

Fe3O4:

Fe3O4

1. 000000000000000
8. 3909244189690053 -0. 0176787746216709 0. 0000429717143815
-0. 0176787870322384 8. 3909279851395127 -0. 0000422316651361
0. 0000429135514187 -0. 0000421747791365 8. 4229010557327069

0 Fe
32 24

Direct

0. 1175622828502441 0. 3824380177809061 0. 1152204411975930
0. 3743662540953778 0. 1256338090252811 0. 1176203739139510
0. 6175650565489619 0. 8824349662911359 0. 1152659773576161
0. 8743766121641414 0. 6256242600297242 0. 1177191377724895
0. 1321902997093716 0. 8678288076847309 0. 1354204640175638
0. 3752631982029513 0. 6247198758273029 0. 1330250474491379
0. 6321711976542446 0. 3678097201416506 0. 1354209184432804
0. 8752796112144523 0. 1247363401198598 0. 1330247925188814
0. 1303456712835995 0. 6346510158016017 0. 3775797763257174
0. 3653637974567516 0. 8696472673182569 0. 3775517533658643
0. 6303526236352681 0. 1346360200389327 0. 3775521914734910
0. 8653486294661406 0. 3696546447970377 0. 3775792102054680
0. 1152874487721007 0. 1196275951279944 0. 3730487552805641
0. 3803722033472212 0. 3847124036099103 0. 3730495958672506
0. 6152844466031340 0. 6196353237252978 0. 3731024289842537
0. 8803644679188807 0. 8847147834239237 0. 3731028906330991
0. 1256347310762607 0. 8743854851228150 0. 6177037774581891
0. 3824309903956262 0. 6175788833472140 0. 6152326875453440
0. 6256139011091975 0. 3743649098494686 0. 6177042292861259
0. 8824210926183440 0. 1175697300025291 0. 6152326562306314
0. 1247156633129194 0. 3752846938917500 0. 6330243408222103
0. 3678152514159052 0. 1321842834226672 0. 6353553148273008
0. 6247352492022316 0. 8752652213430281 0. 6330535161922981
0. 8678075097318683 0. 6321918740248336 0. 6354555467238470
0. 1346457302402442 0. 1303516563820679 0. 8775055854847196
0. 3696485849362716 0. 3653548782394722 0. 8775052305281008
0. 6346530777636872 0. 6303308963946250 0. 8776042127426322
0. 8696694132495111 0. 8653473672945751 0. 8776032701042169
0. 1196368557312937 0. 6152916885802426 0. 8730888394681529
0. 3847253761151279 0. 8803678403369588 0. 8730670839822210
0. 6196320650185356 0. 1152748317341548 0. 8730665446902961
0. 8847086146818057 0. 3803629709478713 0. 8730890550700252
0. 0032512495901571 0. 9967967777103013 0. 0047483763881786
0. 5032033801947691 0. 4967488155591013 0. 0047486225402906

0. 2465227801134304	0. 2534772683489592	0. 2460475527709960
0. 7465141116099687	0. 7534858398840356	0. 2461156983172188
0. 4968005922167791	0. 0031991352213865	0. 5047331886326063
0. 9967537403219993	0. 5032461691142629	0. 5047626343467755
0. 2534830756575346	0. 7465175843773011	0. 7460815568520189
0. 7534827595383859	0. 2465167821656280	0. 7460812529920631
0. 1248423280106437	0. 6251438614274534	0. 1253910439549699
0. 3748578934829254	0. 8751588463567046	0. 1253532465548233
0. 6248409345055208	0. 1251421082818069	0. 1253534807752459
0. 8748563016741286	0. 3751579480701110	0. 1253912056722868
0. 1204142048942245	0. 8795877599407689	0. 3826073817202342
0. 3704370418280547	0. 6295799494489245	0. 3681844972106916
0. 6204121498771045	0. 3795859631351135	0. 3826073617882884
0. 8704200732330634	0. 1295627432150184	0. 3681840424632270
0. 1251354615253817	0. 1248563717022577	0. 6253276273579473
0. 3751431638335703	0. 3748645930436467	0. 6253280843654849
0. 6251198385092778	0. 6248450652660580	0. 6254169846597932
0. 8751552840230943	0. 8748798881519519	0. 6254166828630972
0. 1295721317661531	0. 3704281732798762	0. 8681824676482464
0. 3795961653544637	0. 1204035263767764	0. 8825101896990759
0. 6295976851778988	0. 8704023453189791	0. 8682181270033382
0. 8795997455397853	0. 6204004229457425	0. 8826330474605228

