.727235
486	H	0.690175	0.0617599	0.727235
487	H	0.690175	0.56176	0.727235
488	H	0.309825	0.43824	0.727235
489	H	0.309825	0.93824	0.727235
490	H	0.809825	0.43824	0.727235
491	H	0.809825	0.93824	0.727235
492	H	0.18824	0.440175	0.772765
493	H	0.68824	0.440175	0.772765
494	H	0.31176	0.0598253	0.772765
495	H	0.31176	0.559825	0.772765
496	H	0.81176	0.0598253	0.772765
497	H	0.81176	0.559825	0.772765
498	H	0.309825	0.31176	0.522746
499	H	0.309825	0.81176	0.522746
500	H	0.809825	0.31176	0.522746
501	H	0.809825	0.81176	0.522746
502	H	0.190175	0.18824	0.522746
503	H	0.190175	0.68824	0.522746
504	H	0.690175	0.18824	0.522746
505	H	0.690175	0.68824	0.522746
506	H	0.31176	0.190175	0.477254
507	H	0.31176	0.690175	0.477254
508	H	0.81176	0.190175	0.477254
509	H	0.81176	0.690175	0.477254
510	H	0.18824	0.309825	0.477254
511	H	0.18824	0.809825	0.477254
512	H	0.68824	0.309825	0.477254
513	H	0.68824	0.809825	0.477254
514	H	0.440175	0.31176	0.227235
515	H	0.440175	0.81176	0.227235
516	H	0.0598253	0.18824	0.227235
517	H	0.0598253	0.68824	0.227235
518	H	0.559825	0.18824	0.227235
519	H	0.559825	0.68824	0.227235
520	H	0.43824	0.190175	0.272765

521	H	0.43824	0.690175	0.272765
522	H	0.93824	0.190175	0.272765
523	H	0.93824	0.690175	0.272765
524	H	0.0617599	0.309825	0.272765
525	H	0.0617599	0.809825	0.272765
526	H	0.56176	0.309825	0.272765
527	H	0.56176	0.809825	0.272765
528	Si	0	0	0
529	Si	1	0.5	0
530	Si	0.5	0	0
531	Si	0.5	0.5	0
532	Si	0.25	1	0.749981
533	Si	0.25	0.5	0.749981
534	Si	0.75	1	0.749981
535	Si	0.75	0.5	0.749981
536	Si	0.25	0.25	0.5
537	Si	0.25	0.75	0.5
538	Si	0.75	0.25	0.5
539	Si	0.75	0.75	0.5
540	Si	1	0.25	0.249981
541	Si	1	0.75	0.249981
542	Si	0.5	0.25	0.249981
543	Si	0.5	0.75	0.249981
544	C	0.998974	0.456707	0.0422319
545	C	0.998974	0.293293	0.207787
546	C	0.998417	0.392133	0.107922
547	C	0.998417	0.357867	0.142097
548	C	0.965617	0.400369	0.0778311
549	C	0.965617	0.349631	0.172188
550	C	0.96591	0.432407	0.0451922
551	C	0.96591	0.317593	0.204827
552	H	0.93994	0.381727	0.0791051
553	H	0.93994	0.368273	0.170876
554	H	0.940175	0.43824	0.022746
555	H	0.940175	0.31176	0.227235
556	C	0.998974	0.956707	0.0422319
557	C	0.998974	0.793293	0.207787
558	C	0.998417	0.892133	0.107922
559	C	0.998417	0.857867	0.142097
560	C	0.965617	0.900369	0.0778311
561	C	0.965617	0.849631	0.172188
562	C	0.96591	0.932407	0.0451922
563	C	0.96591	0.817593	0.204827
564	H	0.93994	0.881727	0.0791051
565	H	0.93994	0.868273	0.170876
566	H	0.940175	0.93824	0.022746
567	H	0.940175	0.81176	0.227235
568	C	0.0432935	0.998974	0.957768
569	C	0.206707	0.998974	0.792213
570	C	0.107867	0.998417	0.892078
571	C	0.142133	0.998417	0.857903
572	C	0.0996307	0.965617	0.922169
573	C	0.150369	0.965617	0.827812
574	C	0.0675929	0.96591	0.954808
575	C	0.182407	0.96591	0.795173
576	H	0.118273	0.93994	0.920895
577	H	0.131727	0.93994	0.829124
578	H	0.0617599	0.940175	0.977254
579	H	0.18824	0.940175	0.772765
580	C	0.543293	0.998974	0.957768

581	C	0.706707	0.998974	0.792213
582	C	0.607867	0.998417	0.892078
583	C	0.642133	0.998417	0.857903
584	C	0.599631	0.965617	0.922169
585	C	0.650369	0.965617	0.827812
586	C	0.567593	0.96591	0.954808
587	C	0.682407	0.96591	0.795173
588	H	0.618273	0.93994	0.920895
589	H	0.631727	0.93994	0.829124
590	H	0.56176	0.940175	0.977254
591	H	0.68824	0.940175	0.772765
592	C	0.968666	0.0508559	0.0730345
593	C	0.968754	0.0831282	0.105261
594	H	0.943194	0.0319205	0.0719478
595	H	0.94334	0.0884336	0.128644
596	C	0.968666	0.550856	0.0730345
597	C	0.968754	0.583128	0.105261
598	H	0.943194	0.531921	0.0719478
599	H	0.94334	0.588434	0.128644
600	C	0.0313343	0.449144	0.0730345
601	C	0.0312463	0.416872	0.105261
602	H	0.0568062	0.468079	0.0719478
603	H	0.0566596	0.411566	0.128644
604	C	0.0313343	0.949144	0.0730345
605	C	0.0312463	0.916872	0.105261
606	H	0.0568062	0.968079	0.0719478
607	H	0.0566596	0.911566	0.128644
608	C	0.0508559	0.0313343	0.926965
609	C	0.0831282	0.0312463	0.894739
610	H	0.0319205	0.0568062	0.928052
611	H	0.0884336	0.0566596	0.871356
612	C	0.550856	0.0313343	0.926965
613	C	0.583128	0.0312463	0.894739
614	H	0.531921	0.0568062	0.928052
615	H	0.588434	0.0566596	0.871356
616	C	0.449144	0.968666	0.926965
617	C	0.416872	0.968754	0.894739
618	H	0.468079	0.943194	0.928052
619	H	0.411566	0.94334	0.871356
620	C	0.949144	0.968666	0.926965
621	C	0.916872	0.968754	0.894739
622	H	0.968079	0.943194	0.928052
623	H	0.911566	0.94334	0.871356
624	C	0.199144	0.0313343	0.823053
625	C	0.166872	0.0312463	0.85528
626	H	0.218079	0.0568062	0.821929
627	H	0.161566	0.0566596	0.878663
628	C	0.699144	0.0313343	0.823053
629	C	0.666872	0.0312463	0.85528
630	H	0.718079	0.0568062	0.821929
631	H	0.661566	0.0566596	0.878663
632	C	0.300856	0.968666	0.823053
633	C	0.333128	0.968754	0.85528
634	H	0.281921	0.943194	0.821929
635	H	0.338434	0.94334	0.878663
636	C	0.800856	0.968666	0.823053
637	C	0.833128	0.968754	0.85528
638	H	0.781921	0.943194	0.821929
639	H	0.838434	0.94334	0.878663
640	C	0.0313343	0.300856	0.176947

641	C	0.0312463	0.333128	0.14472
642	H	0.0568062	0.281921	0.178071
643	H	0.0566596	0.338434	0.121337
644	C	0.0313343	0.800856	0.176947
645	C	0.0312463	0.833128	0.14472
646	H	0.0568062	0.781921	0.178071
647	H	0.0566596	0.838434	0.121337
648	C	0.968666	0.199144	0.176947
649	C	0.968754	0.166872	0.14472
650	H	0.943194	0.218079	0.178071
651	H	0.94334	0.161566	0.121337
652	C	0.968666	0.699144	0.176947
653	C	0.968754	0.666872	0.14472
654	H	0.943194	0.718079	0.178071
655	H	0.94334	0.661566	0.121337
656	C	0.00102591	0.0432935	0.229596
657	C	0.00102591	0.543293	0.229596
658	C	0.501026	0.0432935	0.229596
659	C	0.501026	0.543293	0.229596
660	C	0.498974	0.456707	0.229596
661	C	0.498974	0.956707	0.229596
662	C	0.0432935	0.498974	0.145132
663	C	0.543293	0.498974	0.145132
664	C	0.456707	0.00102591	0.145132
665	C	0.456707	0.501026	0.145132
666	C	0.248974	0.0432935	0.895151
667	C	0.248974	0.543293	0.895151
668	C	0.748974	0.0432935	0.895151
669	C	0.748974	0.543293	0.895151
670	C	0.251026	0.456707	0.895151
671	C	0.251026	0.956707	0.895151
672	C	0.751026	0.456707	0.895151
673	C	0.751026	0.956707	0.895151
674	C	0.206707	0.498974	0.979577
675	C	0.706707	0.498974	0.979577
676	C	0.293293	0.00102591	0.979577
677	C	0.293293	0.501026	0.979577
678	C	0.793293	0.00102591	0.979577
679	C	0.793293	0.501026	0.979577
680	C	0.251026	0.293293	0.729596
681	C	0.251026	0.793293	0.729596
682	C	0.751026	0.293293	0.729596
683	C	0.751026	0.793293	0.729596
684	C	0.248974	0.206707	0.729596
685	C	0.248974	0.706707	0.729596
686	C	0.748974	0.206707	0.729596
687	C	0.748974	0.706707	0.729596
688	C	0.293293	0.248974	0.645132
689	C	0.293293	0.748974	0.645132
690	C	0.793293	0.248974	0.645132
691	C	0.793293	0.748974	0.645132
692	C	0.206707	0.251026	0.645132
693	C	0.206707	0.751026	0.645132
694	C	0.706707	0.251026	0.645132
695	C	0.706707	0.751026	0.645132
696	C	0.498974	0.293293	0.395151
697	C	0.498974	0.793293	0.395151
698	C	0.00102591	0.206707	0.395151
699	C	0.00102591	0.706707	0.395151
700	C	0.501026	0.206707	0.395151

701	C	0.501026	0.706707	0.395151
702	C	0.456707	0.248974	0.479577
703	C	0.456707	0.748974	0.479577
704	C	0.956707	0.248974	0.479577
705	C	0.956707	0.748974	0.479577
706	C	0.0432935	0.251026	0.479577
707	C	0.0432935	0.751026	0.479577
708	C	0.543293	0.251026	0.479577
709	C	0.543293	0.751026	0.479577
710	C	0.468666	0.0508559	0.260399
711	C	0.468666	0.550856	0.260399
712	C	0.531334	0.449144	0.260399
713	C	0.531334	0.949144	0.260399
714	C	0.0508559	0.531334	0.11433
715	C	0.550856	0.531334	0.11433
716	C	0.449144	0.468666	0.11433
717	C	0.281334	0.0508559	0.864311
718	C	0.281334	0.550856	0.864311
719	C	0.781334	0.0508559	0.864311
720	C	0.781334	0.550856	0.864311
721	C	0.218666	0.449144	0.864311
722	C	0.218666	0.949144	0.864311
723	C	0.718666	0.449144	0.864311
724	C	0.718666	0.949144	0.864311
725	C	0.199144	0.531334	0.0104174
726	C	0.699144	0.531334	0.0104174
727	C	0.300856	0.468666	0.0104174
728	C	0.218666	0.300856	0.760399
729	C	0.218666	0.800856	0.760399
730	C	0.718666	0.300856	0.760399
731	C	0.718666	0.800856	0.760399
732	C	0.281334	0.199144	0.760399
733	C	0.281334	0.699144	0.760399
734	C	0.781334	0.199144	0.760399
735	C	0.781334	0.699144	0.760399
736	C	0.300856	0.281334	0.61433
737	C	0.300856	0.781334	0.61433
738	C	0.800856	0.281334	0.61433
739	C	0.800856	0.781334	0.61433
740	C	0.199144	0.218666	0.61433
741	C	0.199144	0.718666	0.61433
742	C	0.699144	0.218666	0.61433
743	C	0.699144	0.718666	0.61433
744	C	0.531334	0.300856	0.364311
745	C	0.531334	0.800856	0.364311
746	C	0.468666	0.199144	0.364311
747	C	0.468666	0.699144	0.364311
748	C	0.449144	0.281334	0.510417
749	C	0.449144	0.781334	0.510417
750	C	0.949144	0.281334	0.510417
751	C	0.949144	0.781334	0.510417
752	C	0.0508559	0.218666	0.510417
753	C	0.0508559	0.718666	0.510417
754	C	0.550856	0.218666	0.510417
755	C	0.550856	0.718666	0.510417
756	C	0.468754	0.0831282	0.292625
757	C	0.468754	0.583128	0.292625
758	C	0.531246	0.416872	0.292625
759	C	0.531246	0.916872	0.292625
760	C	0.0831282	0.531246	0.082103

761	C	0.583128	0.531246	0.082103
762	C	0.416872	0.468754	0.082103
763	C	0.281246	0.0831282	0.832084
764	C	0.281246	0.583128	0.832084
765	C	0.781246	0.0831282	0.832084
766	C	0.781246	0.583128	0.832084
767	C	0.218754	0.416872	0.832084
768	C	0.218754	0.916872	0.832084
769	C	0.718754	0.416872	0.832084
770	C	0.718754	0.916872	0.832084
771	C	0.166872	0.531246	0.0426441
772	C	0.666872	0.531246	0.0426441
773	C	0.333128	0.468754	0.0426441
774	C	0.218754	0.333128	0.792625
775	C	0.218754	0.833128	0.792625
776	C	0.718754	0.333128	0.792625
777	C	0.718754	0.833128	0.792625
778	C	0.281246	0.166872	0.792625
779	C	0.281246	0.666872	0.792625
780	C	0.781246	0.166872	0.792625
781	C	0.781246	0.666872	0.792625
782	C	0.333128	0.281246	0.582103
783	C	0.333128	0.781246	0.582103
784	C	0.833128	0.281246	0.582103
785	C	0.833128	0.781246	0.582103
786	C	0.166872	0.218754	0.582103
787	C	0.166872	0.718754	0.582103
788	C	0.666872	0.218754	0.582103
789	C	0.666872	0.718754	0.582103
790	C	0.531246	0.333128	0.332084
791	C	0.531246	0.833128	0.332084
792	C	0.468754	0.166872	0.332084
793	C	0.468754	0.666872	0.332084
794	C	0.416872	0.281246	0.542644
795	C	0.416872	0.781246	0.542644
796	C	0.916872	0.281246	0.542644
797	C	0.916872	0.781246	0.542644
798	C	0.0831282	0.218754	0.542644
799	C	0.0831282	0.718754	0.542644
800	C	0.583128	0.218754	0.542644
801	C	0.583128	0.718754	0.542644
802	C	0.00158284	0.107867	0.295286
803	C	0.00158284	0.607867	0.295286
804	C	0.501583	0.107867	0.295286
805	C	0.501583	0.607867	0.295286
806	C	0.498417	0.392133	0.295286
807	C	0.498417	0.892133	0.295286
808	C	0.107867	0.498417	0.0794424
809	C	0.607867	0.498417	0.0794424
810	C	0.392133	0.00158284	0.0794424
811	C	0.392133	0.501583	0.0794424
812	C	0.248417	0.107867	0.829424
813	C	0.248417	0.607867	0.829424
814	C	0.748417	0.107867	0.829424
815	C	0.748417	0.607867	0.829424
816	C	0.251583	0.392133	0.829424
817	C	0.251583	0.892133	0.829424
818	C	0.751583	0.392133	0.829424
819	C	0.751583	0.892133	0.829424
820	C	0.142133	0.498417	0.0452672

821	C	0.642133	0.498417	0.0452672
822	C	0.357867	0.00158284	0.0452672
823	C	0.357867	0.501583	0.0452672
824	C	0.251583	0.357867	0.795286
825	C	0.251583	0.857867	0.795286
826	C	0.751583	0.357867	0.795286
827	C	0.751583	0.857867	0.795286
828	C	0.248417	0.142133	0.795286
829	C	0.248417	0.642133	0.795286
830	C	0.748417	0.142133	0.795286
831	C	0.748417	0.642133	0.795286
832	C	0.357867	0.248417	0.579442
833	C	0.357867	0.748417	0.579442
834	C	0.857867	0.248417	0.579442
835	C	0.857867	0.748417	0.579442
836	C	0.142133	0.251583	0.579442
837	C	0.142133	0.751583	0.579442
838	C	0.642133	0.251583	0.579442
839	C	0.642133	0.751583	0.579442
840	C	0.498417	0.357867	0.329424
841	C	0.498417	0.857867	0.329424
842	C	0.00158284	0.142133	0.329424
843	C	0.00158284	0.642133	0.329424
844	C	0.501583	0.142133	0.329424
845	C	0.501583	0.642133	0.329424
846	C	0.392133	0.248417	0.545267
847	C	0.392133	0.748417	0.545267
848	C	0.892133	0.248417	0.545267
849	C	0.892133	0.748417	0.545267
850	C	0.107867	0.251583	0.545267
851	C	0.107867	0.751583	0.545267
852	C	0.607867	0.251583	0.545267
853	C	0.607867	0.751583	0.545267
854	C	0.0343827	0.0996307	0.265195
855	C	0.0343827	0.599631	0.265195
856	C	0.534383	0.0996307	0.265195
857	C	0.534383	0.599631	0.265195
858	C	0.465617	0.400369	0.265195
859	C	0.465617	0.900369	0.265195
860	C	0.0996307	0.465617	0.109533
861	C	0.599631	0.465617	0.109533
862	C	0.400369	0.0343827	0.109533
863	C	0.400369	0.534383	0.109533
864	C	0.215617	0.0996307	0.859552
865	C	0.215617	0.599631	0.859552
866	C	0.715617	0.0996307	0.859552
867	C	0.715617	0.599631	0.859552
868	C	0.284383	0.400369	0.859552
869	C	0.284383	0.900369	0.859552
870	C	0.784383	0.400369	0.859552
871	C	0.784383	0.900369	0.859552
872	C	0.150369	0.465617	0.0151765
873	C	0.650369	0.465617	0.0151765
874	C	0.349631	0.0343827	0.0151765
875	C	0.349631	0.534383	0.0151765
876	C	0.284383	0.349631	0.765195
877	C	0.284383	0.849631	0.765195
878	C	0.784383	0.349631	0.765195
879	C	0.784383	0.849631	0.765195
880	C	0.215617	0.150369	0.765195



881	C	0.215617	0.650369	0.765195
882	C	0.715617	0.150369	0.765195
883	C	0.715617	0.650369	0.765195
884	C	0.349631	0.215617	0.609533
885	C	0.349631	0.715617	0.609533
886	C	0.849631	0.215617	0.609533
887	C	0.849631	0.715617	0.609533
888	C	0.150369	0.284383	0.609533
889	C	0.150369	0.784383	0.609533
890	C	0.650369	0.284383	0.609533
891	C	0.650369	0.784383	0.609533
892	C	0.465617	0.349631	0.359552
893	C	0.465617	0.849631	0.359552
894	C	0.0343827	0.150369	0.359552
895	C	0.0343827	0.650369	0.359552
896	C	0.534383	0.150369	0.359552
897	C	0.534383	0.650369	0.359552
898	C	0.400369	0.215617	0.515176
899	C	0.400369	0.715617	0.515176
900	C	0.900369	0.215617	0.515176
901	C	0.900369	0.715617	0.515176
902	C	0.0996307	0.284383	0.515176
903	C	0.0996307	0.784383	0.515176
904	C	0.599631	0.284383	0.515176
905	C	0.599631	0.784383	0.515176
906	C	0.0340896	0.0675929	0.232556
907	C	0.0340896	0.567593	0.232556
908	C	0.53409	0.0675929	0.232556
909	C	0.53409	0.567593	0.232556
910	C	0.46591	0.432407	0.232556
911	C	0.46591	0.932407	0.232556
912	C	0.0675929	0.46591	0.142172
913	C	0.567593	0.46591	0.142172
914	C	0.432407	0.0340896	0.142172
915	C	0.432407	0.53409	0.142172
916	C	0.21591	0.0675929	0.892191
917	C	0.21591	0.567593	0.892191
918	C	0.71591	0.0675929	0.892191
919	C	0.71591	0.567593	0.892191
920	C	0.28409	0.432407	0.892191
921	C	0.28409	0.932407	0.892191
922	C	0.78409	0.432407	0.892191
923	C	0.78409	0.932407	0.892191
924	C	0.182407	0.46591	0.982538
925	C	0.682407	0.46591	0.982538
926	C	0.317593	0.0340896	0.982538
927	C	0.317593	0.53409	0.982538
928	C	0.817593	0.0340896	0.982538
929	C	0.817593	0.53409	0.982538
930	C	0.28409	0.317593	0.732556
931	C	0.28409	0.817593	0.732556
932	C	0.78409	0.317593	0.732556
933	C	0.78409	0.817593	0.732556
934	C	0.21591	0.182407	0.732556
935	C	0.21591	0.682407	0.732556
936	C	0.71591	0.182407	0.732556
937	C	0.71591	0.682407	0.732556
938	C	0.317593	0.21591	0.642172
939	C	0.317593	0.71591	0.642172

940	C	0.817593	0.21591	0.642172
941	C	0.817593	0.71591	0.642172
942	C	0.182407	0.28409	0.642172
943	C	0.182407	0.78409	0.642172
944	C	0.682407	0.28409	0.642172
945	C	0.682407	0.78409	0.642172
946	C	0.46591	0.317593	0.392191
947	C	0.46591	0.817593	0.392191
948	C	0.0340896	0.182407	0.392191
949	C	0.0340896	0.682407	0.392191
950	C	0.53409	0.182407	0.392191
951	C	0.53409	0.682407	0.392191
952	C	0.432407	0.21591	0.482538
953	C	0.432407	0.71591	0.482538
954	C	0.932407	0.21591	0.482538
955	C	0.932407	0.71591	0.482538
956	C	0.0675929	0.28409	0.482538
957	C	0.0675929	0.78409	0.482538
958	C	0.567593	0.28409	0.482538
959	C	0.567593	0.78409	0.482538
960	H	0.443194	0.0319205	0.259275
961	H	0.443194	0.531921	0.259275
962	H	0.556806	0.468079	0.259275
963	H	0.556806	0.968079	0.259275
964	H	0.0319205	0.556806	0.115416
965	H	0.531921	0.556806	0.115416
966	H	0.468079	0.443194	0.115416
967	H	0.306806	0.0319205	0.865435
968	H	0.306806	0.531921	0.865435
969	H	0.806806	0.0319205	0.865435
970	H	0.806806	0.531921	0.865435
971	H	0.193194	0.468079	0.865435
972	H	0.193194	0.968079	0.865435
973	H	0.693194	0.468079	0.865435
974	H	0.693194	0.968079	0.865435
975	H	0.218079	0.556806	0.00929326
976	H	0.718079	0.556806	0.00929326
977	H	0.281921	0.443194	0.00929326
978	H	0.193194	0.281921	0.759275
979	H	0.193194	0.781921	0.759275
980	H	0.693194	0.281921	0.759275
981	H	0.693194	0.781921	0.759275
982	H	0.306806	0.218079	0.759275
983	H	0.306806	0.718079	0.759275
984	H	0.806806	0.218079	0.759275
985	H	0.806806	0.718079	0.759275
986	H	0.281921	0.306806	0.615416
987	H	0.281921	0.806806	0.615416
988	H	0.781921	0.306806	0.615416
989	H	0.781921	0.806806	0.615416
990	H	0.218079	0.193194	0.615416
991	H	0.218079	0.693194	0.615416
992	H	0.718079	0.193194	0.615416
993	H	0.718079	0.693194	0.615416
994	H	0.556806	0.281921	0.365435
995	H	0.556806	0.781921	0.365435
996	H	0.443194	0.218079	0.365435
997	H	0.443194	0.718079	0.365435
998	H	0.468079	0.306806	0.509293
999	H	0.468079	0.806806	0.509293

1000	H	0.968079	0.306806	0.509293
1001	H	0.968079	0.806806	0.509293
1002	H	0.0319205	0.193194	0.509293
1003	H	0.0319205	0.693194	0.509293
1004	H	0.531921	0.193194	0.509293
1005	H	0.531921	0.693194	0.509293
1006	H	0.44334	0.0884336	0.316008
1007	H	0.44334	0.588434	0.316008
1008	H	0.55666	0.411566	0.316008
1009	H	0.55666	0.911566	0.316008
1010	H	0.0884336	0.55666	0.0587199
1011	H	0.588434	0.55666	0.0587199
1012	H	0.411566	0.44334	0.0587199
1013	H	0.30666	0.0884336	0.808701
1014	H	0.30666	0.588434	0.808701
1015	H	0.80666	0.0884336	0.808701
1016	H	0.80666	0.588434	0.808701
1017	H	0.19334	0.411566	0.808701
1018	H	0.19334	0.911566	0.808701
1019	H	0.69334	0.411566	0.808701
1020	H	0.69334	0.911566	0.808701
1021	H	0.161566	0.55666	0.0660271
1022	H	0.661566	0.55666	0.0660271
1023	H	0.338434	0.44334	0.0660271
1024	H	0.19334	0.338434	0.816008
1025	H	0.19334	0.838434	0.816008
1026	H	0.69334	0.338434	0.816008
1027	H	0.69334	0.838434	0.816008
1028	H	0.30666	0.161566	0.816008
1029	H	0.30666	0.661566	0.816008
1030	H	0.80666	0.161566	0.816008
1031	H	0.80666	0.661566	0.816008
1032	H	0.338434	0.30666	0.55872
1033	H	0.338434	0.80666	0.55872
1034	H	0.838434	0.30666	0.55872
1035	H	0.838434	0.80666	0.55872
1036	H	0.161566	0.19334	0.55872
1037	H	0.161566	0.69334	0.55872
1038	H	0.661566	0.19334	0.55872
1039	H	0.661566	0.69334	0.55872
1040	H	0.55666	0.338434	0.308701
1041	H	0.55666	0.838434	0.308701
1042	H	0.44334	0.161566	0.308701
1043	H	0.44334	0.661566	0.308701
1044	H	0.411566	0.30666	0.566027
1045	H	0.411566	0.80666	0.566027
1046	H	0.911566	0.30666	0.566027
1047	H	0.911566	0.80666	0.566027
1048	H	0.0884336	0.19334	0.566027
1049	H	0.0884336	0.69334	0.566027
1050	H	0.588434	0.19334	0.566027
1051	H	0.588434	0.69334	0.566027
1052	H	0.0600598	0.118273	0.266469
1053	H	0.0600598	0.618273	0.266469
1054	H	0.56006	0.118273	0.266469
1055	H	0.56006	0.618273	0.266469
1056	H	0.43994	0.381727	0.266469
1057	H	0.43994	0.881727	0.266469
1058	H	0.118273	0.43994	0.108259
1059	H	0.618273	0.43994	0.108259

