

Supplementary Information

First-principles microkinetic analysis of Lewis acid sites in Zn-ZSM-5 for alkane dehydrogenation and its implication to methanol-to-aromatics conversion

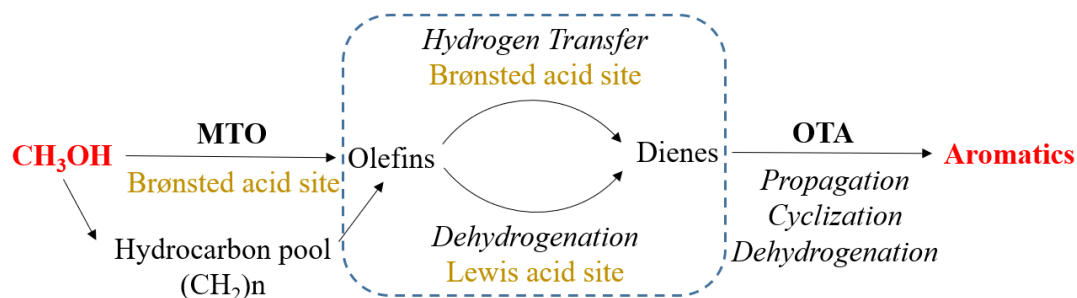
Yu-Jue Du, Wen-De Hu, Chuan-Ming Wang,* Jian Zhou, Guang Yang, Yang-Dong
Wang, Wei-Min Yang*

State Key Laboratory of Green Chemical Engineering and Industrial Catalysis, Sinopec
Shanghai Research Institute of Petrochemical Technology, Shanghai 201208, China

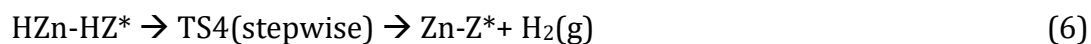
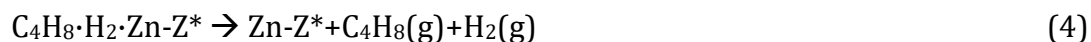
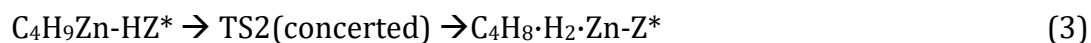
*E-Mail: wangcm.sshy@sinopec.com, yangwm.sshy@sinopec.com

Supplemental Schemes, Figures and Tables

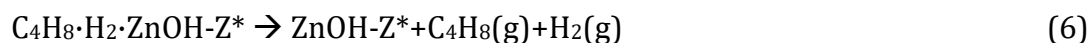
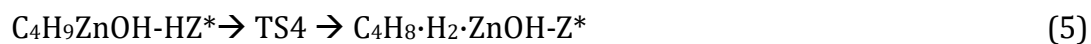
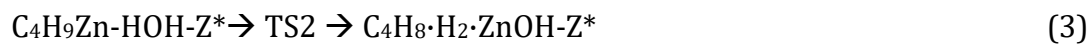
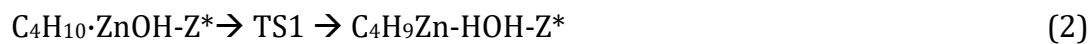
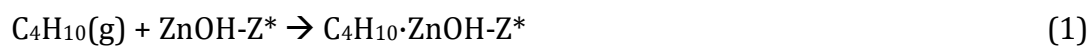
Scheme S1 Schematic reaction mechanism of methanol to aromatics (MTA). HT: hydrogen transfer step; de-H₂: dehydrogenation step.



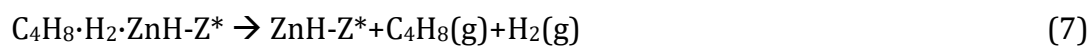
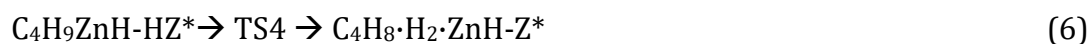
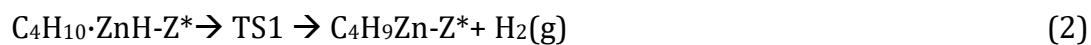
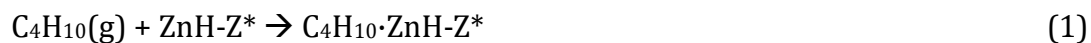
Scheme S2 Reaction pathway of butane dehydrogenation on ZnOZn²⁺ site for microkinetic modeling.



Scheme S3 Reaction pathway of butane dehydrogenation on ZnOH⁺ site for microkinetic modeling.



Scheme S4 Reaction pathway of butane dehydrogenation on ZnH⁺ site for microkinetic modeling.



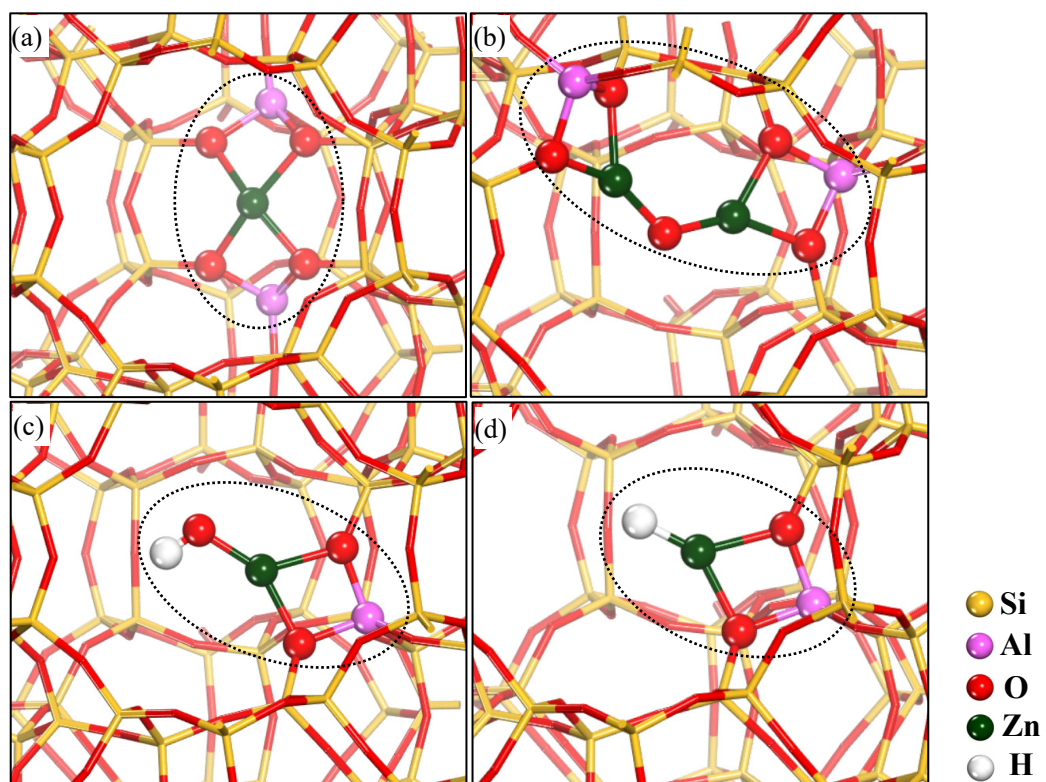


Fig. S1 Investigated structures of four Zn sites. (a) Zn^{2+} , (b) ZnOZn^{2+} , (c) ZnOH^+ , (d) ZnH^+ .

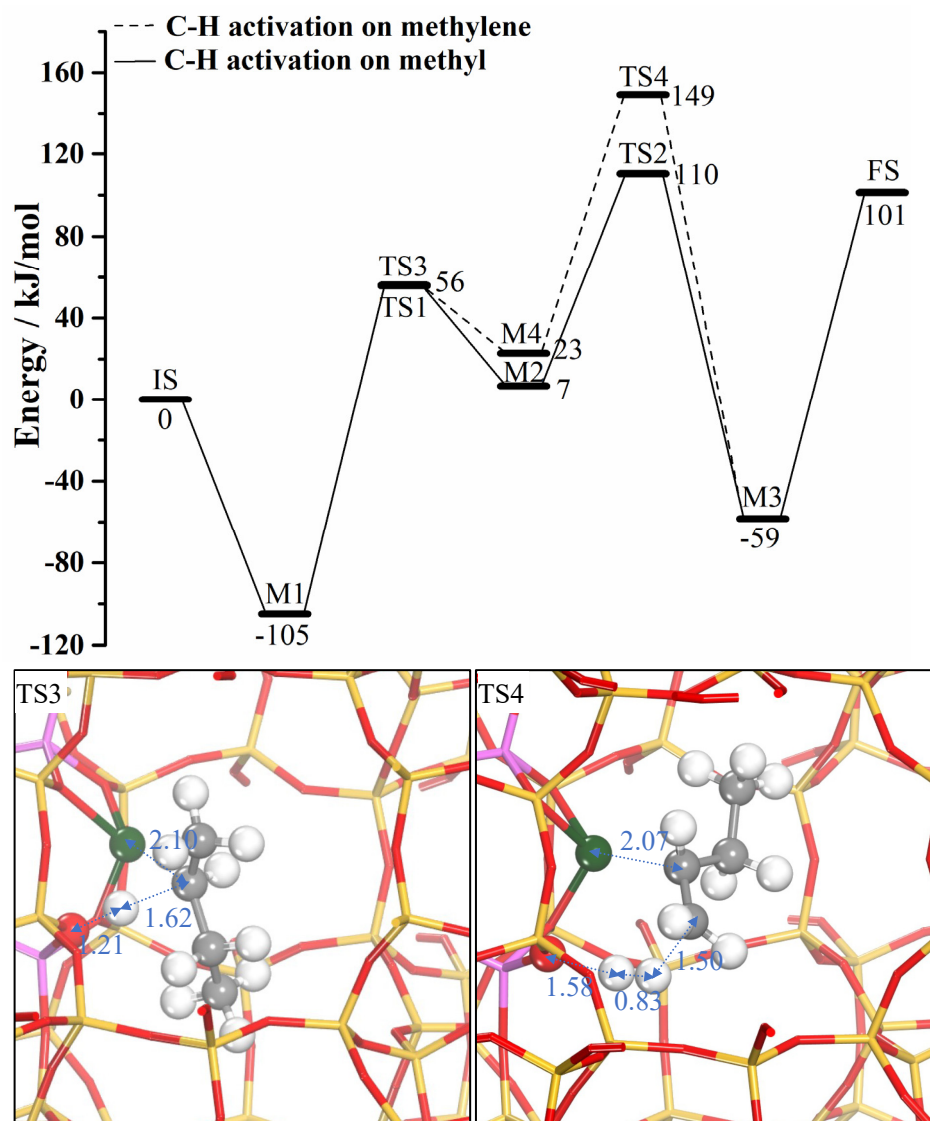


Fig. S2 Energy profile of butane dehydrogenation on Zn²⁺ site at 0 K. Solid line: first C-H activation on methyl group. Dash line: first C-H activation on methylene group.

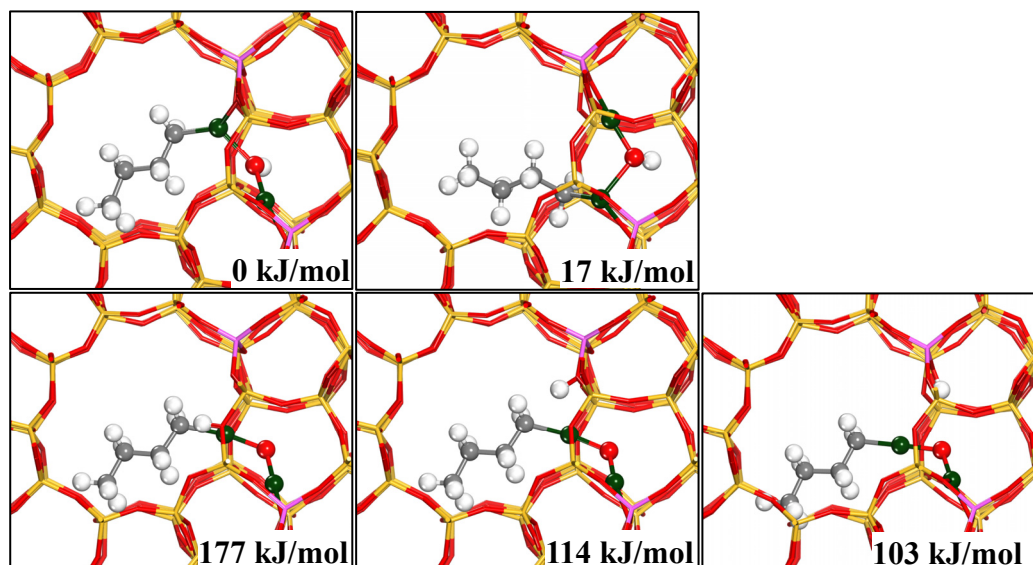


Fig. S3 Investigated configurations for the intermediate state of a Zn-C₄H₉ group and a bridging OH group (M2) in ZnO Zn²⁺ catalyzed pathway. The most favorable structure is considered as energy reference, to which relative energies of other structures are listed.

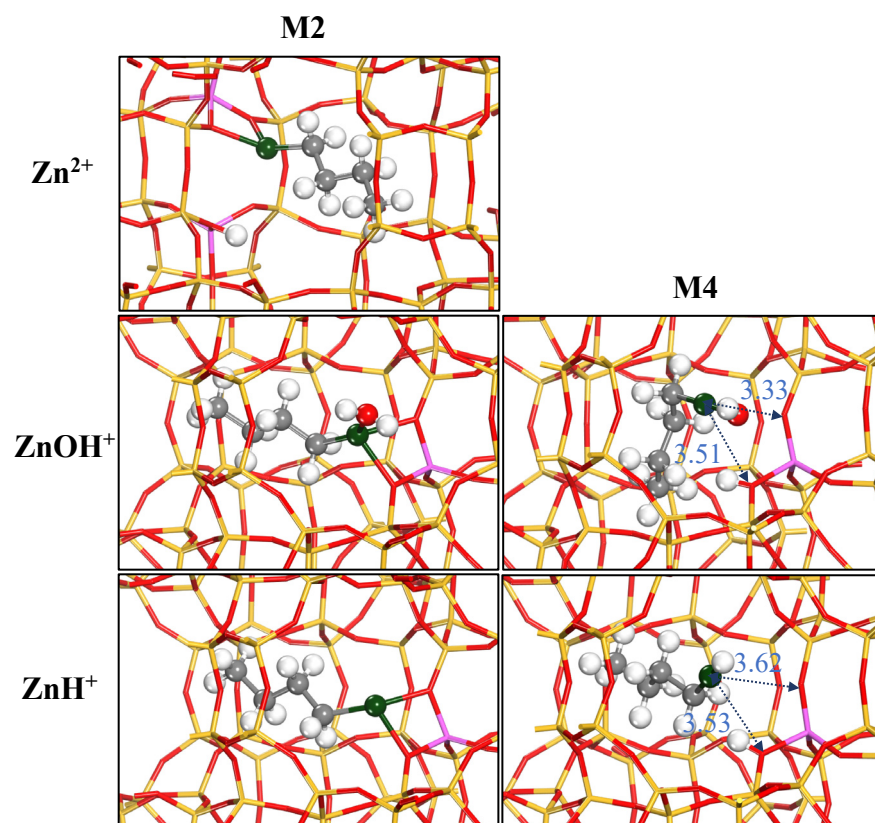


Fig. S4 Optimized structures of intermediates M2 and M4 for butane dehydrogenation to 1-butene in Zn²⁺, ZnOH⁺ and ZnH⁺ catalyzed pathways.

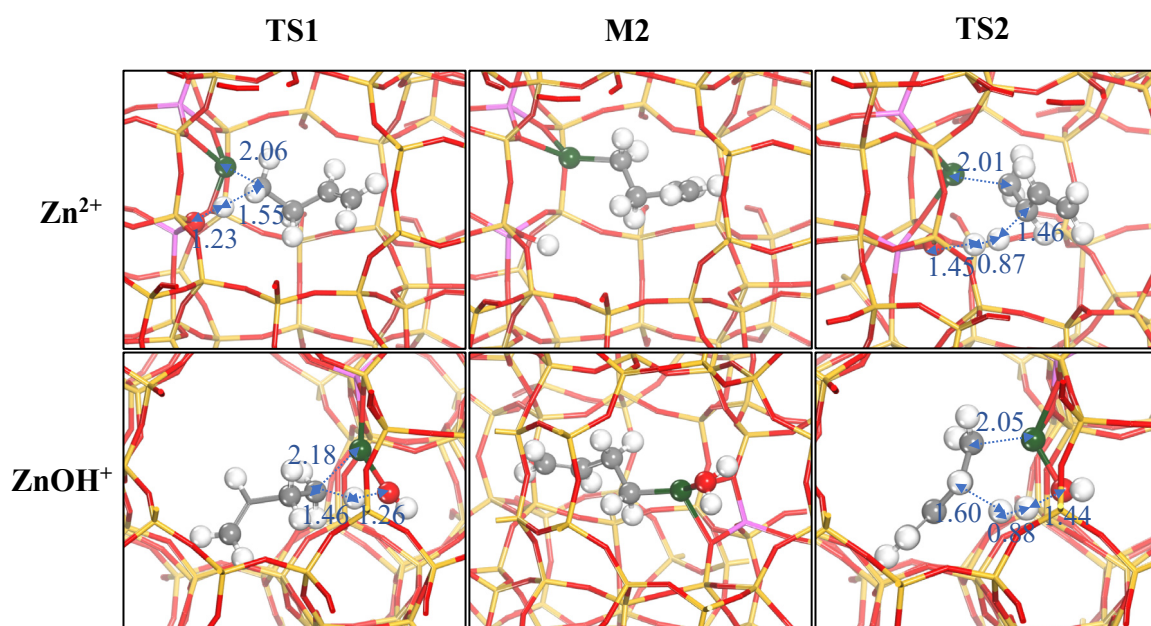


Fig. S5 Optimized structures of key transition states (TS1 and TS2) and intermediate (M2) of 1-butene dehydrogenation to butadiene in Zn²⁺ and ZnOH⁺ catalyzed pathways.

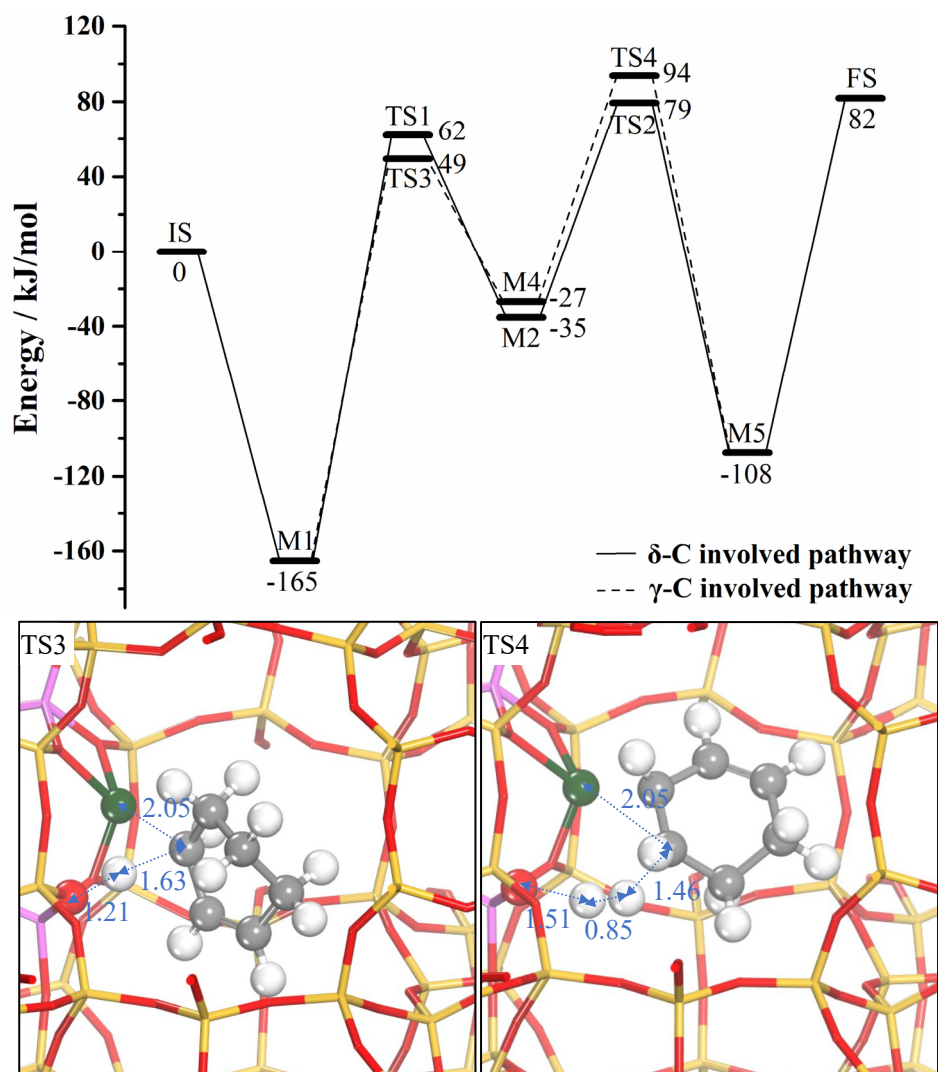


Fig. S6 Energy profile of cyclohexene dehydrogenation to cyclohexadiene on Zn²⁺ site at 0 K. Solid line: first C-H activation at the δ -carbon atom of cyclohexene (next-nearest to double bond). Dash line: first C-H activation at the γ -carbon atom of cyclohexene (nearest to double bond).