Fe3O4_Pb_A

Fe3O4

1. 00000000000000

8. 4692844285620872 0. 0005042832979535 0. 0027449905961299

0. 0005045724375341 8. 4614631823769635 0. 0058281503736327

0. 0027411714136891 0. 0058114461106640 8. 4802794105790582

0 Fe Pb

32 23 1

Direct

0. 1189602762399884	0. 3893266685543730	0. 1278534730868450
0. 3697103562040699	0. 1168760572864765	0. 1324301835866782
0. 6148464504834125	0. 8709995184395536	0. 1301508548175418
0. 8884178968649968	0. 6208539780632326	0. 1231273628261466
0. 1349284765442814	0. 8657393478719981	0. 1332754425620940
0. 3674588426957482	0. 6309584261594988	0. 1330833613754068
0. 6363793728199572	0. 3757943950283623	0. 1286875880904882
0. 8757921820610234	0. 1370264977720035	0. 1299367047636310
0. 1318645862854653	0. 6348904832627853	0. 3641411861857508

0. 3669869244379297	0. 8676431953133030	0. 3695965467837730
0. 6375356192471132	0. 1252410378440305	0. 3730597776672923
0. 8753495199706977	0. 3656129662893598	0. 3676473684886715
0. 1177048021972518	0. 1129331118020128	0. 3675545760737272
0. 3674784379787447	0. 3872115155292843	0. 3803370601413992
0. 6161922468280014	0. 6304622600944030	0. 3711249202335565
0. 8889183020617193	0. 8812316090282252	0. 3698415313974873
0. 1199708568893741	0. 8672769580980869	0. 6130611849162922
0. 3672615976993786	0. 6188845933790981	0. 6137617204551351
0. 5964488636184800	0. 3976330216862973	0. 6008262421200200
0. 8980647922049242	0. 1062183026617088	0. 5973948312240459
0. 1306809511263722	0. 3726753202307901	0. 6234233526763029
0. 3727365099195993	0. 1345452946358068	0. 6237228454458343
0. 6319451427429187	0. 8724359855998357	0. 6273759265051420
0. 8744826280177077	0. 6172774279550949	0. 6328026290942376
0. 1270705316775675	0. 1326574046940319	0. 8740061163851514
0. 3802967576373733	0. 3767183393015733	0. 8661241365683021
0. 6373546913549790	0. 6283282673075570	0. 8746600146221363
0. 8768162667193792	0. 8691970148404435	0. 8792607785945766
0. 1188359005622894	0. 6218696793190589	0. 8867355870595500
0. 3682091240918956	0. 8680159790602767	0. 8855319569730519
0. 6006245416072962	0. 1018648548924993	0. 8991685849478182
0. 8903897445188307	0. 4001914232757968	0. 9010339998767812
0. 0048091149910518	0. 0004415252893029	0. 0048155171605189
0. 5027820455003605	0. 5033806667467645	0. 0018916006596350
0. 2452209482500291	0. 2536715567439888	0. 2519500705327710
0. 7547663739209945	0. 7506172351596092	0. 2488663835479958
0. 5010589494226089	0. 9988149094273722	0. 4985250456972141
0. 0038929035315221	0. 5001255449454813	0. 4947165335517203
0. 2454402836691834	0. 7459032093884103	0. 7498367016072930
0. 1285301291041469	0. 6270244286197038	0. 1251670032159209
0. 3818988709684211	0. 8824169094534721	0. 1194819768178137
0. 6186622705930944	0. 1205331933659981	0. 1337075145539006
0. 8773396229950678	0. 3785820052148365	0. 1300514865504438
0. 1279797483496725	0. 8765047529124790	0. 3777137320012455
0. 3829388888510050	0. 6233729414431594	0. 3765465590352102
0. 6180444996662537	0. 3808293998785430	0. 3665857473155654
0. 8761964443423320	0. 1217026637477482	0. 3685621226629676
0. 1336135764343014	0. 1171088711797595	0. 6187629053941541
0. 3635587700084033	0. 3757883597532888	0. 6299107896165471
0. 6191756620400800	0. 6338690938268066	0. 6200000175054022
0. 8747369804500033	0. 8646773573673427	0. 6284599468558349
0. 1324094846785546	0. 3744470741426089	0. 8730470816985753
0. 3652726515974504	0. 1196670925204132	0. 8813289270272914

0. 6186197072477034	0. 8671218484853759	0. 8819198417931550
0. 8761676770254949	0. 6349588537056108	0. 8687994966997210
0. 7471712030534411	0. 2498495714050591	0. 7486151529542644