1060	H	0.381727	0.0600598	0.108259
1061	H	0.381727	0.56006	0.108259
1062	H	0.18994	0.118273	0.85824
1063	H	0.18994	0.618273	0.85824
1064	H	0.68994	0.118273	0.85824
1065	H	0.68994	0.618273	0.85824
1066	H	0.31006	0.381727	0.85824
1067	H	0.31006	0.881727	0.85824
1068	H	0.81006	0.381727	0.85824
1069	H	0.81006	0.881727	0.85824
1070	H	0.131727	0.43994	0.016488
1071	H	0.631727	0.43994	0.016488
1072	H	0.368273	0.0600598	0.016488
1073	H	0.368273	0.56006	0.016488
1074	H	0.31006	0.368273	0.766469
1075	H	0.31006	0.868273	0.766469
1076	H	0.81006	0.368273	0.766469
1077	H	0.81006	0.868273	0.766469
1078	H	0.18994	0.131727	0.766469
1079	H	0.18994	0.631727	0.766469
1080	H	0.68994	0.131727	0.766469
1081	H	0.68994	0.631727	0.766469
1082	H	0.368273	0.18994	0.608259
1083	H	0.368273	0.68994	0.608259
1084	H	0.868273	0.18994	0.608259
1085	H	0.868273	0.68994	0.608259
1086	H	0.131727	0.31006	0.608259
1087	H	0.131727	0.81006	0.608259
1088	H	0.631727	0.31006	0.608259
1089	H	0.631727	0.81006	0.608259
1090	H	0.43994	0.368273	0.35824
1091	H	0.43994	0.868273	0.35824
1092	H	0.0600598	0.131727	0.35824
1093	H	0.0600598	0.631727	0.35824
1094	H	0.56006	0.131727	0.35824
1095	H	0.56006	0.631727	0.35824
1096	H	0.381727	0.18994	0.516488
1097	H	0.381727	0.68994	0.516488
1098	H	0.881727	0.18994	0.516488
1099	H	0.881727	0.68994	0.516488
1100	H	0.118273	0.31006	0.516488
1101	H	0.118273	0.81006	0.516488
1102	H	0.618273	0.31006	0.516488
1103	H	0.618273	0.81006	0.516488
1104	H	0.0598253	0.0617599	0.21011
1105	H	0.0598253	0.56176	0.21011
1106	H	0.559825	0.0617599	0.21011
1107	H	0.559825	0.56176	0.21011
1108	H	0.440175	0.43824	0.21011
1109	H	0.440175	0.93824	0.21011
1110	H	0.0617599	0.440175	0.164618
1111	H	0.56176	0.440175	0.164618
1112	H	0.43824	0.0598253	0.164618
1113	H	0.43824	0.559825	0.164618
1114	H	0.190175	0.0617599	0.914599
1115	H	0.190175	0.56176	0.914599
1116	H	0.690175	0.0617599	0.914599
1117	H	0.690175	0.56176	0.914599
1118	H	0.309825	0.43824	0.914599
1119	H	0.309825	0.93824	0.914599

1120	H	0.809825	0.43824	0.914599
1121	H	0.809825	0.93824	0.914599
1122	H	0.18824	0.440175	0.960129
1123	H	0.68824	0.440175	0.960129
1124	H	0.31176	0.0598253	0.960129
1125	H	0.31176	0.559825	0.960129
1126	H	0.81176	0.0598253	0.960129
1127	H	0.81176	0.559825	0.960129
1128	H	0.309825	0.31176	0.71011
1129	H	0.309825	0.81176	0.71011
1130	H	0.809825	0.31176	0.71011
1131	H	0.809825	0.81176	0.71011
1132	H	0.190175	0.18824	0.71011
1133	H	0.190175	0.68824	0.71011
1134	H	0.690175	0.18824	0.71011
1135	H	0.690175	0.68824	0.71011
1136	H	0.31176	0.190175	0.664618
1137	H	0.31176	0.690175	0.664618
1138	H	0.81176	0.190175	0.664618
1139	H	0.81176	0.690175	0.664618
1140	H	0.18824	0.309825	0.664618
1141	H	0.18824	0.809825	0.664618
1142	H	0.68824	0.309825	0.664618
1143	H	0.68824	0.809825	0.664618
1144	H	0.440175	0.31176	0.414599
1145	H	0.440175	0.81176	0.414599
1146	H	0.0598253	0.18824	0.414599
1147	H	0.0598253	0.68824	0.414599
1148	H	0.559825	0.18824	0.414599
1149	H	0.559825	0.68824	0.414599
1150	H	0.43824	0.190175	0.460129
1151	H	0.43824	0.690175	0.460129
1152	H	0.93824	0.190175	0.460129
1153	H	0.93824	0.690175	0.460129
1154	H	0.0617599	0.309825	0.460129
1155	H	0.0617599	0.809825	0.460129
1156	H	0.56176	0.309825	0.460129
1157	H	0.56176	0.809825	0.460129
1158	Si	1	1	0.187364
1159	Si	1	0.5	0.187364
1160	Si	0.5	1	0.187364
1161	Si	0.5	0.5	0.187364
1162	Si	0.25	1	0.937345
1163	Si	0.25	0.5	0.937345
1164	Si	0.75	1	0.937345
1165	Si	0.75	0.5	0.937345
1166	Si	0.25	0.25	0.687364
1167	Si	0.25	0.75	0.687364
1168	Si	0.75	0.25	0.687364
1169	Si	0.75	0.75	0.687364
1170	Si	1	0.25	0.437345
1171	Si	1	0.75	0.437345
1172	Si	0.5	0.25	0.437345
1173	Si	0.5	0.75	0.437345
1174	C	0.998974	0.456707	0.229596
1175	C	0.998974	0.293293	0.395151
1176	C	0.998417	0.392133	0.295286
1177	C	0.998417	0.357867	0.329424
1178	C	0.965617	0.400369	0.265195
1179	C	0.965617	0.349631	0.359552

1180	C	0.96591	0.432407	0.232556
1181	C	0.96591	0.317593	0.392191
1182	H	0.93994	0.381727	0.266469
1183	H	0.93994	0.368273	0.35824
1184	H	0.940175	0.43824	0.21011
1185	H	0.940175	0.31176	0.414599
1186	C	0.998974	0.956707	0.229596
1187	C	0.998974	0.793293	0.395151
1188	C	0.998417	0.892133	0.295286
1189	C	0.998417	0.857867	0.329424
1190	C	0.965617	0.900369	0.265195
1191	C	0.965617	0.849631	0.359552
1192	C	0.96591	0.932407	0.232556
1193	C	0.96591	0.817593	0.392191
1194	H	0.93994	0.881727	0.266469
1195	H	0.93994	0.868273	0.35824
1196	H	0.940175	0.93824	0.21011
1197	H	0.940175	0.81176	0.414599
1198	C	0.0432935	0.998974	0.145132
1199	C	0.107867	0.998417	0.0794424
1200	C	0.142133	0.998417	0.0452672
1201	C	0.0996307	0.965617	0.109533
1202	C	0.150369	0.965617	0.0151765
1203	C	0.0675929	0.96591	0.142172
1204	H	0.118273	0.93994	0.108259
1205	H	0.131727	0.93994	0.016488
1206	H	0.0617599	0.940175	0.164618
1207	C	0.543293	0.998974	0.145132
1208	C	0.607867	0.998417	0.0794424
1209	C	0.642133	0.998417	0.0452672
1210	C	0.599631	0.965617	0.109533
1211	C	0.650369	0.965617	0.0151765
1212	C	0.567593	0.96591	0.142172
1213	H	0.618273	0.93994	0.108259
1214	H	0.631727	0.93994	0.016488
1215	H	0.56176	0.940175	0.164618
1216	C	0.956707	0.00102591	0.145132
1217	C	0.892133	0.00158284	0.0794424
1218	C	0.857867	0.00158284	0.0452672
1219	C	0.900369	0.0343827	0.109533
1220	C	0.849631	0.0343827	0.0151765
1221	C	0.932407	0.0340896	0.142172
1222	H	0.881727	0.0600598	0.108259
1223	H	0.868273	0.0600598	0.016488
1224	H	0.93824	0.0598253	0.164618
1225	C	0.956707	0.501026	0.145132
1226	C	0.949144	0.468666	0.11433
1227	C	0.800856	0.468666	0.0104174
1228	C	0.916872	0.468754	0.082103
1229	C	0.833128	0.468754	0.0426441
1230	C	0.892133	0.501583	0.0794424
1231	C	0.857867	0.501583	0.0452672
1232	C	0.900369	0.534383	0.109533
1233	C	0.849631	0.534383	0.0151765
1234	C	0.932407	0.53409	0.142172
1235	H	0.968079	0.443194	0.115416
1236	H	0.781921	0.443194	0.00929326
1237	H	0.911566	0.44334	0.0587199
1238	H	0.838434	0.44334	0.0660271
1239	H	0.881727	0.56006	0.108259

1240	H	0.868273	0.56006	0.016488
1241	H	0.93824	0.559825	0.164618
1242	C	0.206707	0.998974	0.979577
1243	C	0.182407	0.96591	0.982538
1244	H	0.18824	0.940175	0.960129
1245	C	0.706707	0.998974	0.979577
1246	C	0.682407	0.96591	0.982538
1247	H	0.68824	0.940175	0.960129
1248	C	0.968666	0.0508559	0.260399
1249	C	0.968754	0.0831282	0.292625
1250	H	0.943194	0.0319205	0.259275
1251	H	0.94334	0.0884336	0.316008
1252	C	0.968666	0.550856	0.260399
1253	C	0.968754	0.583128	0.292625
1254	H	0.943194	0.531921	0.259275
1255	H	0.94334	0.588434	0.316008
1256	C	0.0313343	0.449144	0.260399
1257	C	0.0312463	0.416872	0.292625
1258	H	0.0568062	0.468079	0.259275
1259	H	0.0566596	0.411566	0.316008
1260	C	0.0313343	0.949144	0.260399
1261	C	0.0312463	0.916872	0.292625
1262	H	0.0568062	0.968079	0.259275
1263	H	0.0566596	0.911566	0.316008
1264	C	0.0508559	0.0313343	0.11433
1265	C	0.0831282	0.0312463	0.082103
1266	H	0.0319205	0.0568062	0.115416
1267	H	0.0884336	0.0566596	0.0587199
1268	C	0.550856	0.0313343	0.11433
1269	C	0.583128	0.0312463	0.082103
1270	H	0.531921	0.0568062	0.115416
1271	H	0.588434	0.0566596	0.0587199
1272	C	0.449144	0.968666	0.11433
1273	C	0.416872	0.968754	0.082103
1274	H	0.468079	0.943194	0.115416
1275	H	0.411566	0.94334	0.0587199
1276	C	0.949144	0.968666	0.11433
1277	C	0.916872	0.968754	0.082103
1278	H	0.968079	0.943194	0.115416
1279	H	0.911566	0.94334	0.0587199
1280	C	0.199144	0.0313343	0.0104174
1281	C	0.166872	0.0312463	0.0426441
1282	H	0.218079	0.0568062	0.00929326
1283	H	0.161566	0.0566596	0.0660271
1284	C	0.699144	0.0313343	0.0104174
1285	C	0.666872	0.0312463	0.0426441
1286	H	0.718079	0.0568062	0.00929326
1287	H	0.661566	0.0566596	0.0660271
1288	C	0.300856	0.968666	0.0104174
1289	C	0.333128	0.968754	0.0426441
1290	H	0.281921	0.943194	0.00929326
1291	H	0.338434	0.94334	0.0660271
1292	C	0.800856	0.968666	0.0104174
1293	C	0.833128	0.968754	0.0426441
1294	H	0.781921	0.943194	0.00929326
1295	H	0.838434	0.94334	0.0660271
1296	C	0.0313343	0.300856	0.364311
1297	C	0.0312463	0.333128	0.332084
1298	H	0.0568062	0.281921	0.365435
1299	H	0.0566596	0.338434	0.308701

1300	C	0.0313343	0.800856	0.364311
1301	C	0.0312463	0.833128	0.332084
1302	H	0.0568062	0.781921	0.365435
1303	H	0.0566596	0.838434	0.308701
1304	C	0.968666	0.199144	0.364311
1305	C	0.968754	0.166872	0.332084
1306	H	0.943194	0.218079	0.365435
1307	H	0.94334	0.161566	0.308701
1308	C	0.968666	0.699144	0.364311
1309	C	0.968754	0.666872	0.332084
1310	H	0.943194	0.718079	0.365435
1311	H	0.94334	0.661566	0.308701

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_SOD\_PPN-4.cif

```

_cell_length_a      26.5013(0)
_cell_length_b      26.6007(0)
_cell_length_c      26.8296(0)
_cell_angle_alpha   109.714(0)
_cell_angle_beta    109.436(0)
_cell_angle_gamma   109.938(0)

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number         1
_symmetry_cell_setting               Triclinic

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
1      Si      0.512173      0.264488      0.753844
2      Si      0.512813      0.757874      0.249547
3      Si      0.759882      0.259277      0.503404
4      Si      0.263995      0.760856      0.501284
5      Si      0.759951      0.505124      0.25132
6      Si      0.263325      0.512207      0.751165
7      C      0.460423      0.297305      0.736664
8      C      0.471445      0.339247      0.715487
9      C      0.437047      0.368991      0.710357
10     C      0.390944      0.35741      0.726656
11     C      0.378152      0.313771      0.745789
12     C      0.412519      0.284091      0.75065
13     C      0.357915      0.392497      0.72655
14     C      0.293132      0.362419      0.701114
15     C      0.263484      0.39702      0.705432
16     C      0.297787      0.461998      0.734944

```



17	C	0.362446	0.491718	0.758526
18	C	0.392271	0.457449	0.754435
19	H	0.507566	0.349761	0.703109
20	H	0.446326	0.401482	0.693941
21	H	0.341961	0.303833	0.757837
22	H	0.401875	0.250706	0.766157
23	H	0.265853	0.312022	0.678101
24	H	0.21301	0.372475	0.685663
25	H	0.390449	0.542291	0.780969
26	H	0.442498	0.481242	0.773777
27	C	0.56085	0.304214	0.839578
28	C	0.557101	0.352831	0.877238
29	C	0.590956	0.381656	0.941141
30	C	0.629588	0.362473	0.968941
31	C	0.634308	0.31453	0.931926
32	C	0.600356	0.286019	0.867986
33	C	0.664429	0.393694	0.036842
34	C	0.652646	0.361115	0.06707
35	C	0.682504	0.392634	0.131302
36	C	0.724707	0.456807	0.166279
37	C	0.738132	0.488619	0.135521
38	C	0.708325	0.457633	0.071594
39	H	0.527492	0.369117	0.857309
40	H	0.587083	0.418943	0.969588
41	H	0.664527	0.299681	0.953102
42	H	0.60477	0.248574	0.840143
43	H	0.619477	0.311406	0.040505
44	H	0.671901	0.366272	0.153701
45	H	0.771935	0.538452	0.161319
46	H	0.718624	0.482931	0.048405
47	C	0.302334	0.847064	0.551711
48	C	0.273723	0.876677	0.574796
49	C	0.304126	0.941532	0.609395
50	C	0.364367	0.978147	0.622105
51	C	0.394046	0.948898	0.600625
52	C	0.363346	0.884208	0.565943
53	C	0.397355	0.046898	0.656944
54	C	0.457702	0.080949	0.708026
55	C	0.490734	0.145779	0.738336
56	C	0.464509	0.178173	0.71867
57	C	0.403487	0.14375	0.668561
58	C	0.370047	0.07882	0.638024
59	H	0.226982	0.849448	0.566009
60	H	0.281097	0.963691	0.626695
61	H	0.440974	0.976838	0.610527
62	H	0.387919	0.863125	0.549882
63	H	0.478848	0.056643	0.723823
64	H	0.537907	0.170916	0.777658
65	H	0.381146	0.167227	0.652262
66	H	0.323047	0.052941	0.598927
67	C	0.721315	0.267699	0.550466
68	C	0.669922	0.214865	0.53671
69	C	0.639856	0.219625	0.570583
70	C	0.660626	0.277615	0.619304
71	C	0.712302	0.330523	0.633874
72	C	0.742299	0.325377	0.599809
73	C	0.627314	0.280754	0.653968
74	C	0.659201	0.308649	0.718038
75	C	0.626182	0.306514	0.749346
76	C	0.561074	0.276703	0.717434

77	C	0.529588	0.250927	0.65334
78	C	0.562208	0.252966	0.621894
79	H	0.652419	0.168858	0.499233
80	H	0.600312	0.178086	0.559402
81	H	0.728932	0.37568	0.671648
82	H	0.782879	0.367298	0.612665
83	H	0.709694	0.331181	0.743427
84	H	0.652169	0.328328	0.799274
85	H	0.47885	0.228326	0.62705
86	H	0.537222	0.232617	0.572273
87	C	0.464555	0.716722	0.163842
88	C	0.404197	0.664845	0.129821
89	C	0.371281	0.633699	0.065712
90	C	0.39881	0.653658	0.034375
91	C	0.459219	0.705408	0.067905
92	C	0.491612	0.736622	0.132013
93	C	0.364618	0.62035	0.966483
94	C	0.357009	0.652939	0.9357
95	C	0.325651	0.621562	0.871595
96	C	0.301794	0.557632	0.83694
97	C	0.309053	0.525241	0.868314
98	C	0.33994	0.556098	0.932376
99	H	0.381765	0.647682	0.152883
100	H	0.324239	0.593949	0.040015
101	H	0.480939	0.720885	0.043754
102	H	0.538596	0.776823	0.156921
103	H	0.375465	0.702664	0.9618
104	H	0.32012	0.648329	0.848896
105	H	0.291036	0.475271	0.842989
106	H	0.345621	0.530502	0.955997
107	C	0.563219	0.723268	0.264486
108	C	0.628442	0.755532	0.295243
109	C	0.661259	0.723947	0.296492
110	C	0.629221	0.658928	0.267231
111	C	0.563918	0.626345	0.238089
112	C	0.531519	0.658138	0.236951
113	C	0.662626	0.624209	0.26651
114	C	0.644262	0.574188	0.276612
115	C	0.673532	0.539349	0.273208
116	C	0.722943	0.554062	0.261608
117	C	0.741985	0.605162	0.252955
118	C	0.711955	0.639431	0.254751
119	H	0.654946	0.806205	0.318896
120	H	0.711884	0.749966	0.320365
121	H	0.5383	0.575869	0.215544
122	H	0.48068	0.631154	0.21372
123	H	0.606985	0.562355	0.287056
124	H	0.656722	0.499821	0.280094
125	H	0.780699	0.618937	0.244417
126	H	0.726559	0.677808	0.246392
127	C	0.724661	0.173835	0.451611
128	C	0.750702	0.139353	0.466163
129	C	0.719272	0.074745	0.428905
130	C	0.660643	0.043467	0.376266
131	C	0.634939	0.077696	0.360178
132	C	0.666685	0.142164	0.397582
133	C	0.624795	0.974759	0.340292
134	C	0.565121	0.943336	0.331424
135	C	0.532422	0.878639	0.302463
136	C	0.558312	0.843836	0.281576

137	C	0.616482	0.875584	0.287615
138	C	0.649779	0.940455	0.316968
139	H	0.796107	0.162464	0.50746
140	H	0.739827	0.04858	0.441277
141	H	0.590065	0.053783	0.318641
142	H	0.645238	0.167606	0.384277
143	H	0.544736	0.969547	0.348119
144	H	0.486257	0.855784	0.296945
145	H	0.637056	0.850045	0.269806
146	H	0.69518	0.964407	0.321943
147	C	0.463376	0.747583	0.285986
148	C	0.400325	0.729792	0.256602
149	C	0.367538	0.729484	0.288091
150	C	0.397623	0.748132	0.350529
151	C	0.460833	0.76614	0.380328
152	C	0.493027	0.765371	0.348342
153	C	0.363774	0.748607	0.384728
154	C	0.375115	0.729142	0.427776
155	C	0.344675	0.730781	0.461409
156	C	0.301474	0.750734	0.452904
157	C	0.289471	0.769069	0.408861
158	C	0.320384	0.768432	0.37551
159	H	0.375488	0.716002	0.208271
160	H	0.318414	0.714591	0.263901
161	H	0.48518	0.781315	0.428907
162	H	0.542072	0.779299	0.372982
163	H	0.40766	0.712461	0.434957
164	H	0.355548	0.715721	0.494981
165	H	0.255733	0.784497	0.400098
166	H	0.311025	0.783942	0.342519
167	C	0.846288	0.301035	0.555179
168	C	0.876477	0.275663	0.583151
169	C	0.941474	0.306648	0.617803
170	C	0.977391	0.363999	0.624934
171	C	0.947679	0.391144	0.599418
172	C	0.882899	0.359944	0.564983
173	C	0.046164	0.395979	0.656521
174	C	0.075183	0.408863	0.623437
175	C	0.139926	0.441914	0.652342
176	C	0.177076	0.463126	0.714818
177	C	0.147662	0.448412	0.746885
178	C	0.082632	0.414821	0.718038
179	H	0.84939	0.230473	0.577556
180	H	0.964149	0.285905	0.638479
181	H	0.975429	0.436482	0.606185
182	H	0.861439	0.382248	0.545231
183	H	0.046894	0.393265	0.575253
184	H	0.161009	0.451432	0.62536
185	H	0.175148	0.463464	0.795212
186	H	0.060433	0.404147	0.743619
187	C	0.747429	0.29521	0.454386
188	C	0.746769	0.270355	0.398736
189	C	0.744941	0.299839	0.364338
190	C	0.745005	0.355887	0.385509
191	C	0.745033	0.380577	0.440872
192	C	0.745553	0.350233	0.474432
193	C	0.745509	0.388872	0.350746
194	C	0.716211	0.424043	0.352341
195	C	0.718638	0.457413	0.321825
196	C	0.749344	0.456436	0.288166

197	C	0.777263	0.419816	0.285451
198	C	0.775627	0.386715	0.316366
199	H	0.74792	0.227397	0.38138
200	H	0.743552	0.279128	0.320949
201	H	0.745158	0.424037	0.458177
202	H	0.744768	0.37036	0.516856
203	H	0.691373	0.425475	0.37751
204	H	0.695467	0.4846	0.324983
205	H	0.801252	0.416979	0.259261
206	H	0.798563	0.359626	0.314288
207	C	0.177656	0.722949	0.451294
208	C	0.141891	0.658648	0.427205
209	C	0.077034	0.627076	0.392733
210	C	0.046271	0.65931	0.381795
211	C	0.081512	0.72307	0.404372
212	C	0.146572	0.754313	0.43842
213	C	0.977313	0.625357	0.348025
214	C	0.945477	0.643898	0.375909
215	C	0.880529	0.609166	0.345825
216	C	0.846168	0.555642	0.287407
217	C	0.878311	0.538467	0.259092
218	C	0.943259	0.572882	0.28899
219	H	0.164336	0.632242	0.435501
220	H	0.050075	0.577452	0.374892
221	H	0.058129	0.748246	0.395328
222	H	0.172788	0.803881	0.454996
223	H	0.971541	0.684867	0.421444
224	H	0.856944	0.624299	0.36893
225	H	0.852998	0.497662	0.2132
226	H	0.96759	0.558899	0.266624
227	C	0.273299	0.72321	0.549163
228	C	0.297594	0.683633	0.543759
229	C	0.299669	0.653762	0.577709
230	C	0.275924	0.661591	0.617582
231	C	0.251336	0.70111	0.623348
232	C	0.250669	0.731855	0.590122
233	C	0.276646	0.628216	0.651955
234	C	0.280221	0.652988	0.709079
235	C	0.278897	0.620064	0.740121
236	C	0.275186	0.562383	0.716052
237	C	0.273626	0.538692	0.659767
238	C	0.273629	0.570703	0.627856
239	H	0.31587	0.675265	0.512534
240	H	0.319948	0.62426	0.57305
241	H	0.23218	0.707623	0.653614
242	H	0.231753	0.762723	0.596383
243	H	0.284002	0.69805	0.729463
244	H	0.280945	0.640612	0.784279
245	H	0.272166	0.494553	0.639922
246	H	0.270877	0.550562	0.583631

```
#*****  
#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials  
#  
#*****
```

data\_LON\_PPN-4.cif

```

_cell_length_a      17.8108(0)
_cell_length_b      17.5848(0)
_cell_length_c      29.175(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   120.037(0)

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number          1
_stmmetry_cell_setting               Monoclinic

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
1      Si      0.338399      0.672768      0.064432
2      Si      0.664748      0.342868      0.564238
3      Si      0.675786      0.343475      0.937321
4      Si      0.327334      0.672134      0.43743
5      C       0.327977      0.675087      0.37307
6      C       0.263463      0.605899      0.347188
7      C       0.265354      0.60803       0.299355
8      C       0.332914      0.679586      0.276199
9      C       0.398054      0.748924      0.301658
10     C       0.395449      0.746318      0.34957
11     C       0.335383      0.679806      0.225511
12     C       0.348511      0.753193      0.200128
13     C       0.350272      0.751408      0.152205
14     C       0.339554      0.676866      0.12872
15     C       0.325663      0.603526      0.154548
16     C       0.323782      0.604661      0.202331
17     H       0.210244      0.548651      0.36419
18     H       0.214029      0.554232      0.279929
19     H       0.451017      0.804529      0.284104
20     H       0.44744       0.801202      0.368454
21     H       0.356876      0.811515      0.217749
22     H       0.360026      0.809405      0.133297
23     H       0.316194      0.543684      0.137437
24     H       0.313759      0.547361      0.221675
25     C       0.675141      0.340539      0.872946
26     C       0.739577      0.409817      0.847058
27     C       0.737677      0.407766      0.79922
28     C       0.670205      0.336146      0.776053
29     C       0.605169      0.266723      0.801507
30     C       0.607751      0.269277      0.849421
31     C       0.667737      0.335925      0.725363
32     C       0.654929      0.262682      0.699964
33     C       0.653234      0.264498      0.65204
34     C       0.663608      0.338891      0.62856
35     C       0.677111      0.412067      0.654398
36     C       0.678962      0.410925      0.702182
37     H       0.792791      0.467105      0.864088
38     H       0.788924      0.461653      0.779823

```

39	H	0.552286	0.211062	0.783962
40	H	0.555822	0.214344	0.868288
41	H	0.646762	0.204429	0.717573
42	H	0.643746	0.20658	0.633156
43	H	0.686253	0.471782	0.63732
44	H	0.688677	0.468092	0.721554
45	C	0.39513	0.615364	0.041082
46	C	0.39409	0.544626	0.063979
47	C	0.438477	0.504198	0.046643
48	C	0.484241	0.533277	0.005228
49	C	0.484449	0.602667	0.981466
50	C	0.440542	0.643371	0.999389
51	C	0.531579	0.490024	0.98761
52	C	0.508042	0.444607	0.945806
53	C	0.551451	0.401666	0.93029
54	C	0.618927	0.403435	0.956076
55	C	0.642685	0.450019	0.997659
56	C	0.599463	0.492875	0.013417
57	H	0.358188	0.519712	0.096224
58	H	0.437507	0.449937	0.065115
59	H	0.519624	0.62538	0.949251
60	H	0.442766	0.69804	0.980314
61	H	0.455468	0.44233	0.925696
62	H	0.5319	0.366649	0.897596
63	H	0.695609	0.453624	0.018351
64	H	0.618451	0.528728	0.045691
65	C	0.395885	0.787517	0.041175
66	C	0.474378	0.850358	0.061401
67	C	0.518873	0.936638	0.045157
68	C	0.485812	0.961018	0.007866
69	C	0.408743	0.898382	0.986735
70	C	0.364019	0.812329	0.003524
71	C	0.532186	0.053091	0.991345
72	C	0.586974	0.076799	0.953088
73	C	0.629806	0.163728	0.937663
74	C	0.617912	0.227994	0.95975
75	C	0.563623	0.203683	0.998321
76	C	0.521013	0.116923	0.014126
77	H	0.501859	0.832546	0.090217
78	H	0.579224	0.985053	0.061273
79	H	0.383626	0.917019	0.957449
80	H	0.303491	0.764677	0.986854
81	H	0.596147	0.02743	0.935516
82	H	0.672722	0.180751	0.907923
83	H	0.553405	0.252203	0.016427
84	H	0.478815	0.098686	0.043982
85	C	0.222422	0.61345	0.045504
86	C	0.156472	0.61125	0.072882
87	C	0.070349	0.568619	0.057752
88	C	0.049193	0.527959	0.014659
89	C	0.114479	0.529161	0.987193
90	C	0.200238	0.571361	0.002651
91	C	0.958894	0.484473	0.997282
92	C	0.938063	0.521759	0.960382
93	C	0.85364	0.480197	0.943075
94	C	0.788669	0.400315	0.961521
95	C	0.810168	0.364146	0.998742
96	C	0.894353	0.405793	0.016676
97	H	0.17149	0.642867	0.106553
98	H	0.019818	0.567422	0.07923