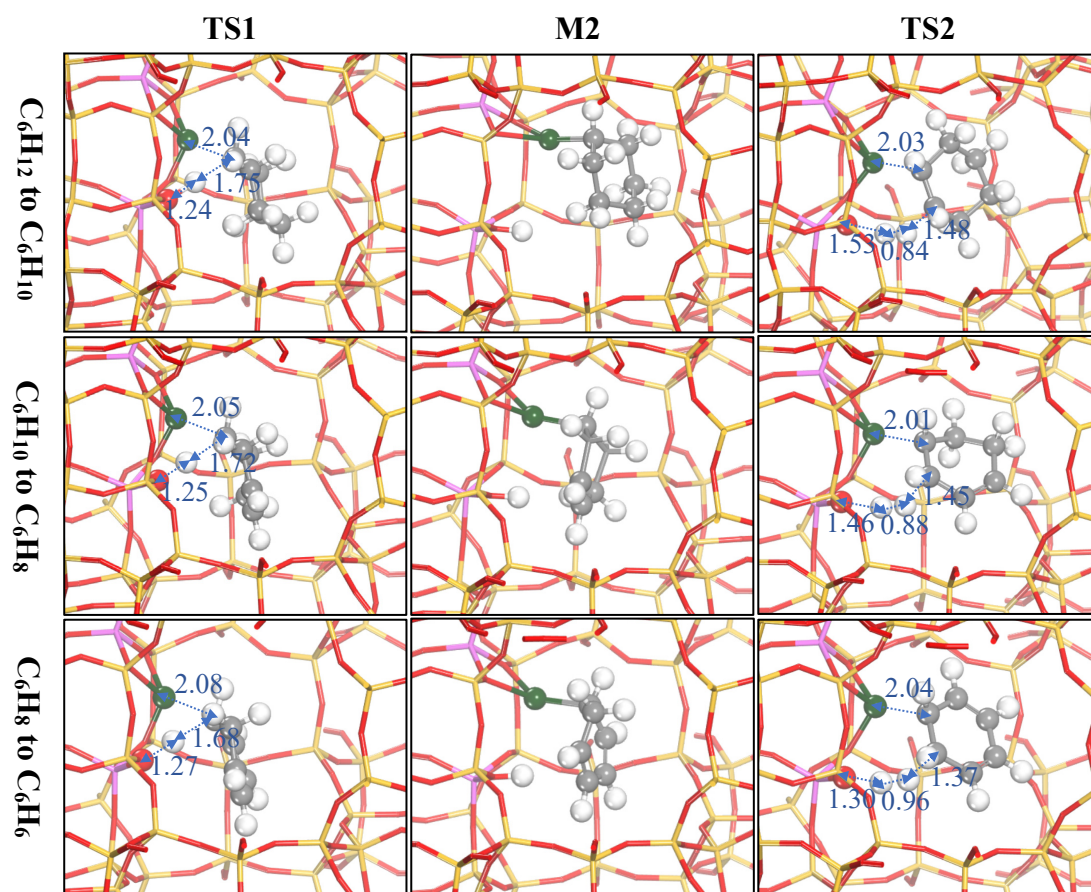


Fig. S7 Optimized structures of key transition states (TS1 and TS2) and intermediate (M2) of three steps of cyclohexane dehydrogenation to benzene in Zn^{2+} catalyzed pathway.

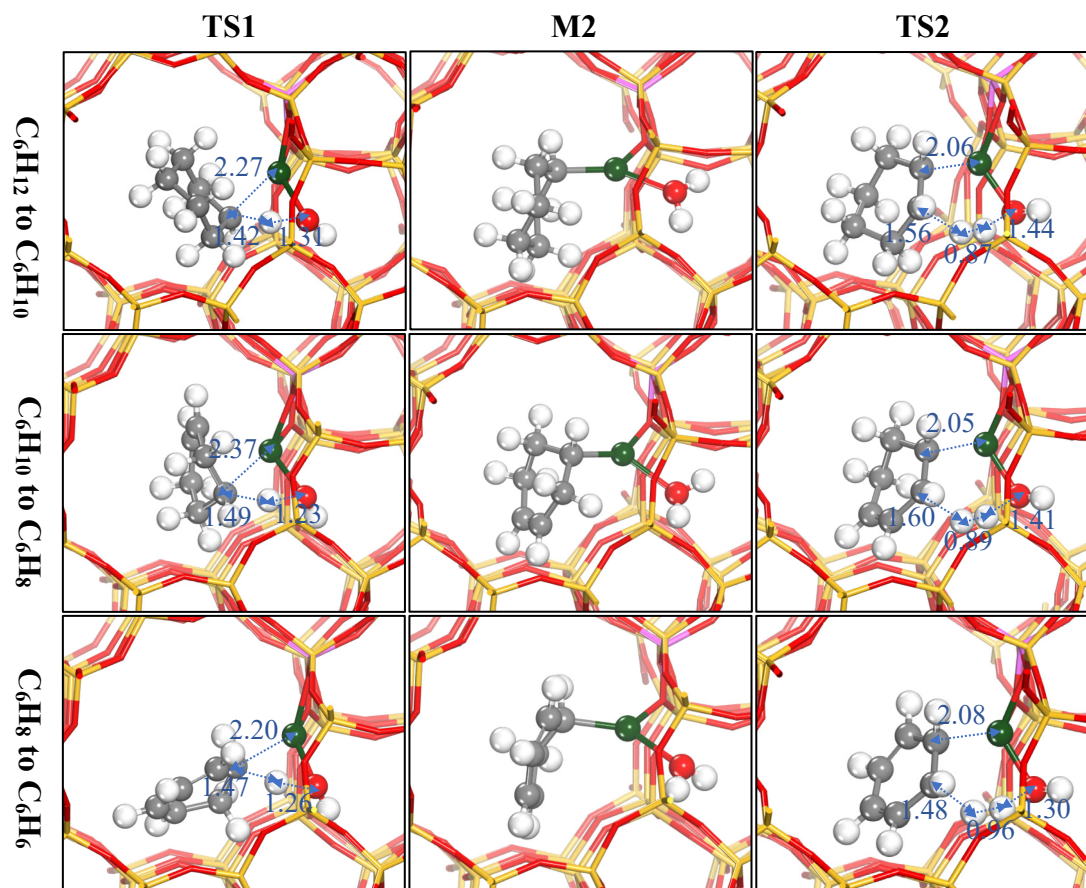


Fig. S8 Optimized structures of key transition states (TS1 and TS2) and intermediate (M2) of three steps of cyclohexane dehydrogenation to benzene in $ZnOH^+$ catalyzed pathway.

Table S1 Calculated dehydrogenation activity (TOF, s⁻¹) of butane/cyclohexane with sequence on ZnOH⁺ and Zn²⁺ sites at 1 bar and 673, 723 and 773 K, respectively.

TOF	Site	C ₄ H ₁₀	C ₄ H ₈	C ₆ H ₁₂	C ₆ H ₁₀	C ₆ H ₈
673 K	ZnOH ⁺	4.4×10 ⁻⁷	2.5×10 ⁻⁶	6.2×10 ⁻⁷	1.4×10 ⁻⁵	1.4×10 ⁻³
	Zn ²⁺	5.1×10 ⁻⁷	1.4×10 ⁻⁸	6.0×10 ⁻⁷	2.0×10 ⁻⁷	1.6×10 ⁻⁸
723 K	ZnOH ⁺	2.3×10 ⁻⁶	1.4×10 ⁻⁵	5.2×10 ⁻⁶	1.0×10 ⁻⁴	3.9×10 ⁻³
	Zn ²⁺	6.5×10 ⁻⁶	3.2×10 ⁻⁷	1.1×10 ⁻⁵	4.3×10 ⁻⁶	3.6×10 ⁻⁷
773 K	ZnOH ⁺	9.7×10 ⁻⁶	5.6×10 ⁻⁵	2.8×10 ⁻⁵	4.1×10 ⁻⁴	9.2×10 ⁻³
	Zn ²⁺	5.1×10 ⁻⁵	5.1×10 ⁻⁶	1.2×10 ⁻⁴	6.0×10 ⁻⁵	5.4×10 ⁻⁶

Supplemental structures in cif format

C₄H₁₀-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 3/M1) Total energy = -1928.64575901 eV

```
data_
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_cell_length_a            20.357621
_cell_length_b            20.050598
_cell_length_c            13.476578
_cell_angle_alpha         90.000000
_cell_angle_beta          90.000000
_cell_angle_gamma         90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H    H1            0.460181            0.600991            0.545149
  H    H2            0.539674            0.565965            0.549117
  H    H3            0.512246            0.606038            0.439831
  H    H4            0.590679            0.678787            0.536751
  H    H5            0.539130            0.673517            0.641400
  H    H6            0.450718            0.732366            0.553008
  H    H7            0.502735            0.737266            0.443321
  H    H8            0.531242            0.802910            0.645083
  H    H9            0.502861            0.845675            0.538617
  H    H10           0.581750            0.808223            0.538370
  C    C11           0.511066            0.608090            0.521077
  C    C12           0.539210            0.673870            0.559919
  C    C13           0.501887            0.736634            0.525979
  C    C14           0.531001            0.802366            0.563856
  O    O15           0.514573            0.031666            0.214308
  O    O16           0.013889            0.545822            0.711600
  O    O17           0.522067            0.442466            0.215734
  O    O18           0.010298            0.936511            0.698284
  O    O19           0.515829            0.935506            0.792539
  O    O20           0.015924            0.456193            0.290494
  O    O21           0.512144            0.552923            0.800150
  O    O22           0.020561            0.041376            0.287897
  O    O23           0.395661            0.063051            0.279577
```

0	024	0.131068	0.544844	0.788284
0	025	0.399112	0.423874	0.277359
0	026	0.128566	0.954813	0.772982
0	027	0.630870	0.943303	0.707952
0	028	0.898891	0.428655	0.214121
0	029	0.628392	0.532317	0.725187
0	030	0.894599	0.057063	0.241722
0	031	0.441214	0.116997	0.113553
0	032	0.106130	0.623298	0.633965
0	033	0.443690	0.364653	0.113997
0	034	0.109852	0.866739	0.628705
0	035	0.614947	0.862863	0.859910
0	036	0.937112	0.371420	0.381547
0	037	0.612398	0.622511	0.868164
0	038	0.946224	0.120815	0.395502
0	039	0.407844	0.989129	0.118176
0	040	0.113382	0.492502	0.610029
0	041	0.424620	0.495074	0.114100
0	042	0.100400	0.996180	0.589176
0	043	0.615680	0.994001	0.888609
0	044	0.905266	0.500631	0.375372
0	045	0.602720	0.493701	0.910826
0	046	0.930674	0.989420	0.404046
0	047	0.333103	0.062417	0.450501
0	048	0.201809	0.540583	0.947911
0	049	0.336371	0.426254	0.449810
0	050	0.198882	0.941798	0.935237
0	051	0.706820	0.922261	0.555368
0	052	0.834208	0.429741	0.046373
0	053	0.695447	0.549525	0.562722
0	054	0.831837	0.053669	0.070331
0	055	0.353110	0.948175	0.355366
0	056	0.208828	0.440005	0.817846
0	057	0.352189	0.538140	0.347119
0	058	0.216578	0.047895	0.818372
0	059	0.698281	0.043639	0.630769
0	060	0.855006	0.543704	0.141135
0	061	0.715995	0.440554	0.671889
0	062	0.853740	0.941800	0.169761
0	063	0.267248	0.037043	0.286461
0	064	0.260399	0.556128	0.773408
0	065	0.269652	0.444083	0.285626
0	066	0.256630	0.930892	0.758451
0	067	0.760970	0.950139	0.730093

0	068	0.769859	0.457206	0.212688
0	069	0.755648	0.557594	0.738580
0	070	0.766535	0.029599	0.235190
0	071	0.300845	0.130679	0.609430
0	072	0.213809	0.622817	0.097829
0	073	0.300916	0.359633	0.608953
0	074	0.212622	0.865404	0.091738
0	075	0.718185	0.861355	0.385628
0	076	0.804282	0.357180	0.889729
0	077	0.716105	0.626679	0.408901
0	078	0.808126	0.118027	0.905794
0	079	0.217344	0.040957	0.536811
0	080	0.314257	0.545029	0.044194
0	081	0.213690	0.435744	0.516680
0	082	0.317059	0.926254	0.012060
0	083	0.812093	0.945936	0.444339
0	084	0.717836	0.444774	0.962621
0	085	0.814967	0.555830	0.490530
0	086	0.712365	0.049383	0.992141
0	087	0.326137	0.001603	0.625881
0	088	0.209069	0.491179	0.126899
0	089	0.310325	0.491555	0.616991
0	090	0.228488	0.997437	0.107343
0	091	0.696538	0.993057	0.389888
0	092	0.824830	0.485930	0.868415
0	093	0.721285	0.495762	0.387098
0	094	0.809800	0.985642	0.905301
0	095	0.126096	0.126440	0.597380
0	096	0.407116	0.625571	0.113057
0	097	0.123284	0.360374	0.603620
0	098	0.407592	0.857326	0.108892
0	099	0.905400	0.858917	0.400799
0	0100	0.626024	0.362653	0.897109
0	0101	0.909949	0.630307	0.416348
0	0102	0.622402	0.125710	0.904970
0	0103	0.112160	0.066098	0.424601
0	0104	0.424857	0.562661	0.944469
0	0105	0.093088	0.429106	0.442605
0	0106	0.440207	0.926516	0.950533
0	0107	0.910498	0.923592	0.571103
0	0108	0.610309	0.420221	0.071574
0	0109	0.937283	0.541836	0.555261
0	0110	0.591654	0.052145	0.061287
0	0111	0.142788	0.048499	0.233918

0	0112	0.388527	0.535138	0.758459
0	0113	0.140998	0.424768	0.260203
0	0114	0.387101	0.939171	0.771353
0	0115	0.889718	0.949040	0.761373
0	0116	0.646175	0.431469	0.260012
0	0117	0.886046	0.560159	0.734695
0	0118	0.640078	0.063034	0.245415
0	0119	0.105395	0.946249	0.344941
0	0120	0.450448	0.444851	0.867478
0	0121	0.111259	0.541229	0.340139
0	0122	0.449609	0.040856	0.856923
0	0123	0.939339	0.042275	0.643717
0	0124	0.606473	0.537588	0.160169
0	0125	0.932995	0.442679	0.684039
0	0126	0.611364	0.945106	0.174644
0	0127	0.230344	0.125889	0.150921
0	0128	0.330929	0.620650	0.640905
0	0129	0.225317	0.359683	0.151633
0	0130	0.331891	0.869361	0.630563
0	0131	0.813779	0.860716	0.849873
0	0132	0.741289	0.367906	0.349853
0	0133	0.823086	0.618016	0.879676
0	0134	0.724313	0.122347	0.361621
0	0135	0.520587	0.854010	0.210552
0	0136	0.021432	0.349511	0.727632
0	0137	0.520308	0.629990	0.215751
0	0138	0.022411	0.132137	0.717954
0	0139	0.521408	0.139443	0.780134
0	0140	0.017981	0.630124	0.305390
0	0141	0.520209	0.347667	0.782740
0	0142	0.016962	0.855038	0.297897
0	0143	0.408862	0.818464	0.296392
0	0144	0.140856	0.328386	0.793825
0	0145	0.407819	0.667610	0.298713
0	0146	0.140026	0.153359	0.790552
0	0147	0.642031	0.149708	0.712948
0	0148	0.903744	0.653882	0.222970
0	0149	0.637398	0.336516	0.703690
0	0150	0.904180	0.824192	0.210244
0	0151	0.462037	0.741606	0.157196
0	0152	0.087788	0.242196	0.667675
0	0153	0.595627	0.243896	0.831011
0	0154	0.954970	0.743412	0.345864
0	0155	0.336984	0.817140	0.451016

0	0156	0.206120	0.347061	0.959765
0	0157	0.336524	0.666439	0.456163
0	0158	0.204796	0.141002	0.958646
0	0159	0.710686	0.161738	0.549672
0	0160	0.831777	0.662776	0.064983
0	0161	0.705652	0.343293	0.537190
0	0162	0.839821	0.840893	0.041550
0	0163	0.269786	0.847070	0.267200
0	0164	0.271830	0.326135	0.794697
0	0165	0.267812	0.644845	0.274468
0	0166	0.270713	0.165859	0.794170
0	0167	0.772318	0.134297	0.718052
0	0168	0.775623	0.626757	0.235135
0	0169	0.767736	0.322849	0.706400
0	0170	0.773833	0.841759	0.209480
0	0171	0.297598	0.744286	0.602492
0	0172	0.244610	0.243085	0.068814
0	0173	0.747920	0.246783	0.413707
0	0174	0.797292	0.742931	0.921164
0	0175	0.220526	0.842255	0.531572
0	0176	0.327373	0.342504	0.031379
0	0177	0.219968	0.643829	0.541187
0	0178	0.327456	0.143953	0.023168
0	0179	0.829302	0.149634	0.469676
0	0180	0.715467	0.647368	0.982937
0	0181	0.830305	0.338980	0.486195
0	0182	0.716532	0.839431	0.980118
0	0183	0.137673	0.744158	0.577520
0	0184	0.408614	0.241618	0.076560
0	0185	0.916539	0.246557	0.430334
0	0186	0.631197	0.743614	0.931690
0	0187	0.105692	0.831097	0.438063
0	0188	0.435407	0.321425	0.926826
0	0189	0.107773	0.653651	0.442148
0	0190	0.439446	0.162177	0.927947
0	0191	0.934855	0.166231	0.581391
0	0192	0.596728	0.650656	0.061029
0	0193	0.946781	0.335496	0.570123
0	0194	0.595661	0.842644	0.051832
0	0195	0.140145	0.835506	0.247868
0	0196	0.394025	0.358518	0.745946
0	0197	0.138907	0.656700	0.250668
0	0198	0.393863	0.133168	0.746426
0	0199	0.897766	0.137685	0.766375

O	O200	0.647031	0.649892	0.244366
O	O201	0.894723	0.326613	0.752120
O	O202	0.645954	0.823262	0.231586
O	O203	0.217797	0.744873	0.166838
O	O204	0.342004	0.245494	0.681566
O	O205	0.818098	0.234733	0.828189
O	O206	0.729900	0.739866	0.314244
Al	Al207	0.337521	0.865352	0.337516
Al	Al208	0.335908	0.621391	0.340266
Si	Si209	0.717148	0.660846	0.299463
Si	Si210	0.439820	0.050227	0.181519
Si	Si211	0.091206	0.551578	0.684935
Si	Si212	0.446367	0.431581	0.181324
Si	Si213	0.087920	0.938731	0.672157
Si	Si214	0.594219	0.934454	0.813618
Si	Si215	0.940067	0.439081	0.316265
Si	Si216	0.589650	0.550187	0.826760
Si	Si217	0.947346	0.052121	0.331901
Si	Si218	0.337483	0.026058	0.342576
Si	Si219	0.200692	0.520018	0.832858
Si	Si220	0.339561	0.459481	0.339347
Si	Si221	0.199960	0.968694	0.822334
Si	Si222	0.699645	0.964859	0.656907
Si	Si223	0.839354	0.464711	0.154434
Si	Si224	0.699436	0.519759	0.674347
Si	Si225	0.836567	0.020549	0.179708
Si	Si226	0.294403	0.058825	0.554964
Si	Si227	0.234910	0.550601	0.055694
Si	Si228	0.290611	0.428386	0.547872
Si	Si229	0.238974	0.932240	0.038341
Si	Si230	0.733722	0.930640	0.442907
Si	Si231	0.795096	0.429309	0.941760
Si	Si232	0.737502	0.556919	0.461253
Si	Si233	0.790537	0.051748	0.967819
Si	Si234	0.139324	0.057670	0.536977
Si	Si235	0.392298	0.556450	0.053945
Si	Si236	0.136278	0.429208	0.543724
Si	Si237	0.392915	0.925568	0.047538
Si	Si238	0.889808	0.929348	0.455199
Si	Si239	0.639425	0.429932	0.960511
Si	Si240	0.891954	0.557038	0.459459
Si	Si241	0.635665	0.055433	0.961185
Si	Si242	0.095175	0.025252	0.323161
Si	Si243	0.443358	0.523746	0.842606