Fe3O4_Pb_B

Fe3O4

1. 000000000000000		
8. 4663730045984291	0. 0021034150496073	-0. 0022207031356600
0. 0021031546738535	8. 4658079571534444	0. 0012311295571291
-0. 0022207964420794	0. 0012317373638944	8. 4663387965787749

0	Fe	Pb
32	23	1

Direct

0. 1283179040110846	0. 3711376330279012	0. 1291637202861334
0. 3855441129402679	0. 1145179690364508	0. 1259648031368849
0. 6155270927055746	0. 8842685511047321	0. 1199197087704582
0. 8824472941737267	0. 6171281076286135	0. 1331945778155372
0. 1339224187584467	0. 8703578765267705	0. 1341863963998565
0. 3801002534222552	0. 6353739056012513	0. 1291586446109125
0. 6299160271566122	0. 3659180531032962	0. 1342910760803789
0. 8644221434090874	0. 1194497457930335	0. 1292450932994511
0. 1289722650784531	0. 6353840920797054	0. 3804242791145825
0. 3645440999304695	0. 8755850493255085	0. 3646488872772465
0. 6243722479686904	0. 1353080451660308	0. 3646313699371971
0. 8643813782846020	0. 3709816584062207	0. 3808734793255447
0. 1258062372994433	0. 1144317736160853	0. 3858147295480508
0. 3855566930752725	0. 3741281563852310	0. 3857317964405362
0. 6208334389265887	0. 6145131328024473	0. 3694791980865414
0. 8855280916211632	0. 8789342532460120	0. 3695251202290083
0. 1201514501934864	0. 8841483417675579	0. 6159308011368018
0. 3691651965233155	0. 6143529512697258	0. 6211873800128175
0. 6156204337085222	0. 3798601064086151	0. 6159318588193582
0. 8855782791894122	0. 1304900468061769	0. 6211292772988168
0. 1339086410767132	0. 3660435207506190	0. 6300410176459765
0. 3645014026885446	0. 1353541565029760	0. 6245407503613133
0. 6215484202262247	0. 8783862646601844	0. 6217472780214851
0. 8669991804925219	0. 6328500390969137	0. 6174627914217152
0. 1288817531085534	0. 1198389600366184	0. 8647477649902017
0. 3800862849242911	0. 3709718501229942	0. 8647745443249087
0. 6164079615776337	0. 6328847562012220	0. 8672479626637729

0.8669303550900801	0.8829545061194158	0.8672568288930989
0.1322194480173995	0.6171430037575838	0.8833258072789537
0.3689627512908300	0.8790171118953326	0.8857041418362352
0.6208500864711941	0.1307872537528118	0.8856107626981247
0.8825712155972220	0.3671812087113732	0.8831703665210392
0.0026481643813142	0.0006379435997237	0.0028043197547432
0.4992180388403836	0.4970353502712327	0.0030929626975445
0.2571339616938397	0.2427405609057766	0.2574554028593330
0.7468063619518226	0.7531279309295079	0.2505652498082290
0.4928453384148984	0.0070816702834436	0.4930121247589447
0.0026564379172697	0.4973758529675204	0.4996831117164436
0.2500804939701575	0.7525078413282831	0.7475280831788121
0.7471581153102919	0.2495397659827886	0.7471933695246432
0.1327869351103545	0.6170458781886721	0.1334334443782423
0.3747622060913104	0.8725486164559314	0.1227926269412395
0.6273422093585072	0.1251062812425817	0.1226720694979422
0.8829787417642710	0.3667623752100787	0.1336030041106491
0.1225816691467814	0.8725875411165113	0.3749924126212559
0.3749393029735015	0.6249098204380998	0.3751651874146835
0.6273905928437541	0.3772804078818596	0.3750570362834956
0.8750434775640844	0.1250010434889950	0.3751201245840575
0.1225919291378357	0.1251015746127805	0.6276795462113537
0.3748137035784413	0.3772840658586964	0.6276359217670783
0.6164158077095626	0.6328950701648979	0.6167855164405202
0.8671401959266334	0.8832004341967712	0.6168609573141792
0.1328507077726837	0.3669413192654694	0.8832836525108040
0.3748955465981101	0.1249669311873911	0.8751986138572240
0.6162104615045850	0.8834837677822183	0.8670038741454427
0.8741350415019464	0.6251558759313651	0.8753191733402258