99	H	0.097997	0.496856	0.953911
100	H	0.24977	0.570759	0.980752
101	H	0.987895	0.583097	0.945346
102	H	0.839113	0.510898	0.914271
103	H	0.761434	0.302318	0.014284
104	H	0.910069	0.376788	0.045431
105	C	0.607966	0.400107	0.540807
106	C	0.608921	0.470839	0.563693
107	C	0.564581	0.511259	0.546292
108	C	0.519006	0.482199	0.504825
109	C	0.518862	0.412845	0.481064
110	C	0.562684	0.37211	0.499072
111	C	0.471596	0.525428	0.487275
112	C	0.495502	0.571633	0.445713
113	C	0.452053	0.614673	0.430412
114	C	0.384192	0.612183	0.456158
115	C	0.360102	0.564833	0.4975
116	C	0.403326	0.521842	0.513031
117	H	0.644692	0.495701	0.595979
118	H	0.565399	0.565466	0.564745
119	H	0.483857	0.390223	0.448805
120	H	0.560486	0.317422	0.480034
121	H	0.548333	0.574439	0.425612
122	H	0.471902	0.650366	0.397913
123	H	0.306898	0.560708	0.518151
124	H	0.384034	0.485285	0.545092
125	C	0.607364	0.228106	0.541032
126	C	0.529039	0.165223	0.561371
127	C	0.48458	0.078911	0.545164
128	C	0.517503	0.054597	0.507793
129	C	0.594354	0.117266	0.486517
130	C	0.639113	0.203348	0.503268
131	C	0.471165	0.962476	0.49136
132	C	0.416121	0.938769	0.453207
133	C	0.373223	0.851841	0.437813
134	C	0.385267	0.787595	0.459812
135	C	0.43973	0.811886	0.498308
136	C	0.482408	0.898656	0.514108
137	H	0.501738	0.182959	0.590265
138	H	0.424442	0.030486	0.561404
139	H	0.619431	0.098654	0.457207
140	H	0.699515	0.25106	0.48653
141	H	0.406748	0.988095	0.435717
142	H	0.330074	0.834768	0.408175
143	H	0.449871	0.763301	0.516402
144	H	0.524681	0.916891	0.543933
145	C	0.780677	0.402215	0.545244
146	C	0.846643	0.404745	0.572739
147	C	0.932798	0.447496	0.557676
148	C	0.953918	0.487878	0.514508
149	C	0.888622	0.486361	0.486936
150	C	0.802853	0.444089	0.502327
151	C	0.044233	0.531373	0.49718
152	C	0.065227	0.493793	0.46049
153	C	0.149723	0.535326	0.443276
154	C	0.214489	0.615446	0.461608
155	C	0.192839	0.651891	0.498641
156	C	0.108581	0.610287	0.516467
157	H	0.831605	0.373284	0.606446
158	H	0.983353	0.449	0.579245

159	H	0.905128	0.51848	0.453599
160	H	0.75328	0.444385	0.48034
161	H	0.01556	0.43232	0.445544
162	H	0.164497	0.50442	0.414673
163	H	0.24149	0.713812	0.514145
164	H	0.092664	0.639479	0.54505

```
#####  
#  
# CIF file created by Zeo++  
# Zeo++ is an open source package to  
# analyze micro-porous materials  
#  
#####
```

data\_DIA\_PPN-5.cif

_cell_length_a	34.116(0)
_cell_length_b	34.116(0)
_cell_length_c	26.686(0)
_cell_angle_alpha	90(0)
_cell_angle_beta	90(0)
_cell_angle_gamma	90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M	'P1'
_symmetry_Int_Tables_number	1
_stmmetry_cell_setting	Tetragonal

```
loop_  
_symmetry_equiv_pos_as_xyz  
'+x,+y,+z'
```

loop_	_atom_site_label	_atom_site_type_symbol	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
0	C	0.00102591	0.0432935	0.0422319	
1	C	0.00102591	0.543293	0.0422319	
2	C	0.501026	0.0432935	0.0422319	
3	C	0.501026	0.543293	0.0422319	
4	C	0.498974	0.456707	0.0422319	
5	C	0.498974	0.956707	0.0422319	
6	C	0.0432935	0.498974	0.957768	
7	C	0.543293	0.498974	0.957768	
8	C	0.456707	0.00102591	0.957768	
9	C	0.456707	0.501026	0.957768	
10	C	0.956707	0.00102591	0.957768	
11	C	0.956707	0.501026	0.957768	
12	C	0.248974	0.0432935	0.707787	
13	C	0.248974	0.543293	0.707787	
14	C	0.748974	0.0432935	0.707787	
15	C	0.748974	0.543293	0.707787	
16	C	0.251026	0.456707	0.707787	
17	C	0.251026	0.956707	0.707787	
18	C	0.751026	0.456707	0.707787	
19	C	0.751026	0.956707	0.707787	
20	C	0.206707	0.498974	0.792213	
21	C	0.706707	0.498974	0.792213	



22	C	0.293293	0.00102591	0.792213
23	C	0.293293	0.501026	0.792213
24	C	0.793293	0.00102591	0.792213
25	C	0.793293	0.501026	0.792213
26	C	0.251026	0.293293	0.542232
27	C	0.251026	0.793293	0.542232
28	C	0.751026	0.293293	0.542232
29	C	0.751026	0.793293	0.542232
30	C	0.248974	0.206707	0.542232
31	C	0.248974	0.706707	0.542232
32	C	0.748974	0.206707	0.542232
33	C	0.748974	0.706707	0.542232
34	C	0.293293	0.248974	0.457768
35	C	0.293293	0.748974	0.457768
36	C	0.793293	0.248974	0.457768
37	C	0.793293	0.748974	0.457768
38	C	0.206707	0.251026	0.457768
39	C	0.206707	0.751026	0.457768
40	C	0.706707	0.251026	0.457768
41	C	0.706707	0.751026	0.457768
42	C	0.498974	0.293293	0.207787
43	C	0.498974	0.793293	0.207787
44	C	0.00102591	0.206707	0.207787
45	C	0.00102591	0.706707	0.207787
46	C	0.501026	0.206707	0.207787
47	C	0.501026	0.706707	0.207787
48	C	0.456707	0.248974	0.292213
49	C	0.456707	0.748974	0.292213
50	C	0.956707	0.248974	0.292213
51	C	0.956707	0.748974	0.292213
52	C	0.0432935	0.251026	0.292213
53	C	0.0432935	0.751026	0.292213
54	C	0.543293	0.251026	0.292213
55	C	0.543293	0.751026	0.292213
56	C	0.468666	0.0508559	0.0730345
57	C	0.468666	0.550856	0.0730345
58	C	0.531334	0.449144	0.0730345
59	C	0.531334	0.949144	0.0730345
60	C	0.0508559	0.531334	0.926965
61	C	0.550856	0.531334	0.926965
62	C	0.449144	0.468666	0.926965
63	C	0.949144	0.468666	0.926965
64	C	0.281334	0.0508559	0.676947
65	C	0.281334	0.550856	0.676947
66	C	0.781334	0.0508559	0.676947
67	C	0.781334	0.550856	0.676947
68	C	0.218666	0.449144	0.676947
69	C	0.218666	0.949144	0.676947
70	C	0.718666	0.449144	0.676947
71	C	0.718666	0.949144	0.676947
72	C	0.199144	0.531334	0.823053
73	C	0.699144	0.531334	0.823053
74	C	0.300856	0.468666	0.823053
75	C	0.800856	0.468666	0.823053
76	C	0.218666	0.300856	0.573035
77	C	0.218666	0.800856	0.573035
78	C	0.718666	0.300856	0.573035
79	C	0.718666	0.800856	0.573035
80	C	0.281334	0.199144	0.573035
81	C	0.281334	0.699144	0.573035

82	C	0.781334	0.199144	0.573035
83	C	0.781334	0.699144	0.573035
84	C	0.300856	0.281334	0.426965
85	C	0.300856	0.781334	0.426965
86	C	0.800856	0.281334	0.426965
87	C	0.800856	0.781334	0.426965
88	C	0.199144	0.218666	0.426965
89	C	0.199144	0.718666	0.426965
90	C	0.699144	0.218666	0.426965
91	C	0.699144	0.718666	0.426965
92	C	0.531334	0.300856	0.176947
93	C	0.531334	0.800856	0.176947
94	C	0.468666	0.199144	0.176947
95	C	0.468666	0.699144	0.176947
96	C	0.449144	0.281334	0.323053
97	C	0.449144	0.781334	0.323053
98	C	0.949144	0.281334	0.323053
99	C	0.949144	0.781334	0.323053
100	C	0.0508559	0.218666	0.323053
101	C	0.0508559	0.718666	0.323053
102	C	0.550856	0.218666	0.323053
103	C	0.550856	0.718666	0.323053
104	C	0.468754	0.0831282	0.105261
105	C	0.468754	0.583128	0.105261
106	C	0.531246	0.416872	0.105261
107	C	0.531246	0.916872	0.105261
108	C	0.0831282	0.531246	0.894739
109	C	0.583128	0.531246	0.894739
110	C	0.416872	0.468754	0.894739
111	C	0.916872	0.468754	0.894739
112	C	0.281246	0.0831282	0.64472
113	C	0.281246	0.583128	0.64472
114	C	0.781246	0.0831282	0.64472
115	C	0.781246	0.583128	0.64472
116	C	0.218754	0.416872	0.64472
117	C	0.218754	0.916872	0.64472
118	C	0.718754	0.416872	0.64472
119	C	0.718754	0.916872	0.64472
120	C	0.166872	0.531246	0.85528
121	C	0.666872	0.531246	0.85528
122	C	0.333128	0.468754	0.85528
123	C	0.833128	0.468754	0.85528
124	C	0.218754	0.333128	0.605261
125	C	0.218754	0.833128	0.605261
126	C	0.718754	0.333128	0.605261
127	C	0.718754	0.833128	0.605261
128	C	0.281246	0.166872	0.605261
129	C	0.281246	0.666872	0.605261
130	C	0.781246	0.166872	0.605261
131	C	0.781246	0.666872	0.605261
132	C	0.333128	0.281246	0.394739
133	C	0.333128	0.781246	0.394739
134	C	0.833128	0.281246	0.394739
135	C	0.833128	0.781246	0.394739
136	C	0.166872	0.218754	0.394739
137	C	0.166872	0.718754	0.394739
138	C	0.666872	0.218754	0.394739
139	C	0.666872	0.718754	0.394739
140	C	0.531246	0.333128	0.14472
141	C	0.531246	0.833128	0.14472

142	C	0.468754	0.166872	0.14472
143	C	0.468754	0.666872	0.14472
144	C	0.416872	0.281246	0.35528
145	C	0.416872	0.781246	0.35528
146	C	0.916872	0.281246	0.35528
147	C	0.916872	0.781246	0.35528
148	C	0.0831282	0.218754	0.35528
149	C	0.0831282	0.718754	0.35528
150	C	0.583128	0.218754	0.35528
151	C	0.583128	0.718754	0.35528
152	C	0.00158284	0.107867	0.107922
153	C	0.00158284	0.607867	0.107922
154	C	0.501583	0.107867	0.107922
155	C	0.501583	0.607867	0.107922
156	C	0.498417	0.392133	0.107922
157	C	0.498417	0.892133	0.107922
158	C	0.107867	0.498417	0.892078
159	C	0.607867	0.498417	0.892078
160	C	0.392133	0.00158284	0.892078
161	C	0.392133	0.501583	0.892078
162	C	0.892133	0.00158284	0.892078
163	C	0.892133	0.501583	0.892078
164	C	0.248417	0.107867	0.642097
165	C	0.248417	0.607867	0.642097
166	C	0.748417	0.107867	0.642097
167	C	0.748417	0.607867	0.642097
168	C	0.251583	0.392133	0.642097
169	C	0.251583	0.892133	0.642097
170	C	0.751583	0.392133	0.642097
171	C	0.751583	0.892133	0.642097
172	C	0.142133	0.498417	0.857903
173	C	0.642133	0.498417	0.857903
174	C	0.357867	0.00158284	0.857903
175	C	0.357867	0.501583	0.857903
176	C	0.857867	0.00158284	0.857903
177	C	0.857867	0.501583	0.857903
178	C	0.251583	0.357867	0.607922
179	C	0.251583	0.857867	0.607922
180	C	0.751583	0.357867	0.607922
181	C	0.751583	0.857867	0.607922
182	C	0.248417	0.142133	0.607922
183	C	0.248417	0.642133	0.607922
184	C	0.748417	0.142133	0.607922
185	C	0.748417	0.642133	0.607922
186	C	0.357867	0.248417	0.392078
187	C	0.357867	0.748417	0.392078
188	C	0.857867	0.248417	0.392078
189	C	0.857867	0.748417	0.392078
190	C	0.142133	0.251583	0.392078
191	C	0.142133	0.751583	0.392078
192	C	0.642133	0.251583	0.392078
193	C	0.642133	0.751583	0.392078
194	C	0.498417	0.357867	0.142097
195	C	0.498417	0.857867	0.142097
196	C	0.00158284	0.142133	0.142097
197	C	0.00158284	0.642133	0.142097
198	C	0.501583	0.142133	0.142097
199	C	0.501583	0.642133	0.142097
200	C	0.392133	0.248417	0.357903
201	C	0.392133	0.748417	0.357903

202	C	0.892133	0.248417	0.357903
203	C	0.892133	0.748417	0.357903
204	C	0.107867	0.251583	0.357903
205	C	0.107867	0.751583	0.357903
206	C	0.607867	0.251583	0.357903
207	C	0.607867	0.751583	0.357903
208	C	0.0343827	0.0996307	0.0778311
209	C	0.0343827	0.599631	0.0778311
210	C	0.534383	0.0996307	0.0778311
211	C	0.534383	0.599631	0.0778311
212	C	0.465617	0.400369	0.0778311
213	C	0.465617	0.900369	0.0778311
214	C	0.0996307	0.465617	0.922169
215	C	0.599631	0.465617	0.922169
216	C	0.400369	0.0343827	0.922169
217	C	0.400369	0.534383	0.922169
218	C	0.900369	0.0343827	0.922169
219	C	0.900369	0.534383	0.922169
220	C	0.215617	0.0996307	0.672188
221	C	0.215617	0.599631	0.672188
222	C	0.715617	0.0996307	0.672188
223	C	0.715617	0.599631	0.672188
224	C	0.284383	0.400369	0.672188
225	C	0.284383	0.900369	0.672188
226	C	0.784383	0.400369	0.672188
227	C	0.784383	0.900369	0.672188
228	C	0.150369	0.465617	0.827812
229	C	0.650369	0.465617	0.827812
230	C	0.349631	0.0343827	0.827812
231	C	0.349631	0.534383	0.827812
232	C	0.849631	0.0343827	0.827812
233	C	0.849631	0.534383	0.827812
234	C	0.284383	0.349631	0.577831
235	C	0.284383	0.849631	0.577831
236	C	0.784383	0.349631	0.577831
237	C	0.784383	0.849631	0.577831
238	C	0.215617	0.150369	0.577831
239	C	0.215617	0.650369	0.577831
240	C	0.715617	0.150369	0.577831
241	C	0.715617	0.650369	0.577831
242	C	0.349631	0.215617	0.422169
243	C	0.349631	0.715617	0.422169
244	C	0.849631	0.215617	0.422169
245	C	0.849631	0.715617	0.422169
246	C	0.150369	0.284383	0.422169
247	C	0.150369	0.784383	0.422169
248	C	0.650369	0.284383	0.422169
249	C	0.650369	0.784383	0.422169
250	C	0.465617	0.349631	0.172188
251	C	0.465617	0.849631	0.172188
252	C	0.0343827	0.150369	0.172188
253	C	0.0343827	0.650369	0.172188
254	C	0.534383	0.150369	0.172188
255	C	0.534383	0.650369	0.172188
256	C	0.400369	0.215617	0.327812
257	C	0.400369	0.715617	0.327812
258	C	0.900369	0.215617	0.327812
259	C	0.900369	0.715617	0.327812
260	C	0.0996307	0.284383	0.327812
261	C	0.0996307	0.784383	0.327812

262	C	0.599631	0.284383	0.327812
263	C	0.599631	0.784383	0.327812
264	C	0.0340896	0.0675929	0.0451922
265	C	0.0340896	0.567593	0.0451922
266	C	0.53409	0.0675929	0.0451922
267	C	0.53409	0.567593	0.0451922
268	C	0.46591	0.432407	0.0451922
269	C	0.46591	0.932407	0.0451922
270	C	0.0675929	0.46591	0.954808
271	C	0.567593	0.46591	0.954808
272	C	0.432407	0.0340896	0.954808
273	C	0.432407	0.53409	0.954808
274	C	0.932407	0.0340896	0.954808
275	C	0.932407	0.53409	0.954808
276	C	0.21591	0.0675929	0.704827
277	C	0.21591	0.567593	0.704827
278	C	0.71591	0.0675929	0.704827
279	C	0.71591	0.567593	0.704827
280	C	0.28409	0.432407	0.704827
281	C	0.28409	0.932407	0.704827
282	C	0.78409	0.432407	0.704827
283	C	0.78409	0.932407	0.704827
284	C	0.182407	0.46591	0.795173
285	C	0.682407	0.46591	0.795173
286	C	0.317593	0.0340896	0.795173
287	C	0.317593	0.53409	0.795173
288	C	0.817593	0.0340896	0.795173
289	C	0.817593	0.53409	0.795173
290	C	0.28409	0.317593	0.545192
291	C	0.28409	0.817593	0.545192
292	C	0.78409	0.317593	0.545192
293	C	0.78409	0.817593	0.545192
294	C	0.21591	0.182407	0.545192
295	C	0.21591	0.682407	0.545192
296	C	0.71591	0.182407	0.545192
297	C	0.71591	0.682407	0.545192
298	C	0.317593	0.21591	0.454808
299	C	0.317593	0.71591	0.454808
300	C	0.817593	0.21591	0.454808
301	C	0.817593	0.71591	0.454808
302	C	0.182407	0.28409	0.454808
303	C	0.182407	0.78409	0.454808
304	C	0.682407	0.28409	0.454808
305	C	0.682407	0.78409	0.454808
306	C	0.46591	0.317593	0.204827
307	C	0.46591	0.817593	0.204827
308	C	0.0340896	0.182407	0.204827
309	C	0.0340896	0.682407	0.204827
310	C	0.53409	0.182407	0.204827
311	C	0.53409	0.682407	0.204827
312	C	0.432407	0.21591	0.295173
313	C	0.432407	0.71591	0.295173
314	C	0.932407	0.21591	0.295173
315	C	0.932407	0.71591	0.295173
316	C	0.0675929	0.28409	0.295173
317	C	0.0675929	0.78409	0.295173
318	C	0.567593	0.28409	0.295173
319	C	0.567593	0.78409	0.295173
320	H	0.443194	0.0319205	0.0719478
321	H	0.443194	0.531921	0.0719478

322	H	0.556806	0.468079	0.0719478
323	H	0.556806	0.968079	0.0719478
324	H	0.0319205	0.556806	0.928052
325	H	0.531921	0.556806	0.928052
326	H	0.468079	0.443194	0.928052
327	H	0.968079	0.443194	0.928052
328	H	0.306806	0.0319205	0.678071
329	H	0.306806	0.531921	0.678071
330	H	0.806806	0.0319205	0.678071
331	H	0.806806	0.531921	0.678071
332	H	0.193194	0.468079	0.678071
333	H	0.193194	0.968079	0.678071
334	H	0.693194	0.468079	0.678071
335	H	0.693194	0.968079	0.678071
336	H	0.218079	0.556806	0.821929
337	H	0.718079	0.556806	0.821929
338	H	0.281921	0.443194	0.821929
339	H	0.781921	0.443194	0.821929
340	H	0.193194	0.281921	0.571948
341	H	0.193194	0.781921	0.571948
342	H	0.693194	0.281921	0.571948
343	H	0.693194	0.781921	0.571948
344	H	0.306806	0.218079	0.571948
345	H	0.306806	0.718079	0.571948
346	H	0.806806	0.218079	0.571948
347	H	0.806806	0.718079	0.571948
348	H	0.281921	0.306806	0.428052
349	H	0.281921	0.806806	0.428052
350	H	0.781921	0.306806	0.428052
351	H	0.781921	0.806806	0.428052
352	H	0.218079	0.193194	0.428052
353	H	0.218079	0.693194	0.428052
354	H	0.718079	0.193194	0.428052
355	H	0.718079	0.693194	0.428052
356	H	0.556806	0.281921	0.178071
357	H	0.556806	0.781921	0.178071
358	H	0.443194	0.218079	0.178071
359	H	0.443194	0.718079	0.178071
360	H	0.468079	0.306806	0.321929
361	H	0.468079	0.806806	0.321929
362	H	0.968079	0.306806	0.321929
363	H	0.968079	0.806806	0.321929
364	H	0.0319205	0.193194	0.321929
365	H	0.0319205	0.693194	0.321929
366	H	0.531921	0.193194	0.321929
367	H	0.531921	0.693194	0.321929
368	H	0.44334	0.0884336	0.128644
369	H	0.44334	0.588434	0.128644
370	H	0.55666	0.411566	0.128644
371	H	0.55666	0.911566	0.128644
372	H	0.0884336	0.55666	0.871356
373	H	0.588434	0.55666	0.871356
374	H	0.411566	0.44334	0.871356
375	H	0.911566	0.44334	0.871356
376	H	0.30666	0.0884336	0.621337
377	H	0.30666	0.588434	0.621337
378	H	0.80666	0.0884336	0.621337
379	H	0.80666	0.588434	0.621337
380	H	0.19334	0.411566	0.621337
381	H	0.19334	0.911566	0.621337

382	H	0.69334	0.411566	0.621337
383	H	0.69334	0.911566	0.621337
384	H	0.161566	0.55666	0.878663
385	H	0.661566	0.55666	0.878663
386	H	0.338434	0.44334	0.878663
387	H	0.838434	0.44334	0.878663
388	H	0.19334	0.338434	0.628644
389	H	0.19334	0.838434	0.628644
390	H	0.69334	0.338434	0.628644
391	H	0.69334	0.838434	0.628644
392	H	0.30666	0.161566	0.628644
393	H	0.30666	0.661566	0.628644
394	H	0.80666	0.161566	0.628644
395	H	0.80666	0.661566	0.628644
396	H	0.338434	0.30666	0.371356
397	H	0.338434	0.80666	0.371356
398	H	0.838434	0.30666	0.371356
399	H	0.838434	0.80666	0.371356
400	H	0.161566	0.19334	0.371356
401	H	0.161566	0.69334	0.371356
402	H	0.661566	0.19334	0.371356
403	H	0.661566	0.69334	0.371356
404	H	0.55666	0.338434	0.121337
405	H	0.55666	0.838434	0.121337
406	H	0.44334	0.161566	0.121337
407	H	0.44334	0.661566	0.121337
408	H	0.411566	0.30666	0.378663
409	H	0.411566	0.80666	0.378663
410	H	0.911566	0.30666	0.378663
411	H	0.911566	0.80666	0.378663
412	H	0.0884336	0.19334	0.378663
413	H	0.0884336	0.69334	0.378663
414	H	0.588434	0.19334	0.378663
415	H	0.588434	0.69334	0.378663
416	H	0.0600598	0.118273	0.0791051
417	H	0.0600598	0.618273	0.0791051
418	H	0.56006	0.118273	0.0791051
419	H	0.56006	0.618273	0.0791051
420	H	0.43994	0.381727	0.0791051
421	H	0.43994	0.881727	0.0791051
422	H	0.118273	0.43994	0.920895
423	H	0.618273	0.43994	0.920895
424	H	0.381727	0.0600598	0.920895
425	H	0.381727	0.56006	0.920895
426	H	0.881727	0.0600598	0.920895
427	H	0.881727	0.56006	0.920895
428	H	0.18994	0.118273	0.670876
429	H	0.18994	0.618273	0.670876
430	H	0.68994	0.118273	0.670876
431	H	0.68994	0.618273	0.670876
432	H	0.31006	0.381727	0.670876
433	H	0.31006	0.881727	0.670876
434	H	0.81006	0.381727	0.670876
435	H	0.81006	0.881727	0.670876
436	H	0.131727	0.43994	0.829124
437	H	0.631727	0.43994	0.829124
438	H	0.368273	0.0600598	0.829124
439	H	0.368273	0.56006	0.829124
440	H	0.868273	0.0600598	0.829124
441	H	0.868273	0.56006	0.829124

442	H	0.31006	0.368273	0.579105
443	H	0.31006	0.868273	0.579105
444	H	0.81006	0.368273	0.579105
445	H	0.81006	0.868273	0.579105
446	H	0.18994	0.131727	0.579105
447	H	0.18994	0.631727	0.579105
448	H	0.68994	0.131727	0.579105
449	H	0.68994	0.631727	0.579105
450	H	0.368273	0.18994	0.420895
451	H	0.368273	0.68994	0.420895
452	H	0.868273	0.18994	0.420895
453	H	0.868273	0.68994	0.420895
454	H	0.131727	0.31006	0.420895
455	H	0.131727	0.81006	0.420895
456	H	0.631727	0.31006	0.420895
457	H	0.631727	0.81006	0.420895
458	H	0.43994	0.368273	0.170876
459	H	0.43994	0.868273	0.170876
460	H	0.0600598	0.131727	0.170876
461	H	0.0600598	0.631727	0.170876
462	H	0.56006	0.131727	0.170876
463	H	0.56006	0.631727	0.170876
464	H	0.381727	0.18994	0.329124
465	H	0.381727	0.68994	0.329124
466	H	0.881727	0.18994	0.329124
467	H	0.881727	0.68994	0.329124
468	H	0.118273	0.31006	0.329124
469	H	0.118273	0.81006	0.329124
470	H	0.618273	0.31006	0.329124
471	H	0.618273	0.81006	0.329124
472	H	0.0598253	0.0617599	0.022746
473	H	0.0598253	0.56176	0.022746
474	H	0.559825	0.0617599	0.022746
475	H	0.559825	0.56176	0.022746
476	H	0.440175	0.43824	0.022746
477	H	0.440175	0.93824	0.022746
478	H	0.0617599	0.440175	0.977254
479	H	0.56176	0.440175	0.977254
480	H	0.43824	0.0598253	0.977254
481	H	0.43824	0.559825	0.977254
482	H	0.93824	0.0598253	0.977254
483	H	0.93824	0.559825	0.977254
484	H	0.190175	0.0617599	0.727235
485	H	0.190175	0.56176	0.727235
486	H	0.690175	0.0617599	0.727235
487	H	0.690175	0.56176	0.727235
488	H	0.309825	0.43824	0.727235
489	H	0.309825	0.93824	0.727235
490	H	0.809825	0.43824	0.727235
491	H	0.809825	0.93824	0.727235
492	H	0.18824	0.440175	0.772765
493	H	0.68824	0.440175	0.772765
494	H	0.31176	0.0598253	0.772765
495	H	0.31176	0.559825	0.772765
496	H	0.81176	0.0598253	0.772765
497	H	0.81176	0.559825	0.772765
498	H	0.309825	0.31176	0.522746
499	H	0.309825	0.81176	0.522746
500	H	0.809825	0.31176	0.522746
501	H	0.809825	0.81176	0.522746