Si	Si244	0.090320	0.463058	0.332903
Si	Si245	0.447454	0.960788	0.841678
Si	Si246	0.937819	0.962902	0.668306
Si	Si247	0.595600	0.457896	0.176396
Si	Si248	0.942615	0.522406	0.671978
Si	Si249	0.589158	0.023287	0.174143
Si	Si250	0.217923	0.051599	0.195055
Si	Si251	0.321990	0.549761	0.697776
Si	Si252	0.211966	0.430445	0.206181
Si	Si253	0.325027	0.936548	0.697007
Si	Si254	0.818529	0.936874	0.810540
Si	Si255	0.720124	0.438560	0.302321
Si	Si256	0.822149	0.554830	0.805452
Si	Si257	0.707322	0.052162	0.308240
Si	Si258	0.450171	0.818246	0.191874
Si	Si259	0.093323	0.320122	0.697958
Si	Si260	0.449927	0.665646	0.194722
Si	Si261	0.094182	0.163591	0.693218
Si	Si262	0.595128	0.164794	0.807373
Si	Si263	0.947175	0.664746	0.322408
Si	Si264	0.594711	0.322459	0.803591
Si	Si265	0.945840	0.820554	0.313382
Si	Si266	0.206632	0.360675	0.841433
Si	Si267	0.207609	0.126943	0.840288
Si	Si268	0.705795	0.122468	0.654210
Si	Si269	0.841454	0.621426	0.166903
Si	Si270	0.706197	0.360877	0.654939
Si	Si271	0.842958	0.862151	0.157681
Si	Si272	0.295444	0.818980	0.555397
Si	Si273	0.250889	0.322586	0.052772
Si	Si274	0.295153	0.668141	0.560580
Si	Si275	0.251755	0.163891	0.050283
Si	Si276	0.753054	0.169656	0.448360
Si	Si277	0.791902	0.667280	0.961453
Si	Si278	0.755860	0.323890	0.447504
Si	Si279	0.792208	0.821165	0.949319
Si	Si280	0.142928	0.821419	0.543139
Si	Si281	0.403613	0.317963	0.037482
Si	Si282	0.142516	0.665938	0.548224
Si	Si283	0.404148	0.165603	0.035885
Si	Si284	0.906717	0.170449	0.468732
Si	Si285	0.638920	0.665851	0.961209
Si	Si286	0.907882	0.323270	0.466808
Si	Si287	0.639854	0.822103	0.956306

Si	Si288	0.092718	0.866889	0.331325
Si	Si289	0.449769	0.367768	0.830515
Si	Si290	0.094731	0.620476	0.333952
Si	Si291	0.450746	0.119183	0.827444
Si	Si292	0.948445	0.119449	0.677661
Si	Si293	0.593328	0.616758	0.170498
Si	Si294	0.948671	0.363570	0.683186
Si	Si295	0.593924	0.866460	0.167013
Si	Si296	0.211507	0.823269	0.195509
Si	Si297	0.327112	0.322677	0.707847
Si	Si298	0.210948	0.667272	0.199365
Si	Si299	0.326789	0.168417	0.708151
Si	Si300	0.824239	0.156333	0.803455
Si	Si301	0.821587	0.311654	0.793882
Si	Si302	0.717239	0.817126	0.285104
Zn	Zn303	0.396173	0.742538	0.399438

TS-C₄H₁₀-dehydro-Zn²⁺ (Fig. 3/TS1) Total energy = -1926.86064953 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.419119	0.735686	0.587073
H	H2	0.391263	0.687074	0.484136
H	H3	0.465043	0.785025	0.513989
H	H4	0.523883	0.658459	0.474757
H	H5	0.500880	0.654999	0.599960
H	H6	0.554408	0.776032	0.610989
H	H7	0.591815	0.754695	0.497760
H	H8	0.606520	0.683090	0.697887
H	H9	0.668383	0.727076	0.632697
H	H10	0.638576	0.650392	0.585923

C	C11	0.449444	0.732053	0.520031
C	C12	0.511451	0.689683	0.538967
C	C13	0.571120	0.733487	0.566264
C	C14	0.624347	0.696241	0.623777
O	O15	0.511155	0.023786	0.207137
O	O16	0.027553	0.532073	0.718197
O	O17	0.526333	0.438036	0.211436
O	O18	0.012614	0.939167	0.697945
O	O19	0.519778	0.947808	0.786760
O	O20	0.018406	0.452531	0.293151
O	O21	0.518667	0.540124	0.798048
O	O22	0.020105	0.039661	0.284990
O	O23	0.392812	0.060955	0.269286
O	O24	0.147082	0.561707	0.779339
O	O25	0.403258	0.436615	0.270242
O	O26	0.135180	0.951424	0.753499
O	O27	0.636950	0.927147	0.712751
O	O28	0.899521	0.429236	0.224964
O	O29	0.642786	0.537080	0.748191
O	O30	0.894512	0.045077	0.237551
O	O31	0.442306	0.110255	0.101748
O	O32	0.101074	0.618021	0.615974
O	O33	0.441842	0.357484	0.125079
O	O34	0.101518	0.863289	0.613838
O	O35	0.600252	0.860137	0.870852
O	O36	0.940338	0.369881	0.389233
O	O37	0.601184	0.614229	0.897669
O	O38	0.942160	0.119553	0.385210
O	O39	0.402719	0.984151	0.111605
O	O40	0.132058	0.489318	0.617878
O	O41	0.435988	0.488258	0.093168
O	O42	0.098655	0.993033	0.574263
O	O43	0.626439	0.990010	0.884434
O	O44	0.912494	0.499873	0.387916
O	O45	0.603304	0.482616	0.919198
O	O46	0.932867	0.988008	0.407087
O	O47	0.331432	0.062318	0.440945
O	O48	0.203275	0.549100	0.953490
O	O49	0.342808	0.442932	0.440912
O	O50	0.199481	0.944271	0.920412
O	O51	0.701386	0.924542	0.546680
O	O52	0.835857	0.423705	0.056959
O	O53	0.705237	0.539697	0.577450
O	O54	0.833951	0.033361	0.064994

0	055	0.349601	0.946633	0.347578
0	056	0.190452	0.442931	0.833634
0	057	0.336072	0.545240	0.317009
0	058	0.219797	0.047485	0.801704
0	059	0.695235	0.037650	0.650845
0	060	0.847723	0.540276	0.149072
0	061	0.719865	0.435738	0.696690
0	062	0.829867	0.933807	0.193896
0	063	0.264145	0.035315	0.278523
0	064	0.275757	0.538142	0.792517
0	065	0.272968	0.432408	0.277203
0	066	0.263570	0.929539	0.749161
0	067	0.768118	0.936372	0.712501
0	068	0.769479	0.447117	0.221370
0	069	0.771609	0.552425	0.745437
0	070	0.764466	0.045886	0.228659
0	071	0.299335	0.129916	0.601211
0	072	0.232920	0.620320	0.112301
0	073	0.327628	0.375059	0.602614
0	074	0.203165	0.864902	0.071959
0	075	0.726882	0.858793	0.383532
0	076	0.810532	0.354247	0.895627
0	077	0.720412	0.618468	0.424370
0	078	0.821134	0.111953	0.912341
0	079	0.218832	0.035378	0.533496
0	080	0.318526	0.532375	0.041396
0	081	0.222502	0.427601	0.512182
0	082	0.314890	0.919471	0.000475
0	083	0.813457	0.947253	0.450440
0	084	0.723965	0.443727	0.959748
0	085	0.824599	0.557603	0.505378
0	086	0.714731	0.055076	0.991808
0	087	0.331438	0.002806	0.617989
0	088	0.209654	0.489492	0.126350
0	089	0.306873	0.505298	0.605940
0	090	0.230696	0.994473	0.096553
0	091	0.700352	0.989396	0.377650
0	092	0.836744	0.483588	0.882448
0	093	0.738213	0.488317	0.402779
0	094	0.798800	0.982488	0.890881
0	095	0.127768	0.122524	0.586836
0	096	0.407844	0.617934	0.106400
0	097	0.125153	0.358135	0.591277
0	098	0.413472	0.854541	0.082146

0	099	0.904355	0.858016	0.400609
0	0100	0.632715	0.353427	0.914893
0	0101	0.921512	0.629088	0.427875
0	0102	0.615463	0.121011	0.909701
0	0103	0.118084	0.063317	0.412326
0	0104	0.423158	0.560460	0.930589
0	0105	0.100130	0.439058	0.443309
0	0106	0.436558	0.936646	0.934615
0	0107	0.912837	0.920219	0.572552
0	0108	0.626259	0.417945	0.086243
0	0109	0.946837	0.541455	0.567672
0	0110	0.593294	0.040538	0.059107
0	0111	0.140340	0.039941	0.220443
0	0112	0.398801	0.543241	0.736343
0	0113	0.143082	0.421220	0.259324
0	0114	0.394455	0.927472	0.747734
0	0115	0.892731	0.948862	0.763636
0	0116	0.645756	0.448965	0.277109
0	0117	0.902117	0.556603	0.752618
0	0118	0.634880	0.060095	0.244989
0	0119	0.102460	0.942233	0.339823
0	0120	0.436906	0.441589	0.849000
0	0121	0.112197	0.542339	0.321848
0	0122	0.432023	0.043843	0.820908
0	0123	0.937456	0.040835	0.640229
0	0124	0.601374	0.539468	0.150758
0	0125	0.936409	0.437632	0.686923
0	0126	0.610928	0.938626	0.181487
0	0127	0.226082	0.121950	0.141828
0	0128	0.314929	0.629470	0.661617
0	0129	0.221229	0.356730	0.138829
0	0130	0.328337	0.870536	0.604701
0	0131	0.819891	0.856505	0.848058
0	0132	0.726724	0.361770	0.357166
0	0133	0.832774	0.616524	0.889667
0	0134	0.713118	0.122211	0.368999
0	0135	0.517421	0.848156	0.204721
0	0136	0.026516	0.344894	0.720151
0	0137	0.517014	0.631317	0.214324
0	0138	0.023593	0.130925	0.705536
0	0139	0.520961	0.136323	0.774101
0	0140	0.016151	0.630681	0.291150
0	0141	0.528398	0.353565	0.794897
0	0142	0.011679	0.854460	0.287005

0	0143	0.401496	0.820636	0.273537
0	0144	0.148786	0.323739	0.778244
0	0145	0.402556	0.670416	0.290067
0	0146	0.140700	0.150936	0.780232
0	0147	0.644632	0.149893	0.722520
0	0148	0.893828	0.649206	0.237933
0	0149	0.645299	0.328907	0.720814
0	0150	0.896588	0.821513	0.211137
0	0151	0.456586	0.738060	0.143279
0	0152	0.091541	0.239222	0.654007
0	0153	0.589939	0.240224	0.840414
0	0154	0.953441	0.742455	0.343949
0	0155	0.325562	0.814008	0.427338
0	0156	0.210986	0.337514	0.946745
0	0157	0.342202	0.653653	0.470114
0	0158	0.205326	0.137167	0.948764
0	0159	0.713506	0.152570	0.560267
0	0160	0.826610	0.660528	0.075266
0	0161	0.707221	0.344717	0.550700
0	0162	0.833805	0.845658	0.042890
0	0163	0.263231	0.855539	0.243825
0	0164	0.277280	0.350735	0.779661
0	0165	0.260969	0.666234	0.294310
0	0166	0.271495	0.166685	0.787502
0	0167	0.773524	0.127972	0.730901
0	0168	0.765906	0.622612	0.240152
0	0169	0.776381	0.318811	0.710998
0	0170	0.765370	0.819830	0.202914
0	0171	0.290240	0.746147	0.587234
0	0172	0.245161	0.238399	0.063813
0	0173	0.742361	0.244022	0.429279
0	0174	0.799619	0.741019	0.928340
0	0175	0.212997	0.842761	0.518385
0	0176	0.329079	0.337526	0.029962
0	0177	0.216862	0.641367	0.529592
0	0178	0.326782	0.138765	0.018943
0	0179	0.826033	0.144653	0.461789
0	0180	0.717305	0.641951	0.972772
0	0181	0.827504	0.340452	0.479254
0	0182	0.715021	0.839972	0.963026
0	0183	0.133981	0.741002	0.567029
0	0184	0.409557	0.235812	0.071770
0	0185	0.910864	0.244736	0.426715
0	0186	0.632188	0.739495	0.929302

O	O187	0.100088	0.824060	0.423757
O	O188	0.442779	0.323751	0.935291
O	O189	0.106426	0.653473	0.426634
O	O190	0.436496	0.158333	0.918493
O	O191	0.932119	0.162885	0.573298
O	O192	0.610682	0.661747	0.083142
O	O193	0.940558	0.328327	0.574649
O	O194	0.603304	0.833285	0.061549
O	O195	0.134227	0.834366	0.233189
O	O196	0.404499	0.332938	0.747777
O	O197	0.136796	0.657511	0.234010
O	O198	0.395978	0.154660	0.730151
O	O199	0.901055	0.138783	0.762068
O	O200	0.638929	0.637510	0.273291
O	O201	0.902214	0.321402	0.762891
O	O202	0.639226	0.818143	0.250182
O	O203	0.215418	0.746668	0.152476
O	O204	0.320188	0.252059	0.661029
O	O205	0.821430	0.230534	0.836756
O	O206	0.721120	0.732530	0.332811
Al	Al207	0.329764	0.865660	0.319393
Al	Al208	0.331216	0.628699	0.338288
Si	Si209	0.711877	0.653118	0.316493
Si	Si210	0.437376	0.044976	0.172662
Si	Si211	0.101404	0.550246	0.682102
Si	Si212	0.450821	0.430399	0.175230
Si	Si213	0.087895	0.936756	0.659689
Si	Si214	0.595388	0.931701	0.814923
Si	Si215	0.943128	0.437932	0.324793
Si	Si216	0.592786	0.543365	0.841049
Si	Si217	0.946597	0.048086	0.328628
Si	Si218	0.334748	0.024609	0.333780
Si	Si219	0.204028	0.522589	0.840428
Si	Si220	0.338395	0.465764	0.325416
Si	Si221	0.204490	0.968037	0.806547
Si	Si222	0.700721	0.957080	0.656481
Si	Si223	0.838223	0.460342	0.163938
Si	Si224	0.709925	0.516003	0.692185
Si	Si225	0.830843	0.014556	0.181608
Si	Si226	0.295343	0.057649	0.547528
Si	Si227	0.241002	0.548680	0.059665
Si	Si228	0.299570	0.437471	0.540535
Si	Si229	0.236938	0.930390	0.024233
Si	Si230	0.735872	0.929861	0.438829

Si	Si231	0.801710	0.426113	0.948507
Si	Si232	0.747315	0.550963	0.476890
Si	Si233	0.792076	0.045737	0.964686
Si	Si234	0.141195	0.053794	0.526611
Si	Si235	0.396115	0.549656	0.043161
Si	Si236	0.145173	0.428607	0.540965
Si	Si237	0.391276	0.924794	0.031830
Si	Si238	0.890909	0.928138	0.457321
Si	Si239	0.646868	0.423994	0.970217
Si	Si240	0.901255	0.556710	0.472157
Si	Si241	0.637759	0.051581	0.960996
Si	Si242	0.095107	0.021165	0.314791
Si	Si243	0.444255	0.521094	0.829587
Si	Si244	0.093632	0.463708	0.328849
Si	Si245	0.445432	0.964186	0.822071
Si	Si246	0.939095	0.962067	0.668173
Si	Si247	0.599673	0.460761	0.180876
Si	Si248	0.953137	0.516733	0.682030
Si	Si249	0.587283	0.016244	0.173679
Si	Si250	0.215993	0.047112	0.184870
Si	Si251	0.323777	0.552734	0.699595
Si	Si252	0.212468	0.425558	0.200239
Si	Si253	0.328852	0.933541	0.680060
Si	Si254	0.819890	0.931582	0.803390
Si	Si255	0.720285	0.436858	0.314401
Si	Si256	0.835431	0.551907	0.817800
Si	Si257	0.703726	0.054318	0.305487
Si	Si258	0.447421	0.815927	0.173403
Si	Si259	0.097967	0.316646	0.686179
Si	Si260	0.445846	0.663287	0.187467
Si	Si261	0.095970	0.160817	0.681571
Si	Si262	0.592628	0.161932	0.811527
Si	Si263	0.946670	0.663116	0.324971
Si	Si264	0.598958	0.318888	0.817845
Si	Si265	0.941864	0.819150	0.310732
Si	Si266	0.207199	0.363849	0.833963
Si	Si267	0.208692	0.125393	0.829843
Si	Si268	0.706913	0.116786	0.666904
Si	Si269	0.833636	0.617722	0.176345
Si	Si270	0.711662	0.357227	0.669547
Si	Si271	0.831982	0.855627	0.162309
Si	Si272	0.288708	0.819285	0.534299
Si	Si273	0.251962	0.317505	0.045163
Si	Si274	0.288818	0.667205	0.563474

Si	Si275	0.250779	0.159446	0.042687
Si	Si276	0.748876	0.165556	0.454641
Si	Si277	0.794083	0.664712	0.965845
Si	Si278	0.751047	0.322213	0.455099
Si	Si279	0.792146	0.820315	0.946831
Si	Si280	0.136725	0.818076	0.530043
Si	Si281	0.405451	0.313865	0.040601
Si	Si282	0.138903	0.663338	0.534517
Si	Si283	0.403623	0.160611	0.028099
Si	Si284	0.902894	0.167533	0.461392
Si	Si285	0.640365	0.664024	0.970951
Si	Si286	0.904831	0.320760	0.467718
Si	Si287	0.638144	0.818174	0.956055
Si	Si288	0.087974	0.863809	0.319847
Si	Si289	0.453022	0.363175	0.831590
Si	Si290	0.093301	0.620997	0.317969
Si	Si291	0.446072	0.123220	0.810945
Si	Si292	0.948524	0.118267	0.670635
Si	Si293	0.592384	0.617279	0.180260
Si	Si294	0.951356	0.358102	0.685518
Si	Si295	0.593462	0.859909	0.173697
Si	Si296	0.205081	0.825221	0.177748
Si	Si297	0.331970	0.327650	0.698752
Si	Si298	0.212553	0.672399	0.200112
Si	Si299	0.322300	0.174712	0.694811
Si	Si300	0.829174	0.152467	0.809376
Si	Si301	0.828077	0.307227	0.801601
Si	Si302	0.713329	0.808140	0.292632
Zn	Zn303	0.411403	0.755786	0.383939

M-C₄H₉Zn-OH-Zn²⁺ (Fig. 3/M2) Total energy = -1927.50322408 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