Fe3O4_Bi_A

Fe3O4

1.0000000000000000

8.4789790506236606	-0.0016717599919904	0.0048276714165898
-0.0016721647083598	8.4693255191467554	0.0151821458136737
0.0048250172230021	0.0151698910169921	8.4895701866221298

0 Fe Bi

32 23 1

Direct

0.1189033256673907	0.3897221039782138	0.1283472297870944
--------------------	--------------------	--------------------

0. 3695112180297634	0. 1173913559617514	0. 1324601243931200
0. 6153171163366158	0. 8711371386290645	0. 1302770508126881
0. 8884891308035230	0. 6212161634939166	0. 1236877685718245
0. 1351874867503173	0. 8658469320936852	0. 1332909346926681
0. 3674107235021298	0. 6312828228502645	0. 1331746994879218
0. 6363530360096267	0. 3760081538935043	0. 1285946182944886
0. 8757026693702662	0. 1371733811051807	0. 1298920141855061
0. 1320916451402682	0. 6349040771445286	0. 3640329699371989
0. 3670241070036404	0. 8675861985216745	0. 3695850546808364
0. 6376500091181633	0. 1252406561931538	0. 3733100898124545
0. 8751213567023458	0. 3650282723804544	0. 3681198439535375
0. 1176588560616369	0. 1129229490820972	0. 3667597878801771
0. 3668085269328010	0. 3871369453175734	0. 3805532905562158
0. 6162073171393694	0. 6305387002799091	0. 3710320134941374
0. 8891713797438981	0. 8804712004487447	0. 3697308440982532
0. 1198773479965031	0. 8660488343609444	0. 6132663112439732
0. 3665468604530658	0. 6186731169617643	0. 6139295032212718
0. 5952253611529689	0. 3976620654510787	0. 6010392415881741
0. 8988544106815189	0. 1032851546154990	0. 5963776669636245
0. 1298409533650381	0. 3718539722673221	0. 6235451397128066
0. 3730903397834099	0. 1344577312216782	0. 6235957167543226
0. 6321993170161405	0. 8726598586412579	0. 6272411166310251
0. 8741200890511184	0. 6162500341620309	0. 6322682671469002
0. 1265789232763981	0. 1329631423294444	0. 8737624992559566
0. 3804982527622963	0. 3769150696543302	0. 8663684998209770
0. 6372978872264133	0. 6284214576909730	0. 8745437741107399
0. 8767043616012815	0. 8703396182883127	0. 8791739401470985
0. 1187314490327832	0. 6222461637012072	0. 8869025176985071
0. 3680673263192226	0. 8682549879670818	0. 8851458506157005
0. 6008244755763643	0. 1027482876065893	0. 8986016278034104
0. 8906997770122070	0. 4013426783597482	0. 9023335068033278
0. 0051866273595086	0. 0004439529419928	0. 0053726180508979
0. 5024084337135731	0. 5039194443904249	0. 0022732658220027
0. 2453178042333438	0. 2539013478968298	0. 2517819572152177
0. 7548740900819843	0. 7506199458765521	0. 2489309056056291
0. 5007524217502332	0. 9984259473987558	0. 4981865677067458
0. 0042530133759975	0. 5000593664537905	0. 4940641949549978
0. 2457745823383921	0. 7457463734063803	0. 7501541181590227
0. 1285493624953141	0. 6274706509084778	0. 1253389920862481
0. 3825740397991892	0. 8831308115214842	0. 1189996916861738
0. 6183554445836517	0. 1205488334852268	0. 1339859415688250
0. 8776070794324742	0. 3793461733989386	0. 1310507933676618
0. 1283690152495929	0. 8765794989921407	0. 3779845667472053
0. 3832799365856032	0. 6231504482267283	0. 3765415383587462

0. 6173187330340011	0. 3809720599712567	0. 3662788093935803
0. 8764901374114863	0. 1204078616326584	0. 3679100185969759
0. 1344712093997806	0. 1157620468067334	0. 6178723422887267
0. 3623517144440849	0. 3760716317929171	0. 6300507725917094
0. 6182440648892991	0. 6343302112575417	0. 6197307339012095
0. 8750990814563827	0. 8627952798591413	0. 6290051019276806
0. 1326640457088643	0. 3750214974265552	0. 8734445123000569
0. 3647735076935080	0. 1198057412756183	0. 8814221302496534
0. 6182772119205941	0. 8671251362308303	0. 8820864250392478
0. 8763851763150138	0. 6362138464764924	0. 8687166751806671
0. 7488582301096484	0. 2504226677196175	0. 7478738130451661