502	H	0.190175	0.18824	0.522746
503	H	0.190175	0.68824	0.522746
504	H	0.690175	0.18824	0.522746
505	H	0.690175	0.68824	0.522746
506	H	0.31176	0.190175	0.477254
507	H	0.31176	0.690175	0.477254
508	H	0.81176	0.190175	0.477254
509	H	0.81176	0.690175	0.477254
510	H	0.18824	0.309825	0.477254
511	H	0.18824	0.809825	0.477254
512	H	0.68824	0.309825	0.477254
513	H	0.68824	0.809825	0.477254
514	H	0.440175	0.31176	0.227235
515	H	0.440175	0.81176	0.227235
516	H	0.0598253	0.18824	0.227235
517	H	0.0598253	0.68824	0.227235
518	H	0.559825	0.18824	0.227235
519	H	0.559825	0.68824	0.227235
520	H	0.43824	0.190175	0.272765
521	H	0.43824	0.690175	0.272765
522	H	0.93824	0.190175	0.272765
523	H	0.93824	0.690175	0.272765
524	H	0.0617599	0.309825	0.272765
525	H	0.0617599	0.809825	0.272765
526	H	0.56176	0.309825	0.272765
527	H	0.56176	0.809825	0.272765
528	Ge	0	0	0
529	Ge	1	0.5	0
530	Ge	0.5	0	0
531	Ge	0.5	0.5	0
532	Ge	0.25	1	0.749981
533	Ge	0.25	0.5	0.749981
534	Ge	0.75	1	0.749981
535	Ge	0.75	0.5	0.749981
536	Ge	0.25	0.25	0.5
537	Ge	0.25	0.75	0.5
538	Ge	0.75	0.25	0.5
539	Ge	0.75	0.75	0.5
540	Ge	1	0.25	0.249981
541	Ge	1	0.75	0.249981
542	Ge	0.5	0.25	0.249981
543	Ge	0.5	0.75	0.249981
544	C	0.998974	0.456707	0.0422319
545	C	0.998974	0.293293	0.207787
546	C	0.998417	0.392133	0.107922
547	C	0.998417	0.357867	0.142097
548	C	0.965617	0.400369	0.0778311
549	C	0.965617	0.349631	0.172188
550	C	0.96591	0.432407	0.0451922
551	C	0.96591	0.317593	0.204827
552	H	0.93994	0.381727	0.0791051
553	H	0.93994	0.368273	0.170876
554	H	0.940175	0.43824	0.022746
555	H	0.940175	0.31176	0.227235
556	C	0.998974	0.956707	0.0422319
557	C	0.998974	0.793293	0.207787
558	C	0.998417	0.892133	0.107922
559	C	0.998417	0.857867	0.142097
560	C	0.965617	0.900369	0.0778311
561	C	0.965617	0.849631	0.172188

562	C	0.96591	0.932407	0.0451922
563	C	0.96591	0.817593	0.204827
564	H	0.93994	0.881727	0.0791051
565	H	0.93994	0.868273	0.170876
566	H	0.940175	0.93824	0.022746
567	H	0.940175	0.81176	0.227235
568	C	0.0432935	0.998974	0.957768
569	C	0.206707	0.998974	0.792213
570	C	0.107867	0.998417	0.892078
571	C	0.142133	0.998417	0.857903
572	C	0.0996307	0.965617	0.922169
573	C	0.150369	0.965617	0.827812
574	C	0.0675929	0.96591	0.954808
575	C	0.182407	0.96591	0.795173
576	H	0.118273	0.93994	0.920895
577	H	0.131727	0.93994	0.829124
578	H	0.0617599	0.940175	0.977254
579	H	0.18824	0.940175	0.772765
580	C	0.543293	0.998974	0.957768
581	C	0.706707	0.998974	0.792213
582	C	0.607867	0.998417	0.892078
583	C	0.642133	0.998417	0.857903
584	C	0.599631	0.965617	0.922169
585	C	0.650369	0.965617	0.827812
586	C	0.567593	0.96591	0.954808
587	C	0.682407	0.96591	0.795173
588	H	0.618273	0.93994	0.920895
589	H	0.631727	0.93994	0.829124
590	H	0.56176	0.940175	0.977254
591	H	0.68824	0.940175	0.772765
592	C	0.968666	0.0508559	0.0730345
593	C	0.968754	0.0831282	0.105261
594	H	0.943194	0.0319205	0.0719478
595	H	0.94334	0.0884336	0.128644
596	C	0.968666	0.550856	0.0730345
597	C	0.968754	0.583128	0.105261
598	H	0.943194	0.531921	0.0719478
599	H	0.94334	0.588434	0.128644
600	C	0.0313343	0.449144	0.0730345
601	C	0.0312463	0.416872	0.105261
602	H	0.0568062	0.468079	0.0719478
603	H	0.0566596	0.411566	0.128644
604	C	0.0313343	0.949144	0.0730345
605	C	0.0312463	0.916872	0.105261
606	H	0.0568062	0.968079	0.0719478
607	H	0.0566596	0.911566	0.128644
608	C	0.0508559	0.0313343	0.926965
609	C	0.0831282	0.0312463	0.894739
610	H	0.0319205	0.0568062	0.928052
611	H	0.0884336	0.0566596	0.871356
612	C	0.550856	0.0313343	0.926965
613	C	0.583128	0.0312463	0.894739
614	H	0.531921	0.0568062	0.928052
615	H	0.588434	0.0566596	0.871356
616	C	0.449144	0.968666	0.926965
617	C	0.416872	0.968754	0.894739
618	H	0.468079	0.943194	0.928052
619	H	0.411566	0.94334	0.871356
620	C	0.949144	0.968666	0.926965
621	C	0.916872	0.968754	0.894739

622	H	0.968079	0.943194	0.928052
623	H	0.911566	0.94334	0.871356
624	C	0.199144	0.0313343	0.823053
625	C	0.166872	0.0312463	0.85528
626	H	0.218079	0.0568062	0.821929
627	H	0.161566	0.0566596	0.878663
628	C	0.699144	0.0313343	0.823053
629	C	0.666872	0.0312463	0.85528
630	H	0.718079	0.0568062	0.821929
631	H	0.661566	0.0566596	0.878663
632	C	0.300856	0.968666	0.823053
633	C	0.333128	0.968754	0.85528
634	H	0.281921	0.943194	0.821929
635	H	0.338434	0.94334	0.878663
636	C	0.800856	0.968666	0.823053
637	C	0.833128	0.968754	0.85528
638	H	0.781921	0.943194	0.821929
639	H	0.838434	0.94334	0.878663
640	C	0.0313343	0.300856	0.176947
641	C	0.0312463	0.333128	0.14472
642	H	0.0568062	0.281921	0.178071
643	H	0.0566596	0.338434	0.121337
644	C	0.0313343	0.800856	0.176947
645	C	0.0312463	0.833128	0.14472
646	H	0.0568062	0.781921	0.178071
647	H	0.0566596	0.838434	0.121337
648	C	0.968666	0.199144	0.176947
649	C	0.968754	0.166872	0.14472
650	H	0.943194	0.218079	0.178071
651	H	0.94334	0.161566	0.121337
652	C	0.968666	0.699144	0.176947
653	C	0.968754	0.666872	0.14472
654	H	0.943194	0.718079	0.178071
655	H	0.94334	0.661566	0.121337

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# annalyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_DIA\_2-fold-PPN-5.cif

```

_cell_length_a      34.822(0)
_cell_length_b      34.822(0)
_cell_length_c      26.645(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number          1
_stmmetry_cell_setting               Tetragonal

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

```

loop_	_atom_site_label	_atom_site_type_symbol	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z
0	C		0.000947677	0.0441675	0.0435729
1	C		0.000947677	0.544167	0.0435729
2	C		0.500948	0.0441675	0.0435729
3	C		0.500948	0.544167	0.0435729
4	C		0.499052	0.455833	0.0435729
5	C		0.499052	0.955833	0.0435729
6	C		0.0441675	0.499052	0.956427
7	C		0.544167	0.499052	0.956427
8	C		0.455833	0.000947677	0.956427
9	C		0.455833	0.500948	0.956427
10	C		0.955833	0.000947677	0.956427
11	C		0.955833	0.500948	0.956427
12	C		0.249067	0.0441675	0.706436
13	C		0.249067	0.544167	0.706436
14	C		0.749067	0.0441675	0.706436
15	C		0.749067	0.544167	0.706436
16	C		0.250933	0.455833	0.706436
17	C		0.250933	0.955833	0.706436
18	C		0.750933	0.455833	0.706436
19	C		0.750933	0.955833	0.706436
20	C		0.205818	0.499052	0.793545
21	C		0.705818	0.499052	0.793545
22	C		0.294182	0.000947677	0.793545
23	C		0.294182	0.500948	0.793545
24	C		0.794182	0.000947677	0.793545
25	C		0.794182	0.500948	0.793545
26	C		0.250933	0.294182	0.543554
27	C		0.250933	0.794182	0.543554
28	C		0.750933	0.294182	0.543554
29	C		0.750933	0.794182	0.543554
30	C		0.249067	0.205818	0.543554
31	C		0.249067	0.705818	0.543554
32	C		0.749067	0.205818	0.543554
33	C		0.749067	0.705818	0.543554
34	C		0.294182	0.249067	0.456446
35	C		0.294182	0.749067	0.456446
36	C		0.794182	0.249067	0.456446
37	C		0.794182	0.749067	0.456446
38	C		0.205818	0.250933	0.456446
39	C		0.205818	0.750933	0.456446
40	C		0.705818	0.250933	0.456446
41	C		0.705818	0.750933	0.456446
42	C		0.499052	0.294182	0.206455
43	C		0.499052	0.794182	0.206455
44	C		0.000947677	0.205818	0.206455
45	C		0.000947677	0.705818	0.206455
46	C		0.500948	0.205818	0.206455
47	C		0.500948	0.705818	0.206455
48	C		0.455833	0.249067	0.293564
49	C		0.455833	0.749067	0.293564
50	C		0.955833	0.249067	0.293564
51	C		0.955833	0.749067	0.293564
52	C		0.0441675	0.250933	0.293564
53	C		0.0441675	0.750933	0.293564

54	C	0.544167	0.250933	0.293564
55	C	0.544167	0.750933	0.293564
56	C	0.469215	0.0518638	0.0741978
57	C	0.469215	0.551864	0.0741978
58	C	0.530785	0.448136	0.0741978
59	C	0.530785	0.948136	0.0741978
60	C	0.0518638	0.530785	0.925802
61	C	0.551864	0.530785	0.925802
62	C	0.448136	0.469215	0.925802
63	C	0.948136	0.469215	0.925802
64	C	0.280771	0.0518638	0.675812
65	C	0.280771	0.551864	0.675812
66	C	0.780771	0.0518638	0.675812
67	C	0.780771	0.551864	0.675812
68	C	0.219229	0.448136	0.675812
69	C	0.219229	0.948136	0.675812
70	C	0.719229	0.448136	0.675812
71	C	0.719229	0.948136	0.675812
72	C	0.198151	0.530785	0.82417
73	C	0.698151	0.530785	0.82417
74	C	0.301849	0.469215	0.82417
75	C	0.801849	0.469215	0.82417
76	C	0.219229	0.301849	0.574179
77	C	0.219229	0.801849	0.574179
78	C	0.719229	0.301849	0.574179
79	C	0.719229	0.801849	0.574179
80	C	0.280771	0.198151	0.574179
81	C	0.280771	0.698151	0.574179
82	C	0.780771	0.198151	0.574179
83	C	0.780771	0.698151	0.574179
84	C	0.301849	0.280771	0.425821
85	C	0.301849	0.780771	0.425821
86	C	0.801849	0.280771	0.425821
87	C	0.801849	0.780771	0.425821
88	C	0.198151	0.219229	0.425821
89	C	0.198151	0.719229	0.425821
90	C	0.698151	0.219229	0.425821
91	C	0.698151	0.719229	0.425821
92	C	0.530785	0.301849	0.17583
93	C	0.530785	0.801849	0.17583
94	C	0.469215	0.198151	0.17583
95	C	0.469215	0.698151	0.17583
96	C	0.448136	0.280771	0.324188
97	C	0.448136	0.780771	0.324188
98	C	0.948136	0.280771	0.324188
99	C	0.948136	0.780771	0.324188
100	C	0.0518638	0.219229	0.324188
101	C	0.0518638	0.719229	0.324188
102	C	0.551864	0.219229	0.324188
103	C	0.551864	0.719229	0.324188
104	C	0.469272	0.0837402	0.105949
105	C	0.469272	0.58374	0.105949
106	C	0.530728	0.41626	0.105949
107	C	0.530728	0.91626	0.105949
108	C	0.0837402	0.530728	0.894051
109	C	0.58374	0.530728	0.894051
110	C	0.41626	0.469272	0.894051
111	C	0.91626	0.469272	0.894051
112	C	0.280713	0.0837402	0.644061
113	C	0.280713	0.58374	0.644061

114	C	0.780713	0.0837402	0.644061
115	C	0.780713	0.58374	0.644061
116	C	0.219287	0.41626	0.644061
117	C	0.219287	0.91626	0.644061
118	C	0.719287	0.41626	0.644061
119	C	0.719287	0.91626	0.644061
120	C	0.166245	0.530728	0.855958
121	C	0.666245	0.530728	0.855958
122	C	0.333755	0.469272	0.855958
123	C	0.833755	0.469272	0.855958
124	C	0.219287	0.333755	0.605967
125	C	0.219287	0.833755	0.605967
126	C	0.719287	0.333755	0.605967
127	C	0.719287	0.833755	0.605967
128	C	0.280713	0.166245	0.605967
129	C	0.280713	0.666245	0.605967
130	C	0.780713	0.166245	0.605967
131	C	0.780713	0.666245	0.605967
132	C	0.333755	0.280713	0.394033
133	C	0.333755	0.780713	0.394033
134	C	0.833755	0.280713	0.394033
135	C	0.833755	0.780713	0.394033
136	C	0.166245	0.219287	0.394033
137	C	0.166245	0.719287	0.394033
138	C	0.666245	0.219287	0.394033
139	C	0.666245	0.719287	0.394033
140	C	0.530728	0.333755	0.144042
141	C	0.530728	0.833755	0.144042
142	C	0.469272	0.166245	0.144042
143	C	0.469272	0.666245	0.144042
144	C	0.41626	0.280713	0.355939
145	C	0.41626	0.780713	0.355939
146	C	0.91626	0.280713	0.355939
147	C	0.91626	0.780713	0.355939
148	C	0.0837402	0.219287	0.355939
149	C	0.0837402	0.719287	0.355939
150	C	0.58374	0.219287	0.355939
151	C	0.58374	0.719287	0.355939
152	C	0.00146459	0.108064	0.108163
153	C	0.00146459	0.608064	0.108163
154	C	0.501465	0.108064	0.108163
155	C	0.501465	0.608064	0.108163
156	C	0.498535	0.391936	0.108163
157	C	0.498535	0.891936	0.108163
158	C	0.108064	0.498535	0.891837
159	C	0.608064	0.498535	0.891837
160	C	0.391936	0.00146459	0.891837
161	C	0.391936	0.501465	0.891837
162	C	0.891936	0.00146459	0.891837
163	C	0.891936	0.501465	0.891837
164	C	0.24855	0.108064	0.641809
165	C	0.24855	0.608064	0.641809
166	C	0.74855	0.108064	0.641809
167	C	0.74855	0.608064	0.641809
168	C	0.25145	0.391936	0.641809
169	C	0.25145	0.891936	0.641809
170	C	0.75145	0.391936	0.641809
171	C	0.75145	0.891936	0.641809
172	C	0.14195	0.498535	0.858172
173	C	0.64195	0.498535	0.858172

174	C	0.35805	0.00146459	0.858172
175	C	0.35805	0.501465	0.858172
176	C	0.85805	0.00146459	0.858172
177	C	0.85805	0.501465	0.858172
178	C	0.25145	0.35805	0.608182
179	C	0.25145	0.85805	0.608182
180	C	0.75145	0.35805	0.608182
181	C	0.75145	0.85805	0.608182
182	C	0.24855	0.14195	0.608182
183	C	0.24855	0.64195	0.608182
184	C	0.74855	0.14195	0.608182
185	C	0.74855	0.64195	0.608182
186	C	0.35805	0.24855	0.391818
187	C	0.35805	0.74855	0.391818
188	C	0.85805	0.24855	0.391818
189	C	0.85805	0.74855	0.391818
190	C	0.14195	0.25145	0.391818
191	C	0.14195	0.75145	0.391818
192	C	0.64195	0.25145	0.391818
193	C	0.64195	0.75145	0.391818
194	C	0.498535	0.35805	0.141828
195	C	0.498535	0.85805	0.141828
196	C	0.00146459	0.14195	0.141828
197	C	0.00146459	0.64195	0.141828
198	C	0.501465	0.14195	0.141828
199	C	0.501465	0.64195	0.141828
200	C	0.391936	0.24855	0.358191
201	C	0.391936	0.74855	0.358191
202	C	0.891936	0.24855	0.358191
203	C	0.891936	0.74855	0.358191
204	C	0.108064	0.25145	0.358191
205	C	0.108064	0.75145	0.358191
206	C	0.608064	0.25145	0.358191
207	C	0.608064	0.75145	0.358191
208	C	0.0335707	0.0997645	0.0780634
209	C	0.0335707	0.599765	0.0780634
210	C	0.533571	0.0997645	0.0780634
211	C	0.533571	0.599765	0.0780634
212	C	0.466429	0.400235	0.0780634
213	C	0.466429	0.900235	0.0780634
214	C	0.0997645	0.466429	0.921937
215	C	0.599765	0.466429	0.921937
216	C	0.400235	0.0335707	0.921937
217	C	0.400235	0.533571	0.921937
218	C	0.900235	0.0335707	0.921937
219	C	0.900235	0.533571	0.921937
220	C	0.216444	0.0997645	0.671946
221	C	0.216444	0.599765	0.671946
222	C	0.716444	0.0997645	0.671946
223	C	0.716444	0.599765	0.671946
224	C	0.283556	0.400235	0.671946
225	C	0.283556	0.900235	0.671946
226	C	0.783556	0.400235	0.671946
227	C	0.783556	0.900235	0.671946
228	C	0.15025	0.466429	0.828073
229	C	0.65025	0.466429	0.828073
230	C	0.34975	0.0335707	0.828073
231	C	0.34975	0.533571	0.828073
232	C	0.84975	0.0335707	0.828073
233	C	0.84975	0.533571	0.828073

234	C	0.283556	0.34975	0.578082
235	C	0.283556	0.84975	0.578082
236	C	0.783556	0.34975	0.578082
237	C	0.783556	0.84975	0.578082
238	C	0.216444	0.15025	0.578082
239	C	0.216444	0.65025	0.578082
240	C	0.716444	0.15025	0.578082
241	C	0.716444	0.65025	0.578082
242	C	0.34975	0.216444	0.421918
243	C	0.34975	0.716444	0.421918
244	C	0.84975	0.216444	0.421918
245	C	0.84975	0.716444	0.421918
246	C	0.15025	0.283556	0.421918
247	C	0.15025	0.783556	0.421918
248	C	0.65025	0.283556	0.421918
249	C	0.65025	0.783556	0.421918
250	C	0.466429	0.34975	0.171927
251	C	0.466429	0.84975	0.171927
252	C	0.0335707	0.15025	0.171927
253	C	0.0335707	0.65025	0.171927
254	C	0.533571	0.15025	0.171927
255	C	0.533571	0.65025	0.171927
256	C	0.400235	0.216444	0.328054
257	C	0.400235	0.716444	0.328054
258	C	0.900235	0.216444	0.328054
259	C	0.900235	0.716444	0.328054
260	C	0.0997645	0.283556	0.328054
261	C	0.0997645	0.783556	0.328054
262	C	0.599765	0.283556	0.328054
263	C	0.599765	0.783556	0.328054
264	C	0.0332548	0.0680317	0.0458998
265	C	0.0332548	0.568032	0.0458998
266	C	0.533255	0.0680317	0.0458998
267	C	0.533255	0.568032	0.0458998
268	C	0.466745	0.431968	0.0458998
269	C	0.466745	0.931968	0.0458998
270	C	0.0680317	0.466745	0.9541
271	C	0.568032	0.466745	0.9541
272	C	0.431968	0.0332548	0.9541
273	C	0.431968	0.533255	0.9541
274	C	0.931968	0.0332548	0.9541
275	C	0.931968	0.533255	0.9541
276	C	0.21676	0.0680317	0.70411
277	C	0.21676	0.568032	0.70411
278	C	0.71676	0.0680317	0.70411
279	C	0.71676	0.568032	0.70411
280	C	0.28324	0.431968	0.70411
281	C	0.28324	0.931968	0.70411
282	C	0.78324	0.431968	0.70411
283	C	0.78324	0.931968	0.70411
284	C	0.181954	0.466745	0.795872
285	C	0.681954	0.466745	0.795872
286	C	0.318046	0.0332548	0.795872
287	C	0.318046	0.533255	0.795872
288	C	0.818046	0.0332548	0.795872
289	C	0.818046	0.533255	0.795872
290	C	0.28324	0.318046	0.545881
291	C	0.28324	0.818046	0.545881
292	C	0.78324	0.318046	0.545881
293	C	0.78324	0.818046	0.545881



294	C	0.21676	0.181954	0.545881
295	C	0.21676	0.681954	0.545881
296	C	0.71676	0.181954	0.545881
297	C	0.71676	0.681954	0.545881
298	C	0.318046	0.21676	0.454119
299	C	0.318046	0.71676	0.454119
300	C	0.818046	0.21676	0.454119
301	C	0.818046	0.71676	0.454119
302	C	0.181954	0.28324	0.454119
303	C	0.181954	0.78324	0.454119
304	C	0.681954	0.28324	0.454119
305	C	0.681954	0.78324	0.454119
306	C	0.466745	0.318046	0.204128
307	C	0.466745	0.818046	0.204128
308	C	0.0332548	0.181954	0.204128
309	C	0.0332548	0.681954	0.204128
310	C	0.533255	0.181954	0.204128
311	C	0.533255	0.681954	0.204128
312	C	0.431968	0.21676	0.29589
313	C	0.431968	0.71676	0.29589
314	C	0.931968	0.21676	0.29589
315	C	0.931968	0.71676	0.29589
316	C	0.0680317	0.28324	0.29589
317	C	0.0680317	0.78324	0.29589
318	C	0.568032	0.28324	0.29589
319	C	0.568032	0.78324	0.29589
320	H	0.444346	0.0332261	0.0731845
321	H	0.444346	0.533226	0.0731845
322	H	0.555654	0.466774	0.0731845
323	H	0.555654	0.966774	0.0731845
324	H	0.0332261	0.555654	0.926816
325	H	0.533226	0.555654	0.926816
326	H	0.466774	0.444346	0.926816
327	H	0.966774	0.444346	0.926816
328	H	0.305669	0.0332261	0.676825
329	H	0.305669	0.533226	0.676825
330	H	0.805669	0.0332261	0.676825
331	H	0.805669	0.533226	0.676825
332	H	0.194331	0.466774	0.676825
333	H	0.194331	0.966774	0.676825
334	H	0.694331	0.466774	0.676825
335	H	0.694331	0.966774	0.676825
336	H	0.216788	0.555654	0.823194
337	H	0.716788	0.555654	0.823194
338	H	0.283212	0.444346	0.823194
339	H	0.783212	0.444346	0.823194
340	H	0.194331	0.283212	0.573166
341	H	0.194331	0.783212	0.573166
342	H	0.694331	0.283212	0.573166
343	H	0.694331	0.783212	0.573166
344	H	0.305669	0.216788	0.573166
345	H	0.305669	0.716788	0.573166
346	H	0.805669	0.216788	0.573166
347	H	0.805669	0.716788	0.573166
348	H	0.283212	0.305669	0.426834
349	H	0.283212	0.805669	0.426834
350	H	0.783212	0.305669	0.426834
351	H	0.783212	0.805669	0.426834
352	H	0.216788	0.194331	0.426834
353	H	0.216788	0.694331	0.426834

354	H	0.716788	0.194331	0.426834
355	H	0.716788	0.694331	0.426834
356	H	0.555654	0.283212	0.176806
357	H	0.555654	0.783212	0.176806
358	H	0.444346	0.216788	0.176806
359	H	0.444346	0.716788	0.176806
360	H	0.466774	0.305669	0.323175
361	H	0.466774	0.805669	0.323175
362	H	0.966774	0.305669	0.323175
363	H	0.966774	0.805669	0.323175
364	H	0.0332261	0.194331	0.323175
365	H	0.0332261	0.694331	0.323175
366	H	0.533226	0.194331	0.323175
367	H	0.533226	0.694331	0.323175
368	H	0.444403	0.0891678	0.129293
369	H	0.444403	0.589168	0.129293
370	H	0.555597	0.410832	0.129293
371	H	0.555597	0.910832	0.129293
372	H	0.0891678	0.555597	0.870707
373	H	0.589168	0.555597	0.870707
374	H	0.410832	0.444403	0.870707
375	H	0.910832	0.444403	0.870707
376	H	0.305611	0.0891678	0.620717
377	H	0.305611	0.589168	0.620717
378	H	0.805611	0.0891678	0.620717
379	H	0.805611	0.589168	0.620717
380	H	0.194389	0.410832	0.620717
381	H	0.194389	0.910832	0.620717
382	H	0.694389	0.410832	0.620717
383	H	0.694389	0.910832	0.620717
384	H	0.160818	0.555597	0.879264
385	H	0.660818	0.555597	0.879264
386	H	0.339182	0.444403	0.879264
387	H	0.839182	0.444403	0.879264
388	H	0.194389	0.339182	0.629274
389	H	0.194389	0.839182	0.629274
390	H	0.694389	0.339182	0.629274
391	H	0.694389	0.839182	0.629274
392	H	0.305611	0.160818	0.629274
393	H	0.305611	0.660818	0.629274
394	H	0.805611	0.160818	0.629274
395	H	0.805611	0.660818	0.629274
396	H	0.339182	0.305611	0.370726
397	H	0.339182	0.805611	0.370726
398	H	0.839182	0.305611	0.370726
399	H	0.839182	0.805611	0.370726
400	H	0.160818	0.194389	0.370726
401	H	0.160818	0.694389	0.370726
402	H	0.660818	0.194389	0.370726
403	H	0.660818	0.694389	0.370726
404	H	0.555597	0.339182	0.120736
405	H	0.555597	0.839182	0.120736
406	H	0.444403	0.160818	0.120736
407	H	0.444403	0.660818	0.120736
408	H	0.410832	0.305611	0.379283
409	H	0.410832	0.805611	0.379283
410	H	0.910832	0.305611	0.379283
411	H	0.910832	0.805611	0.379283
412	H	0.0891678	0.194389	0.379283
413	H	0.0891678	0.694389	0.379283

414	H	0.589168	0.194389	0.379283
415	H	0.589168	0.694389	0.379283
416	H	0.0586698	0.118086	0.0789642
417	H	0.0586698	0.618086	0.0789642
418	H	0.55867	0.118086	0.0789642
419	H	0.55867	0.618086	0.0789642
420	H	0.44133	0.381914	0.0789642
421	H	0.44133	0.881914	0.0789642
422	H	0.118086	0.44133	0.921036
423	H	0.618086	0.44133	0.921036
424	H	0.381914	0.0586698	0.921036
425	H	0.381914	0.55867	0.921036
426	H	0.881914	0.0586698	0.921036
427	H	0.881914	0.55867	0.921036
428	H	0.191316	0.118086	0.671045
429	H	0.191316	0.618086	0.671045
430	H	0.691316	0.118086	0.671045
431	H	0.691316	0.618086	0.671045
432	H	0.308684	0.381914	0.671045
433	H	0.308684	0.881914	0.671045
434	H	0.808684	0.381914	0.671045
435	H	0.808684	0.881914	0.671045
436	H	0.131928	0.44133	0.828974
437	H	0.631928	0.44133	0.828974
438	H	0.368072	0.0586698	0.828974
439	H	0.368072	0.55867	0.828974
440	H	0.868072	0.0586698	0.828974
441	H	0.868072	0.55867	0.828974
442	H	0.308684	0.368072	0.578983
443	H	0.308684	0.868072	0.578983
444	H	0.808684	0.368072	0.578983
445	H	0.808684	0.868072	0.578983
446	H	0.191316	0.131928	0.578983
447	H	0.191316	0.631928	0.578983
448	H	0.691316	0.131928	0.578983
449	H	0.691316	0.631928	0.578983
450	H	0.368072	0.191316	0.421017
451	H	0.368072	0.691316	0.421017
452	H	0.868072	0.191316	0.421017
453	H	0.868072	0.691316	0.421017
454	H	0.131928	0.308684	0.421017
455	H	0.131928	0.808684	0.421017
456	H	0.631928	0.308684	0.421017
457	H	0.631928	0.808684	0.421017
458	H	0.44133	0.368072	0.171026
459	H	0.44133	0.868072	0.171026
460	H	0.0586698	0.131928	0.171026
461	H	0.0586698	0.631928	0.171026
462	H	0.55867	0.131928	0.171026
463	H	0.55867	0.631928	0.171026
464	H	0.381914	0.191316	0.328955
465	H	0.381914	0.691316	0.328955
466	H	0.881914	0.191316	0.328955
467	H	0.881914	0.691316	0.328955
468	H	0.118086	0.308684	0.328955
469	H	0.118086	0.808684	0.328955
470	H	0.618086	0.308684	0.328955
471	H	0.618086	0.808684	0.328955
472	H	0.0582965	0.0620872	0.0231938
473	H	0.0582965	0.562087	0.0231938