<u>_atom_site_fract_x</u>		<u>_atom_site_fract_y</u>		<u>_atom_site_fract_z</u>
H	H1	0.502039	0.829361	0.515342
H	H2	0.380276	0.625582	0.494828
H	H3	0.547179	0.799512	0.413148
H	H4	0.541290	0.682247	0.485683
H	H5	0.498953	0.714697	0.589239
H	H6	0.596905	0.791878	0.619707
H	H7	0.638499	0.750294	0.523539
H	H8	0.588584	0.687179	0.717095
H	H9	0.671794	0.699494	0.683685
H	H10	0.623213	0.641090	0.618062
C	C11	0.510165	0.785332	0.468378
C	C12	0.535079	0.727275	0.531406
C	C13	0.601010	0.743752	0.581306
C	C14	0.622500	0.689831	0.654231
O	O15	0.510267	0.023803	0.208127
O	O16	0.024819	0.532152	0.717856
O	O17	0.524838	0.437885	0.211743
O	O18	0.011912	0.936177	0.693433
O	O19	0.518760	0.948054	0.784040
O	O20	0.017265	0.452869	0.293661
O	O21	0.516649	0.539801	0.799537
O	O22	0.019098	0.039874	0.285139
O	O23	0.391586	0.059188	0.270473
O	O24	0.142913	0.562592	0.783860
O	O25	0.402241	0.434362	0.273772
O	O26	0.133535	0.950863	0.753210
O	O27	0.636819	0.928620	0.712809
O	O28	0.898765	0.429998	0.222848
O	O29	0.640204	0.533050	0.747383
O	O30	0.893259	0.046377	0.238299
O	O31	0.439328	0.107596	0.101592
O	O32	0.098755	0.621047	0.621876
O	O33	0.441051	0.356561	0.125830
O	O34	0.104945	0.866567	0.606471
O	O35	0.599216	0.860297	0.869004
O	O36	0.938540	0.369294	0.386547
O	O37	0.601114	0.614211	0.894972
O	O38	0.941822	0.118587	0.387907
O	O39	0.402405	0.980370	0.115214
O	O40	0.131317	0.492893	0.618317
O	O41	0.431959	0.487484	0.096987

0	042	0.096995	0.996950	0.576074
0	043	0.623986	0.990399	0.884763
0	044	0.910367	0.499306	0.387229
0	045	0.601345	0.483189	0.921085
0	046	0.931821	0.986766	0.405745
0	047	0.330044	0.062459	0.441235
0	048	0.199242	0.549588	0.958415
0	049	0.341101	0.450861	0.443322
0	050	0.198713	0.945363	0.919942
0	051	0.701277	0.923933	0.547283
0	052	0.834744	0.424394	0.055113
0	053	0.702511	0.540297	0.576596
0	054	0.832957	0.035022	0.065459
0	055	0.345090	0.945894	0.348777
0	056	0.187878	0.444472	0.835934
0	057	0.335796	0.546121	0.307571
0	058	0.218009	0.047584	0.799190
0	059	0.696052	0.038127	0.648616
0	060	0.847310	0.541043	0.146604
0	061	0.721528	0.435780	0.693392
0	062	0.831237	0.934081	0.192051
0	063	0.262469	0.036935	0.278720
0	064	0.271809	0.541843	0.797773
0	065	0.271954	0.431520	0.280394
0	066	0.261829	0.929052	0.747931
0	067	0.768077	0.937224	0.713020
0	068	0.768658	0.448737	0.220071
0	069	0.768334	0.553871	0.745460
0	070	0.763214	0.044086	0.229427
0	071	0.300541	0.130262	0.602074
0	072	0.230562	0.620430	0.116802
0	073	0.326335	0.375349	0.599345
0	074	0.204845	0.864804	0.070398
0	075	0.724315	0.859398	0.382358
0	076	0.808753	0.354452	0.894167
0	077	0.720027	0.620064	0.424447
0	078	0.818202	0.112457	0.911764
0	079	0.217585	0.037555	0.535311
0	080	0.316294	0.534433	0.041737
0	081	0.220685	0.429806	0.512049
0	082	0.314981	0.920988	0.997388
0	083	0.811558	0.948011	0.447582
0	084	0.722416	0.444092	0.959520
0	085	0.822475	0.556027	0.506381

0	086	0.713346	0.053586	0.992378
0	087	0.329984	0.002085	0.617418
0	088	0.209140	0.489278	0.129984
0	089	0.303348	0.504729	0.612920
0	090	0.230940	0.994290	0.096809
0	091	0.697564	0.990051	0.379086
0	092	0.834655	0.483623	0.879768
0	093	0.735601	0.489750	0.401149
0	094	0.799131	0.982537	0.891714
0	095	0.126383	0.126159	0.583485
0	096	0.406534	0.618000	0.110569
0	097	0.124398	0.361217	0.595201
0	098	0.414674	0.852474	0.070340
0	099	0.901407	0.857059	0.401572
0	0100	0.631423	0.354328	0.913151
0	0101	0.916524	0.629083	0.425331
0	0102	0.615682	0.121629	0.909484
0	0103	0.117939	0.063801	0.411107
0	0104	0.422825	0.560384	0.934958
0	0105	0.097864	0.440247	0.445464
0	0106	0.436570	0.942772	0.933683
0	0107	0.909676	0.920958	0.572176
0	0108	0.624540	0.416961	0.085941
0	0109	0.945859	0.542827	0.565346
0	0110	0.591431	0.041785	0.059036
0	0111	0.138989	0.038586	0.219287
0	0112	0.395879	0.540551	0.742357
0	0113	0.142167	0.420355	0.262203
0	0114	0.392790	0.927280	0.748485
0	0115	0.892946	0.949799	0.763540
0	0116	0.644667	0.447516	0.276120
0	0117	0.899021	0.557078	0.749122
0	0118	0.633868	0.060450	0.244307
0	0119	0.100723	0.942236	0.341089
0	0120	0.436731	0.440794	0.855506
0	0121	0.111863	0.542069	0.321880
0	0122	0.431024	0.045403	0.811951
0	0123	0.939132	0.040724	0.639778
0	0124	0.600428	0.538740	0.150305
0	0125	0.933844	0.438404	0.683254
0	0126	0.610060	0.939030	0.179907
0	0127	0.223580	0.121869	0.140492
0	0128	0.316493	0.628641	0.664010
0	0129	0.220340	0.356483	0.140399

0	0130	0.328131	0.869470	0.605300
0	0131	0.820578	0.856901	0.847431
0	0132	0.728051	0.362671	0.356003
0	0133	0.832114	0.616500	0.888780
0	0134	0.712422	0.122511	0.367633
0	0135	0.515117	0.849676	0.199418
0	0136	0.024412	0.346888	0.721220
0	0137	0.517332	0.631519	0.214039
0	0138	0.023233	0.132542	0.705102
0	0139	0.520938	0.138056	0.774358
0	0140	0.014916	0.629596	0.295282
0	0141	0.525961	0.352282	0.794948
0	0142	0.008918	0.855228	0.289537
0	0143	0.397060	0.823763	0.262626
0	0144	0.146111	0.325062	0.781671
0	0145	0.404165	0.671345	0.293243
0	0146	0.140952	0.152510	0.777431
0	0147	0.644614	0.149456	0.721961
0	0148	0.895085	0.649900	0.233554
0	0149	0.642534	0.331932	0.718242
0	0150	0.894279	0.820261	0.211991
0	0151	0.456390	0.737860	0.141682
0	0152	0.089985	0.241684	0.654447
0	0153	0.591364	0.240869	0.839054
0	0154	0.952430	0.742197	0.344601
0	0155	0.330904	0.813525	0.425950
0	0156	0.211247	0.339219	0.947421
0	0157	0.337865	0.640856	0.470804
0	0158	0.203681	0.136729	0.947283
0	0159	0.712306	0.153614	0.558801
0	0160	0.825312	0.661467	0.073981
0	0161	0.706148	0.344399	0.548909
0	0162	0.832910	0.844957	0.042262
0	0163	0.256721	0.855275	0.249684
0	0164	0.274179	0.354005	0.776575
0	0165	0.259649	0.668716	0.296350
0	0166	0.271773	0.166147	0.788107
0	0167	0.773860	0.129143	0.728189
0	0168	0.767266	0.623277	0.241314
0	0169	0.773118	0.316830	0.711119
0	0170	0.762936	0.822145	0.201339
0	0171	0.295277	0.744063	0.582234
0	0172	0.242410	0.238305	0.062673
0	0173	0.741841	0.244340	0.426853

O	O174	0.799010	0.741167	0.925944
O	O175	0.216012	0.839100	0.512728
O	O176	0.328284	0.336212	0.032378
O	O177	0.214914	0.641722	0.535843
O	O178	0.324809	0.139063	0.018243
O	O179	0.825021	0.144766	0.461134
O	O180	0.716630	0.642119	0.970924
O	O181	0.827129	0.339666	0.480498
O	O182	0.714503	0.840225	0.959682
O	O183	0.133169	0.742513	0.566935
O	O184	0.408947	0.234168	0.073096
O	O185	0.910587	0.244195	0.426583
O	O186	0.631390	0.739601	0.928155
O	O187	0.102533	0.822433	0.418397
O	O188	0.440825	0.321323	0.935554
O	O189	0.105281	0.651354	0.430922
O	O190	0.435686	0.156395	0.919362
O	O191	0.929889	0.163204	0.575049
O	O192	0.610085	0.660779	0.081182
O	O193	0.941353	0.328754	0.572616
O	O194	0.603343	0.833866	0.059682
O	O195	0.128830	0.836986	0.225170
O	O196	0.401486	0.335499	0.748484
O	O197	0.134991	0.659069	0.238761
O	O198	0.396511	0.159538	0.730602
O	O199	0.900903	0.136864	0.763921
O	O200	0.639831	0.636684	0.270920
O	O201	0.899636	0.322513	0.759589
O	O202	0.636775	0.818393	0.248795
O	O203	0.212023	0.747274	0.152870
O	O204	0.317362	0.253501	0.661710
O	O205	0.822027	0.230540	0.836326
O	O206	0.720191	0.733396	0.330208
Al	Al207	0.327464	0.864803	0.316372
Al	Al208	0.331632	0.630087	0.328945
Si	Si209	0.711940	0.653756	0.315582
Si	Si210	0.435963	0.042914	0.173918
Si	Si211	0.098799	0.551820	0.684811
Si	Si212	0.449089	0.429321	0.177226
Si	Si213	0.087689	0.937711	0.657157
Si	Si214	0.594181	0.932168	0.813937
Si	Si215	0.941646	0.437931	0.323536
Si	Si216	0.591290	0.542766	0.840866
Si	Si217	0.945624	0.047880	0.329126

Si	Si218	0.332579	0.024090	0.334492
Si	Si219	0.200198	0.524110	0.844934
Si	Si220	0.337413	0.467065	0.324945
Si	Si221	0.203073	0.968065	0.805451
Si	Si222	0.700818	0.957568	0.656302
Si	Si223	0.837361	0.461227	0.162005
Si	Si224	0.708161	0.515636	0.690884
Si	Si225	0.830247	0.014896	0.181648
Si	Si226	0.294652	0.058131	0.548233
Si	Si227	0.238925	0.549177	0.063125
Si	Si228	0.297504	0.439387	0.541635
Si	Si229	0.237217	0.931041	0.022865
Si	Si230	0.733888	0.930095	0.438312
Si	Si231	0.800079	0.426418	0.946948
Si	Si232	0.745145	0.551650	0.476515
Si	Si233	0.790805	0.045872	0.965005
Si	Si234	0.140189	0.056324	0.526115
Si	Si235	0.394260	0.550271	0.047000
Si	Si236	0.143586	0.431083	0.542739
Si	Si237	0.391515	0.924960	0.028964
Si	Si238	0.888638	0.928002	0.456506
Si	Si239	0.645338	0.424231	0.970184
Si	Si240	0.898653	0.556459	0.470894
Si	Si241	0.636363	0.051760	0.961180
Si	Si242	0.094104	0.021089	0.314582
Si	Si243	0.443176	0.520169	0.834635
Si	Si244	0.092355	0.463660	0.330181
Si	Si245	0.444671	0.965972	0.819060
Si	Si246	0.938627	0.961803	0.666912
Si	Si247	0.598265	0.460123	0.180507
Si	Si248	0.950692	0.517433	0.679590
Si	Si249	0.586100	0.016560	0.173324
Si	Si250	0.214688	0.047076	0.184380
Si	Si251	0.321357	0.551982	0.706006
Si	Si252	0.211542	0.424885	0.202922
Si	Si253	0.327637	0.932969	0.679822
Si	Si254	0.820145	0.932149	0.803474
Si	Si255	0.719549	0.437496	0.313073
Si	Si256	0.833070	0.552339	0.816006
Si	Si257	0.702319	0.054159	0.305474
Si	Si258	0.445466	0.816332	0.167031
Si	Si259	0.096116	0.318726	0.688395
Si	Si260	0.445964	0.664266	0.190143
Si	Si261	0.095208	0.163003	0.680042

Si	Si262	0.593045	0.162457	0.811160
Si	Si263	0.945040	0.663057	0.324501
Si	Si264	0.597685	0.319694	0.816342
Si	Si265	0.939498	0.818780	0.311716
Si	Si266	0.205268	0.365529	0.834994
Si	Si267	0.207952	0.125490	0.828294
Si	Si268	0.706895	0.117298	0.665249
Si	Si269	0.833656	0.618481	0.174589
Si	Si270	0.710274	0.357395	0.667694
Si	Si271	0.830817	0.855724	0.161519
Si	Si272	0.292191	0.818114	0.531119
Si	Si273	0.250868	0.317429	0.046232
Si	Si274	0.287256	0.665407	0.567787
Si	Si275	0.248675	0.159332	0.041587
Si	Si276	0.747981	0.165966	0.453208
Si	Si277	0.793252	0.665078	0.964239
Si	Si278	0.750797	0.322298	0.453979
Si	Si279	0.791705	0.820407	0.945251
Si	Si280	0.138734	0.818495	0.525263
Si	Si281	0.404592	0.312265	0.042040
Si	Si282	0.136763	0.664281	0.538414
Si	Si283	0.402055	0.159155	0.028424
Si	Si284	0.901938	0.167252	0.462310
Si	Si285	0.639654	0.663991	0.969105
Si	Si286	0.904393	0.320387	0.466712
Si	Si287	0.637518	0.818411	0.954023
Si	Si288	0.086043	0.864252	0.317453
Si	Si289	0.451101	0.362533	0.833377
Si	Si290	0.092059	0.620517	0.321246
Si	Si291	0.445817	0.124782	0.809563
Si	Si292	0.948215	0.118222	0.671311
Si	Si293	0.592159	0.616880	0.179025
Si	Si294	0.949654	0.359081	0.683647
Si	Si295	0.591667	0.860441	0.171429
Si	Si296	0.201796	0.826128	0.176828
Si	Si297	0.329569	0.329378	0.697666
Si	Si298	0.210196	0.673816	0.202676
Si	Si299	0.322061	0.176127	0.695238
Si	Si300	0.828637	0.152382	0.808871
Si	Si301	0.826233	0.307174	0.800327
Si	Si302	0.711051	0.809081	0.290898
Zn	Zn303	0.428790	0.777083	0.392363

TS-C₄H₉Zn-HTransfer-Concerted-Zn²⁺ (Fig. 3/TS2) Total energy = -1926.20592093 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.521070	0.798646	0.467389
H	H2	0.405874	0.657030	0.525199
H	H3	0.537250	0.720052	0.407041
H	H4	0.526755	0.669355	0.566742
H	H5	0.440260	0.671941	0.555289
H	H6	0.455235	0.799234	0.627015
H	H7	0.536626	0.778791	0.657085
H	H8	0.414552	0.704477	0.733204
H	H9	0.467428	0.757018	0.801966
H	H10	0.496691	0.679673	0.757396
C	C11	0.504799	0.746968	0.457669
C	C12	0.497726	0.714448	0.553883
C	C13	0.487392	0.757086	0.644760
C	C14	0.465147	0.722104	0.739702
O	O15	0.513243	0.026436	0.207507
O	O16	0.022268	0.536047	0.715255
O	O17	0.524732	0.438644	0.207723
O	O18	0.014466	0.936649	0.692661
O	O19	0.522216	0.951957	0.780227
O	O20	0.016450	0.454409	0.287652
O	O21	0.514347	0.543806	0.798191
O	O22	0.022405	0.041538	0.286195
O	O23	0.394473	0.058719	0.271389
O	O24	0.141062	0.560242	0.783533
O	O25	0.401304	0.431024	0.266843
O	O26	0.136839	0.944839	0.751501
O	O27	0.641315	0.927833	0.714373
O	O28	0.898460	0.430529	0.216956

0	029	0.636027	0.537799	0.737495
0	030	0.896900	0.047118	0.238416
0	031	0.441116	0.111942	0.105370
0	032	0.100587	0.622357	0.622806
0	033	0.442879	0.360230	0.112529
0	034	0.104750	0.867244	0.598648
0	035	0.598521	0.865090	0.873049
0	036	0.937940	0.369962	0.380226
0	037	0.601839	0.619439	0.884837
0	038	0.944074	0.120776	0.386874
0	039	0.406327	0.984180	0.111322
0	040	0.127591	0.492564	0.616941
0	041	0.432996	0.491770	0.095904
0	042	0.100069	0.998485	0.578700
0	043	0.627268	0.995038	0.881386
0	044	0.909109	0.499867	0.381531
0	045	0.602900	0.488447	0.915344
0	046	0.935021	0.989198	0.407355
0	047	0.331632	0.063933	0.440418
0	048	0.201177	0.554396	0.954117
0	049	0.339730	0.444062	0.437246
0	050	0.201454	0.942503	0.919353
0	051	0.704991	0.925100	0.547682
0	052	0.834238	0.425271	0.049843
0	053	0.701072	0.543584	0.570461
0	054	0.835635	0.039938	0.066760
0	055	0.349288	0.945929	0.353220
0	056	0.185233	0.443372	0.845744
0	057	0.342202	0.545444	0.310700
0	058	0.213924	0.046710	0.800198
0	059	0.692970	0.040239	0.644780
0	060	0.847752	0.541914	0.140787
0	061	0.715638	0.437948	0.687128
0	062	0.832257	0.936889	0.189314
0	063	0.265844	0.033999	0.277480
0	064	0.270007	0.534994	0.791016
0	065	0.271528	0.435997	0.272228
0	066	0.266016	0.931290	0.748543
0	067	0.771624	0.945545	0.712574
0	068	0.768681	0.450377	0.215413
0	069	0.764878	0.554293	0.741850
0	070	0.766793	0.047407	0.231907
0	071	0.304893	0.130455	0.603248
0	072	0.228773	0.620350	0.117699

0	073	0.315999	0.371457	0.593368
0	074	0.213745	0.862363	0.070241
0	075	0.728036	0.858637	0.384575
0	076	0.808892	0.356483	0.888022
0	077	0.718368	0.619404	0.415718
0	078	0.821272	0.116739	0.912683
0	079	0.220551	0.038704	0.537731
0	080	0.315322	0.534642	0.043746
0	081	0.217373	0.434918	0.504273
0	082	0.319534	0.923848	0.993905
0	083	0.814655	0.949208	0.446029
0	084	0.722226	0.445653	0.954423
0	085	0.821290	0.557191	0.500039
0	086	0.716417	0.056523	0.991565
0	087	0.333873	0.001667	0.614994
0	088	0.205138	0.488965	0.121971
0	089	0.305701	0.502732	0.605984
0	090	0.232906	0.993002	0.095378
0	091	0.699936	0.988726	0.376803
0	092	0.833992	0.486268	0.875649
0	093	0.734474	0.488700	0.397709
0	094	0.804191	0.986196	0.893326
0	095	0.128617	0.127464	0.583084
0	096	0.404732	0.621312	0.107002
0	097	0.124129	0.361790	0.589527
0	098	0.417858	0.855679	0.072901
0	099	0.905522	0.859489	0.399814
0	0100	0.629806	0.358609	0.905193
0	0101	0.916697	0.629379	0.421449
0	0102	0.618109	0.125512	0.912009
0	0103	0.121702	0.063199	0.411781
0	0104	0.419664	0.562515	0.932310
0	0105	0.094121	0.442274	0.442045
0	0106	0.441540	0.942395	0.931434
0	0107	0.911726	0.922185	0.572240
0	0108	0.623237	0.419664	0.079070
0	0109	0.944163	0.541738	0.560678
0	0110	0.594760	0.042357	0.058264
0	0111	0.142073	0.037142	0.219862
0	0112	0.394097	0.540397	0.739734
0	0113	0.141732	0.421398	0.260264
0	0114	0.396884	0.926905	0.746214
0	0115	0.896337	0.949685	0.764501
0	0116	0.644812	0.446599	0.270411