Fe3O4_Bi_B

Fe3O4

1. 0000000000000000		
8. 4733819127518490	0. 0137277572161616	-0. 0138054978275961
0. 0137277572161616	8. 4733819127518490	0. 0138054978275961
-0. 0138068332338103	0. 0138068332338103	8. 4733146552446819

0	Fe	Pb
32	23	1

Direct

0. 1269941644874635	0. 3730058355125365	0. 1272356080730219
0. 3850680692143627	0. 1149319307856373	0. 1264260620171953
0. 6161218548105794	0. 8838781451894206	0. 1197513955594616
0. 8834994384463712	0. 6165005615536288	0. 1397848061703044
0. 1336938764745810	0. 8698478004672339	0. 1337221964018909
0. 3797672953616669	0. 6359945611054201	0. 1303257127721267
0. 6301521995327661	0. 3663061235254190	0. 1337221964018909
0. 8640054388945799	0. 1202327046383331	0. 1303257127721267
0. 1303452930181024	0. 6359580176490098	0. 3797410905663909
0. 3650631232220505	0. 8760944254787262	0. 3650537126805702
0. 6239055745212738	0. 1349368767779424	0. 3650537126805702
0. 8640419823509902	0. 3696547069818976	0. 3797410905663909
0. 1263706205068331	0. 1149088735130803	0. 3852298245388184
0. 3850911264869197	0. 3736293794931669	0. 3852298245388184
0. 6197996922602371	0. 6138882768225287	0. 3697973966824364
0. 8861117231774713	0. 8802003077397629	0. 3697973966824364
0. 1198643251229825	0. 8838199466010295	0. 6161770330558696
0. 3699311625858499	0. 6139064280263895	0. 6197841936304869
0. 6161800533989705	0. 3801356748770175	0. 6161770330558696
0. 8860935719736105	0. 1300688374141501	0. 6197841936304869
0. 1337455968668664	0. 3662544031331336	0. 6304334989876850

0. 3650848273375829	0. 1349151726624171	0. 6240789249142153
0. 6231287326068156	0. 8768712673931844	0. 6229821893828884
0. 8667965823061365	0. 6332034176938635	0. 6091796732121040
0. 1302822058394852	0. 1201596652617525	0. 8641463730845587
0. 3798403347382475	0. 3697177941605148	0. 8641463730845587
0. 6095157968420111	0. 6334031118577315	0. 8665610367268783
0. 8665968881422685	0. 8904842031579889	0. 8665610367268783
0. 1400834592734057	0. 6165233051230743	0. 8836725132319287
0. 3699408166200087	0. 8802701452983257	0. 8860961276555059
0. 6197298547016743	0. 1300591833799913	0. 8860961276555059
0. 8834766948769257	0. 3599165407265943	0. 8836725132319287
0. 0020772171715819	0. 0034385416078209	0. 0021951948637948
0. 4965614583921791	0. 4979227828284181	0. 0021951948637948
0. 2566658514069431	0. 2433341485930569	0. 2567895882306459
0. 7478958366588273	0. 7521041633411727	0. 2531068401984342
0. 4933628367553951	0. 0066371632446049	0. 4934118386120900
0. 0023603127460703	0. 4976396872539297	0. 4963897314586276
0. 2532877668547329	0. 7521002392323197	0. 7479331807341794
0. 7478997607676803	0. 2467122331452671	0. 7479331807341794
0. 1329445799041054	0. 6184689475925254	0. 1329990587623584
0. 3749514907969669	0. 8728885945770699	0. 1229810472557773
0. 6271114054229301	0. 1250485092030331	0. 1229810472557773
0. 8815310524074746	0. 3670554200958946	0. 1329990587623584
0. 1230207178828380	0. 8728657739311885	0. 3749803784551844
0. 3750496388481963	0. 6249158256400520	0. 3750287520778031
0. 6271342260688115	0. 3769792821171620	0. 3749803784551844
0. 8750841743599480	0. 1249503611518037	0. 3750287520778031
0. 1229886644961269	0. 1250148573190231	0. 6272874449938257
0. 3749851426809769	0. 3770113355038731	0. 6272874449938257
0. 6168311085472382	0. 6316171127161425	0. 6166232217860923
0. 8683828872838575	0. 8831688914527618	0. 6166232217860923
0. 1330229850194584	0. 3669770149805416	0. 8819237298339715
0. 3749672216496478	0. 1250327783503522	0. 8752042022558584
0. 6167872340809524	0. 8832127659190476	0. 8682106991775953
0. 8747740537979070	0. 6252259462020930	0. 8744202320029686