474	H	0.558296	0.0620872	0.0231938
475	H	0.558296	0.562087	0.0231938
476	H	0.441704	0.437913	0.0231938
477	H	0.441704	0.937913	0.0231938
478	H	0.0620872	0.441704	0.976806
479	H	0.562087	0.441704	0.976806
480	H	0.437913	0.0582965	0.976806
481	H	0.437913	0.558296	0.976806
482	H	0.937913	0.0582965	0.976806
483	H	0.937913	0.558296	0.976806
484	H	0.191718	0.0620872	0.726816
485	H	0.191718	0.562087	0.726816
486	H	0.691718	0.0620872	0.726816
487	H	0.691718	0.562087	0.726816
488	H	0.308282	0.437913	0.726816
489	H	0.308282	0.937913	0.726816
490	H	0.808282	0.437913	0.726816
491	H	0.808282	0.937913	0.726816
492	H	0.187898	0.441704	0.773203
493	H	0.687898	0.441704	0.773203
494	H	0.312102	0.0582965	0.773203
495	H	0.312102	0.558296	0.773203
496	H	0.812102	0.0582965	0.773203
497	H	0.812102	0.558296	0.773203
498	H	0.308282	0.312102	0.523175
499	H	0.308282	0.812102	0.523175
500	H	0.808282	0.312102	0.523175
501	H	0.808282	0.812102	0.523175
502	H	0.191718	0.187898	0.523175
503	H	0.191718	0.687898	0.523175
504	H	0.691718	0.187898	0.523175
505	H	0.691718	0.687898	0.523175
506	H	0.312102	0.191718	0.476825
507	H	0.312102	0.691718	0.476825
508	H	0.812102	0.191718	0.476825
509	H	0.812102	0.691718	0.476825
510	H	0.187898	0.308282	0.476825
511	H	0.187898	0.808282	0.476825
512	H	0.687898	0.308282	0.476825
513	H	0.687898	0.808282	0.476825
514	H	0.441704	0.312102	0.226797
515	H	0.441704	0.812102	0.226797
516	H	0.0582965	0.187898	0.226797
517	H	0.0582965	0.687898	0.226797
518	H	0.558296	0.187898	0.226797
519	H	0.558296	0.687898	0.226797
520	H	0.437913	0.191718	0.273184
521	H	0.437913	0.691718	0.273184
522	H	0.937913	0.191718	0.273184
523	H	0.937913	0.691718	0.273184
524	H	0.0620872	0.308282	0.273184
525	H	0.0620872	0.808282	0.273184
526	H	0.562087	0.308282	0.273184
527	H	0.562087	0.808282	0.273184
528	Ge	0	0	0
529	Ge	1	0.5	0
530	Ge	0.5	0	0
531	Ge	0.5	0.5	0
532	Ge	0.250014	1	0.750009
533	Ge	0.250014	0.5	0.750009

534	Ge	0.750014	1	0.750009
535	Ge	0.750014	0.5	0.750009
536	Ge	0.250014	0.250014	0.499981
537	Ge	0.250014	0.750014	0.499981
538	Ge	0.750014	0.250014	0.499981
539	Ge	0.750014	0.750014	0.499981
540	Ge	1	0.250014	0.249991
541	Ge	1	0.750014	0.249991
542	Ge	0.5	0.250014	0.249991
543	Ge	0.5	0.750014	0.249991
544	C	0.999052	0.455833	0.0435729
545	C	0.999052	0.294182	0.206455
546	C	0.998535	0.391936	0.108163
547	C	0.998535	0.35805	0.141828
548	C	0.966429	0.400235	0.0780634
549	C	0.966429	0.34975	0.171927
550	C	0.966745	0.431968	0.0458998
551	C	0.966745	0.318046	0.204128
552	H	0.94133	0.381914	0.0789642
553	H	0.94133	0.368072	0.171026
554	H	0.941704	0.437913	0.0231938
555	H	0.941704	0.312102	0.226797
556	C	0.999052	0.955833	0.0435729
557	C	0.999052	0.794182	0.206455
558	C	0.998535	0.891936	0.108163
559	C	0.998535	0.85805	0.141828
560	C	0.966429	0.900235	0.0780634
561	C	0.966429	0.84975	0.171927
562	C	0.966745	0.931968	0.0458998
563	C	0.966745	0.818046	0.204128
564	H	0.94133	0.881914	0.0789642
565	H	0.94133	0.868072	0.171026
566	H	0.941704	0.937913	0.0231938
567	H	0.941704	0.812102	0.226797
568	C	0.0441675	0.999052	0.956427
569	C	0.205818	0.999052	0.793545
570	C	0.108064	0.998535	0.891837
571	C	0.14195	0.998535	0.858172
572	C	0.0997645	0.966429	0.921937
573	C	0.15025	0.966429	0.828073
574	C	0.0680317	0.966745	0.9541
575	C	0.181954	0.966745	0.795872
576	H	0.118086	0.94133	0.921036
577	H	0.131928	0.94133	0.828974
578	H	0.0620872	0.941704	0.976806
579	H	0.187898	0.941704	0.773203
580	C	0.544167	0.999052	0.956427
581	C	0.705818	0.999052	0.793545
582	C	0.608064	0.998535	0.891837
583	C	0.64195	0.998535	0.858172
584	C	0.599765	0.966429	0.921937
585	C	0.65025	0.966429	0.828073
586	C	0.568032	0.966745	0.9541
587	C	0.681954	0.966745	0.795872
588	H	0.618086	0.94133	0.921036
589	H	0.631928	0.94133	0.828974
590	H	0.562087	0.941704	0.976806
591	H	0.687898	0.941704	0.773203
592	C	0.969215	0.0518638	0.0741978
593	C	0.969272	0.0837402	0.105949

594	H	0.944346	0.0332261	0.0731845
595	H	0.944403	0.0891678	0.129293
596	C	0.969215	0.551864	0.0741978
597	C	0.969272	0.58374	0.105949
598	H	0.944346	0.533226	0.0731845
599	H	0.944403	0.589168	0.129293
600	C	0.0307851	0.448136	0.0741978
601	C	0.0307277	0.41626	0.105949
602	H	0.0556545	0.466774	0.0731845
603	H	0.055597	0.410832	0.129293
604	C	0.0307851	0.948136	0.0741978
605	C	0.0307277	0.91626	0.105949
606	H	0.0556545	0.966774	0.0731845
607	H	0.055597	0.910832	0.129293
608	C	0.0518638	0.0307851	0.925802
609	C	0.0837402	0.0307277	0.894051
610	H	0.0332261	0.0556545	0.926816
611	H	0.0891678	0.055597	0.870707
612	C	0.551864	0.0307851	0.925802
613	C	0.58374	0.0307277	0.894051
614	H	0.533226	0.0556545	0.926816
615	H	0.589168	0.055597	0.870707
616	C	0.448136	0.969215	0.925802
617	C	0.41626	0.969272	0.894051
618	H	0.466774	0.944346	0.926816
619	H	0.410832	0.944403	0.870707
620	C	0.948136	0.969215	0.925802
621	C	0.91626	0.969272	0.894051
622	H	0.966774	0.944346	0.926816
623	H	0.910832	0.944403	0.870707
624	C	0.198151	0.0307851	0.82417
625	C	0.166245	0.0307277	0.855958
626	H	0.216788	0.0556545	0.823194
627	H	0.160818	0.055597	0.879264
628	C	0.698151	0.0307851	0.82417
629	C	0.666245	0.0307277	0.855958
630	H	0.716788	0.0556545	0.823194
631	H	0.660818	0.055597	0.879264
632	C	0.301849	0.969215	0.82417
633	C	0.333755	0.969272	0.855958
634	H	0.283212	0.944346	0.823194
635	H	0.339182	0.944403	0.879264
636	C	0.801849	0.969215	0.82417
637	C	0.833755	0.969272	0.855958
638	H	0.783212	0.944346	0.823194
639	H	0.839182	0.944403	0.879264
640	C	0.0307851	0.301849	0.17583
641	C	0.0307277	0.333755	0.144042
642	H	0.0556545	0.283212	0.176806
643	H	0.055597	0.339182	0.120736
644	C	0.0307851	0.801849	0.17583
645	C	0.0307277	0.833755	0.144042
646	H	0.0556545	0.783212	0.176806
647	H	0.055597	0.839182	0.120736
648	C	0.969215	0.198151	0.17583
649	C	0.969272	0.166245	0.144042
650	H	0.944346	0.216788	0.176806
651	H	0.944403	0.160818	0.120736
652	C	0.969215	0.698151	0.17583
653	C	0.969272	0.666245	0.144042

654	H	0.944346	0.716788	0.176806
655	H	0.944403	0.660818	0.120736
656	C	0.000947677	0.0441675	0.231225
657	C	0.000947677	0.544167	0.231225
658	C	0.500948	0.0441675	0.231225
659	C	0.500948	0.544167	0.231225
660	C	0.499052	0.455833	0.231225
661	C	0.499052	0.955833	0.231225
662	C	0.0441675	0.499052	0.14408
663	C	0.544167	0.499052	0.14408
664	C	0.455833	0.000947677	0.14408
665	C	0.455833	0.500948	0.14408
666	C	0.249067	0.0441675	0.894089
667	C	0.249067	0.544167	0.894089
668	C	0.749067	0.0441675	0.894089
669	C	0.749067	0.544167	0.894089
670	C	0.250933	0.455833	0.894089
671	C	0.250933	0.955833	0.894089
672	C	0.750933	0.455833	0.894089
673	C	0.750933	0.955833	0.894089
674	C	0.205818	0.499052	0.981197
675	C	0.705818	0.499052	0.981197
676	C	0.294182	0.000947677	0.981197
677	C	0.294182	0.500948	0.981197
678	C	0.794182	0.000947677	0.981197
679	C	0.794182	0.500948	0.981197
680	C	0.250933	0.294182	0.731207
681	C	0.250933	0.794182	0.731207
682	C	0.750933	0.294182	0.731207
683	C	0.750933	0.794182	0.731207
684	C	0.249067	0.205818	0.731207
685	C	0.249067	0.705818	0.731207
686	C	0.749067	0.205818	0.731207
687	C	0.749067	0.705818	0.731207
688	C	0.294182	0.249067	0.644098
689	C	0.294182	0.749067	0.644098
690	C	0.794182	0.249067	0.644098
691	C	0.794182	0.749067	0.644098
692	C	0.205818	0.250933	0.644098
693	C	0.205818	0.750933	0.644098
694	C	0.705818	0.250933	0.644098
695	C	0.705818	0.750933	0.644098
696	C	0.499052	0.294182	0.394108
697	C	0.499052	0.794182	0.394108
698	C	0.000947677	0.205818	0.394108
699	C	0.000947677	0.705818	0.394108
700	C	0.500948	0.205818	0.394108
701	C	0.500948	0.705818	0.394108
702	C	0.455833	0.249067	0.481216
703	C	0.455833	0.749067	0.481216
704	C	0.955833	0.249067	0.481216
705	C	0.955833	0.749067	0.481216
706	C	0.0441675	0.250933	0.481216
707	C	0.0441675	0.750933	0.481216
708	C	0.544167	0.250933	0.481216
709	C	0.544167	0.750933	0.481216
710	C	0.469215	0.0518638	0.261813
711	C	0.469215	0.551864	0.261813
712	C	0.530785	0.448136	0.261813
713	C	0.530785	0.948136	0.261813

714	C	0.0518638	0.530785	0.113455
715	C	0.551864	0.530785	0.113455
716	C	0.448136	0.469215	0.113455
717	C	0.280771	0.0518638	0.863464
718	C	0.280771	0.551864	0.863464
719	C	0.780771	0.0518638	0.863464
720	C	0.780771	0.551864	0.863464
721	C	0.219229	0.448136	0.863464
722	C	0.219229	0.948136	0.863464
723	C	0.719229	0.448136	0.863464
724	C	0.719229	0.948136	0.863464
725	C	0.198151	0.530785	0.0118221
726	C	0.698151	0.530785	0.0118221
727	C	0.301849	0.469215	0.0118221
728	C	0.219229	0.301849	0.761831
729	C	0.219229	0.801849	0.761831
730	C	0.719229	0.301849	0.761831
731	C	0.719229	0.801849	0.761831
732	C	0.280771	0.198151	0.761831
733	C	0.280771	0.698151	0.761831
734	C	0.780771	0.198151	0.761831
735	C	0.780771	0.698151	0.761831
736	C	0.301849	0.280771	0.613473
737	C	0.301849	0.780771	0.613473
738	C	0.801849	0.280771	0.613473
739	C	0.801849	0.780771	0.613473
740	C	0.198151	0.219229	0.613473
741	C	0.198151	0.719229	0.613473
742	C	0.698151	0.219229	0.613473
743	C	0.698151	0.719229	0.613473
744	C	0.530785	0.301849	0.363483
745	C	0.530785	0.801849	0.363483
746	C	0.469215	0.198151	0.363483
747	C	0.469215	0.698151	0.363483
748	C	0.448136	0.280771	0.511841
749	C	0.448136	0.780771	0.511841
750	C	0.948136	0.280771	0.511841
751	C	0.948136	0.780771	0.511841
752	C	0.0518638	0.219229	0.511841
753	C	0.0518638	0.719229	0.511841
754	C	0.551864	0.219229	0.511841
755	C	0.551864	0.719229	0.511841
756	C	0.469272	0.0837402	0.293601
757	C	0.469272	0.58374	0.293601
758	C	0.530728	0.41626	0.293601
759	C	0.530728	0.91626	0.293601
760	C	0.0837402	0.530728	0.0817039
761	C	0.58374	0.530728	0.0817039
762	C	0.41626	0.469272	0.0817039
763	C	0.280713	0.0837402	0.831713
764	C	0.280713	0.58374	0.831713
765	C	0.780713	0.0837402	0.831713
766	C	0.780713	0.58374	0.831713
767	C	0.219287	0.41626	0.831713
768	C	0.219287	0.91626	0.831713
769	C	0.719287	0.41626	0.831713
770	C	0.719287	0.91626	0.831713
771	C	0.166245	0.530728	0.0436104
772	C	0.666245	0.530728	0.0436104
773	C	0.333755	0.469272	0.0436104



774	C	0.219287	0.333755	0.793582
775	C	0.219287	0.833755	0.793582
776	C	0.719287	0.333755	0.793582
777	C	0.719287	0.833755	0.793582
778	C	0.280713	0.166245	0.793582
779	C	0.280713	0.666245	0.793582
780	C	0.780713	0.166245	0.793582
781	C	0.780713	0.666245	0.793582
782	C	0.333755	0.280713	0.581685
783	C	0.333755	0.780713	0.581685
784	C	0.833755	0.280713	0.581685
785	C	0.833755	0.780713	0.581685
786	C	0.166245	0.219287	0.581685
787	C	0.166245	0.719287	0.581685
788	C	0.666245	0.219287	0.581685
789	C	0.666245	0.719287	0.581685
790	C	0.530728	0.333755	0.331695
791	C	0.530728	0.833755	0.331695
792	C	0.469272	0.166245	0.331695
793	C	0.469272	0.666245	0.331695
794	C	0.41626	0.280713	0.543592
795	C	0.41626	0.780713	0.543592
796	C	0.91626	0.280713	0.543592
797	C	0.91626	0.780713	0.543592
798	C	0.0837402	0.219287	0.543592
799	C	0.0837402	0.719287	0.543592
800	C	0.58374	0.219287	0.543592
801	C	0.58374	0.719287	0.543592
802	C	0.00146459	0.108064	0.295815
803	C	0.00146459	0.608064	0.295815
804	C	0.501465	0.108064	0.295815
805	C	0.501465	0.608064	0.295815
806	C	0.498535	0.391936	0.295815
807	C	0.498535	0.891936	0.295815
808	C	0.108064	0.498535	0.0794521
809	C	0.608064	0.498535	0.0794521
810	C	0.391936	0.00146459	0.0794521
811	C	0.391936	0.501465	0.0794521
812	C	0.24855	0.108064	0.829461
813	C	0.24855	0.608064	0.829461
814	C	0.74855	0.108064	0.829461
815	C	0.74855	0.608064	0.829461
816	C	0.25145	0.391936	0.829461
817	C	0.25145	0.891936	0.829461
818	C	0.75145	0.391936	0.829461
819	C	0.75145	0.891936	0.829461
820	C	0.14195	0.498535	0.0458247
821	C	0.64195	0.498535	0.0458247
822	C	0.35805	0.00146459	0.0458247
823	C	0.35805	0.501465	0.0458247
824	C	0.25145	0.35805	0.795834
825	C	0.25145	0.85805	0.795834
826	C	0.75145	0.35805	0.795834
827	C	0.75145	0.85805	0.795834
828	C	0.24855	0.14195	0.795834
829	C	0.24855	0.64195	0.795834
830	C	0.74855	0.14195	0.795834
831	C	0.74855	0.64195	0.795834
832	C	0.35805	0.24855	0.579471
833	C	0.35805	0.74855	0.579471

834	C	0.85805	0.24855	0.579471
835	C	0.85805	0.74855	0.579471
836	C	0.14195	0.25145	0.579471
837	C	0.14195	0.75145	0.579471
838	C	0.64195	0.25145	0.579471
839	C	0.64195	0.75145	0.579471
840	C	0.498535	0.35805	0.32948
841	C	0.498535	0.85805	0.32948
842	C	0.00146459	0.14195	0.32948
843	C	0.00146459	0.64195	0.32948
844	C	0.501465	0.14195	0.32948
845	C	0.501465	0.64195	0.32948
846	C	0.391936	0.24855	0.545843
847	C	0.391936	0.74855	0.545843
848	C	0.891936	0.24855	0.545843
849	C	0.891936	0.74855	0.545843
850	C	0.108064	0.25145	0.545843
851	C	0.108064	0.75145	0.545843
852	C	0.608064	0.25145	0.545843
853	C	0.608064	0.75145	0.545843
854	C	0.0335707	0.0997645	0.265716
855	C	0.0335707	0.599765	0.265716
856	C	0.533571	0.0997645	0.265716
857	C	0.533571	0.599765	0.265716
858	C	0.466429	0.400235	0.265716
859	C	0.466429	0.900235	0.265716
860	C	0.0997645	0.466429	0.109589
861	C	0.599765	0.466429	0.109589
862	C	0.400235	0.0335707	0.109589
863	C	0.400235	0.533571	0.109589
864	C	0.216444	0.0997645	0.859598
865	C	0.216444	0.599765	0.859598
866	C	0.716444	0.0997645	0.859598
867	C	0.716444	0.599765	0.859598
868	C	0.283556	0.400235	0.859598
869	C	0.283556	0.900235	0.859598
870	C	0.783556	0.400235	0.859598
871	C	0.783556	0.900235	0.859598
872	C	0.15025	0.466429	0.0157253
873	C	0.65025	0.466429	0.0157253
874	C	0.34975	0.0335707	0.0157253
875	C	0.34975	0.533571	0.0157253
876	C	0.283556	0.34975	0.765735
877	C	0.283556	0.84975	0.765735
878	C	0.783556	0.34975	0.765735
879	C	0.783556	0.84975	0.765735
880	C	0.216444	0.15025	0.765735
881	C	0.216444	0.65025	0.765735
882	C	0.716444	0.15025	0.765735
883	C	0.716444	0.65025	0.765735
884	C	0.34975	0.216444	0.60957
885	C	0.34975	0.716444	0.60957
886	C	0.84975	0.216444	0.60957
887	C	0.84975	0.716444	0.60957
888	C	0.15025	0.283556	0.60957
889	C	0.15025	0.783556	0.60957
890	C	0.65025	0.283556	0.60957
891	C	0.65025	0.783556	0.60957
892	C	0.466429	0.34975	0.35958
893	C	0.466429	0.84975	0.35958

894	C	0.0335707	0.15025	0.35958
895	C	0.0335707	0.65025	0.35958
896	C	0.533571	0.15025	0.35958
897	C	0.533571	0.65025	0.35958
898	C	0.400235	0.216444	0.515707
899	C	0.400235	0.716444	0.515707
900	C	0.900235	0.216444	0.515707
901	C	0.900235	0.716444	0.515707
902	C	0.0997645	0.283556	0.515707
903	C	0.0997645	0.783556	0.515707
904	C	0.599765	0.283556	0.515707
905	C	0.599765	0.783556	0.515707
906	C	0.0332548	0.0680317	0.233552
907	C	0.0332548	0.568032	0.233552
908	C	0.533255	0.0680317	0.233552
909	C	0.533255	0.568032	0.233552
910	C	0.466745	0.431968	0.233552
911	C	0.466745	0.931968	0.233552
912	C	0.0680317	0.466745	0.141753
913	C	0.568032	0.466745	0.141753
914	C	0.431968	0.0332548	0.141753
915	C	0.431968	0.533255	0.141753
916	C	0.21676	0.0680317	0.891762
917	C	0.21676	0.568032	0.891762
918	C	0.71676	0.0680317	0.891762
919	C	0.71676	0.568032	0.891762
920	C	0.28324	0.431968	0.891762
921	C	0.28324	0.931968	0.891762
922	C	0.78324	0.431968	0.891762
923	C	0.78324	0.931968	0.891762
924	C	0.181954	0.466745	0.983524
925	C	0.681954	0.466745	0.983524
926	C	0.318046	0.0332548	0.983524
927	C	0.318046	0.533255	0.983524
928	C	0.818046	0.0332548	0.983524
929	C	0.818046	0.533255	0.983524
930	C	0.28324	0.318046	0.733533
931	C	0.28324	0.818046	0.733533
932	C	0.78324	0.318046	0.733533
933	C	0.78324	0.818046	0.733533
934	C	0.21676	0.181954	0.733533
935	C	0.21676	0.681954	0.733533
936	C	0.71676	0.181954	0.733533
937	C	0.71676	0.681954	0.733533
938	C	0.318046	0.21676	0.641771
939	C	0.318046	0.71676	0.641771
940	C	0.818046	0.21676	0.641771
941	C	0.818046	0.71676	0.641771
942	C	0.181954	0.28324	0.641771
943	C	0.181954	0.78324	0.641771
944	C	0.681954	0.28324	0.641771
945	C	0.681954	0.78324	0.641771
946	C	0.466745	0.318046	0.391743
947	C	0.466745	0.818046	0.391743
948	C	0.0332548	0.181954	0.391743
949	C	0.0332548	0.681954	0.391743
950	C	0.533255	0.181954	0.391743
951	C	0.533255	0.681954	0.391743
952	C	0.431968	0.21676	0.483543
953	C	0.431968	0.71676	0.483543

954	C	0.931968	0.21676	0.483543
955	C	0.931968	0.71676	0.483543
956	C	0.0680317	0.28324	0.483543
957	C	0.0680317	0.78324	0.483543
958	C	0.568032	0.28324	0.483543
959	C	0.568032	0.78324	0.483543
960	H	0.444346	0.0332261	0.260837
961	H	0.444346	0.533226	0.260837
962	H	0.555654	0.466774	0.260837
963	H	0.555654	0.966774	0.260837
964	H	0.0332261	0.555654	0.114468
965	H	0.533226	0.555654	0.114468
966	H	0.466774	0.444346	0.114468
967	H	0.305669	0.0332261	0.864477
968	H	0.305669	0.533226	0.864477
969	H	0.805669	0.0332261	0.864477
970	H	0.805669	0.533226	0.864477
971	H	0.194331	0.466774	0.864477
972	H	0.194331	0.966774	0.864477
973	H	0.694331	0.466774	0.864477
974	H	0.694331	0.966774	0.864477
975	H	0.216788	0.555654	0.0108463
976	H	0.716788	0.555654	0.0108463
977	H	0.283212	0.444346	0.0108463
978	H	0.194331	0.283212	0.760818
979	H	0.194331	0.783212	0.760818
980	H	0.694331	0.283212	0.760818
981	H	0.694331	0.783212	0.760818
982	H	0.305669	0.216788	0.760818
983	H	0.305669	0.716788	0.760818
984	H	0.805669	0.216788	0.760818
985	H	0.805669	0.716788	0.760818
986	H	0.283212	0.305669	0.614487
987	H	0.283212	0.805669	0.614487
988	H	0.783212	0.305669	0.614487
989	H	0.783212	0.805669	0.614487
990	H	0.216788	0.194331	0.614487
991	H	0.216788	0.694331	0.614487
992	H	0.716788	0.194331	0.614487
993	H	0.716788	0.694331	0.614487
994	H	0.555654	0.283212	0.364459
995	H	0.555654	0.783212	0.364459
996	H	0.444346	0.216788	0.364459
997	H	0.444346	0.716788	0.364459
998	H	0.466774	0.305669	0.510828
999	H	0.466774	0.805669	0.510828
1000	H	0.966774	0.305669	0.510828
1001	H	0.966774	0.805669	0.510828
1002	H	0.0332261	0.194331	0.510828
1003	H	0.0332261	0.694331	0.510828
1004	H	0.533226	0.194331	0.510828
1005	H	0.533226	0.694331	0.510828
1006	H	0.444403	0.0891678	0.316945
1007	H	0.444403	0.589168	0.316945
1008	H	0.555597	0.410832	0.316945
1009	H	0.555597	0.910832	0.316945
1010	H	0.0891678	0.555597	0.0583599
1011	H	0.589168	0.555597	0.0583599
1012	H	0.410832	0.444403	0.0583599
1013	H	0.305611	0.0891678	0.808369

1014	H	0.305611	0.589168	0.808369
1015	H	0.805611	0.0891678	0.808369
1016	H	0.805611	0.589168	0.808369
1017	H	0.194389	0.410832	0.808369
1018	H	0.194389	0.910832	0.808369
1019	H	0.694389	0.410832	0.808369
1020	H	0.694389	0.910832	0.808369
1021	H	0.160818	0.555597	0.0669169
1022	H	0.660818	0.555597	0.0669169
1023	H	0.339182	0.444403	0.0669169
1024	H	0.194389	0.339182	0.816926
1025	H	0.194389	0.839182	0.816926
1026	H	0.694389	0.339182	0.816926
1027	H	0.694389	0.839182	0.816926
1028	H	0.305611	0.160818	0.816926
1029	H	0.305611	0.660818	0.816926
1030	H	0.805611	0.160818	0.816926
1031	H	0.805611	0.660818	0.816926
1032	H	0.339182	0.305611	0.558379
1033	H	0.339182	0.805611	0.558379
1034	H	0.839182	0.305611	0.558379
1035	H	0.839182	0.805611	0.558379
1036	H	0.160818	0.194389	0.558379
1037	H	0.160818	0.694389	0.558379
1038	H	0.660818	0.194389	0.558379
1039	H	0.660818	0.694389	0.558379
1040	H	0.555597	0.339182	0.308388
1041	H	0.555597	0.839182	0.308388
1042	H	0.444403	0.160818	0.308388
1043	H	0.444403	0.660818	0.308388
1044	H	0.410832	0.305611	0.566936
1045	H	0.410832	0.805611	0.566936
1046	H	0.910832	0.305611	0.566936
1047	H	0.910832	0.805611	0.566936
1048	H	0.0891678	0.194389	0.566936
1049	H	0.0891678	0.694389	0.566936
1050	H	0.589168	0.194389	0.566936
1051	H	0.589168	0.694389	0.566936
1052	H	0.0586698	0.118086	0.266617
1053	H	0.0586698	0.618086	0.266617
1054	H	0.55867	0.118086	0.266617
1055	H	0.55867	0.618086	0.266617
1056	H	0.44133	0.381914	0.266617
1057	H	0.44133	0.881914	0.266617
1058	H	0.118086	0.44133	0.108688
1059	H	0.618086	0.44133	0.108688
1060	H	0.381914	0.0586698	0.108688
1061	H	0.381914	0.55867	0.108688
1062	H	0.191316	0.118086	0.858698
1063	H	0.191316	0.618086	0.858698
1064	H	0.691316	0.118086	0.858698
1065	H	0.691316	0.618086	0.858698
1066	H	0.308684	0.381914	0.858698
1067	H	0.308684	0.881914	0.858698
1068	H	0.808684	0.381914	0.858698
1069	H	0.808684	0.881914	0.858698
1070	H	0.131928	0.44133	0.016626
1071	H	0.631928	0.44133	0.016626
1072	H	0.368072	0.0586698	0.016626
1073	H	0.368072	0.55867	0.016626