0	0117	0.895650	0.559898	0.742438
0	0118	0.637118	0.061359	0.243726
0	0119	0.101632	0.941890	0.341802
0	0120	0.438196	0.442619	0.855935
0	0121	0.111065	0.543430	0.317315
0	0122	0.431431	0.046023	0.810810
0	0123	0.941029	0.041745	0.641296
0	0124	0.600666	0.540232	0.148700
0	0125	0.932913	0.440302	0.684447
0	0126	0.611605	0.940102	0.180215
0	0127	0.226717	0.120158	0.140891
0	0128	0.311093	0.626933	0.663439
0	0129	0.218544	0.356861	0.137554
0	0130	0.330351	0.868637	0.606115
0	0131	0.818545	0.860222	0.845567
0	0132	0.729149	0.362214	0.349671
0	0133	0.828456	0.619325	0.882119
0	0134	0.713144	0.121496	0.372606
0	0135	0.517239	0.850036	0.203894
0	0136	0.024382	0.348591	0.717056
0	0137	0.515772	0.631730	0.211646
0	0138	0.025615	0.133212	0.705520
0	0139	0.523673	0.136807	0.775410
0	0140	0.014944	0.631651	0.290711
0	0141	0.524087	0.352990	0.788556
0	0142	0.012176	0.853757	0.285624
0	0143	0.399320	0.823502	0.264946
0	0144	0.145877	0.326725	0.776957
0	0145	0.403219	0.673445	0.291450
0	0146	0.143895	0.156034	0.776315
0	0147	0.647433	0.152184	0.724311
0	0148	0.894308	0.650625	0.230332
0	0149	0.641072	0.331188	0.711826
0	0150	0.895943	0.823545	0.209821
0	0151	0.457376	0.739613	0.141471
0	0152	0.089942	0.242768	0.651701
0	0153	0.590192	0.243111	0.837552
0	0154	0.951211	0.743100	0.341681
0	0155	0.334336	0.811289	0.428853
0	0156	0.209232	0.332880	0.945085
0	0157	0.341433	0.646611	0.472579
0	0158	0.204790	0.136810	0.948214
0	0159	0.715559	0.157371	0.561704
0	0160	0.826775	0.662556	0.068402

0	0161	0.705277	0.345931	0.542593
0	0162	0.833660	0.847227	0.040295
0	0163	0.259795	0.856449	0.254149
0	0164	0.273659	0.356619	0.778187
0	0165	0.261881	0.664151	0.298456
0	0166	0.275202	0.161626	0.790591
0	0167	0.775607	0.124688	0.729264
0	0168	0.766275	0.623574	0.233123
0	0169	0.772379	0.321174	0.705039
0	0170	0.764459	0.825180	0.200395
0	0171	0.294310	0.743463	0.586840
0	0172	0.244071	0.237373	0.066425
0	0173	0.743273	0.244693	0.424117
0	0174	0.797891	0.744095	0.923684
0	0175	0.218437	0.839482	0.511986
0	0176	0.326645	0.337425	0.030224
0	0177	0.215200	0.642019	0.529713
0	0178	0.326736	0.139431	0.017251
0	0179	0.827070	0.145737	0.461442
0	0180	0.715239	0.645860	0.971363
0	0181	0.827166	0.341228	0.476890
0	0182	0.714325	0.843310	0.961000
0	0183	0.134256	0.742821	0.564259
0	0184	0.409215	0.236780	0.069293
0	0185	0.911511	0.245619	0.426233
0	0186	0.630754	0.743328	0.925385
0	0187	0.107136	0.820565	0.412474
0	0188	0.435442	0.320099	0.924441
0	0189	0.101985	0.650105	0.432170
0	0190	0.438813	0.155583	0.920727
0	0191	0.932710	0.164090	0.574270
0	0192	0.604966	0.661204	0.073763
0	0193	0.941981	0.333413	0.567766
0	0194	0.604062	0.833747	0.062571
0	0195	0.132624	0.840118	0.220286
0	0196	0.399953	0.343724	0.737529
0	0197	0.136417	0.662341	0.242156
0	0198	0.399719	0.162014	0.732139
0	0199	0.902593	0.139605	0.762686
0	0200	0.639153	0.642083	0.262890
0	0201	0.899219	0.322527	0.753483
0	0202	0.638964	0.820295	0.251742
0	0203	0.217333	0.747195	0.158612
0	0204	0.316321	0.253377	0.667931

O	O205	0.819210	0.232308	0.828045
O	O206	0.723463	0.733855	0.326264
Al	Al207	0.330607	0.865077	0.321106
Al	Al208	0.333880	0.628333	0.340589
Si	Si209	0.712024	0.654939	0.308143
Si	Si210	0.438811	0.045528	0.173965
Si	Si211	0.097381	0.552634	0.683700
Si	Si212	0.449193	0.430575	0.171358
Si	Si213	0.090024	0.936798	0.655249
Si	Si214	0.596973	0.935562	0.813558
Si	Si215	0.941104	0.438815	0.317766
Si	Si216	0.589971	0.546955	0.834569
Si	Si217	0.948853	0.049660	0.329580
Si	Si218	0.335523	0.023708	0.335370
Si	Si219	0.199287	0.523017	0.843968
Si	Si220	0.338422	0.466041	0.320913
Si	Si221	0.204628	0.966384	0.805234
Si	Si222	0.703100	0.960282	0.655703
Si	Si223	0.837241	0.462193	0.156591
Si	Si224	0.704740	0.518089	0.684403
Si	Si225	0.832975	0.017784	0.182010
Si	Si226	0.297813	0.058804	0.548492
Si	Si227	0.237576	0.550434	0.061098
Si	Si228	0.294643	0.438202	0.535004
Si	Si229	0.241588	0.930097	0.021410
Si	Si230	0.737226	0.930340	0.438158
Si	Si231	0.799833	0.428127	0.941629
Si	Si232	0.744084	0.552154	0.470136
Si	Si233	0.794214	0.049842	0.965575
Si	Si234	0.143174	0.057200	0.527320
Si	Si235	0.392738	0.552519	0.045397
Si	Si236	0.140967	0.432870	0.538187
Si	Si237	0.395682	0.927391	0.027251
Si	Si238	0.891900	0.929691	0.456153
Si	Si239	0.644769	0.427588	0.963769
Si	Si240	0.897823	0.556714	0.465811
Si	Si241	0.639436	0.054871	0.960802
Si	Si242	0.096985	0.020861	0.315418
Si	Si243	0.441136	0.521964	0.832696
Si	Si244	0.091174	0.465227	0.326206
Si	Si245	0.447712	0.967065	0.816956
Si	Si246	0.941205	0.962599	0.667178
Si	Si247	0.597938	0.461095	0.175940
Si	Si248	0.948822	0.519417	0.676359

Si	Si249	0.588908	0.017985	0.172870
Si	Si250	0.217570	0.045260	0.183972
Si	Si251	0.319610	0.550161	0.700531
Si	Si252	0.210012	0.426282	0.198023
Si	Si253	0.330895	0.933134	0.678789
Si	Si254	0.822620	0.935932	0.803705
Si	Si255	0.719636	0.437275	0.307903
Si	Si256	0.830431	0.554451	0.810743
Si	Si257	0.704848	0.054625	0.306613
Si	Si258	0.447599	0.817957	0.168777
Si	Si259	0.096014	0.320202	0.683862
Si	Si260	0.444785	0.665570	0.187450
Si	Si261	0.097187	0.164594	0.679297
Si	Si262	0.594707	0.164436	0.812193
Si	Si263	0.944798	0.663984	0.320796
Si	Si264	0.596117	0.321435	0.810589
Si	Si265	0.941606	0.820145	0.309083
Si	Si266	0.203909	0.365097	0.835854
Si	Si267	0.208674	0.125048	0.829150
Si	Si268	0.708083	0.118404	0.665771
Si	Si269	0.833950	0.619243	0.168993
Si	Si270	0.708036	0.359115	0.661478
Si	Si271	0.832262	0.858508	0.159572
Si	Si272	0.293723	0.816206	0.533642
Si	Si273	0.249804	0.316347	0.045360
Si	Si274	0.288741	0.664369	0.562279
Si	Si275	0.250498	0.158812	0.042268
Si	Si276	0.749984	0.167016	0.454460
Si	Si277	0.792119	0.667646	0.960627
Si	Si278	0.751177	0.323112	0.449305
Si	Si279	0.791328	0.823301	0.944061
Si	Si280	0.140969	0.818111	0.521267
Si	Si281	0.403299	0.314060	0.034548
Si	Si282	0.137716	0.664240	0.536696
Si	Si283	0.403606	0.160816	0.028393
Si	Si284	0.903959	0.168678	0.462039
Si	Si285	0.638234	0.667097	0.964437
Si	Si286	0.904594	0.322472	0.462904
Si	Si287	0.637461	0.821432	0.955464
Si	Si288	0.089149	0.864053	0.313924
Si	Si289	0.449227	0.364830	0.826420
Si	Si290	0.091656	0.622014	0.320313
Si	Si291	0.448157	0.125192	0.810206
Si	Si292	0.950514	0.119504	0.671264

Si	Si293	0.590472	0.618498	0.174058
Si	Si294	0.949577	0.361239	0.680254
Si	Si295	0.593444	0.861480	0.174020
Si	Si296	0.206932	0.826307	0.178367
Si	Si297	0.326260	0.331087	0.695524
Si	Si298	0.212482	0.673099	0.206346
Si	Si299	0.324405	0.175895	0.697927
Si	Si300	0.829837	0.153751	0.806862
Si	Si301	0.825332	0.309198	0.793726
Si	Si302	0.713901	0.810315	0.290944
Zn	Zn303	0.420814	0.760561	0.381783

C₄H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 3/M3) Total energy = -1927.88596482 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.506669	0.818996	0.418881
H	H2	0.477311	0.561364	0.501895
H	H3	0.523760	0.733016	0.374861
H	H4	0.509743	0.688966	0.540639
H	H5	0.485558	0.561259	0.555344
H	H6	0.474202	0.831913	0.603438
H	H7	0.550616	0.798685	0.636254
H	H8	0.418441	0.737192	0.699896
H	H9	0.473340	0.782873	0.775666
H	H10	0.497108	0.704246	0.728286
C	C11	0.506290	0.765663	0.433805
C	C12	0.503823	0.742489	0.528850
C	C13	0.499230	0.784783	0.619854
C	C14	0.470067	0.750050	0.711097
O	O15	0.514221	0.029809	0.207341

0	016	0.021140	0.540809	0.711970
0	017	0.522948	0.439956	0.206088
0	018	0.016250	0.940542	0.698200
0	019	0.524949	0.952428	0.784630
0	020	0.014242	0.456460	0.283795
0	021	0.514051	0.547749	0.798545
0	022	0.023113	0.042020	0.286457
0	023	0.395014	0.060710	0.269339
0	024	0.141344	0.560119	0.774530
0	025	0.397741	0.430568	0.257112
0	026	0.140120	0.942208	0.751803
0	027	0.643205	0.927814	0.716848
0	028	0.895534	0.428054	0.217971
0	029	0.635052	0.537104	0.736858
0	030	0.897704	0.047175	0.240140
0	031	0.442422	0.116368	0.105897
0	032	0.101155	0.622260	0.612918
0	033	0.443719	0.364586	0.101067
0	034	0.100731	0.866187	0.600748
0	035	0.601207	0.866283	0.877286
0	036	0.939358	0.371695	0.382496
0	037	0.604129	0.620422	0.883794
0	038	0.945575	0.122070	0.386823
0	039	0.408986	0.988514	0.106526
0	040	0.122097	0.491857	0.609431
0	041	0.434738	0.496214	0.092003
0	042	0.102821	0.997312	0.579941
0	043	0.630836	0.996213	0.883230
0	044	0.906962	0.500950	0.378199
0	045	0.601397	0.489276	0.915015
0	046	0.936269	0.990662	0.409937
0	047	0.335666	0.060643	0.441643
0	048	0.205957	0.547527	0.939992
0	049	0.337590	0.432065	0.430592
0	050	0.201640	0.947670	0.922978
0	051	0.704942	0.926200	0.548369
0	052	0.833142	0.427925	0.049236
0	053	0.699518	0.543327	0.569708
0	054	0.838007	0.038862	0.067286
0	055	0.349193	0.946292	0.343564
0	056	0.193603	0.443135	0.818177
0	057	0.344237	0.542891	0.323415
0	058	0.213177	0.048026	0.795275
0	059	0.694364	0.040588	0.647399

0	060	0.848282	0.542310	0.146325
0	061	0.716431	0.438580	0.687777
0	062	0.832215	0.937184	0.192370
0	063	0.266151	0.039892	0.279698
0	064	0.270800	0.544091	0.771375
0	065	0.268055	0.441766	0.267791
0	066	0.269714	0.932880	0.756671
0	067	0.773387	0.945144	0.712182
0	068	0.766131	0.451140	0.213965
0	069	0.763505	0.556213	0.740949
0	070	0.767874	0.048994	0.231220
0	071	0.305386	0.131058	0.599446
0	072	0.221243	0.621526	0.097036
0	073	0.308174	0.369595	0.595235
0	074	0.214492	0.865253	0.071868
0	075	0.730776	0.859503	0.386275
0	076	0.808718	0.358029	0.888292
0	077	0.717805	0.619938	0.415502
0	078	0.824261	0.117545	0.914559
0	079	0.222517	0.037848	0.534865
0	080	0.315041	0.535598	0.046555
0	081	0.215432	0.436474	0.500245
0	082	0.320264	0.926296	0.995056
0	083	0.816321	0.950212	0.451336
0	084	0.721045	0.446910	0.953568
0	085	0.819572	0.556029	0.499310
0	086	0.718843	0.058600	0.994387
0	087	0.334761	0.003813	0.620179
0	088	0.202329	0.489253	0.113592
0	089	0.309955	0.501671	0.592889
0	090	0.235326	0.995453	0.099399
0	091	0.702606	0.989253	0.376843
0	092	0.832625	0.487782	0.874307
0	093	0.731575	0.489293	0.396068
0	094	0.804166	0.987663	0.892871
0	095	0.130850	0.126361	0.584486
0	096	0.405578	0.624780	0.098365
0	097	0.124410	0.360919	0.586974
0	098	0.413555	0.857484	0.085554
0	099	0.906767	0.860857	0.402402
0	0100	0.629326	0.359231	0.904846
0	0101	0.914985	0.629705	0.423582
0	0102	0.621099	0.126898	0.912815
0	0103	0.121833	0.063193	0.413087

0	0104	0.414582	0.563343	0.925174
0	0105	0.092465	0.438017	0.436234
0	0106	0.443781	0.934011	0.934306
0	0107	0.915112	0.922642	0.574784
0	0108	0.622008	0.419848	0.078234
0	0109	0.942400	0.538761	0.558511
0	0110	0.596682	0.044322	0.059088
0	0111	0.142837	0.040573	0.220480
0	0112	0.396377	0.535229	0.731933
0	0113	0.138909	0.423090	0.253091
0	0114	0.400367	0.928736	0.747730
0	0115	0.897369	0.948889	0.767248
0	0116	0.642795	0.442810	0.270652
0	0117	0.894159	0.560494	0.739725
0	0118	0.638338	0.062013	0.245394
0	0119	0.103283	0.942807	0.339297
0	0120	0.441877	0.443562	0.856505
0	0121	0.110050	0.543502	0.319632
0	0122	0.434649	0.044223	0.827465
0	0123	0.939483	0.042688	0.644470
0	0124	0.602661	0.539767	0.151392
0	0125	0.935200	0.440745	0.688612
0	0126	0.610930	0.941535	0.180133
0	0127	0.226524	0.123823	0.139217
0	0128	0.326537	0.626818	0.642061
0	0129	0.219039	0.357328	0.137598
0	0130	0.331152	0.871465	0.610789
0	0131	0.817705	0.861056	0.848593
0	0132	0.730506	0.362265	0.349868
0	0133	0.828659	0.620754	0.880449
0	0134	0.714718	0.122034	0.373801
0	0135	0.516823	0.851851	0.208746
0	0136	0.026158	0.348182	0.717805
0	0137	0.515309	0.630445	0.208872
0	0138	0.026756	0.132304	0.705395
0	0139	0.525109	0.134804	0.778506
0	0140	0.014475	0.632146	0.295611
0	0141	0.525109	0.352882	0.785829
0	0142	0.013060	0.853875	0.287738
0	0143	0.399981	0.818256	0.274089
0	0144	0.148500	0.324061	0.773235
0	0145	0.401843	0.670717	0.284491
0	0146	0.144342	0.158324	0.776244
0	0147	0.648059	0.152870	0.724156

0	0148	0.894113	0.652423	0.232655
0	0149	0.643031	0.330765	0.712400
0	0150	0.896358	0.823980	0.213204
0	0151	0.460084	0.741071	0.142551
0	0152	0.089373	0.242116	0.648446
0	0153	0.590130	0.243272	0.837224
0	0154	0.951329	0.743797	0.345678
0	0155	0.332257	0.815237	0.434441
0	0156	0.206390	0.342755	0.945303
0	0157	0.338889	0.665321	0.452157
0	0158	0.206636	0.135921	0.945475
0	0159	0.717792	0.157237	0.563182
0	0160	0.828936	0.661484	0.068188
0	0161	0.706437	0.346881	0.542950
0	0162	0.835440	0.847746	0.042972
0	0163	0.260789	0.850655	0.254978
0	0164	0.278130	0.345061	0.783596
0	0165	0.259483	0.655949	0.279065
0	0166	0.275722	0.163071	0.786364
0	0167	0.776363	0.125420	0.732467
0	0168	0.765682	0.626159	0.232457
0	0169	0.774405	0.322253	0.704721
0	0170	0.764801	0.825113	0.201731
0	0171	0.293810	0.746839	0.590833
0	0172	0.242607	0.240165	0.056308
0	0173	0.744428	0.245161	0.425801
0	0174	0.798787	0.744869	0.926306
0	0175	0.217387	0.844779	0.519833
0	0176	0.325555	0.340566	0.025989
0	0177	0.219467	0.643240	0.531034
0	0178	0.327509	0.141632	0.017695
0	0179	0.828806	0.146664	0.461795
0	0180	0.716521	0.646240	0.973321
0	0181	0.828298	0.342105	0.477432
0	0182	0.715316	0.843417	0.968349
0	0183	0.137067	0.743529	0.563487
0	0184	0.408274	0.240599	0.067623
0	0185	0.913167	0.246913	0.427377
0	0186	0.632136	0.744024	0.928144
0	0187	0.109140	0.822450	0.413403
0	0188	0.431950	0.319560	0.915889
0	0189	0.110174	0.654984	0.423964
0	0190	0.439182	0.159719	0.920480
0	0191	0.934430	0.164672	0.574494

O	O192	0.605404	0.660154	0.073496
O	O193	0.942487	0.334487	0.569884
O	O194	0.603321	0.833194	0.066449
O	O195	0.133023	0.839805	0.220297
O	O196	0.402246	0.350609	0.728550
O	O197	0.132963	0.659188	0.230032
O	O198	0.400877	0.153429	0.731250
O	O199	0.903698	0.142737	0.763154
O	O200	0.638241	0.643529	0.263417
O	O201	0.900723	0.323014	0.756223
O	O202	0.639197	0.823361	0.255650
O	O203	0.214143	0.746721	0.150862
O	O204	0.327070	0.251344	0.664230
O	O205	0.819298	0.233605	0.830216
O	O206	0.722169	0.734997	0.328369
Al	Al207	0.331231	0.863963	0.321577
Al	Al208	0.330771	0.626781	0.331805
Si	Si209	0.711312	0.656186	0.308530
Si	Si210	0.440086	0.048871	0.172326
Si	Si211	0.096116	0.553691	0.676230
Si	Si212	0.448359	0.432977	0.164948
Si	Si213	0.091006	0.936667	0.657714
Si	Si214	0.599894	0.936296	0.816964
Si	Si215	0.939718	0.439259	0.316734
Si	Si216	0.589809	0.548233	0.834231
Si	Si217	0.949899	0.050444	0.330847
Si	Si218	0.336590	0.024815	0.333099
Si	Si219	0.203115	0.523247	0.826612
Si	Si220	0.336995	0.463569	0.318939
Si	Si221	0.205964	0.967764	0.807258
Si	Si222	0.704381	0.960580	0.657038
Si	Si223	0.835715	0.462584	0.157583
Si	Si224	0.704019	0.518530	0.683902
Si	Si225	0.834051	0.018000	0.183057
Si	Si226	0.299490	0.058291	0.548056
Si	Si227	0.236078	0.549146	0.050733
Si	Si228	0.292994	0.434940	0.529564
Si	Si229	0.242568	0.933164	0.023931
Si	Si230	0.739093	0.931250	0.440050
Si	Si231	0.798787	0.429872	0.941023
Si	Si232	0.742351	0.552059	0.469325
Si	Si233	0.796292	0.050732	0.966779
Si	Si234	0.144961	0.056388	0.527740
Si	Si235	0.392001	0.554781	0.040430

Si	Si236	0.138967	0.431757	0.533324
Si	Si237	0.396153	0.927325	0.030568
Si	Si238	0.893778	0.930869	0.459391
Si	Si239	0.643644	0.428473	0.963124
Si	Si240	0.895997	0.556178	0.464816
Si	Si241	0.642126	0.056454	0.962366
Si	Si242	0.097882	0.022008	0.315294
Si	Si243	0.441220	0.522369	0.828903
Si	Si244	0.089232	0.465337	0.322611
Si	Si245	0.450584	0.965185	0.823478
Si	Si246	0.942392	0.963639	0.670650
Si	Si247	0.597090	0.460412	0.176044
Si	Si248	0.948254	0.520048	0.675434
Si	Si249	0.589813	0.019832	0.173494
Si	Si250	0.218345	0.049373	0.185020
Si	Si251	0.325128	0.551083	0.684734
Si	Si252	0.207815	0.428321	0.192887
Si	Si253	0.333048	0.935400	0.684078
Si	Si254	0.823154	0.936192	0.805082
Si	Si255	0.718140	0.436674	0.307369
Si	Si256	0.829427	0.555821	0.809103
Si	Si257	0.706495	0.055463	0.307188
Si	Si258	0.447217	0.817791	0.176732
Si	Si259	0.097032	0.319284	0.681673
Si	Si260	0.445476	0.666019	0.182485
Si	Si261	0.097904	0.164487	0.678599
Si	Si262	0.595868	0.164544	0.812980
Si	Si263	0.944282	0.664783	0.323986
Si	Si264	0.596842	0.321490	0.809888
Si	Si265	0.942378	0.820762	0.312089
Si	Si266	0.206717	0.363909	0.829738
Si	Si267	0.209547	0.126179	0.826103
Si	Si268	0.709424	0.118867	0.667552
Si	Si269	0.834339	0.620155	0.170848
Si	Si270	0.709508	0.359707	0.661901
Si	Si271	0.832877	0.858812	0.162287
Si	Si272	0.292364	0.820208	0.539764
Si	Si273	0.248655	0.319828	0.041472
Si	Si274	0.293922	0.669695	0.552953
Si	Si275	0.250840	0.160901	0.039309
Si	Si276	0.751618	0.167486	0.455669
Si	Si277	0.793295	0.668022	0.961376
Si	Si278	0.752404	0.323700	0.449972
Si	Si279	0.792044	0.823877	0.947777

Si	Si280	0.140670	0.819678	0.523655
Si	Si281	0.402092	0.316778	0.027919
Si	Si282	0.141923	0.665569	0.532333
Si	Si283	0.404072	0.164198	0.028331
Si	Si284	0.905609	0.169811	0.462421
Si	Si285	0.639586	0.667352	0.965119
Si	Si286	0.905853	0.323689	0.464420
Si	Si287	0.638489	0.821748	0.960237
Si	Si288	0.090285	0.864689	0.314088
Si	Si289	0.450174	0.366436	0.821634
Si	Si290	0.092339	0.622544	0.317088
Si	Si291	0.449783	0.123231	0.814468
Si	Si292	0.951119	0.120490	0.672254
Si	Si293	0.590795	0.618047	0.174105
Si	Si294	0.951072	0.361618	0.682627
Si	Si295	0.592860	0.862867	0.176948
Si	Si296	0.206891	0.825410	0.176966
Si	Si297	0.328867	0.329226	0.693500
Si	Si298	0.208342	0.670742	0.191299
Si	Si299	0.327419	0.173855	0.695539
Si	Si300	0.831037	0.155206	0.808831
Si	Si301	0.826293	0.310312	0.794954
Si	Si302	0.714349	0.811604	0.292970
Zn	Zn303	0.401224	0.744674	0.393752

TS-C₄H₉-HTransfer-Stepwise-Zn²⁺ (Fig. 3/TS3) Total energy = -1925.69057410 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.527045	0.825087	0.563935
---	----	----------	----------	----------

H	H2	0.380517	0.672915	0.449219
---	----	----------	----------	----------

H	H3	0.555449	0.832832	0.435100
H	H4	0.538479	0.715185	0.404612
H	H5	0.444280	0.709441	0.450637
H	H6	0.507818	0.703841	0.627881
H	H7	0.585925	0.692324	0.575753
H	H8	0.465791	0.603216	0.535803
H	H9	0.538812	0.581772	0.597927
H	H10	0.540548	0.597514	0.468709
C	C11	0.525116	0.806183	0.488335
C	C12	0.522327	0.734406	0.476411
C	C13	0.532869	0.686428	0.560685
C	C14	0.518561	0.613023	0.539187
O	O15	0.515943	0.030137	0.211944
O	O16	0.028170	0.527057	0.706137
O	O17	0.520927	0.443671	0.197710
O	O18	0.014217	0.933657	0.701999
O	O19	0.521499	0.950426	0.791046
O	O20	0.013388	0.451168	0.280051
O	O21	0.517673	0.539639	0.787730
O	O22	0.023478	0.041518	0.293226
O	O23	0.398268	0.058314	0.281809
O	O24	0.149680	0.553790	0.760359
O	O25	0.395989	0.449555	0.242815
O	O26	0.136137	0.938194	0.766981
O	O27	0.637419	0.927121	0.712047
O	O28	0.891271	0.424736	0.228193
O	O29	0.644645	0.548603	0.751335
O	O30	0.901003	0.036061	0.234231
O	O31	0.440559	0.118475	0.119205
O	O32	0.100459	0.609440	0.597865
O	O33	0.438861	0.364964	0.104176
O	O34	0.104087	0.858399	0.616325
O	O35	0.601225	0.861872	0.872398
O	O36	0.942263	0.368285	0.388500
O	O37	0.590869	0.614967	0.902374
O	O38	0.936532	0.118885	0.379470
O	O39	0.408937	0.990287	0.114180
O	O40	0.130141	0.480088	0.602166
O	O41	0.438519	0.494989	0.067702
O	O42	0.104668	0.989470	0.589490
O	O43	0.631236	0.991080	0.882630
O	O44	0.912555	0.497953	0.386285
O	O45	0.601481	0.482820	0.910838
O	O46	0.934825	0.988042	0.411740

0	047	0.338856	0.053547	0.453538
0	048	0.213224	0.554499	0.928581
0	049	0.335000	0.426065	0.409693
0	050	0.199308	0.954343	0.937839
0	051	0.701538	0.923068	0.545214
0	052	0.831175	0.424898	0.057670
0	053	0.700337	0.541230	0.576648
0	054	0.838006	0.036204	0.064476
0	055	0.341532	0.945021	0.338884
0	056	0.191784	0.438635	0.837973
0	057	0.310105	0.538415	0.314067
0	058	0.205232	0.048079	0.799923
0	059	0.692850	0.037723	0.642880
0	060	0.846618	0.539694	0.154606
0	061	0.705529	0.436913	0.697259
0	062	0.824388	0.933425	0.186763
0	063	0.267714	0.049691	0.291563
0	064	0.277069	0.524047	0.763768
0	065	0.268539	0.422721	0.241872
0	066	0.266018	0.933360	0.772741
0	067	0.768508	0.940972	0.711462
0	068	0.762494	0.449923	0.219647
0	069	0.774641	0.546228	0.736979
0	070	0.771706	0.049614	0.233123
0	071	0.304924	0.121322	0.611995
0	072	0.222369	0.625341	0.091318
0	073	0.328721	0.359972	0.574127
0	074	0.212561	0.871352	0.084926
0	075	0.730724	0.859348	0.381283
0	076	0.810325	0.353085	0.897517
0	077	0.717259	0.619578	0.424880
0	078	0.820980	0.113954	0.910658
0	079	0.222659	0.031159	0.539037
0	080	0.319696	0.543618	0.041194
0	081	0.219241	0.413941	0.498967
0	082	0.319331	0.927920	0.003863
0	083	0.814674	0.948887	0.455239
0	084	0.722026	0.444003	0.953338
0	085	0.819248	0.551083	0.498793
0	086	0.717950	0.053168	0.996253
0	087	0.332483	0.992022	0.626223
0	088	0.206534	0.494506	0.103108
0	089	0.310320	0.491288	0.577852
0	090	0.239973	0.998985	0.113892

0	091	0.703218	0.989297	0.375678
0	092	0.836750	0.482426	0.881728
0	093	0.725591	0.488852	0.400075
0	094	0.802378	0.983609	0.891175
0	095	0.133007	0.118910	0.599629
0	096	0.420880	0.626637	0.068035
0	097	0.112898	0.351310	0.565697
0	098	0.409683	0.858611	0.099775
0	099	0.901969	0.858884	0.400047
0	0100	0.631239	0.353700	0.908437
0	0101	0.911826	0.628084	0.421141
0	0102	0.621050	0.121450	0.914009
0	0103	0.118949	0.060922	0.425955
0	0104	0.411534	0.559491	0.901413
0	0105	0.100781	0.436559	0.421838
0	0106	0.443434	0.932747	0.945193
0	0107	0.915337	0.917645	0.574111
0	0108	0.623298	0.419003	0.078650
0	0109	0.941394	0.544188	0.564921
0	0110	0.594936	0.038181	0.058274
0	0111	0.144278	0.038640	0.233823
0	0112	0.401251	0.528380	0.709422
0	0113	0.137209	0.425871	0.233175
0	0114	0.396386	0.922161	0.761694
0	0115	0.893533	0.942467	0.765235
0	0116	0.638389	0.442149	0.272043
0	0117	0.904617	0.554902	0.753937
0	0118	0.641445	0.060958	0.240514
0	0119	0.101416	0.941611	0.350850
0	0120	0.440001	0.438210	0.841021
0	0121	0.105679	0.543312	0.309241
0	0122	0.429356	0.040568	0.831563
0	0123	0.939173	0.037056	0.647036
0	0124	0.605563	0.540410	0.149862
0	0125	0.933210	0.436921	0.679306
0	0126	0.610476	0.939109	0.185097
0	0127	0.221448	0.126359	0.148075
0	0128	0.318736	0.615465	0.635777
0	0129	0.204874	0.362134	0.098743
0	0130	0.321715	0.859293	0.636672
0	0131	0.812461	0.856288	0.846611
0	0132	0.724503	0.361528	0.354520
0	0133	0.829621	0.615443	0.882814
0	0134	0.714636	0.122154	0.371953

0	0135	0.517654	0.848488	0.213119
0	0136	0.025635	0.345636	0.713789
0	0137	0.515361	0.629749	0.205284
0	0138	0.024239	0.127798	0.710116
0	0139	0.521352	0.130316	0.786067
0	0140	0.008637	0.630604	0.288339
0	0141	0.527657	0.347662	0.787448
0	0142	0.011616	0.853742	0.293630
0	0143	0.403546	0.820121	0.288561
0	0144	0.151604	0.327580	0.749681
0	0145	0.392689	0.650222	0.259459
0	0146	0.139729	0.160347	0.787075
0	0147	0.642153	0.146849	0.723575
0	0148	0.887377	0.654489	0.231511
0	0149	0.646209	0.321412	0.717405
0	0150	0.898438	0.825631	0.208820
0	0151	0.455585	0.740291	0.148894
0	0152	0.085810	0.236392	0.648091
0	0153	0.589444	0.237705	0.842657
0	0154	0.948420	0.742716	0.343802
0	0155	0.337096	0.823524	0.449642
0	0156	0.215811	0.318838	0.915064
0	0157	0.335566	0.651322	0.445168
0	0158	0.204444	0.133868	0.953888
0	0159	0.710716	0.156083	0.562240
0	0160	0.818043	0.655360	0.069804
0	0161	0.707642	0.346991	0.548542
0	0162	0.834064	0.842849	0.040075
0	0163	0.260747	0.837969	0.262756
0	0164	0.278875	0.358496	0.754261
0	0165	0.250128	0.664476	0.277152
0	0166	0.271776	0.160922	0.793974
0	0167	0.771416	0.124599	0.730281
0	0168	0.760867	0.621675	0.239015
0	0169	0.777588	0.327656	0.709346
0	0170	0.767463	0.816278	0.202042
0	0171	0.295235	0.737191	0.583437
0	0172	0.243242	0.239239	0.062593
0	0173	0.742462	0.244672	0.429072
0	0174	0.797034	0.739548	0.925171
0	0175	0.216028	0.835023	0.522399
0	0176	0.323694	0.340170	0.021076
0	0177	0.215759	0.638527	0.516312
0	0178	0.325366	0.138424	0.028408

O	O179	0.825160	0.145505	0.471333
O	O180	0.712127	0.640623	0.957305
O	O181	0.827254	0.341900	0.472754
O	O182	0.712782	0.837012	0.970683
O	O183	0.132985	0.735298	0.564506
O	O184	0.404977	0.240519	0.070094
O	O185	0.909875	0.243084	0.426904
O	O186	0.626867	0.740398	0.929232
O	O187	0.103609	0.821389	0.424513
O	O188	0.433823	0.318388	0.918996
O	O189	0.105622	0.655231	0.413253
O	O190	0.437323	0.154101	0.930680
O	O191	0.937228	0.157317	0.569768
O	O192	0.614442	0.663242	0.084621
O	O193	0.937243	0.325279	0.574077
O	O194	0.599138	0.834520	0.063462
O	O195	0.132372	0.839775	0.232261
O	O196	0.405746	0.334980	0.727944
O	O197	0.126039	0.657749	0.217228
O	O198	0.397533	0.153863	0.742616
O	O199	0.899334	0.139645	0.757345
O	O200	0.634500	0.639607	0.275933
O	O201	0.902321	0.322138	0.764105
O	O202	0.640876	0.819285	0.250085
O	O203	0.204406	0.748920	0.140936
O	O204	0.319298	0.245846	0.664931
O	O205	0.817433	0.231226	0.827617
O	O206	0.720055	0.732697	0.333772
Al	Al207	0.328918	0.860988	0.327448
Al	Al208	0.320339	0.623183	0.312656
Si	Si209	0.708480	0.653705	0.316677
Si	Si210	0.440917	0.049198	0.181700
Si	Si211	0.101675	0.542471	0.665836
Si	Si212	0.447139	0.438335	0.153444
Si	Si213	0.090601	0.930148	0.668761
Si	Si214	0.597413	0.933004	0.815695
Si	Si215	0.940389	0.435539	0.321576
Si	Si216	0.589647	0.546251	0.838368
Si	Si217	0.948149	0.046181	0.329846
Si	Si218	0.336659	0.024499	0.340722
Si	Si219	0.207768	0.517478	0.822852
Si	Si220	0.327151	0.461209	0.301316
Si	Si221	0.201361	0.968285	0.819910
Si	Si222	0.700445	0.957586	0.653965

Si	Si223	0.832928	0.460059	0.165622
Si	Si224	0.706625	0.517772	0.691214
Si	Si225	0.833744	0.013863	0.179761
Si	Si226	0.299620	0.049762	0.557284
Si	Si227	0.240467	0.554778	0.041681
Si	Si228	0.297955	0.422843	0.515058
Si	Si229	0.242538	0.937753	0.036017
Si	Si230	0.737787	0.929953	0.438552
Si	Si231	0.799912	0.425865	0.947421
Si	Si232	0.741135	0.549971	0.474408
Si	Si233	0.794941	0.046885	0.964816
Si	Si234	0.145153	0.050331	0.538567
Si	Si235	0.397043	0.556485	0.020129
Si	Si236	0.141450	0.420785	0.521624
Si	Si237	0.395074	0.927815	0.041112
Si	Si238	0.891826	0.928191	0.460145
Si	Si239	0.644774	0.424554	0.963084
Si	Si240	0.896166	0.555108	0.467715
Si	Si241	0.641472	0.050770	0.962832
Si	Si242	0.097116	0.020711	0.326243
Si	Si243	0.442754	0.516374	0.810873
Si	Si244	0.089546	0.464181	0.310183
Si	Si245	0.447573	0.961700	0.832528
Si	Si246	0.941029	0.957806	0.671768
Si	Si247	0.596597	0.461231	0.173815
Si	Si248	0.951824	0.515697	0.676543
Si	Si249	0.590412	0.017452	0.174642
Si	Si250	0.218678	0.052737	0.197523
Si	Si251	0.326201	0.538182	0.672233
Si	Si252	0.205029	0.427201	0.169936
Si	Si253	0.328599	0.928015	0.699375
Si	Si254	0.819083	0.931375	0.803250
Si	Si255	0.713106	0.435895	0.311505
Si	Si256	0.835867	0.549509	0.814171
Si	Si257	0.708286	0.055212	0.305591
Si	Si258	0.446477	0.816302	0.185910
Si	Si259	0.093927	0.315259	0.669684
Si	Si260	0.444341	0.661150	0.171998
Si	Si261	0.095599	0.160564	0.686260
Si	Si262	0.593210	0.159216	0.816187
Si	Si263	0.939538	0.664002	0.321102
Si	Si264	0.598581	0.315361	0.813959
Si	Si265	0.940475	0.820038	0.311333
Si	Si266	0.209495	0.361281	0.813871

Si	Si267	0.204889	0.125795	0.834242
Si	Si268	0.704578	0.116123	0.665698
Si	Si269	0.828249	0.617327	0.174154
Si	Si270	0.709017	0.358397	0.667764
Si	Si271	0.831850	0.854938	0.159162
Si	Si272	0.291248	0.814959	0.548606
Si	Si273	0.247249	0.315460	0.025333
Si	Si274	0.288705	0.660630	0.548618
Si	Si275	0.248773	0.159683	0.047141
Si	Si276	0.748451	0.166730	0.457840
Si	Si277	0.789243	0.662505	0.958535
Si	Si278	0.750464	0.323254	0.452516
Si	Si279	0.789237	0.818503	0.946652
Si	Si280	0.138475	0.813211	0.531595
Si	Si281	0.400243	0.316344	0.028590
Si	Si282	0.137597	0.659537	0.522305
Si	Si283	0.401688	0.162655	0.037516
Si	Si284	0.902432	0.165941	0.462027
Si	Si285	0.636014	0.664472	0.968575
Si	Si286	0.904124	0.319670	0.465238
Si	Si287	0.635335	0.818318	0.959265
Si	Si288	0.088028	0.863937	0.324243
Si	Si289	0.451664	0.359639	0.818947
Si	Si290	0.086942	0.621859	0.306615
Si	Si291	0.446184	0.119639	0.822932
Si	Si292	0.949732	0.115517	0.671317
Si	Si293	0.591847	0.617802	0.178730
Si	Si294	0.949538	0.357685	0.682688
Si	Si295	0.592489	0.860563	0.176708
Si	Si296	0.204082	0.824653	0.182672
Si	Si297	0.333066	0.324355	0.681347
Si	Si298	0.201941	0.673494	0.183717
Si	Si299	0.323817	0.169713	0.703310
Si	Si300	0.827462	0.152590	0.805485
Si	Si301	0.827249	0.309031	0.799899
Si	Si302	0.714905	0.808079	0.291833
Zn	Zn303	0.433560	0.797565	0.431540

C₄H₈-Phys.Ads-ZnH-OH-Zn²⁺(Fig. 3/M4) Total energy = -1927.04054925 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'
_cell_length_a 20.357621
_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.488790	0.875857	0.560030
H	H2	0.377118	0.667013	0.446308
H	H3	0.501136	0.888441	0.424683
H	H4	0.572924	0.791410	0.417206
H	H5	0.438547	0.701756	0.460424
H	H6	0.552249	0.784996	0.644467
H	H7	0.628340	0.782521	0.582596
H	H8	0.523326	0.672731	0.578162
H	H9	0.604004	0.668542	0.626099
H	H10	0.591390	0.673558	0.496674
C	C11	0.508891	0.857763	0.490185
C	C12	0.551400	0.805492	0.488425
C	C13	0.576372	0.767654	0.576528
C	C14	0.573404	0.691108	0.568563
O	O15	0.519132	0.030353	0.211919
O	O16	0.028280	0.524633	0.706657
O	O17	0.518050	0.443408	0.197724
O	O18	0.014691	0.929501	0.703481
O	O19	0.519961	0.944653	0.791602
O	O20	0.010221	0.449053	0.279521
O	O21	0.518790	0.536347	0.786966
O	O22	0.024711	0.044229	0.296282
O	O23	0.402842	0.053381	0.289176
O	O24	0.152373	0.547358	0.750021
O	O25	0.390779	0.434051	0.230816
O	O26	0.134611	0.938745	0.775549
O	O27	0.635169	0.924029	0.708720
O	O28	0.886841	0.422123	0.235213
O	O29	0.646532	0.548176	0.756776
O	O30	0.905177	0.031707	0.226061
O	O31	0.439717	0.121504	0.131301
O	O32	0.097753	0.607157	0.594855
O	O33	0.446333	0.366003	0.084226