1074	H	0.308684	0.368072	0.766635
1075	H	0.308684	0.868072	0.766635
1076	H	0.808684	0.368072	0.766635
1077	H	0.808684	0.868072	0.766635
1078	H	0.191316	0.131928	0.766635
1079	H	0.191316	0.631928	0.766635
1080	H	0.691316	0.131928	0.766635
1081	H	0.691316	0.631928	0.766635
1082	H	0.368072	0.191316	0.60867
1083	H	0.368072	0.691316	0.60867
1084	H	0.868072	0.191316	0.60867
1085	H	0.868072	0.691316	0.60867
1086	H	0.131928	0.308684	0.60867
1087	H	0.131928	0.808684	0.60867
1088	H	0.631928	0.308684	0.60867
1089	H	0.631928	0.808684	0.60867
1090	H	0.44133	0.368072	0.358679
1091	H	0.44133	0.868072	0.358679
1092	H	0.0586698	0.131928	0.358679
1093	H	0.0586698	0.631928	0.358679
1094	H	0.55867	0.131928	0.358679
1095	H	0.55867	0.631928	0.358679
1096	H	0.381914	0.191316	0.516607
1097	H	0.381914	0.691316	0.516607
1098	H	0.881914	0.191316	0.516607
1099	H	0.881914	0.691316	0.516607
1100	H	0.118086	0.308684	0.516607
1101	H	0.118086	0.808684	0.516607
1102	H	0.618086	0.308684	0.516607
1103	H	0.618086	0.808684	0.516607
1104	H	0.0582965	0.0620872	0.210846
1105	H	0.0582965	0.562087	0.210846
1106	H	0.558296	0.0620872	0.210846
1107	H	0.558296	0.562087	0.210846
1108	H	0.441704	0.437913	0.210846
1109	H	0.441704	0.937913	0.210846
1110	H	0.0620872	0.441704	0.164459
1111	H	0.562087	0.441704	0.164459
1112	H	0.437913	0.0582965	0.164459
1113	H	0.437913	0.558296	0.164459
1114	H	0.191718	0.0620872	0.914468
1115	H	0.191718	0.562087	0.914468
1116	H	0.691718	0.0620872	0.914468
1117	H	0.691718	0.562087	0.914468
1118	H	0.308282	0.437913	0.914468
1119	H	0.308282	0.937913	0.914468
1120	H	0.808282	0.437913	0.914468
1121	H	0.808282	0.937913	0.914468
1122	H	0.187898	0.441704	0.960856
1123	H	0.687898	0.441704	0.960856
1124	H	0.312102	0.0582965	0.960856
1125	H	0.312102	0.558296	0.960856
1126	H	0.812102	0.0582965	0.960856
1127	H	0.812102	0.558296	0.960856
1128	H	0.308282	0.312102	0.710828
1129	H	0.308282	0.812102	0.710828
1130	H	0.808282	0.312102	0.710828
1131	H	0.808282	0.812102	0.710828
1132	H	0.191718	0.187898	0.710828
1133	H	0.191718	0.687898	0.710828

1134	H	0.691718	0.187898	0.710828
1135	H	0.691718	0.687898	0.710828
1136	H	0.312102	0.191718	0.664477
1137	H	0.312102	0.691718	0.664477
1138	H	0.812102	0.191718	0.664477
1139	H	0.812102	0.691718	0.664477
1140	H	0.187898	0.308282	0.664477
1141	H	0.187898	0.808282	0.664477
1142	H	0.687898	0.308282	0.664477
1143	H	0.687898	0.808282	0.664477
1144	H	0.441704	0.312102	0.414449
1145	H	0.441704	0.812102	0.414449
1146	H	0.0582965	0.187898	0.414449
1147	H	0.0582965	0.687898	0.414449
1148	H	0.558296	0.187898	0.414449
1149	H	0.558296	0.687898	0.414449
1150	H	0.437913	0.191718	0.460837
1151	H	0.437913	0.691718	0.460837
1152	H	0.937913	0.191718	0.460837
1153	H	0.937913	0.691718	0.460837
1154	H	0.0620872	0.308282	0.460837
1155	H	0.0620872	0.808282	0.460837
1156	H	0.562087	0.308282	0.460837
1157	H	0.562087	0.808282	0.460837
1158	Ge	1 1	0.187652	
1159	Ge	1 0.5	0.187652	
1160	Ge	0.5 1	0.187652	
1161	Ge	0.5 0.5	0.187652	
1162	Ge	0.250014 1	0.937662	
1163	Ge	0.250014 0.5	0.937662	
1164	Ge	0.750014 1	0.937662	
1165	Ge	0.750014 0.5	0.937662	
1166	Ge	0.250014 0.250014	0.687634	
1167	Ge	0.250014 0.750014	0.687634	
1168	Ge	0.750014 0.250014	0.687634	
1169	Ge	0.750014 0.750014	0.687634	
1170	Ge	1 0.250014	0.437643	
1171	Ge	1 0.750014	0.437643	
1172	Ge	0.5 0.250014	0.437643	
1173	Ge	0.5 0.750014	0.437643	
1174	C	0.999052 0.455833	0.231225	
1175	C	0.999052 0.294182	0.394108	
1176	C	0.998535 0.391936	0.295815	
1177	C	0.998535 0.35805	0.32948	
1178	C	0.966429 0.400235	0.265716	
1179	C	0.966429 0.34975	0.35958	
1180	C	0.966745 0.431968	0.233552	
1181	C	0.966745 0.318046	0.391743	
1182	H	0.94133 0.381914	0.266617	
1183	H	0.94133 0.368072	0.358679	
1184	H	0.941704 0.437913	0.210846	
1185	H	0.941704 0.312102	0.414449	
1186	C	0.999052 0.955833	0.231225	
1187	C	0.999052 0.794182	0.394108	
1188	C	0.998535 0.891936	0.295815	
1189	C	0.998535 0.85805	0.32948	
1190	C	0.966429 0.900235	0.265716	
1191	C	0.966429 0.84975	0.35958	
1192	C	0.966745 0.931968	0.233552	
1193	C	0.966745 0.818046	0.391743	

1194	H	0.94133	0.881914	0.266617
1195	H	0.94133	0.868072	0.358679
1196	H	0.941704	0.937913	0.210846
1197	H	0.941704	0.812102	0.414449
1198	C	0.0441675	0.999052	0.14408
1199	C	0.108064	0.998535	0.0794521
1200	C	0.14195	0.998535	0.0458247
1201	C	0.0997645	0.966429	0.109589
1202	C	0.15025	0.966429	0.0157253
1203	C	0.0680317	0.966745	0.141753
1204	H	0.118086	0.94133	0.108688
1205	H	0.131928	0.94133	0.016626
1206	H	0.0620872	0.941704	0.164459
1207	C	0.544167	0.999052	0.14408
1208	C	0.608064	0.998535	0.0794521
1209	C	0.64195	0.998535	0.0458247
1210	C	0.599765	0.966429	0.109589
1211	C	0.65025	0.966429	0.0157253
1212	C	0.568032	0.966745	0.141753
1213	H	0.618086	0.94133	0.108688
1214	H	0.631928	0.94133	0.016626
1215	H	0.562087	0.941704	0.164459
1216	C	0.955833	0.000947677	0.14408
1217	C	0.891936	0.00146459	0.0794521
1218	C	0.85805	0.00146459	0.0458247
1219	C	0.900235	0.0335707	0.109589
1220	C	0.84975	0.0335707	0.0157253
1221	C	0.931968	0.0332548	0.141753
1222	H	0.881914	0.0586698	0.108688
1223	H	0.868072	0.0586698	0.016626
1224	H	0.937913	0.0582965	0.164459
1225	C	0.955833	0.500948	0.14408
1226	C	0.948136	0.469215	0.113455
1227	C	0.801849	0.469215	0.0118221
1228	C	0.91626	0.469272	0.0817039
1229	C	0.833755	0.469272	0.0436104
1230	C	0.891936	0.501465	0.0794521
1231	C	0.85805	0.501465	0.0458247
1232	C	0.900235	0.533571	0.109589
1233	C	0.84975	0.533571	0.0157253
1234	C	0.931968	0.533255	0.141753
1235	H	0.966774	0.444346	0.114468
1236	H	0.783212	0.444346	0.0108463
1237	H	0.910832	0.444403	0.0583599
1238	H	0.839182	0.444403	0.0669169
1239	H	0.881914	0.55867	0.108688
1240	H	0.868072	0.55867	0.016626
1241	H	0.937913	0.558296	0.164459
1242	C	0.205818	0.999052	0.981197
1243	C	0.181954	0.966745	0.983524
1244	H	0.187898	0.941704	0.960856
1245	C	0.705818	0.999052	0.981197
1246	C	0.681954	0.966745	0.983524
1247	H	0.687898	0.941704	0.960856
1248	C	0.969215	0.0518638	0.261813
1249	C	0.969272	0.0837402	0.293601
1250	H	0.944346	0.0332261	0.260837
1251	H	0.944403	0.0891678	0.316945
1252	C	0.969215	0.551864	0.261813
1253	C	0.969272	0.58374	0.293601



1254	H	0.944346	0.533226	0.260837
1255	H	0.944403	0.589168	0.316945
1256	C	0.0307851	0.448136	0.261813
1257	C	0.0307277	0.41626	0.293601
1258	H	0.0556545	0.466774	0.260837
1259	H	0.055597	0.410832	0.316945
1260	C	0.0307851	0.948136	0.261813
1261	C	0.0307277	0.91626	0.293601
1262	H	0.0556545	0.966774	0.260837
1263	H	0.055597	0.910832	0.316945
1264	C	0.0518638	0.0307851	0.113455
1265	C	0.0837402	0.0307277	0.0817039
1266	H	0.0332261	0.0556545	0.114468
1267	H	0.0891678	0.055597	0.0583599
1268	C	0.551864	0.0307851	0.113455
1269	C	0.58374	0.0307277	0.0817039
1270	H	0.533226	0.0556545	0.114468
1271	H	0.589168	0.055597	0.0583599
1272	C	0.448136	0.969215	0.113455
1273	C	0.41626	0.969272	0.0817039
1274	H	0.466774	0.944346	0.114468
1275	H	0.410832	0.944403	0.0583599
1276	C	0.948136	0.969215	0.113455
1277	C	0.91626	0.969272	0.0817039
1278	H	0.966774	0.944346	0.114468
1279	H	0.910832	0.944403	0.0583599
1280	C	0.198151	0.0307851	0.0118221
1281	C	0.166245	0.0307277	0.0436104
1282	H	0.216788	0.0556545	0.0108463
1283	H	0.160818	0.055597	0.0669169
1284	C	0.698151	0.0307851	0.0118221
1285	C	0.666245	0.0307277	0.0436104
1286	H	0.716788	0.0556545	0.0108463
1287	H	0.660818	0.055597	0.0669169
1288	C	0.301849	0.969215	0.0118221
1289	C	0.333755	0.969272	0.0436104
1290	H	0.283212	0.944346	0.0108463
1291	H	0.339182	0.944403	0.0669169
1292	C	0.801849	0.969215	0.0118221
1293	C	0.833755	0.969272	0.0436104
1294	H	0.783212	0.944346	0.0108463
1295	H	0.839182	0.944403	0.0669169
1296	C	0.0307851	0.301849	0.363483
1297	C	0.0307277	0.333755	0.331695
1298	H	0.0556545	0.283212	0.364459
1299	H	0.055597	0.339182	0.308388
1300	C	0.0307851	0.801849	0.363483
1301	C	0.0307277	0.833755	0.331695
1302	H	0.0556545	0.783212	0.364459
1303	H	0.055597	0.839182	0.308388
1304	C	0.969215	0.198151	0.363483
1305	C	0.969272	0.166245	0.331695
1306	H	0.944346	0.216788	0.364459
1307	H	0.944403	0.160818	0.308388
1308	C	0.969215	0.698151	0.363483
1309	C	0.969272	0.666245	0.331695
1310	H	0.944346	0.716788	0.364459
1311	H	0.944403	0.660818	0.308388

#\*\*\*\*\*

```
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****
```

data\_DIA\_PPN-6.cif

```
_cell_length_a      15.5065(0)
_cell_length_b      15.5062(0)
_cell_length_c      26.9138(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number          1
_symmetry_cell_setting               Orthorhombic
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
1      C      0.00165      0.07844      0.03567
2      C      0.92944      0.09456      0.06627
3      C      0.92948      0.16194      0.10067
4      C      0.00259      0.21422      0.10664
5      C      0.07602      0.19672      0.07786
6      C      0.07614      0.12918      0.04351
7      H      0.87243      0.05455      0.06334
8      H      0.87267      0.17207      0.12331
9      H      0.13373      0.23542      0.08179
10     H      0.13577      0.11634      0.02414
11     C      0.50157      0.57843      0.53566
12     C      0.42938      0.59454      0.56629
13     C      0.42946      0.6619      0.60071
14     C      0.50258      0.71418      0.60666
15     C      0.57599      0.69668      0.57786
16     C      0.57606      0.62915      0.5435
17     H      0.37236      0.55455      0.56336
18     H      0.37267      0.67202      0.62337
19     H      0.6337      0.73537      0.58178
20     H      0.63568      0.61632      0.52411
21     C      0.99844      0.92157      0.03566
22     C      0.07063      0.90545      0.06629
23     C      0.07056      0.83807      0.1007
24     C      0.99744      0.7858      0.10665
25     C      0.92403      0.80331      0.07785
26     C      0.92395      0.87084      0.04349
27     H      0.12766      0.94543      0.06336
28     H      0.12735      0.82794      0.12336
29     H      0.86632      0.76462      0.08178
30     H      0.86434      0.88365      0.02411
```

31	C	0.49834	0.42156	0.53566
32	C	0.57055	0.40547	0.56628
33	C	0.57051	0.33811	0.60069
34	C	0.49741	0.2858	0.60664
35	C	0.42398	0.30328	0.57786
36	C	0.42386	0.37082	0.5435
37	H	0.62756	0.44547	0.56335
38	H	0.62732	0.32799	0.62335
39	H	0.36628	0.26458	0.5818
40	H	0.36424	0.38363	0.52413
41	C	0.0785	0.9984	0.96435
42	C	0.0946	0.0706	0.93373
43	C	0.16196	0.07053	0.89931
44	C	0.21425	0.99743	0.89336
45	C	0.19676	0.92401	0.92216
46	C	0.12923	0.9239	0.95651
47	H	0.05459	0.12761	0.93666
48	H	0.17208	0.12734	0.87666
49	H	0.23545	0.86629	0.91822
50	H	0.11642	0.86429	0.97589
51	C	0.57837	0.4984	0.46434
52	C	0.59445	0.57059	0.43372
53	C	0.66181	0.57053	0.39929
54	C	0.71408	0.49741	0.39332
55	C	0.6966	0.42399	0.42212
56	C	0.62909	0.4239	0.45649
57	H	0.55447	0.62761	0.43665
58	H	0.67193	0.62734	0.37664
59	H	0.7353	0.36628	0.41818
60	H	0.6163	0.36429	0.47588
61	C	0.92163	0.00161	0.96434
62	C	0.90554	0.92941	0.93372
63	C	0.83818	0.92947	0.89929
64	C	0.7859	0.00258	0.89332
65	C	0.8034	0.07601	0.92212
66	C	0.8709	0.07611	0.95649
67	H	0.94553	0.87239	0.93666
68	H	0.82807	0.87266	0.87664
69	H	0.7647	0.13371	0.91817
70	H	0.88371	0.13572	0.97586
71	C	0.4215	0.50161	0.46435
72	C	0.40539	0.42941	0.43374
73	C	0.33803	0.42947	0.39932
74	C	0.28574	0.50259	0.39336
75	C	0.30323	0.576	0.42215
76	C	0.37076	0.5761	0.45651
77	H	0.44539	0.37239	0.43666
78	H	0.3279	0.37267	0.37667
79	H	0.26453	0.63371	0.41822
80	H	0.38358	0.63571	0.47589
81	C	0.49843	0.07843	0.71435
82	C	0.57062	0.09453	0.68372
83	C	0.57055	0.16188	0.6493
84	C	0.49743	0.21417	0.64334
85	C	0.42402	0.19668	0.67214
86	C	0.42394	0.12916	0.70651
87	H	0.62764	0.05453	0.68664
88	H	0.62734	0.17201	0.62663
89	H	0.36631	0.23536	0.66821
90	H	0.36434	0.11636	0.7259

91	C	0.99835	0.57842	0.21435
92	C	0.07056	0.59451	0.18373
93	C	0.07051	0.66186	0.14931
94	C	0.99741	0.71416	0.14334
95	C	0.92397	0.69667	0.17212
96	C	0.92386	0.62915	0.20649
97	H	0.12757	0.55452	0.18668
98	H	0.12733	0.67197	0.12666
99	H	0.86627	0.73535	0.16817
100	H	0.86424	0.61635	0.22586
101	C	0.50165	0.92157	0.71434
102	C	0.42943	0.90546	0.68374
103	C	0.42947	0.83809	0.64934
104	C	0.5026	0.78582	0.64335
105	C	0.57603	0.80333	0.67212
106	C	0.57615	0.87085	0.70648
107	H	0.37241	0.94545	0.68668
108	H	0.37265	0.82796	0.62669
109	H	0.63375	0.76466	0.66817
110	H	0.63578	0.88369	0.72585
111	C	0.00158	0.42156	0.21436
112	C	0.9294	0.40548	0.18372
113	C	0.92947	0.33814	0.14929
114	C	0.00258	0.28585	0.14333
115	C	0.07599	0.30333	0.17214
116	C	0.07607	0.37084	0.20651
117	H	0.87238	0.44549	0.18664
118	H	0.87269	0.32803	0.12662
119	H	0.13371	0.26464	0.16821
120	H	0.13568	0.38365	0.2259
121	C	0.42163	0.99839	0.78567
122	C	0.40554	0.07059	0.81629
123	C	0.33818	0.07053	0.85071
124	C	0.28588	0.99742	0.85667
125	C	0.30337	0.92401	0.82788
126	C	0.37089	0.9239	0.79351
127	H	0.44554	0.12759	0.81337
128	H	0.32807	0.12733	0.87337
129	H	0.26466	0.8663	0.83181
130	H	0.3837	0.86428	0.77413
131	C	0.9215	0.49839	0.28565
132	C	0.90538	0.5706	0.31627
133	C	0.83799	0.57053	0.35067
134	C	0.78571	0.49741	0.35663
135	C	0.80323	0.42399	0.32784
136	C	0.87077	0.42389	0.29349
137	H	0.94536	0.62761	0.31334
138	H	0.82785	0.62735	0.37332
139	H	0.76452	0.36629	0.33177
140	H	0.88359	0.36428	0.27412
141	C	0.5785	0.00161	0.78566
142	C	0.59462	0.92941	0.81627
143	C	0.66199	0.92946	0.85068
144	C	0.71427	0.00258	0.85664
145	C	0.69677	0.076	0.82784
146	C	0.62922	0.0761	0.79349
147	H	0.55461	0.87239	0.81335
148	H	0.67213	0.87266	0.87333
149	H	0.73545	0.13371	0.83178
150	H	0.61639	0.13572	0.77412

151	C	0.07838	0.50161	0.28568
152	C	0.09446	0.42941	0.3163
153	C	0.16181	0.42948	0.35072
154	C	0.21411	0.50259	0.35667
155	C	0.19663	0.57599	0.32787
156	C	0.12911	0.5761	0.29351
157	H	0.05446	0.3724	0.31337
158	H	0.17194	0.37268	0.37338
159	H	0.23533	0.6337	0.3318
160	H	0.11631	0.6357	0.27411
161	C	6e-05	1e-05	1e-05
162	C	0.49995	0.5	0.5
163	C	0.50005	0.99999	0.75001
164	C	0.99995	0.5	0.25001

```

#*****
#
# CIF file created by Zeo++
# Zeo++ is an open source package to
# analyze micro-porous materials
#
#*****

```

data\_DIA\_2-fold-PPN-6.cif

```

_cell_length_a      31.014(0)
_cell_length_b      31.012(0)
_cell_length_c      26.914(0)
_cell_angle_alpha   90(0)
_cell_angle_beta    90(0)
_cell_angle_gamma   90(0)

_symmetry_space_group_name_H-M      'P1'
_symmetry_Int_Tables_number         1
_symmetry_cell_setting               Orthorhombic

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'+x,+y,+z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
0      C      0.000838331 0.0392106 0.0356692
1      C      0.00128974 0.10712 0.106636
2      C      0.0380151 0.098349 0.0778777
3      C      0.0380796 0.0645879 0.043509
4      H      0.066873 0.117696 0.081779
5      H      0.0678726 0.058171 0.024151
6      C      0.000806088 0.210789 0.214349
7      C      0.00128974 0.142912 0.143345
8      C      0.0379828 0.151651 0.172141
9      C      0.0380473 0.185412 0.20651
10     H      0.0668408 0.132336 0.168202
11     H      0.0678403 0.191829 0.225905
12     C      3.22435e-05 0 0
13     C      0.000838331 0.539211 0.0356692

```

14	C	0.00128974	0.60712	0.106636
15	C	0.0380151	0.598349	0.0778777
16	C	0.0380796	0.564588	0.043509
17	H	0.066873	0.617696	0.081779
18	H	0.0678726	0.558171	0.024151
19	C	0.000806088	0.710789	0.214349
20	C	0.00128974	0.642912	0.143345
21	C	0.0379828	0.651651	0.172141
22	C	0.0380473	0.685412	0.20651
23	H	0.0668408	0.632336	0.168202
24	H	0.0678403	0.691829	0.225905
25	C	3.22435e-05	0.5	0
26	C	0.500838	0.0392106	0.0356692
27	C	0.500838	0.539211	0.0356692
28	C	0.464726	0.047272	0.0662852
29	C	0.464726	0.547272	0.0662852
30	C	0.464726	0.0809687	0.100654
31	C	0.464726	0.580969	0.100654
32	C	0.50129	0.10712	0.106636
33	C	0.50129	0.60712	0.106636
34	C	0.538015	0.098349	0.0778777
35	C	0.538015	0.598349	0.0778777
36	C	0.53808	0.0645879	0.043509
37	C	0.53808	0.564588	0.043509
38	H	0.436222	0.0272798	0.0633499
39	H	0.436222	0.52728	0.0633499
40	H	0.436319	0.0860312	0.123319
41	H	0.436319	0.586031	0.123319
42	H	0.566873	0.117696	0.081779
43	H	0.566873	0.617696	0.081779
44	H	0.567873	0.058171	0.024151
45	H	0.567873	0.558171	0.024151
46	C	0.25079	0.289211	0.535669
47	C	0.25079	0.789211	0.535669
48	C	0.75079	0.289211	0.535669
49	C	0.75079	0.789211	0.535669
50	C	0.214677	0.297272	0.566285
51	C	0.214677	0.797272	0.566285
52	C	0.714677	0.297272	0.566285
53	C	0.714677	0.797272	0.566285
54	C	0.214742	0.330936	0.600728
55	C	0.214742	0.830936	0.600728
56	C	0.714742	0.330936	0.600728
57	C	0.714742	0.830936	0.600728
58	C	0.251306	0.357088	0.606673
59	C	0.251306	0.857088	0.606673
60	C	0.751306	0.357088	0.606673
61	C	0.751306	0.857088	0.606673
62	C	0.287999	0.348349	0.577878
63	C	0.287999	0.848349	0.577878
64	C	0.787999	0.348349	0.577878
65	C	0.787999	0.848349	0.577878
66	C	0.288031	0.314588	0.543509
67	C	0.288031	0.814588	0.543509
68	C	0.788031	0.314588	0.543509
69	C	0.788031	0.814588	0.543509
70	H	0.186174	0.27728	0.56335
71	H	0.186174	0.77728	0.56335
72	H	0.686174	0.27728	0.56335
73	H	0.686174	0.77728	0.56335

74	H	0.186335	0.335999	0.623356
75	H	0.186335	0.835999	0.623356
76	H	0.686335	0.335999	0.623356
77	H	0.686335	0.835999	0.623356
78	H	0.316857	0.367696	0.581779
79	H	0.316857	0.867696	0.581779
80	H	0.816857	0.367696	0.581779
81	H	0.816857	0.867696	0.581779
82	H	0.317824	0.308171	0.524114
83	H	0.317824	0.808171	0.524114
84	H	0.817824	0.308171	0.524114
85	H	0.817824	0.808171	0.524114
86	C	0.499226	0.460789	0.0356692
87	C	0.499226	0.960789	0.0356692
88	C	0.999226	0.460789	0.0356692
89	C	0.999226	0.960789	0.0356692
90	C	0.535307	0.452728	0.0662852
91	C	0.535307	0.952728	0.0662852
92	C	0.535274	0.419031	0.100691
93	C	0.535274	0.919031	0.100691
94	C	0.49871	0.392912	0.106636
95	C	0.49871	0.892912	0.106636
96	C	0.99871	0.392912	0.106636
97	C	0.99871	0.892912	0.106636
98	C	0.462017	0.401651	0.0778405
99	C	0.462017	0.901651	0.0778405
100	C	0.962017	0.401651	0.0778405
101	C	0.962017	0.901651	0.0778405
102	C	0.461985	0.435412	0.0434718
103	C	0.461985	0.935412	0.0434718
104	C	0.961985	0.435412	0.0434718
105	C	0.961985	0.935412	0.0434718
106	H	0.563842	0.47272	0.0633499
107	H	0.563842	0.97272	0.0633499
108	H	0.563681	0.413969	0.123356
109	H	0.563681	0.913969	0.123356
110	H	0.433159	0.382304	0.081779
111	H	0.433159	0.882304	0.081779
112	H	0.933159	0.382304	0.081779
113	H	0.933159	0.882304	0.081779
114	H	0.43216	0.441829	0.0241138
115	H	0.43216	0.941829	0.0241138
116	H	0.93216	0.441829	0.0241138
117	H	0.93216	0.941829	0.0241138
118	C	0.249178	0.210789	0.535669
119	C	0.249178	0.710789	0.535669
120	C	0.749178	0.210789	0.535669
121	C	0.749178	0.710789	0.535669
122	C	0.285291	0.202728	0.566285
123	C	0.285291	0.702728	0.566285
124	C	0.785291	0.202728	0.566285
125	C	0.785291	0.702728	0.566285
126	C	0.285258	0.169064	0.600691
127	C	0.285258	0.669064	0.600691
128	C	0.785258	0.169064	0.600691
129	C	0.785258	0.669064	0.600691
130	C	0.248694	0.142912	0.606636
131	C	0.248694	0.642912	0.606636
132	C	0.748694	0.142912	0.606636
133	C	0.748694	0.642912	0.606636