0	034	0.109217	0.854663	0.627780
0	035	0.603306	0.858617	0.870211
0	036	0.941800	0.366742	0.393303
0	037	0.588995	0.612283	0.905700
0	038	0.929816	0.117210	0.372063
0	039	0.411428	0.993439	0.113398
0	040	0.123317	0.477360	0.589979
0	041	0.436086	0.497218	0.069448
0	042	0.106574	0.985133	0.593686
0	043	0.630038	0.988768	0.879312
0	044	0.912916	0.496526	0.390954
0	045	0.600767	0.480343	0.913104
0	046	0.934010	0.986688	0.407269
0	047	0.341104	0.047947	0.458656
0	048	0.214417	0.552561	0.919608
0	049	0.333328	0.419882	0.402841
0	050	0.199416	0.950292	0.945393
0	051	0.699753	0.922603	0.542055
0	052	0.827664	0.421023	0.063676
0	053	0.699862	0.542446	0.580176
0	054	0.839720	0.033897	0.058442
0	055	0.341355	0.941706	0.338366
0	056	0.194045	0.434362	0.835785
0	057	0.318647	0.533476	0.305722
0	058	0.206958	0.046083	0.809845
0	059	0.690716	0.035395	0.645525
0	060	0.844940	0.536891	0.157127
0	061	0.700512	0.435039	0.695384
0	062	0.826553	0.930501	0.180396
0	063	0.271657	0.049989	0.294757
0	064	0.279369	0.517428	0.757740
0	065	0.261398	0.422585	0.241647
0	066	0.264612	0.930397	0.778405
0	067	0.766516	0.936745	0.708921
0	068	0.758811	0.449625	0.224135
0	069	0.776041	0.539275	0.738035
0	070	0.775758	0.046692	0.229316
0	071	0.308047	0.113933	0.619666
0	072	0.216322	0.626239	0.080100
0	073	0.325416	0.351222	0.564537
0	074	0.215848	0.870196	0.096153
0	075	0.731885	0.857764	0.380313
0	076	0.810802	0.348629	0.903042
0	077	0.717265	0.618320	0.425244

0	078	0.820338	0.110869	0.903922
0	079	0.223699	0.027961	0.540997
0	080	0.319084	0.549313	0.037184
0	081	0.218630	0.413129	0.497649
0	082	0.320218	0.928002	0.010483
0	083	0.815433	0.946186	0.458236
0	084	0.720204	0.438264	0.954367
0	085	0.818025	0.549212	0.499773
0	086	0.718940	0.048729	0.992275
0	087	0.331690	0.983484	0.627885
0	088	0.207668	0.495363	0.096556
0	089	0.315841	0.483616	0.573706
0	090	0.239688	0.999214	0.118707
0	091	0.706202	0.987983	0.372245
0	092	0.835691	0.478192	0.887579
0	093	0.722060	0.486968	0.405195
0	094	0.803627	0.980254	0.886389
0	095	0.135386	0.114501	0.608096
0	096	0.422921	0.628700	0.062738
0	097	0.114075	0.346741	0.564595
0	098	0.410612	0.861184	0.109933
0	099	0.901374	0.857439	0.394716
0	0100	0.626292	0.350319	0.913150
0	0101	0.910274	0.627117	0.422415
0	0102	0.623811	0.119444	0.910861
0	0103	0.118198	0.059937	0.432967
0	0104	0.412190	0.557788	0.898586
0	0105	0.102324	0.425185	0.411583
0	0106	0.443694	0.929227	0.948854
0	0107	0.919704	0.914276	0.569072
0	0108	0.622055	0.417580	0.082223
0	0109	0.939428	0.545485	0.569085
0	0110	0.595823	0.036676	0.055316
0	0111	0.146759	0.040629	0.241716
0	0112	0.403413	0.526878	0.705963
0	0113	0.131507	0.428339	0.219179
0	0114	0.394813	0.915900	0.766419
0	0115	0.892350	0.935860	0.759257
0	0116	0.634881	0.440208	0.276121
0	0117	0.905352	0.548983	0.759792
0	0118	0.645469	0.059543	0.235706
0	0119	0.099951	0.942296	0.353081
0	0120	0.439073	0.435746	0.838446
0	0121	0.102928	0.539919	0.316810

0	0122	0.428214	0.035320	0.831886
0	0123	0.939777	0.032839	0.647065
0	0124	0.604624	0.539082	0.153455
0	0125	0.934334	0.434158	0.674510
0	0126	0.612349	0.938091	0.182625
0	0127	0.223902	0.127053	0.153227
0	0128	0.317516	0.609079	0.628622
0	0129	0.203937	0.363463	0.090741
0	0130	0.318096	0.851450	0.645669
0	0131	0.810478	0.852258	0.844294
0	0132	0.721769	0.360026	0.358347
0	0133	0.828238	0.611040	0.883546
0	0134	0.719267	0.120575	0.366264
0	0135	0.520761	0.847537	0.216883
0	0136	0.026105	0.342579	0.711985
0	0137	0.514138	0.629082	0.205042
0	0138	0.023405	0.124496	0.711084
0	0139	0.520799	0.124642	0.788539
0	0140	0.006420	0.626809	0.288470
0	0141	0.527063	0.345626	0.784034
0	0142	0.013521	0.851479	0.294233
0	0143	0.408412	0.817331	0.295871
0	0144	0.151829	0.323976	0.749686
0	0145	0.390497	0.651948	0.253298
0	0146	0.137049	0.156504	0.794388
0	0147	0.639280	0.146448	0.719998
0	0148	0.885359	0.652485	0.232677
0	0149	0.647908	0.317335	0.723555
0	0150	0.902382	0.823674	0.204025
0	0151	0.457392	0.741247	0.148116
0	0152	0.086480	0.232359	0.650322
0	0153	0.585397	0.234739	0.843054
0	0154	0.948628	0.740642	0.342225
0	0155	0.339848	0.822314	0.456627
0	0156	0.220641	0.314439	0.911349
0	0157	0.332206	0.646324	0.439100
0	0158	0.205239	0.134585	0.959280
0	0159	0.705763	0.151141	0.556476
0	0160	0.817508	0.652233	0.069719
0	0161	0.706809	0.341988	0.552220
0	0162	0.835542	0.838121	0.037006
0	0163	0.265978	0.828579	0.268818
0	0164	0.279418	0.354162	0.747340
0	0165	0.247513	0.654077	0.269829

0	0166	0.268806	0.160977	0.794780
0	0167	0.768804	0.125534	0.725244
0	0168	0.758862	0.619819	0.238214
0	0169	0.778696	0.330224	0.712873
0	0170	0.771780	0.812997	0.202817
0	0171	0.293920	0.731398	0.580321
0	0172	0.244891	0.239993	0.066484
0	0173	0.741913	0.242387	0.428962
0	0174	0.796152	0.735419	0.923376
0	0175	0.216580	0.831186	0.522001
0	0176	0.325316	0.340402	0.023045
0	0177	0.213106	0.634286	0.513089
0	0178	0.326775	0.138941	0.031473
0	0179	0.824355	0.144645	0.479054
0	0180	0.711016	0.637234	0.958288
0	0181	0.825970	0.339723	0.473707
0	0182	0.713135	0.833203	0.972800
0	0183	0.132602	0.732552	0.565120
0	0184	0.408021	0.240725	0.065998
0	0185	0.908525	0.240771	0.426767
0	0186	0.626503	0.737551	0.929829
0	0187	0.099994	0.824193	0.434519
0	0188	0.427915	0.312958	0.905908
0	0189	0.103752	0.655655	0.410806
0	0190	0.441379	0.145251	0.939289
0	0191	0.941290	0.151294	0.563423
0	0192	0.614423	0.661632	0.086624
0	0193	0.934812	0.319672	0.577097
0	0194	0.598095	0.833426	0.061687
0	0195	0.136997	0.838395	0.244702
0	0196	0.406589	0.336336	0.715580
0	0197	0.123145	0.651670	0.214290
0	0198	0.396221	0.151604	0.754045
0	0199	0.897208	0.137802	0.749134
0	0200	0.633249	0.639183	0.277995
0	0201	0.903172	0.322296	0.768145
0	0202	0.644559	0.818239	0.245722
0	0203	0.201488	0.746570	0.145514
0	0204	0.322343	0.240529	0.663765
0	0205	0.817738	0.229435	0.824438
0	0206	0.720488	0.731219	0.334141
Al	Al207	0.332479	0.856880	0.333727
Al	Al208	0.320455	0.618619	0.305727
Si	Si209	0.707689	0.652283	0.317218

Si	Si210	0.443289	0.049501	0.186322
Si	Si211	0.100378	0.538895	0.659898
Si	Si212	0.446422	0.435560	0.146272
Si	Si213	0.092024	0.927182	0.675141
Si	Si214	0.596711	0.929636	0.813952
Si	Si215	0.938379	0.433587	0.325405
Si	Si216	0.589577	0.543941	0.840599
Si	Si217	0.947878	0.044934	0.325702
Si	Si218	0.338998	0.021171	0.344530
Si	Si219	0.209733	0.512815	0.815993
Si	Si220	0.326102	0.454842	0.294401
Si	Si221	0.201158	0.966216	0.827946
Si	Si222	0.698625	0.955239	0.652275
Si	Si223	0.829640	0.457662	0.170537
Si	Si224	0.705996	0.515730	0.693144
Si	Si225	0.836779	0.010802	0.173511
Si	Si226	0.300950	0.043797	0.561657
Si	Si227	0.239488	0.556061	0.033732
Si	Si228	0.297928	0.417191	0.509366
Si	Si229	0.243449	0.936397	0.043794
Si	Si230	0.738759	0.928535	0.437281
Si	Si231	0.798372	0.421375	0.952209
Si	Si232	0.739765	0.549003	0.476829
Si	Si233	0.795791	0.043747	0.959423
Si	Si234	0.146234	0.047038	0.543983
Si	Si235	0.396996	0.558447	0.017165
Si	Si236	0.140209	0.415882	0.515677
Si	Si237	0.396217	0.928291	0.046243
Si	Si238	0.892874	0.926036	0.457101
Si	Si239	0.642509	0.421279	0.966093
Si	Si240	0.895118	0.554391	0.470479
Si	Si241	0.642323	0.048197	0.959450
Si	Si242	0.097517	0.021668	0.331038
Si	Si243	0.443400	0.514157	0.808524
Si	Si244	0.087167	0.460802	0.306108
Si	Si245	0.446515	0.956522	0.835140
Si	Si246	0.942151	0.953341	0.669503
Si	Si247	0.594443	0.459973	0.176703
Si	Si248	0.951775	0.513201	0.677946
Si	Si249	0.592833	0.016570	0.172035
Si	Si250	0.220787	0.053470	0.202895
Si	Si251	0.328514	0.532752	0.666540
Si	Si252	0.201912	0.428183	0.162696
Si	Si253	0.326577	0.921461	0.704689

Si	Si254	0.818212	0.926809	0.799322
Si	Si255	0.709637	0.434459	0.315960
Si	Si256	0.835730	0.544096	0.817548
Si	Si257	0.712150	0.053343	0.301061
Si	Si258	0.448991	0.815933	0.190864
Si	Si259	0.094512	0.311618	0.669129
Si	Si260	0.444432	0.661933	0.168785
Si	Si261	0.095397	0.156987	0.691097
Si	Si262	0.591982	0.156634	0.815256
Si	Si263	0.938169	0.661812	0.321457
Si	Si264	0.596696	0.312475	0.815929
Si	Si265	0.942037	0.817920	0.308750
Si	Si266	0.211552	0.357062	0.810666
Si	Si267	0.204082	0.124507	0.840006
Si	Si268	0.701503	0.114567	0.662875
Si	Si269	0.826764	0.614827	0.174819
Si	Si270	0.708364	0.356243	0.670718
Si	Si271	0.834844	0.851689	0.155755
Si	Si272	0.291306	0.810265	0.551170
Si	Si273	0.248944	0.315020	0.023776
Si	Si274	0.286614	0.655352	0.543717
Si	Si275	0.250330	0.160308	0.051649
Si	Si276	0.748098	0.164395	0.456908
Si	Si277	0.788229	0.658711	0.958630
Si	Si278	0.749132	0.320736	0.454562
Si	Si279	0.789065	0.814382	0.945204
Si	Si280	0.139046	0.811221	0.537078
Si	Si281	0.401658	0.315240	0.020114
Si	Si282	0.135644	0.657412	0.520342
Si	Si283	0.403498	0.161562	0.042297
Si	Si284	0.901405	0.163306	0.460509
Si	Si285	0.635127	0.661751	0.970318
Si	Si286	0.902728	0.316888	0.467245
Si	Si287	0.635592	0.815475	0.959030
Si	Si288	0.088539	0.863828	0.330583
Si	Si289	0.450240	0.357686	0.811011
Si	Si290	0.084812	0.618534	0.306820
Si	Si291	0.446295	0.114303	0.828714
Si	Si292	0.950052	0.111755	0.667920
Si	Si293	0.590854	0.616720	0.180887
Si	Si294	0.949685	0.354930	0.683045
Si	Si295	0.594492	0.859507	0.175250
Si	Si296	0.206854	0.821034	0.191225
Si	Si297	0.333432	0.319901	0.674134

Si	Si298	0.198496	0.669152	0.179391
Si	Si299	0.324007	0.165791	0.707970
Si	Si300	0.826224	0.151010	0.799839
Si	Si301	0.827903	0.307973	0.802207
Si	Si302	0.717656	0.806238	0.290420
Zn	Zn303	0.433114	0.776917	0.432433

ZnH-OH-Zn²⁺ (Fig. 3/M5) Total energy = -1865.12577695 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.380828	0.639750	0.459881
H	H2	0.468623	0.724714	0.479030
O	O3	0.519086	0.030166	0.211376
O	O4	0.028130	0.525216	0.707136
O	O5	0.518068	0.442199	0.199194
O	O6	0.014830	0.929559	0.702879
O	O7	0.520335	0.945801	0.791173
O	O8	0.009779	0.448704	0.280026
O	O9	0.519128	0.535636	0.787996
O	O10	0.024597	0.044419	0.296213
O	O11	0.402723	0.053185	0.288861
O	O12	0.152527	0.547314	0.749213
O	O13	0.390435	0.430727	0.230539
O	O14	0.134930	0.939293	0.773457
O	O15	0.636188	0.923578	0.710068
O	O16	0.886319	0.421884	0.236501
O	O17	0.646922	0.547416	0.758255
O	O18	0.905176	0.031418	0.225914
O	O19	0.439567	0.120899	0.130742
O	O20	0.098152	0.607383	0.594916

0	021	0.447324	0.365418	0.082866
0	022	0.108938	0.855206	0.625346
0	023	0.602277	0.859157	0.871986
0	024	0.941827	0.366421	0.394153
0	025	0.588813	0.612114	0.906425
0	026	0.929339	0.116905	0.371924
0	027	0.410917	0.992743	0.113884
0	028	0.122082	0.477428	0.589351
0	029	0.436295	0.496913	0.072160
0	030	0.106194	0.985648	0.592190
0	031	0.630177	0.988906	0.879607
0	032	0.913052	0.496181	0.392311
0	033	0.600689	0.480294	0.914929
0	034	0.934394	0.986292	0.407156
0	035	0.340479	0.049850	0.457963
0	036	0.212549	0.553511	0.920375
0	037	0.333003	0.423750	0.403585
0	038	0.199940	0.951645	0.942532
0	039	0.699978	0.924090	0.542025
0	040	0.827686	0.420622	0.064619
0	041	0.700086	0.541972	0.581053
0	042	0.839962	0.033747	0.058078
0	043	0.340155	0.942433	0.340561
0	044	0.193164	0.434575	0.836846
0	045	0.323291	0.535137	0.298966
0	046	0.208911	0.046217	0.806164
0	047	0.690679	0.035589	0.648246
0	048	0.844960	0.536635	0.157633
0	049	0.700938	0.434735	0.696282
0	050	0.826226	0.930620	0.180590
0	051	0.271468	0.050358	0.293485
0	052	0.279205	0.517277	0.760757
0	053	0.260521	0.425232	0.242820
0	054	0.264485	0.929038	0.774748
0	055	0.767387	0.936842	0.708322
0	056	0.758455	0.449647	0.224578
0	057	0.776347	0.538996	0.738750
0	058	0.775781	0.047240	0.228450
0	059	0.307777	0.115744	0.618742
0	060	0.219705	0.625772	0.082787
0	061	0.325715	0.353019	0.564265
0	062	0.214210	0.869444	0.090748
0	063	0.732481	0.857921	0.380739
0	064	0.810698	0.348758	0.903536

0	065	0.716859	0.618344	0.426225
0	066	0.820569	0.110649	0.903524
0	067	0.223751	0.028573	0.541438
0	068	0.318317	0.544992	0.035023
0	069	0.218587	0.414702	0.498363
0	070	0.319868	0.928219	0.008941
0	071	0.815587	0.946690	0.457975
0	072	0.720150	0.438149	0.955682
0	073	0.818060	0.549734	0.499987
0	074	0.719083	0.049086	0.992134
0	075	0.332320	0.985613	0.627986
0	076	0.205498	0.495044	0.095841
0	077	0.315630	0.485328	0.575457
0	078	0.239143	0.997895	0.118596
0	079	0.706604	0.988033	0.371266
0	080	0.835654	0.478290	0.888933
0	081	0.722303	0.486948	0.405994
0	082	0.803586	0.980082	0.886320
0	083	0.134969	0.115051	0.606829
0	084	0.417812	0.627770	0.069958
0	085	0.115040	0.346503	0.565455
0	086	0.410293	0.860656	0.105813
0	087	0.901236	0.857130	0.395398
0	088	0.626274	0.350271	0.913700
0	089	0.910987	0.626870	0.421867
0	090	0.623887	0.119680	0.910460
0	091	0.118826	0.060149	0.431735
0	092	0.413977	0.558666	0.901928
0	093	0.102302	0.423877	0.411509
0	094	0.443525	0.930739	0.947410
0	095	0.919539	0.914184	0.569261
0	096	0.621984	0.416728	0.083365
0	097	0.939308	0.546367	0.569823
0	098	0.595903	0.037337	0.055247
0	099	0.146443	0.040050	0.240700
0	0100	0.403228	0.527077	0.709179
0	0101	0.130788	0.427556	0.219205
0	0102	0.394753	0.916048	0.765472
0	0103	0.892824	0.935477	0.760010
0	0104	0.634798	0.440174	0.277336
0	0105	0.905474	0.548625	0.760898
0	0106	0.645405	0.059868	0.235589
0	0107	0.099647	0.942204	0.352909
0	0108	0.438793	0.435975	0.841476

0	0109	0.102782	0.539019	0.318103
0	0110	0.427549	0.035838	0.829168
0	0111	0.939431	0.032661	0.647342
0	0112	0.604042	0.538325	0.153499
0	0113	0.934586	0.434395	0.673484
0	0114	0.612694	0.938376	0.181890
0	0115	0.223311	0.126268	0.151469
0	0116	0.317501	0.609830	0.633289
0	0117	0.204851	0.362898	0.092505
0	0118	0.320092	0.853314	0.639168
0	0119	0.810596	0.852097	0.844420
0	0120	0.721872	0.360004	0.359031
0	0121	0.828475	0.611068	0.884285
0	0122	0.719531	0.120723	0.365769
0	0123	0.519904	0.848870	0.215218
0	0124	0.026231	0.343126	0.711960
0	0125	0.514335	0.628594	0.204349
0	0126	0.023364	0.124128	0.710942
0	0127	0.520809	0.124907	0.787952
0	0128	0.007295	0.627170	0.287935
0	0129	0.526947	0.346340	0.784760
0	0130	0.012816	0.851676	0.293803
0	0131	0.406498	0.818125	0.291133
0	0132	0.151681	0.323829	0.750847
0	0133	0.393951	0.656904	0.262614
0	0134	0.137122	0.155773	0.793721
0	0135	0.639301	0.147544	0.719869
0	0136	0.886070	0.652086	0.232043
0	0137	0.647680	0.317373	0.724044
0	0138	0.901280	0.823341	0.204660
0	0139	0.458002	0.741353	0.146889
0	0140	0.086118	0.232471	0.651091
0	0141	0.584685	0.235006	0.843404
0	0142	0.948914	0.740524	0.341967
0	0143	0.337814	0.818417	0.449858
0	0144	0.221279	0.315128	0.911805
0	0145	0.334214	0.641572	0.444050
0	0146	0.205648	0.133543	0.957720
0	0147	0.705379	0.150402	0.556080
0	0148	0.816860	0.651943	0.070470
0	0149	0.706771	0.341809	0.552849
0	0150	0.835103	0.838228	0.037353
0	0151	0.264639	0.831029	0.264222
0	0152	0.278921	0.355425	0.746753