134	C	0.212001	0.151651	0.577878
135	C	0.212001	0.651651	0.577878
136	C	0.712001	0.151651	0.577878
137	C	0.712001	0.651651	0.577878
138	C	0.211937	0.185412	0.543509
139	C	0.211937	0.685412	0.543509
140	C	0.711937	0.185412	0.543509
141	C	0.711937	0.685412	0.543509
142	H	0.313794	0.22272	0.56335
143	H	0.313794	0.72272	0.56335
144	H	0.813794	0.22272	0.56335
145	H	0.813794	0.72272	0.56335
146	H	0.313665	0.164001	0.623356
147	H	0.313665	0.664001	0.623356
148	H	0.813665	0.164001	0.623356
149	H	0.813665	0.664001	0.623356
150	H	0.183143	0.132304	0.581816
151	H	0.183143	0.632304	0.581816
152	H	0.683143	0.132304	0.581816
153	H	0.683143	0.632304	0.581816
154	H	0.182111	0.191829	0.524114
155	H	0.182111	0.691829	0.524114
156	H	0.682111	0.191829	0.524114
157	H	0.682111	0.691829	0.524114
158	C	0.0392403	0.499194	0.964368
159	C	0.0392403	0.999194	0.964368
160	C	0.53924	0.499194	0.964368
161	C	0.53924	0.999194	0.964368
162	C	0.0473012	0.535309	0.933715
163	C	0.547301	0.535309	0.933715
164	C	0.0809957	0.535277	0.899309
165	C	0.580996	0.535277	0.899309
166	C	0.107113	0.49871	0.893364
167	C	0.107113	0.99871	0.893364
168	C	0.607113	0.49871	0.893364
169	C	0.607113	0.99871	0.893364
170	C	0.0983749	0.462015	0.922159
171	C	0.0983749	0.962015	0.922159
172	C	0.598375	0.462015	0.922159
173	C	0.598375	0.962015	0.922159
174	C	0.064616	0.46195	0.956528
175	C	0.064616	0.96195	0.956528
176	C	0.564616	0.46195	0.956528
177	C	0.564616	0.96195	0.956528
178	H	0.0273102	0.563814	0.93665
179	H	0.52731	0.563814	0.93665
180	H	0.0860257	0.563685	0.876644
181	H	0.586026	0.563685	0.876644
182	H	0.117721	0.433155	0.918221
183	H	0.117721	0.933155	0.918221
184	H	0.617721	0.433155	0.918221
185	H	0.617721	0.933155	0.918221
186	H	0.0581995	0.432155	0.975886
187	H	0.0581995	0.932155	0.975886
188	H	0.5582	0.432155	0.975886
189	H	0.5582	0.932155	0.975886
190	C	0.289192	0.249194	0.464331
191	C	0.289192	0.749194	0.464331
192	C	0.789192	0.249194	0.464331
193	C	0.789192	0.749194	0.464331



194	C	0.297221	0.285309	0.433715
195	C	0.297221	0.785309	0.433715
196	C	0.797221	0.285309	0.433715
197	C	0.797221	0.785309	0.433715
198	C	0.330915	0.285277	0.399272
199	C	0.330915	0.785277	0.399272
200	C	0.830915	0.285277	0.399272
201	C	0.830915	0.785277	0.399272
202	C	0.357032	0.24871	0.393327
203	C	0.357032	0.74871	0.393327
204	C	0.857032	0.24871	0.393327
205	C	0.857032	0.74871	0.393327
206	C	0.348294	0.211982	0.422122
207	C	0.348294	0.711982	0.422122
208	C	0.848294	0.211982	0.422122
209	C	0.848294	0.711982	0.422122
210	C	0.314535	0.21195	0.456491
211	C	0.314535	0.71195	0.456491
212	C	0.814535	0.21195	0.456491
213	C	0.814535	0.71195	0.456491
214	H	0.27723	0.313814	0.43665
215	H	0.27723	0.813814	0.43665
216	H	0.77723	0.313814	0.43665
217	H	0.77723	0.813814	0.43665
218	H	0.335977	0.313685	0.376644
219	H	0.335977	0.813685	0.376644
220	H	0.835977	0.313685	0.376644
221	H	0.835977	0.813685	0.376644
222	H	0.36764	0.183155	0.418184
223	H	0.36764	0.683155	0.418184
224	H	0.86764	0.183155	0.418184
225	H	0.86764	0.683155	0.418184
226	H	0.308151	0.182155	0.475886
227	H	0.308151	0.682155	0.475886
228	H	0.808151	0.182155	0.475886
229	H	0.808151	0.682155	0.475886
230	C	0.460824	0.500806	0.964331
231	C	0.960824	0.500806	0.964331
232	C	0.452763	0.464691	0.933715
233	C	0.952763	0.464691	0.933715
234	C	0.419101	0.464723	0.899272
235	C	0.919101	0.464723	0.899272
236	C	0.392952	0.50129	0.893327
237	C	0.892952	0.50129	0.893327
238	C	0.40169	0.538018	0.922122
239	C	0.90169	0.538018	0.922122
240	C	0.435449	0.53805	0.956491
241	C	0.935449	0.53805	0.956491
242	H	0.472754	0.436186	0.93665
243	H	0.972754	0.436186	0.93665
244	H	0.414039	0.436315	0.876644
245	H	0.914039	0.436315	0.876644
246	H	0.382343	0.566845	0.918184
247	H	0.882343	0.566845	0.918184
248	H	0.441865	0.567845	0.975849
249	H	0.941865	0.567845	0.975849
250	C	0.210744	0.250806	0.464368
251	C	0.210744	0.750806	0.464368
252	C	0.710744	0.250806	0.464368
253	C	0.710744	0.750806	0.464368

254	C	0.202683	0.214691	0.433752
255	C	0.202683	0.714691	0.433752
256	C	0.702683	0.214691	0.433752
257	C	0.702683	0.714691	0.433752
258	C	0.16902	0.214723	0.399309
259	C	0.16902	0.714723	0.399309
260	C	0.66902	0.214723	0.399309
261	C	0.66902	0.714723	0.399309
262	C	0.142871	0.25129	0.393364
263	C	0.142871	0.75129	0.393364
264	C	0.642871	0.25129	0.393364
265	C	0.642871	0.75129	0.393364
266	C	0.151609	0.287985	0.422159
267	C	0.151609	0.787985	0.422159
268	C	0.651609	0.287985	0.422159
269	C	0.651609	0.787985	0.422159
270	C	0.185368	0.28805	0.456528
271	C	0.185368	0.78805	0.456528
272	C	0.685368	0.28805	0.456528
273	C	0.685368	0.78805	0.456528
274	H	0.222706	0.186186	0.43665
275	H	0.222706	0.686186	0.43665
276	H	0.722706	0.186186	0.43665
277	H	0.722706	0.686186	0.43665
278	H	0.163958	0.186347	0.376681
279	H	0.163958	0.686347	0.376681
280	H	0.663958	0.186347	0.376681
281	H	0.663958	0.686347	0.376681
282	H	0.132263	0.316845	0.418221
283	H	0.132263	0.816845	0.418221
284	H	0.632263	0.316845	0.418221
285	H	0.632263	0.816845	0.418221
286	H	0.191784	0.317845	0.475886
287	H	0.191784	0.817845	0.475886
288	H	0.691784	0.317845	0.475886
289	H	0.691784	0.817845	0.475886
290	C	0.24921	0.0392106	0.714349
291	C	0.24921	0.539211	0.714349
292	C	0.74921	0.0392106	0.714349
293	C	0.74921	0.539211	0.714349
294	C	0.285323	0.047272	0.683733
295	C	0.285323	0.547272	0.683733
296	C	0.785323	0.047272	0.683733
297	C	0.785323	0.547272	0.683733
298	C	0.285291	0.0809364	0.64929
299	C	0.285291	0.580936	0.64929
300	C	0.785291	0.0809364	0.64929
301	C	0.785291	0.580936	0.64929
302	C	0.248726	0.107088	0.643345
303	C	0.248726	0.607088	0.643345
304	C	0.748726	0.107088	0.643345
305	C	0.748726	0.607088	0.643345
306	C	0.212001	0.098349	0.672141
307	C	0.212001	0.598349	0.672141
308	C	0.712001	0.098349	0.672141
309	C	0.712001	0.598349	0.672141
310	C	0.211969	0.0645879	0.70651
311	C	0.211969	0.564588	0.70651
312	C	0.711969	0.0645879	0.70651
313	C	0.711969	0.564588	0.70651

314	H	0.313826	0.0272798	0.686631
315	H	0.313826	0.52728	0.686631
316	H	0.813826	0.0272798	0.686631
317	H	0.813826	0.52728	0.686631
318	H	0.313665	0.085999	0.626626
319	H	0.313665	0.585999	0.626626
320	H	0.813665	0.085999	0.626626
321	H	0.813665	0.585999	0.626626
322	H	0.183143	0.117664	0.668202
323	H	0.183143	0.617664	0.668202
324	H	0.683143	0.117664	0.668202
325	H	0.683143	0.617664	0.668202
326	H	0.182176	0.058171	0.725905
327	H	0.182176	0.558171	0.725905
328	H	0.682176	0.058171	0.725905
329	H	0.682176	0.558171	0.725905
330	C	0.499162	0.289211	0.214349
331	C	0.499162	0.789211	0.214349
332	C	0.999162	0.289211	0.214349
333	C	0.999162	0.789211	0.214349
334	C	0.535274	0.29724	0.183733
335	C	0.535274	0.79724	0.183733
336	C	0.535242	0.330936	0.149327
337	C	0.535242	0.830936	0.149327
338	C	0.49871	0.357088	0.143345
339	C	0.49871	0.857088	0.143345
340	C	0.99871	0.357088	0.143345
341	C	0.99871	0.857088	0.143345
342	C	0.461985	0.348349	0.172104
343	C	0.461985	0.848349	0.172104
344	C	0.961985	0.348349	0.172104
345	C	0.961985	0.848349	0.172104
346	C	0.46192	0.314588	0.206472
347	C	0.46192	0.814588	0.206472
348	C	0.96192	0.314588	0.206472
349	C	0.96192	0.814588	0.206472
350	H	0.563778	0.277248	0.186669
351	H	0.563778	0.777248	0.186669
352	H	0.563681	0.335999	0.126663
353	H	0.563681	0.835999	0.126663
354	H	0.433127	0.367664	0.168165
355	H	0.433127	0.867664	0.168165
356	H	0.933127	0.367664	0.168165
357	H	0.933127	0.867664	0.168165
358	H	0.432127	0.308171	0.225868
359	H	0.432127	0.808171	0.225868
360	H	0.932127	0.308171	0.225868
361	H	0.932127	0.808171	0.225868
362	C	0.250822	0.460789	0.714349
363	C	0.250822	0.960789	0.714349
364	C	0.750822	0.460789	0.714349
365	C	0.750822	0.960789	0.714349
366	C	0.214709	0.452728	0.683733
367	C	0.214709	0.952728	0.683733
368	C	0.714709	0.452728	0.683733
369	C	0.714709	0.952728	0.683733
370	C	0.214742	0.419031	0.649327
371	C	0.214742	0.919031	0.649327
372	C	0.714742	0.419031	0.649327
373	C	0.714742	0.919031	0.649327

374	C	0.251306	0.392912	0.643345
375	C	0.251306	0.892912	0.643345
376	C	0.751306	0.392912	0.643345
377	C	0.751306	0.892912	0.643345
378	C	0.287999	0.401651	0.672104
379	C	0.287999	0.901651	0.672104
380	C	0.787999	0.401651	0.672104
381	C	0.787999	0.901651	0.672104
382	C	0.288063	0.435412	0.706472
383	C	0.288063	0.935412	0.706472
384	C	0.788063	0.435412	0.706472
385	C	0.788063	0.935412	0.706472
386	H	0.186206	0.47272	0.686669
387	H	0.186206	0.97272	0.686669
388	H	0.686206	0.47272	0.686669
389	H	0.686206	0.97272	0.686669
390	H	0.186335	0.413969	0.6267
391	H	0.186335	0.913969	0.6267
392	H	0.686335	0.413969	0.6267
393	H	0.686335	0.913969	0.6267
394	H	0.316889	0.382336	0.668165
395	H	0.316889	0.882336	0.668165
396	H	0.816889	0.382336	0.668165
397	H	0.816889	0.882336	0.668165
398	H	0.317889	0.441829	0.725868
399	H	0.317889	0.941829	0.725868
400	H	0.817889	0.441829	0.725868
401	H	0.817889	0.941829	0.725868
402	C	0.500806	0.210789	0.214349
403	C	0.500806	0.710789	0.214349
404	C	0.464693	0.202728	0.183733
405	C	0.464693	0.702728	0.183733
406	C	0.464726	0.169064	0.14929
407	C	0.464726	0.669064	0.14929
408	C	0.50129	0.142912	0.143345
409	C	0.50129	0.642912	0.143345
410	C	0.537983	0.151651	0.172141
411	C	0.537983	0.651651	0.172141
412	C	0.538047	0.185412	0.20651
413	C	0.538047	0.685412	0.20651
414	H	0.43619	0.222752	0.186631
415	H	0.43619	0.722752	0.186631
416	H	0.436351	0.164001	0.126626
417	H	0.436351	0.664001	0.126626
418	H	0.566841	0.132336	0.168202
419	H	0.566841	0.632336	0.168202
420	H	0.56784	0.191829	0.225905
421	H	0.56784	0.691829	0.225905
422	C	0.210808	0.499194	0.785688
423	C	0.210808	0.999194	0.785688
424	C	0.710808	0.499194	0.785688
425	C	0.710808	0.999194	0.785688
426	C	0.202779	0.535309	0.816304
427	C	0.702779	0.535309	0.816304
428	C	0.169085	0.535277	0.85071
429	C	0.669085	0.535277	0.85071
430	C	0.142935	0.49871	0.856655
431	C	0.142935	0.99871	0.856655
432	C	0.642935	0.49871	0.856655
433	C	0.642935	0.99871	0.856655

434	C	0.151673	0.462015	0.827896
435	C	0.151673	0.962015	0.827896
436	C	0.651673	0.462015	0.827896
437	C	0.651673	0.962015	0.827896
438	C	0.185432	0.46195	0.793528
439	C	0.185432	0.96195	0.793528
440	C	0.685432	0.46195	0.793528
441	C	0.685432	0.96195	0.793528
442	H	0.22277	0.563782	0.813369
443	H	0.72277	0.563782	0.813369
444	H	0.164023	0.563653	0.873374
445	H	0.664023	0.563653	0.873374
446	H	0.132327	0.433155	0.831798
447	H	0.132327	0.933155	0.831798
448	H	0.632327	0.433155	0.831798
449	H	0.632327	0.933155	0.831798
450	H	0.191849	0.432155	0.774132
451	H	0.191849	0.932155	0.774132
452	H	0.691849	0.432155	0.774132
453	H	0.691849	0.932155	0.774132
454	C	0.46076	0.249194	0.285651
455	C	0.46076	0.749194	0.285651
456	C	0.96076	0.249194	0.285651
457	C	0.96076	0.749194	0.285651
458	C	0.452699	0.285309	0.316267
459	C	0.452699	0.785309	0.316267
460	C	0.952699	0.285309	0.316267
461	C	0.952699	0.785309	0.316267
462	C	0.419004	0.285277	0.350673
463	C	0.419004	0.785277	0.350673
464	C	0.919004	0.285277	0.350673
465	C	0.919004	0.785277	0.350673
466	C	0.392855	0.24871	0.356617
467	C	0.392855	0.74871	0.356617
468	C	0.892855	0.24871	0.356617
469	C	0.892855	0.74871	0.356617
470	C	0.401625	0.211982	0.327822
471	C	0.401625	0.711982	0.327822
472	C	0.901625	0.211982	0.327822
473	C	0.901625	0.711982	0.327822
474	C	0.435384	0.21195	0.29349
475	C	0.435384	0.71195	0.29349
476	C	0.935384	0.21195	0.29349
477	C	0.935384	0.71195	0.29349
478	H	0.47269	0.313814	0.313331
479	H	0.47269	0.813814	0.313331
480	H	0.97269	0.313814	0.313331
481	H	0.97269	0.813814	0.313331
482	H	0.41391	0.313685	0.373337
483	H	0.41391	0.813685	0.373337
484	H	0.91391	0.313685	0.373337
485	H	0.91391	0.813685	0.373337
486	H	0.382247	0.183155	0.33176
487	H	0.382247	0.683155	0.33176
488	H	0.882247	0.183155	0.33176
489	H	0.882247	0.683155	0.33176
490	H	0.4418	0.182155	0.274132
491	H	0.4418	0.682155	0.274132
492	H	0.9418	0.182155	0.274132
493	H	0.9418	0.682155	0.274132

494	C	0.289256	0.500806	0.785651
495	C	0.789256	0.500806	0.785651
496	C	0.297317	0.464691	0.816267
497	C	0.797317	0.464691	0.816267
498	C	0.33098	0.464723	0.850673
499	C	0.83098	0.464723	0.850673
500	C	0.357129	0.50129	0.856655
501	C	0.857129	0.50129	0.856655
502	C	0.348391	0.537985	0.827822
503	C	0.848391	0.537985	0.827822
504	C	0.3146	0.53805	0.79349
505	C	0.8146	0.53805	0.79349
506	H	0.277294	0.436186	0.813369
507	H	0.777294	0.436186	0.813369
508	H	0.336074	0.436315	0.873337
509	H	0.836074	0.436315	0.873337
510	H	0.367737	0.566845	0.831798
511	H	0.867737	0.566845	0.831798
512	H	0.308183	0.567845	0.774132
513	H	0.808183	0.567845	0.774132
514	C	0.0391759	0.250806	0.285688
515	C	0.0391759	0.750806	0.285688
516	C	0.539176	0.250806	0.285688
517	C	0.539176	0.750806	0.285688
518	C	0.0472367	0.214691	0.316304
519	C	0.0472367	0.714691	0.316304
520	C	0.547237	0.214691	0.316304
521	C	0.547237	0.714691	0.316304
522	C	0.0808989	0.214756	0.35071
523	C	0.0808989	0.714756	0.35071
524	C	0.580899	0.214756	0.35071
525	C	0.580899	0.714756	0.35071
526	C	0.107048	0.25129	0.356655
527	C	0.107048	0.75129	0.356655
528	C	0.607048	0.25129	0.356655
529	C	0.607048	0.75129	0.356655
530	C	0.0983104	0.287985	0.327859
531	C	0.0983104	0.787985	0.327859
532	C	0.59831	0.287985	0.327859
533	C	0.59831	0.787985	0.327859
534	C	0.0645515	0.28805	0.293528
535	C	0.0645515	0.78805	0.293528
536	C	0.564551	0.28805	0.293528
537	C	0.564551	0.78805	0.293528
538	H	0.0272458	0.186186	0.313369
539	H	0.0272458	0.686186	0.313369
540	H	0.527246	0.186186	0.313369
541	H	0.527246	0.686186	0.313369
542	H	0.0859612	0.186347	0.373374
543	H	0.0859612	0.686347	0.373374
544	H	0.585961	0.186347	0.373374
545	H	0.585961	0.686347	0.373374
546	H	0.117657	0.316845	0.331798
547	H	0.117657	0.816845	0.331798
548	H	0.617657	0.316845	0.331798
549	H	0.617657	0.816845	0.331798
550	H	0.0581673	0.317845	0.274095
551	H	0.0581673	0.817845	0.274095
552	H	0.558167	0.317845	0.274095
553	H	0.558167	0.817845	0.274095

554	C	0.500032	0	0
555	C	0.500032	0.5	0
556	C	0.249984	0.25	0.5
557	C	0.249984	0.75	0.5
558	C	0.749984	0.25	0.5
559	C	0.749984	0.75	0.5
560	C	0.250016	0.5	0.750019
561	C	0.250016	0	0.750019
562	C	0.750016	0.5	0.750019
563	C	0.750016	0	0.750019
564	C	0.499968	0.25	0.250019
565	C	0.499968	0.75	0.250019
566	C	0.999968	0.25	0.250019
567	C	0.999968	0.75	0.250019
568	C	0.964726	0.047272	0.0662852
569	C	0.964726	0.0809687	0.100654
570	H	0.936222	0.0272798	0.0633499
571	H	0.936319	0.0860312	0.123319
572	C	0.964726	0.547272	0.0662852
573	C	0.964726	0.580969	0.100654
574	H	0.936222	0.52728	0.0633499
575	H	0.936319	0.586031	0.123319
576	C	0.0353066	0.452728	0.0662852
577	C	0.0352744	0.419031	0.100691
578	H	0.0638421	0.47272	0.0633499
579	H	0.0636809	0.413969	0.123356
580	C	0.0353066	0.952728	0.0662852
581	C	0.0352744	0.919031	0.100691
582	H	0.0638421	0.97272	0.0633499
583	H	0.0636809	0.913969	0.123356
584	C	0.0473012	0.0353089	0.933715
585	C	0.0809957	0.0352767	0.899309
586	H	0.0273102	0.063814	0.93665
587	H	0.0860257	0.063685	0.876644
588	C	0.547301	0.0353089	0.933715
589	C	0.580996	0.0352767	0.899309
590	H	0.52731	0.063814	0.93665
591	H	0.586026	0.063685	0.876644
592	C	0.460824	0.00080614	0.964331
593	C	0.392952	0.00128982	0.893327
594	C	0.40169	0.0380175	0.922122
595	C	0.435449	0.0380498	0.956491
596	H	0.382343	0.0668451	0.918184
597	H	0.441865	0.0678447	0.975849
598	C	0.289256	0.00080614	0.785651
599	C	0.357129	0.00128982	0.856655
600	C	0.348391	0.0379853	0.827822
601	C	0.3146	0.0380498	0.79349
602	H	0.367737	0.0668451	0.831798
603	H	0.308183	0.0678447	0.774132
604	C	0.960824	0.00080614	0.964331
605	C	0.892952	0.00128982	0.893327
606	C	0.90169	0.0380175	0.922122
607	C	0.935449	0.0380498	0.956491
608	H	0.882343	0.0668451	0.918184
609	H	0.941865	0.0678447	0.975849
610	C	0.789256	0.00080614	0.785651
611	C	0.857129	0.00128982	0.856655
612	C	0.848391	0.0379853	0.827822
613	C	0.8146	0.0380498	0.79349

614	H	0.867737	0.0668451	0.831798
615	H	0.808183	0.0678447	0.774132
616	C	0.452763	0.964691	0.933715
617	C	0.419101	0.964723	0.899272
618	H	0.472754	0.936186	0.93665
619	H	0.414039	0.936315	0.876644
620	C	0.952763	0.964691	0.933715
621	C	0.919101	0.964723	0.899272
622	H	0.972754	0.936186	0.93665
623	H	0.914039	0.936315	0.876644
624	C	0.0352744	0.29724	0.183733
625	C	0.0352421	0.330936	0.149327
626	H	0.0637776	0.277248	0.186669
627	H	0.0636809	0.335999	0.126663
628	C	0.0352744	0.79724	0.183733
629	C	0.0352421	0.830936	0.149327
630	H	0.0637776	0.777248	0.186669
631	H	0.0636809	0.835999	0.126663
632	C	0.964693	0.202728	0.183733
633	C	0.964726	0.169064	0.14929
634	H	0.93619	0.222752	0.186631
635	H	0.936351	0.164001	0.126626
636	C	0.964693	0.702728	0.183733
637	C	0.964726	0.669064	0.14929
638	H	0.93619	0.722752	0.186631
639	H	0.936351	0.664001	0.126626
640	C	0.202779	0.0353089	0.816304
641	C	0.169085	0.0352767	0.85071
642	H	0.22277	0.0637818	0.813369
643	H	0.164023	0.0636528	0.873374
644	C	0.702779	0.0353089	0.816304
645	C	0.669085	0.0352767	0.85071
646	H	0.72277	0.0637818	0.813369
647	H	0.664023	0.0636528	0.873374
648	C	0.297317	0.964691	0.816267
649	C	0.33098	0.964723	0.850673
650	H	0.277294	0.936186	0.813369
651	H	0.336074	0.936315	0.873337
652	C	0.797317	0.964691	0.816267
653	C	0.83098	0.964723	0.850673
654	H	0.777294	0.936186	0.813369
655	H	0.836074	0.936315	0.873337
656	C	0.000838331	0.0392106	0.258601
657	C	0.00128974	0.10712	0.329568
658	C	0.0380151	0.098349	0.30081
659	C	0.0380796	0.0645879	0.266441
660	H	0.066873	0.117696	0.304711
661	H	0.0678726	0.058171	0.247083
662	C	0.000806088	0.210789	0.437282
663	C	0.00128974	0.142912	0.366278
664	C	0.0379828	0.151651	0.395073
665	C	0.0380473	0.185412	0.429442
666	H	0.0668408	0.132336	0.391135
667	H	0.0678403	0.191829	0.448837
668	C	3.22435e-05	1 0.222932	
669	C	0.000838331	0.539211	0.258601
670	C	0.00128974	0.60712	0.329568
671	C	0.0380151	0.598349	0.30081
672	C	0.0380796	0.564588	0.266441
673	H	0.066873	0.617696	0.304711



674	H	0.0678726	0.558171	0.247083
675	C	0.0392403	0.499194	0.187263
676	C	0.0473012	0.535309	0.156647
677	C	0.0809957	0.535277	0.122241
678	C	0.107113	0.49871	0.116296
679	C	0.0983749	0.462015	0.145092
680	C	0.064616	0.46195	0.179423
681	H	0.0273102	0.563814	0.159582
682	H	0.0860257	0.563685	0.0995764
683	H	0.117721	0.433155	0.141153
684	H	0.0581995	0.432155	0.198818
685	C	0.000806088	0.710789	0.437282
686	C	0.00128974	0.642912	0.366278
687	C	0.0379828	0.651651	0.395073
688	C	0.0380473	0.685412	0.429442
689	H	0.0668408	0.632336	0.391135
690	H	0.0678403	0.691829	0.448837
691	C	0.210808	0.499194	0.00858289
692	C	0.202779	0.535309	0.0392361
693	C	0.169085	0.535277	0.073642
694	C	0.142935	0.49871	0.0795868
695	C	0.151673	0.462015	0.0508286
696	C	0.185432	0.46195	0.0164227
697	H	0.22277	0.563782	0.0363008
698	H	0.164023	0.563653	0.0963068
699	H	0.132327	0.433155	0.0547299
700	C	3.22435e-05	0.5	0.222932
701	C	0.500838	0.0392106	0.258601
702	C	0.500838	0.539211	0.258601
703	C	0.464726	0.047272	0.289218
704	C	0.464726	0.547272	0.289218
705	C	0.464726	0.0809687	0.323586
706	C	0.464726	0.580969	0.323586
707	C	0.50129	0.10712	0.329568
708	C	0.50129	0.60712	0.329568
709	C	0.538015	0.098349	0.30081
710	C	0.538015	0.598349	0.30081
711	C	0.53808	0.0645879	0.266441
712	C	0.53808	0.564588	0.266441
713	H	0.436222	0.0272798	0.286282
714	H	0.436222	0.52728	0.286282
715	H	0.436319	0.0860312	0.346251
716	H	0.436319	0.586031	0.346251
717	H	0.566873	0.117696	0.304711
718	H	0.566873	0.617696	0.304711
719	H	0.567873	0.058171	0.247083
720	H	0.567873	0.558171	0.247083
721	C	0.25079	0.289211	0.758601
722	C	0.25079	0.789211	0.758601
723	C	0.75079	0.289211	0.758601
724	C	0.75079	0.789211	0.758601
725	C	0.214677	0.297272	0.789218
726	C	0.214677	0.797272	0.789218
727	C	0.714677	0.297272	0.789218
728	C	0.714677	0.797272	0.789218
729	C	0.214742	0.330936	0.823661
730	C	0.214742	0.830936	0.823661
731	C	0.714742	0.330936	0.823661
732	C	0.714742	0.830936	0.823661
733	C	0.251306	0.357088	0.829605

734	C	0.251306	0.857088	0.829605
735	C	0.751306	0.357088	0.829605
736	C	0.751306	0.857088	0.829605
737	C	0.287999	0.348349	0.80081
738	C	0.287999	0.848349	0.80081
739	C	0.787999	0.348349	0.80081
740	C	0.787999	0.848349	0.80081
741	C	0.288031	0.314588	0.766441
742	C	0.288031	0.814588	0.766441
743	C	0.788031	0.314588	0.766441
744	C	0.788031	0.814588	0.766441
745	H	0.186174	0.27728	0.786282
746	H	0.186174	0.77728	0.786282
747	H	0.686174	0.27728	0.786282
748	H	0.686174	0.77728	0.786282
749	H	0.186335	0.335999	0.846288
750	H	0.186335	0.835999	0.846288
751	H	0.686335	0.335999	0.846288
752	H	0.686335	0.835999	0.846288
753	H	0.316857	0.367696	0.804711
754	H	0.316857	0.867696	0.804711
755	H	0.816857	0.367696	0.804711
756	H	0.816857	0.867696	0.804711
757	H	0.317824	0.308171	0.747046
758	H	0.317824	0.808171	0.747046
759	H	0.817824	0.308171	0.747046
760	H	0.817824	0.808171	0.747046
761	C	0.499226	0.460789	0.258601
762	C	0.499226	0.960789	0.258601
763	C	0.999226	0.460789	0.258601
764	C	0.999226	0.960789	0.258601
765	C	0.535307	0.452728	0.289218
766	C	0.535307	0.952728	0.289218
767	C	0.535274	0.419031	0.323623
768	C	0.535274	0.919031	0.323623
769	C	0.49871	0.392912	0.329568
770	C	0.49871	0.892912	0.329568
771	C	0.99871	0.392912	0.329568
772	C	0.99871	0.892912	0.329568
773	C	0.462017	0.401651	0.300773
774	C	0.462017	0.901651	0.300773
775	C	0.962017	0.401651	0.300773
776	C	0.962017	0.901651	0.300773
777	C	0.461985	0.435412	0.266441
778	C	0.461985	0.935412	0.266441
779	C	0.961985	0.435412	0.266441
780	C	0.961985	0.935412	0.266441
781	H	0.563842	0.47272	0.286282
782	H	0.563842	0.97272	0.286282
783	H	0.563681	0.413969	0.346288
784	H	0.563681	0.913969	0.346288
785	H	0.433159	0.382304	0.304711
786	H	0.433159	0.882304	0.304711
787	H	0.933159	0.382304	0.304711
788	H	0.933159	0.882304	0.304711
789	H	0.43216	0.441829	0.247046
790	H	0.43216	0.941829	0.247046
791	H	0.93216	0.441829	0.247046
792	H	0.93216	0.941829	0.247046
793	C	0.249178	0.210789	0.758601

794	C	0.249178	0.710789	0.758601
795	C	0.749178	0.210789	0.758601
796	C	0.749178	0.710789	0.758601
797	C	0.285291	0.202728	0.789218
798	C	0.285291	0.702728	0.789218
799	C	0.785291	0.202728	0.789218
800	C	0.785291	0.702728	0.789218
801	C	0.285258	0.169064	0.823623
802	C	0.285258	0.669064	0.823623
803	C	0.785258	0.169064	0.823623
804	C	0.785258	0.669064	0.823623
805	C	0.248694	0.142912	0.829568
806	C	0.248694	0.642912	0.829568
807	C	0.748694	0.142912	0.829568
808	C	0.748694	0.642912	0.829568
809	C	0.212001	0.151651	0.80081
810	C	0.212001	0.651651	0.80081
811	C	0.712001	0.151651	0.80081
812	C	0.712001	0.651651	0.80081
813	C	0.211937	0.185412	0.766441
814	C	0.211937	0.685412	0.766441
815	C	0.711937	0.185412	0.766441
816	C	0.711937	0.685412	0.766441
817	H	0.313794	0.22272	0.786282
818	H	0.313794	0.72272	0.786282
819	H	0.813794	0.22272	0.786282
820	H	0.813794	0.72272	0.786282
821	H	0.313665	0.164001	0.846288
822	H	0.313665	0.664001	0.846288
823	H	0.813665	0.164001	0.846288
824	H	0.813665	0.664001	0.846288
825	H	0.183143	0.132304	0.804748
826	H	0.183143	0.632304	0.804748
827	H	0.683143	0.132304	0.804748
828	H	0.683143	0.632304	0.804748
829	H	0.182111	0.191829	0.747046
830	H	0.182111	0.691829	0.747046
831	H	0.682111	0.191829	0.747046
832	H	0.682111	0.691829	0.747046
833	C	0.53924	0.499194	0.187263
834	C	0.547301	0.535309	0.156647
835	C	0.580996	0.535277	0.122241
836	C	0.607113	0.49871	0.116296
837	C	0.598375	0.462015	0.145092
838	C	0.564616	0.46195	0.179423
839	H	0.52731	0.563814	0.159582
840	H	0.586026	0.563685	0.0995764
841	H	0.617721	0.433155	0.141153
842	H	0.5582	0.432155	0.198818
843	C	0.289192	0.249194	0.687263
844	C	0.289192	0.749194	0.687263
845	C	0.789192	0.249194	0.687263
846	C	0.789192	0.749194	0.687263
847	C	0.297221	0.285309	0.656647
848	C	0.297221	0.785309	0.656647
849	C	0.797221	0.285309	0.656647
850	C	0.797221	0.785309	0.656647
851	C	0.330915	0.285277	0.622241
852	C	0.330915	0.785277	0.622241
853	C	0.830915	0.285277	0.622241

854	C	0.830915	0.785277	0.622241
855	C	0.357032	0.24871	0.616259
856	C	0.357032	0.74871	0.616259
857	C	0.857032	0.24871	0.616259
858	C	0.857032	0.74871	0.616259
859	C	0.348294	0.211982	0.645055
860	C	0.348294	0.711982	0.645055
861	C	0.848294	0.211982	0.645055
862	C	0.848294	0.711982	0.645055
863	C	0.314535	0.21195	0.679423
864	C	0.314535	0.71195	0.679423
865	C	0.814535	0.21195	0.679423
866	C	0.814535	0.71195	0.679423
867	H	0.27723	0.313814	0.659582
868	H	0.27723	0.813814	0.659582
869	H	0.77723	0.313814	0.659582
870	H	0.77723	0.813814	0.659582
871	H	0.335977	0.313685	0.599576
872	H	0.335977	0.813685	0.599576
873	H	0.835977	0.313685	0.599576
874	H	0.835977	0.813685	0.599576
875	H	0.36764	0.183155	0.641116
876	H	0.36764	0.683155	0.641116
877	H	0.86764	0.183155	0.641116
878	H	0.86764	0.683155	0.641116
879	H	0.308151	0.182155	0.698818
880	H	0.308151	0.682155	0.698818
881	H	0.808151	0.182155	0.698818
882	H	0.808151	0.682155	0.698818
883	C	0.460824	0.00080614	0.187263
884	C	0.460824	0.500806	0.187263
885	C	0.452763	0.464691	0.156647
886	C	0.419101	0.464723	0.122204
887	C	0.392952	0.00128982	0.116259
888	C	0.392952	0.50129	0.116259
889	C	0.40169	0.0380175	0.145055
890	C	0.40169	0.538018	0.145055
891	C	0.435449	0.0380498	0.179423
892	C	0.435449	0.53805	0.179423
893	H	0.472754	0.436186	0.159582
894	H	0.414039	0.436315	0.0995764
895	H	0.382343	0.0668451	0.141116
896	H	0.382343	0.566845	0.141116
897	H	0.441865	0.0678447	0.198781
898	H	0.441865	0.567845	0.198781
899	C	0.210744	0.250806	0.6873
900	C	0.210744	0.750806	0.6873
901	C	0.710744	0.250806	0.6873
902	C	0.710744	0.750806	0.6873
903	C	0.202683	0.214691	0.656684
904	C	0.202683	0.714691	0.656684
905	C	0.702683	0.214691	0.656684
906	C	0.702683	0.714691	0.656684
907	C	0.16902	0.214723	0.622241
908	C	0.16902	0.714723	0.622241
909	C	0.66902	0.214723	0.622241
910	C	0.66902	0.714723	0.622241
911	C	0.142871	0.25129	0.616296
912	C	0.142871	0.75129	0.616296

913	C	0.642871	0.25129	0.616296
914	C	0.642871	0.75129	0.616296
915	C	0.151609	0.287985	0.645092
916	C	0.151609	0.787985	0.645092
917	C	0.651609	0.287985	0.645092
918	C	0.651609	0.787985	0.645092
919	C	0.185368	0.28805	0.679461
920	C	0.185368	0.78805	0.679461
921	C	0.685368	0.28805	0.679461
922	C	0.685368	0.78805	0.679461
923	H	0.222706	0.186186	0.659582
924	H	0.222706	0.686186	0.659582
925	H	0.722706	0.186186	0.659582
926	H	0.722706	0.686186	0.659582
927	H	0.163958	0.186347	0.599614
928	H	0.163958	0.686347	0.599614
929	H	0.663958	0.186347	0.599614
930	H	0.663958	0.686347	0.599614
931	H	0.132263	0.316845	0.641153
932	H	0.132263	0.816845	0.641153
933	H	0.632263	0.316845	0.641153
934	H	0.632263	0.816845	0.641153
935	H	0.191784	0.317845	0.698818
936	H	0.191784	0.817845	0.698818
937	H	0.691784	0.317845	0.698818
938	H	0.691784	0.817845	0.698818
939	C	0.24921	0.0392106	0.937282
940	C	0.24921	0.539211	0.937282
941	C	0.74921	0.0392106	0.937282
942	C	0.74921	0.539211	0.937282
943	C	0.285323	0.047272	0.906666
944	C	0.285323	0.547272	0.906666
945	C	0.785323	0.047272	0.906666
946	C	0.785323	0.547272	0.906666
947	C	0.285291	0.0809364	0.872223
948	C	0.285291	0.580936	0.872223
949	C	0.785291	0.0809364	0.872223
950	C	0.785291	0.580936	0.872223
951	C	0.248726	0.107088	0.866278
952	C	0.248726	0.607088	0.866278
953	C	0.748726	0.107088	0.866278
954	C	0.748726	0.607088	0.866278
955	C	0.212001	0.098349	0.895073
956	C	0.212001	0.598349	0.895073
957	C	0.712001	0.098349	0.895073
958	C	0.712001	0.598349	0.895073
959	C	0.211969	0.0645879	0.929442
960	C	0.211969	0.564588	0.929442
961	C	0.711969	0.0645879	0.929442
962	C	0.711969	0.564588	0.929442
963	H	0.313826	0.0272798	0.909564
964	H	0.313826	0.52728	0.909564
965	H	0.813826	0.0272798	0.909564
966	H	0.813826	0.52728	0.909564
967	H	0.313665	0.085999	0.849558
968	H	0.313665	0.585999	0.849558
969	H	0.813665	0.085999	0.849558
970	H	0.813665	0.585999	0.849558
971	H	0.183143	0.117664	0.891135
972	H	0.183143	0.617664	0.891135

973	H	0.683143	0.117664	0.891135
974	H	0.683143	0.617664	0.891135
975	H	0.182176	0.058171	0.948837
976	H	0.182176	0.558171	0.948837
977	H	0.682176	0.058171	0.948837
978	H	0.682176	0.558171	0.948837
979	C	0.499162	0.289211	0.437282
980	C	0.499162	0.789211	0.437282
981	C	0.999162	0.289211	0.437282
982	C	0.999162	0.789211	0.437282
983	C	0.535274	0.29724	0.406666
984	C	0.535274	0.79724	0.406666
985	C	0.535242	0.330936	0.37226
986	C	0.535242	0.830936	0.37226
987	C	0.49871	0.357088	0.366278
988	C	0.49871	0.857088	0.366278
989	C	0.99871	0.357088	0.366278
990	C	0.99871	0.857088	0.366278
991	C	0.461985	0.348349	0.395036
992	C	0.461985	0.848349	0.395036
993	C	0.961985	0.348349	0.395036
994	C	0.961985	0.848349	0.395036
995	C	0.46192	0.314588	0.429442
996	C	0.46192	0.814588	0.429442
997	C	0.96192	0.314588	0.429442
998	C	0.96192	0.814588	0.429442
999	H	0.563778	0.277248	0.409601
1000	H	0.563778	0.777248	0.409601
1001	H	0.563681	0.335999	0.349595
1002	H	0.563681	0.835999	0.349595
1003	H	0.433127	0.367664	0.391098
1004	H	0.433127	0.867664	0.391098
1005	H	0.933127	0.367664	0.391098
1006	H	0.933127	0.867664	0.391098
1007	H	0.432127	0.308171	0.4488
1008	H	0.432127	0.808171	0.4488
1009	H	0.932127	0.308171	0.4488
1010	H	0.932127	0.808171	0.4488
1011	C	0.250822	0.460789	0.937282
1012	C	0.250822	0.960789	0.937282
1013	C	0.750822	0.460789	0.937282
1014	C	0.750822	0.960789	0.937282
1015	C	0.214709	0.452728	0.906666
1016	C	0.214709	0.952728	0.906666
1017	C	0.714709	0.452728	0.906666
1018	C	0.714709	0.952728	0.906666
1019	C	0.214742	0.419031	0.87226
1020	C	0.214742	0.919031	0.87226
1021	C	0.714742	0.419031	0.87226
1022	C	0.714742	0.919031	0.87226
1023	C	0.251306	0.392912	0.866278
1024	C	0.251306	0.892912	0.866278
1025	C	0.751306	0.392912	0.866278
1026	C	0.751306	0.892912	0.866278
1027	C	0.287999	0.401651	0.895036
1028	C	0.287999	0.901651	0.895036
1029	C	0.787999	0.401651	0.895036
1030	C	0.787999	0.901651	0.895036
1031	C	0.288063	0.435412	0.929405

1032	C	0.288063	0.935412	0.929405
1033	C	0.788063	0.435412	0.929405
1034	C	0.788063	0.935412	0.929405
1035	H	0.186206	0.47272	0.909601
1036	H	0.186206	0.97272	0.909601
1037	H	0.686206	0.47272	0.909601
1038	H	0.686206	0.97272	0.909601
1039	H	0.186335	0.413969	0.849632
1040	H	0.186335	0.913969	0.849632
1041	H	0.686335	0.413969	0.849632
1042	H	0.686335	0.913969	0.849632
1043	H	0.316889	0.382336	0.891098
1044	H	0.316889	0.882336	0.891098
1045	H	0.816889	0.382336	0.891098
1046	H	0.816889	0.882336	0.891098
1047	H	0.317889	0.441829	0.9488
1048	H	0.317889	0.941829	0.9488
1049	H	0.817889	0.441829	0.9488
1050	H	0.817889	0.941829	0.9488
1051	C	0.500806	0.210789	0.437282
1052	C	0.500806	0.710789	0.437282
1053	C	0.464693	0.202728	0.406666
1054	C	0.464693	0.702728	0.406666
1055	C	0.464726	0.169064	0.372223
1056	C	0.464726	0.669064	0.372223
1057	C	0.50129	0.142912	0.366278
1058	C	0.50129	0.642912	0.366278
1059	C	0.537983	0.151651	0.395073
1060	C	0.537983	0.651651	0.395073
1061	C	0.538047	0.185412	0.429442
1062	C	0.538047	0.685412	0.429442
1063	H	0.43619	0.222752	0.409564
1064	H	0.43619	0.722752	0.409564
1065	H	0.436351	0.164001	0.349558
1066	H	0.436351	0.664001	0.349558
1067	H	0.566841	0.132336	0.391135
1068	H	0.566841	0.632336	0.391135
1069	H	0.56784	0.191829	0.448837
1070	H	0.56784	0.691829	0.448837
1071	C	0.710808	0.499194	0.00858289
1072	C	0.702779	0.535309	0.0392361
1073	C	0.669085	0.535277	0.073642
1074	C	0.642935	0.49871	0.0795868
1075	C	0.651673	0.462015	0.0508286
1076	C	0.685432	0.46195	0.0164227
1077	H	0.72277	0.563782	0.0363008
1078	H	0.664023	0.563653	0.0963068
1079	H	0.632327	0.433155	0.0547299
1080	C	0.46076	0.249194	0.508583
1081	C	0.46076	0.749194	0.508583
1082	C	0.96076	0.249194	0.508583
1083	C	0.96076	0.749194	0.508583
1084	C	0.452699	0.285309	0.539199
1085	C	0.452699	0.785309	0.539199
1086	C	0.952699	0.285309	0.539199
1087	C	0.952699	0.785309	0.539199
1088	C	0.419004	0.285277	0.573605
1089	C	0.419004	0.785277	0.573605
1090	C	0.919004	0.285277	0.573605
1091	C	0.919004	0.785277	0.573605

1092	C	0.392855	0.24871	0.57955
1093	C	0.392855	0.74871	0.57955
1094	C	0.892855	0.24871	0.57955
1095	C	0.892855	0.74871	0.57955
1096	C	0.401625	0.211982	0.550791
1097	C	0.401625	0.711982	0.550791
1098	C	0.901625	0.211982	0.550791
1099	C	0.901625	0.711982	0.550791
1100	C	0.435384	0.21195	0.516423
1101	C	0.435384	0.71195	0.516423
1102	C	0.935384	0.21195	0.516423
1103	C	0.935384	0.71195	0.516423
1104	H	0.47269	0.313814	0.536264
1105	H	0.47269	0.813814	0.536264
1106	H	0.97269	0.313814	0.536264
1107	H	0.97269	0.813814	0.536264
1108	H	0.41391	0.313685	0.59627
1109	H	0.41391	0.813685	0.59627
1110	H	0.91391	0.313685	0.59627
1111	H	0.91391	0.813685	0.59627
1112	H	0.382247	0.183155	0.554693
1113	H	0.382247	0.683155	0.554693
1114	H	0.882247	0.183155	0.554693
1115	H	0.882247	0.683155	0.554693
1116	H	0.4418	0.182155	0.497065
1117	H	0.4418	0.682155	0.497065
1118	H	0.9418	0.182155	0.497065
1119	H	0.9418	0.682155	0.497065
1120	C	0.289256	0.00080614	0.00858289
1121	C	0.289256	0.500806	0.00858289
1122	C	0.297317	0.464691	0.0391989
1123	C	0.33098	0.464723	0.0736048
1124	C	0.357129	0.00128982	0.0795868
1125	C	0.357129	0.50129	0.0795868
1126	C	0.348391	0.0379853	0.0507543
1127	C	0.348391	0.537985	0.0507543
1128	C	0.3146	0.0380498	0.0164227
1129	C	0.3146	0.53805	0.0164227
1130	H	0.277294	0.436186	0.0362637
1131	H	0.336074	0.436315	0.0962696
1132	H	0.367737	0.0668451	0.0546927
1133	H	0.367737	0.566845	0.0546927
1134	C	0.0391759	0.250806	0.50862
1135	C	0.0391759	0.750806	0.50862
1136	C	0.539176	0.250806	0.50862
1137	C	0.539176	0.750806	0.50862
1138	C	0.0472367	0.214691	0.539236
1139	C	0.0472367	0.714691	0.539236
1140	C	0.547237	0.214691	0.539236
1141	C	0.547237	0.714691	0.539236
1142	C	0.0808989	0.214756	0.573642
1143	C	0.0808989	0.714756	0.573642
1144	C	0.580899	0.214756	0.573642
1145	C	0.580899	0.714756	0.573642
1146	C	0.107048	0.25129	0.579587
1147	C	0.107048	0.75129	0.579587
1148	C	0.607048	0.25129	0.579587
1149	C	0.607048	0.75129	0.579587
1150	C	0.0983104	0.287985	0.550791
1151	C	0.0983104	0.787985	0.550791



1152	C	0.59831	0.287985	0.550791
1153	C	0.59831	0.787985	0.550791
1154	C	0.0645515	0.28805	0.51646
1155	C	0.0645515	0.78805	0.51646
1156	C	0.564551	0.28805	0.51646
1157	C	0.564551	0.78805	0.51646
1158	H	0.0272458	0.186186	0.536301
1159	H	0.0272458	0.686186	0.536301
1160	H	0.527246	0.186186	0.536301
1161	H	0.527246	0.686186	0.536301
1162	H	0.0859612	0.186347	0.596307
1163	H	0.0859612	0.686347	0.596307
1164	H	0.585961	0.186347	0.596307
1165	H	0.585961	0.686347	0.596307
1166	H	0.117657	0.316845	0.55473
1167	H	0.117657	0.816845	0.55473
1168	H	0.617657	0.316845	0.55473
1169	H	0.617657	0.816845	0.55473
1170	H	0.0581673	0.317845	0.497028
1171	H	0.0581673	0.817845	0.497028
1172	H	0.558167	0.317845	0.497028
1173	H	0.558167	0.817845	0.497028
1174	C	0.500032	1	0.222932
1175	C	0.500032	0.5	0.222932
1176	C	0.249984	0.25	0.722932
1177	C	0.249984	0.75	0.722932
1178	C	0.749984	0.25	0.722932
1179	C	0.749984	0.75	0.722932
1180	C	0.250016	0.5	0.972951
1181	C	0.250016	0	0.972951
1182	C	0.750016	0.5	0.972951
1183	C	0.750016	0	0.972951
1184	C	0.499968	0.25	0.472951
1185	C	0.499968	0.75	0.472951
1186	C	0.999968	0.25	0.472951
1187	C	0.999968	0.75	0.472951
1188	C	0.964726	0.047272	0.289218
1189	C	0.964726	0.0809687	0.323586
1190	H	0.936222	0.0272798	0.286282
1191	H	0.936319	0.0860312	0.346251
1192	C	0.964726	0.547272	0.289218
1193	C	0.964726	0.580969	0.323586
1194	H	0.936222	0.52728	0.286282
1195	H	0.936319	0.586031	0.346251
1196	C	0.0353066	0.452728	0.289218
1197	C	0.0352744	0.419031	0.323623
1198	H	0.0638421	0.47272	0.286282
1199	H	0.0636809	0.413969	0.346288
1200	C	0.0353066	0.952728	0.289218
1201	C	0.0352744	0.919031	0.323623
1202	H	0.0638421	0.97272	0.286282
1203	H	0.0636809	0.913969	0.346288
1204	C	0.0392403	0.999194	0.187263
1205	C	0.107113	0.99871	0.116296
1206	C	0.0983749	0.962015	0.145092
1207	C	0.064616	0.96195	0.179423
1208	H	0.117721	0.933155	0.141153
1209	H	0.0581995	0.932155	0.198818
1210	C	0.210808	0.999194	0.00858289
1211	C	0.142935	0.99871	0.0795868

1212	C	0.151673	0.962015	0.0508286
1213	C	0.185432	0.96195	0.0164227
1214	H	0.132327	0.933155	0.0547299
1215	C	0.53924	0.999194	0.187263
1216	C	0.607113	0.99871	0.116296
1217	C	0.598375	0.962015	0.145092
1218	C	0.564616	0.96195	0.179423
1219	H	0.617721	0.933155	0.141153
1220	H	0.5582	0.932155	0.198818
1221	C	0.710808	0.999194	0.00858289
1222	C	0.642935	0.99871	0.0795868
1223	C	0.651673	0.962015	0.0508286
1224	C	0.685432	0.96195	0.0164227
1225	H	0.632327	0.933155	0.0547299
1226	C	0.0473012	0.0353089	0.156647
1227	C	0.0809957	0.0352767	0.122241
1228	H	0.0273102	0.063814	0.159582
1229	H	0.0860257	0.063685	0.0995764
1230	C	0.547301	0.0353089	0.156647
1231	C	0.580996	0.0352767	0.122241
1232	H	0.52731	0.063814	0.159582
1233	H	0.586026	0.063685	0.0995764
1234	C	0.960824	0.00080614	0.187263
1235	C	0.892952	0.00128982	0.116259
1236	C	0.90169	0.0380175	0.145055
1237	C	0.935449	0.0380498	0.179423
1238	H	0.882343	0.0668451	0.141116
1239	H	0.941865	0.0678447	0.198781
1240	C	0.789256	0.00080614	0.00858289
1241	C	0.857129	0.00128982	0.0795868
1242	C	0.848391	0.0379853	0.0507543
1243	C	0.8146	0.0380498	0.0164227
1244	H	0.867737	0.0668451	0.0546927
1245	C	0.960824	0.500806	0.187263
1246	C	0.952763	0.464691	0.156647
1247	C	0.919101	0.464723	0.122204
1248	C	0.892952	0.50129	0.116259
1249	C	0.90169	0.538018	0.145055
1250	C	0.935449	0.53805	0.179423
1251	H	0.972754	0.436186	0.159582
1252	H	0.914039	0.436315	0.0995764
1253	H	0.882343	0.566845	0.141116
1254	H	0.941865	0.567845	0.198781
1255	C	0.789256	0.500806	0.00858289
1256	C	0.797317	0.464691	0.0391989
1257	C	0.83098	0.464723	0.0736048
1258	C	0.857129	0.50129	0.0795868
1259	C	0.848391	0.537985	0.0507543
1260	C	0.8146	0.53805	0.0164227
1261	H	0.777294	0.436186	0.0362637
1262	H	0.836074	0.436315	0.0962696
1263	H	0.867737	0.566845	0.0546927
1264	C	0.452763	0.964691	0.156647
1265	C	0.419101	0.964723	0.122204
1266	H	0.472754	0.936186	0.159582
1267	H	0.414039	0.936315	0.0995764
1268	C	0.952763	0.964691	0.156647
1269	C	0.919101	0.964723	0.122204
1270	H	0.972754	0.936186	0.159582
1271	H	0.914039	0.936315	0.0995764

1272	C	0.0352744	0.29724	0.406666
1273	C	0.0352421	0.330936	0.37226
1274	H	0.0637776	0.277248	0.409601
1275	H	0.0636809	0.335999	0.349595
1276	C	0.0352744	0.79724	0.406666
1277	C	0.0352421	0.830936	0.37226
1278	H	0.0637776	0.777248	0.409601
1279	H	0.0636809	0.835999	0.349595
1280	C	0.964693	0.202728	0.406666
1281	C	0.964726	0.169064	0.372223
1282	H	0.93619	0.222752	0.409564
1283	H	0.936351	0.164001	0.349558
1284	C	0.964693	0.702728	0.406666
1285	C	0.964726	0.669064	0.372223
1286	H	0.93619	0.722752	0.409564
1287	H	0.936351	0.664001	0.349558
1288	C	0.202779	0.0353089	0.0392361
1289	C	0.169085	0.0352767	0.073642
1290	H	0.22277	0.0637818	0.0363008
1291	H	0.164023	0.0636528	0.0963068
1292	C	0.702779	0.0353089	0.0392361
1293	C	0.669085	0.0352767	0.073642
1294	H	0.72277	0.0637818	0.0363008
1295	H	0.664023	0.0636528	0.0963068
1296	H	0.191849	0.432155	0.997065
1297	H	0.191849	0.932155	0.997065
1298	H	0.691849	0.432155	0.997065
1299	H	0.691849	0.932155	0.997065
1300	C	0.297317	0.964691	0.0391989
1301	C	0.33098	0.964723	0.0736048
1302	H	0.277294	0.936186	0.0362637
1303	H	0.336074	0.936315	0.0962696
1304	C	0.797317	0.964691	0.0391989
1305	C	0.83098	0.964723	0.0736048
1306	H	0.777294	0.936186	0.0362637
1307	H	0.836074	0.936315	0.0962696
1308	H	0.308183	0.0678447	0.997065
1309	H	0.308183	0.567845	0.997065
1310	H	0.808183	0.0678447	0.997065
1311	H	0.808183	0.567845	0.997065