0	0153	0.249769	0.656636	0.271726
0	0154	0.268790	0.162414	0.793950
0	0155	0.768793	0.126863	0.725053
0	0156	0.759413	0.619446	0.240071
0	0157	0.778641	0.329616	0.713432
0	0158	0.770473	0.813500	0.202672
0	0159	0.294564	0.731672	0.580280
0	0160	0.244675	0.239339	0.065385
0	0161	0.741810	0.242258	0.429531
0	0162	0.796258	0.735387	0.924053
0	0163	0.216659	0.830942	0.520923
0	0164	0.325753	0.339950	0.024176
0	0165	0.213740	0.634825	0.513563
0	0166	0.326789	0.138502	0.030927
0	0167	0.824237	0.144581	0.479672
0	0168	0.710962	0.637179	0.957860
0	0169	0.825957	0.339460	0.474413
0	0170	0.712915	0.833263	0.972265
0	0171	0.132657	0.732820	0.564587
0	0172	0.408268	0.240124	0.065705
0	0173	0.908496	0.240504	0.427021
0	0174	0.626219	0.737582	0.930451
0	0175	0.100803	0.823391	0.431839
0	0176	0.427351	0.312325	0.905155
0	0177	0.104714	0.655227	0.410607
0	0178	0.441274	0.144776	0.938642
0	0179	0.941525	0.150888	0.563108
0	0180	0.614762	0.661130	0.086826
0	0181	0.934775	0.319202	0.577753
0	0182	0.598439	0.832789	0.062926
0	0183	0.135609	0.839357	0.241148
0	0184	0.406418	0.338412	0.715581
0	0185	0.125221	0.649768	0.215146
0	0186	0.396304	0.152885	0.753480
0	0187	0.897275	0.138031	0.748819
0	0188	0.633556	0.638214	0.277893
0	0189	0.903257	0.323163	0.768788
0	0190	0.643693	0.818688	0.247532
0	0191	0.200825	0.746318	0.145114
0	0192	0.322695	0.242089	0.663418
0	0193	0.818680	0.229606	0.825650
0	0194	0.720602	0.731118	0.333678
Al	Al195	0.330574	0.858255	0.330649
Al	Al196	0.322389	0.620018	0.305452

Si	Si197	0.707594	0.652257	0.318167
Si	Si198	0.443264	0.049033	0.186121
Si	Si199	0.100008	0.538976	0.659750
Si	Si200	0.446808	0.434114	0.146882
Si	Si201	0.091917	0.927596	0.673534
Si	Si202	0.596792	0.929694	0.814206
Si	Si203	0.938009	0.433271	0.326407
Si	Si204	0.589908	0.543671	0.841743
Si	Si205	0.947718	0.044684	0.325624
Si	Si206	0.338599	0.022051	0.344517
Si	Si207	0.208826	0.512974	0.817213
Si	Si208	0.326784	0.455707	0.293053
Si	Si209	0.201986	0.966389	0.824763
Si	Si210	0.698954	0.955312	0.652899
Si	Si211	0.829404	0.457509	0.171304
Si	Si212	0.706267	0.515463	0.693990
Si	Si213	0.836702	0.010822	0.173211
Si	Si214	0.300928	0.045315	0.561429
Si	Si215	0.239071	0.555140	0.033946
Si	Si216	0.297769	0.419113	0.510093
Si	Si217	0.242951	0.936377	0.041357
Si	Si218	0.738819	0.928837	0.437269
Si	Si219	0.798328	0.421323	0.953196
Si	Si220	0.739668	0.549186	0.477592
Si	Si221	0.795877	0.043641	0.959200
Si	Si222	0.146235	0.047509	0.543119
Si	Si223	0.396273	0.557312	0.019768
Si	Si224	0.140006	0.415798	0.515933
Si	Si225	0.395928	0.928770	0.044243
Si	Si226	0.892770	0.925988	0.457243
Si	Si227	0.642496	0.421023	0.967234
Si	Si228	0.895124	0.554609	0.470883
Si	Si229	0.642433	0.048443	0.959288
Si	Si230	0.097369	0.021603	0.330461
Si	Si231	0.443904	0.514328	0.811379
Si	Si232	0.086700	0.459953	0.306528
Si	Si233	0.446636	0.957182	0.833209
Si	Si234	0.942020	0.953161	0.669671
Si	Si235	0.594420	0.459294	0.177667
Si	Si236	0.951610	0.513489	0.678253
Si	Si237	0.592956	0.016774	0.171778
Si	Si238	0.220409	0.052919	0.201830
Si	Si239	0.328391	0.532914	0.670109
Si	Si240	0.201236	0.428182	0.163039

Si	Si241	0.327408	0.922098	0.701969
Si	Si242	0.818418	0.926597	0.799352
Si	Si243	0.709666	0.434489	0.316886
Si	Si244	0.835780	0.544029	0.818552
Si	Si245	0.712264	0.053495	0.300529
Si	Si246	0.449188	0.816688	0.187153
Si	Si247	0.094551	0.311625	0.669844
Si	Si248	0.444839	0.662678	0.171652
Si	Si249	0.095158	0.156841	0.690755
Si	Si250	0.591903	0.156962	0.815122
Si	Si251	0.938640	0.661719	0.320955
Si	Si252	0.596501	0.312658	0.816427
Si	Si253	0.941430	0.817829	0.308855
Si	Si254	0.211393	0.357445	0.811120
Si	Si255	0.204677	0.124328	0.838277
Si	Si256	0.701393	0.114855	0.663297
Si	Si257	0.826725	0.614603	0.175479
Si	Si258	0.708407	0.355997	0.671361
Si	Si259	0.833878	0.851715	0.156118
Si	Si260	0.291672	0.810211	0.548066
Si	Si261	0.249377	0.314707	0.024300
Si	Si262	0.286496	0.655225	0.547710
Si	Si263	0.250253	0.159642	0.050354
Si	Si264	0.747977	0.164153	0.457000
Si	Si265	0.788144	0.658713	0.959075
Si	Si266	0.749090	0.320551	0.455193
Si	Si267	0.788869	0.814405	0.945310
Si	Si268	0.139015	0.811405	0.535378
Si	Si269	0.401986	0.314574	0.019823
Si	Si270	0.135810	0.657637	0.520425
Si	Si271	0.403553	0.160975	0.041718
Si	Si272	0.901243	0.162992	0.460580
Si	Si273	0.635165	0.661807	0.970345
Si	Si274	0.902644	0.316493	0.467878
Si	Si275	0.635301	0.815551	0.959516
Si	Si276	0.088012	0.863968	0.328911
Si	Si277	0.450136	0.358209	0.811729
Si	Si278	0.085359	0.617733	0.307108
Si	Si279	0.446206	0.114636	0.827516
Si	Si280	0.949949	0.111540	0.667805
Si	Si281	0.591315	0.616151	0.180851
Si	Si282	0.949696	0.355172	0.683145
Si	Si283	0.594491	0.859838	0.175964
Si	Si284	0.205315	0.821790	0.187534

Si	Si285	0.333441	0.321429	0.673959
Si	Si286	0.199977	0.669275	0.180624
Si	Si287	0.324166	0.167204	0.707338
Si	Si288	0.826415	0.151262	0.799927
Si	Si289	0.828087	0.308102	0.802863
Si	Si290	0.716915	0.806414	0.291414
Zn	Zn291	0.427957	0.771060	0.415349

TS-H₂-Dis-Zn²⁺ (Fig. 3/TS4) Total energy = -1864.73065817 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.393182	0.671245	0.467672
H	H2	0.432743	0.697515	0.472164
O	O3	0.517224	0.026644	0.208447
O	O4	0.026642	0.527685	0.713553
O	O5	0.517574	0.439193	0.205593
O	O6	0.014970	0.931273	0.698932
O	O7	0.520696	0.945645	0.784547
O	O8	0.010050	0.449005	0.282004
O	O9	0.519100	0.536113	0.790634
O	O10	0.024644	0.043909	0.292545
O	O11	0.400455	0.053184	0.283833
O	O12	0.151549	0.549713	0.752668
O	O13	0.389918	0.421019	0.236171
O	O14	0.135919	0.943259	0.762553
O	O15	0.638241	0.921513	0.710416
O	O16	0.886582	0.423497	0.238308
O	O17	0.646357	0.546205	0.757167
O	O18	0.903570	0.033245	0.225960
O	O19	0.439933	0.117175	0.124328

0	020	0.095763	0.610211	0.600245
0	021	0.449520	0.362677	0.084711
0	022	0.107597	0.857613	0.617221
0	023	0.599779	0.858555	0.871207
0	024	0.941188	0.366792	0.395039
0	025	0.590415	0.613169	0.904570
0	026	0.931557	0.117640	0.371731
0	027	0.408107	0.989163	0.112375
0	028	0.118425	0.479754	0.593991
0	029	0.433791	0.493927	0.082573
0	030	0.103196	0.987896	0.582634
0	031	0.628602	0.988105	0.878779
0	032	0.913938	0.496810	0.395486
0	033	0.601722	0.481672	0.917499
0	034	0.935084	0.986733	0.405611
0	035	0.335887	0.058443	0.451255
0	036	0.207139	0.553724	0.926828
0	037	0.334987	0.429476	0.412606
0	038	0.201641	0.944965	0.929578
0	039	0.701108	0.925652	0.541623
0	040	0.828256	0.419279	0.066002
0	041	0.700940	0.542519	0.580747
0	042	0.839090	0.033325	0.056992
0	043	0.348888	0.942100	0.358267
0	044	0.188678	0.435697	0.839284
0	045	0.341060	0.536464	0.296722
0	046	0.214804	0.045468	0.804210
0	047	0.690267	0.035396	0.652901
0	048	0.843389	0.536440	0.156252
0	049	0.702260	0.434678	0.694602
0	050	0.827185	0.930565	0.180731
0	051	0.270166	0.035565	0.286155
0	052	0.277789	0.517870	0.770715
0	053	0.260785	0.435153	0.254391
0	054	0.264709	0.927635	0.758154
0	055	0.769105	0.936532	0.706919
0	056	0.758389	0.448326	0.224997
0	057	0.775748	0.539555	0.739822
0	058	0.773495	0.046319	0.225225
0	059	0.306830	0.119181	0.617445
0	060	0.223750	0.623211	0.090422
0	061	0.318916	0.356955	0.570761
0	062	0.212166	0.862930	0.077948
0	063	0.731455	0.857731	0.381023

0	064	0.810916	0.348153	0.904287
0	065	0.715282	0.617671	0.424670
0	066	0.820493	0.109571	0.901699
0	067	0.223273	0.029894	0.542295
0	068	0.316065	0.537781	0.031771
0	069	0.217466	0.424455	0.498597
0	070	0.319623	0.923789	0.003290
0	071	0.816016	0.946515	0.453367
0	072	0.719374	0.435387	0.959596
0	073	0.818807	0.553511	0.499141
0	074	0.718285	0.049084	0.988874
0	075	0.335518	0.989909	0.619700
0	076	0.202979	0.492116	0.099083
0	077	0.315373	0.488959	0.585193
0	078	0.234365	0.992412	0.107190
0	079	0.705909	0.987954	0.370062
0	080	0.833313	0.478215	0.891128
0	081	0.725270	0.486209	0.407306
0	082	0.803534	0.978784	0.886035
0	083	0.133274	0.116940	0.599139
0	084	0.408455	0.623471	0.086976
0	085	0.121168	0.348550	0.573352
0	086	0.415229	0.858479	0.091825
0	087	0.903464	0.857289	0.393801
0	088	0.622845	0.350882	0.916053
0	089	0.915855	0.627575	0.425430
0	090	0.621701	0.118986	0.908362
0	091	0.122253	0.060638	0.422914
0	092	0.418858	0.559391	0.914158
0	093	0.098994	0.424265	0.418412
0	094	0.442177	0.935601	0.939144
0	095	0.918304	0.914932	0.568011
0	096	0.620266	0.417251	0.086145
0	097	0.938473	0.546657	0.574258
0	098	0.595685	0.037103	0.054451
0	099	0.145542	0.040026	0.231204
0	0100	0.401106	0.532099	0.720411
0	0101	0.132149	0.424430	0.227696
0	0102	0.395089	0.916715	0.756246
0	0103	0.893969	0.935233	0.760021
0	0104	0.635201	0.442043	0.280088
0	0105	0.904116	0.549073	0.765312
0	0106	0.643052	0.059637	0.235940
0	0107	0.101191	0.941904	0.345534

0	0108	0.439180	0.437320	0.846159
0	0109	0.104014	0.538239	0.319311
0	0110	0.428127	0.037369	0.815161
0	0111	0.937754	0.033397	0.646524
0	0112	0.599586	0.538297	0.156348
0	0113	0.934659	0.434994	0.677569
0	0114	0.613200	0.937868	0.180979
0	0115	0.231136	0.120702	0.148493
0	0116	0.312763	0.613023	0.644843
0	0117	0.212179	0.359755	0.110584
0	0118	0.325410	0.857317	0.619527
0	0119	0.811885	0.851069	0.843109
0	0120	0.720675	0.359469	0.360367
0	0121	0.825447	0.610892	0.887446
0	0122	0.719182	0.120740	0.363009
0	0123	0.519848	0.847883	0.212201
0	0124	0.026600	0.343787	0.711802
0	0125	0.511098	0.628377	0.211856
0	0126	0.024115	0.123622	0.708488
0	0127	0.522112	0.126502	0.779170
0	0128	0.009285	0.627206	0.286339
0	0129	0.525910	0.347209	0.782949
0	0130	0.013509	0.851670	0.287858
0	0131	0.404533	0.818078	0.280008
0	0132	0.150139	0.321480	0.760874
0	0133	0.393868	0.667832	0.275654
0	0134	0.138557	0.152046	0.789643
0	0135	0.642563	0.150382	0.720253
0	0136	0.886081	0.649428	0.237019
0	0137	0.647691	0.318675	0.726761
0	0138	0.900593	0.822107	0.203650
0	0139	0.457984	0.739647	0.143452
0	0140	0.087034	0.233275	0.652554
0	0141	0.583807	0.235591	0.843135
0	0142	0.950680	0.740506	0.340072
0	0143	0.332727	0.807786	0.435474
0	0144	0.218026	0.319764	0.923823
0	0145	0.335428	0.641045	0.453676
0	0146	0.205935	0.132556	0.956170
0	0147	0.705839	0.147551	0.553760
0	0148	0.819780	0.654068	0.072977
0	0149	0.706159	0.339827	0.554149
0	0150	0.834163	0.838525	0.036805
0	0151	0.265682	0.846594	0.254582

0	0152	0.277042	0.355186	0.757059
0	0153	0.252996	0.650189	0.280455
0	0154	0.269639	0.163995	0.794391
0	0155	0.771395	0.127019	0.721467
0	0156	0.758427	0.619591	0.238687
0	0157	0.778835	0.329074	0.714161
0	0158	0.769702	0.814154	0.202296
0	0159	0.292884	0.732483	0.582480
0	0160	0.246466	0.236543	0.066936
0	0161	0.741648	0.241499	0.429590
0	0162	0.793590	0.735401	0.925548
0	0163	0.216419	0.831657	0.516773
0	0164	0.327974	0.337045	0.026723
0	0165	0.212510	0.634158	0.519790
0	0166	0.329131	0.138064	0.020417
0	0167	0.824558	0.143500	0.475991
0	0168	0.710228	0.637254	0.969959
0	0169	0.825223	0.339245	0.475023
0	0170	0.712438	0.835979	0.968386
0	0171	0.131797	0.734476	0.563010
0	0172	0.411959	0.237286	0.062178
0	0173	0.908252	0.241009	0.427665
0	0174	0.627642	0.737655	0.931479
0	0175	0.101813	0.822802	0.424997
0	0176	0.428306	0.312568	0.904857
0	0177	0.104079	0.653499	0.414207
0	0178	0.445107	0.142229	0.933244
0	0179	0.940853	0.151626	0.563098
0	0180	0.607361	0.661074	0.086964
0	0181	0.934281	0.320515	0.578618
0	0182	0.599139	0.832598	0.062100
0	0183	0.136259	0.837973	0.234258
0	0184	0.403861	0.342809	0.717341
0	0185	0.128971	0.650322	0.220185
0	0186	0.396975	0.156867	0.750533
0	0187	0.899071	0.139062	0.750136
0	0188	0.632467	0.639364	0.276908
0	0189	0.903646	0.322700	0.769620
0	0190	0.643136	0.818030	0.247441
0	0191	0.210964	0.744206	0.156147
0	0192	0.321276	0.245315	0.664646
0	0193	0.818833	0.229184	0.826395
0	0194	0.720520	0.730990	0.333315
Al	Al195	0.332317	0.861277	0.327980

Al	Al196	0.326201	0.618447	0.322434
Si	Si197	0.706827	0.652296	0.317109
Si	Si198	0.441735	0.046336	0.182129
Si	Si199	0.098063	0.541726	0.664630
Si	Si200	0.446520	0.429392	0.153095
Si	Si201	0.091213	0.929985	0.665187
Si	Si202	0.596359	0.928902	0.812130
Si	Si203	0.938181	0.434117	0.328439
Si	Si204	0.590449	0.543882	0.842317
Si	Si205	0.948113	0.045284	0.324131
Si	Si206	0.338892	0.020830	0.344282
Si	Si207	0.205894	0.514106	0.822566
Si	Si208	0.331698	0.457160	0.299380
Si	Si209	0.204470	0.965287	0.813915
Si	Si210	0.700075	0.955184	0.653417
Si	Si211	0.829299	0.457211	0.171920
Si	Si212	0.706436	0.515370	0.693398
Si	Si213	0.835900	0.010955	0.172346
Si	Si214	0.300334	0.049641	0.557603
Si	Si215	0.237440	0.552322	0.038158
Si	Si216	0.296341	0.425007	0.516569
Si	Si217	0.241739	0.930608	0.031041
Si	Si218	0.738855	0.929163	0.435963
Si	Si219	0.797737	0.420114	0.955219
Si	Si220	0.740528	0.549835	0.477337
Si	Si221	0.795350	0.042928	0.957695
Si	Si222	0.145834	0.049079	0.536576
Si	Si223	0.393889	0.553495	0.028661
Si	Si224	0.139539	0.419156	0.521086
Si	Si225	0.395852	0.927775	0.036363
Si	Si226	0.893318	0.926211	0.454962
Si	Si227	0.641230	0.420910	0.970077
Si	Si228	0.896542	0.555861	0.473456
Si	Si229	0.641338	0.048120	0.957466
Si	Si230	0.098289	0.021428	0.323327
Si	Si231	0.444215	0.516232	0.818847
Si	Si232	0.086688	0.459225	0.311378
Si	Si233	0.446501	0.958773	0.823511
Si	Si234	0.941538	0.953871	0.668049
Si	Si235	0.592975	0.458970	0.181372
Si	Si236	0.950754	0.514303	0.682984
Si	Si237	0.591959	0.015883	0.170578
Si	Si238	0.220807	0.046531	0.193861
Si	Si239	0.326380	0.536827	0.680259

Si	Si240	0.202983	0.428163	0.172848
Si	Si241	0.329544	0.923731	0.688345
Si	Si242	0.819477	0.925862	0.798705
Si	Si243	0.710186	0.434276	0.318342
Si	Si244	0.834028	0.544182	0.821465
Si	Si245	0.710845	0.053206	0.298821
Si	Si246	0.449958	0.816550	0.178912
Si	Si247	0.095981	0.312090	0.674342
Si	Si248	0.442585	0.663371	0.177866
Si	Si249	0.095739	0.156553	0.687711
Si	Si250	0.592366	0.158021	0.812569
Si	Si251	0.940922	0.661273	0.322128
Si	Si252	0.595087	0.313548	0.817131
Si	Si253	0.942512	0.817602	0.306384
Si	Si254	0.208825	0.358295	0.819768
Si	Si255	0.206484	0.123199	0.836459
Si	Si256	0.702793	0.114797	0.662950
Si	Si257	0.826975	0.614467	0.176838
Si	Si258	0.708619	0.355582	0.672197
Si	Si259	0.833563	0.851658	0.155655
Si	Si260	0.291271	0.808261	0.539999
Si	Si261	0.251275	0.313550	0.032518
Si	Si262	0.286570	0.654774	0.550830
Si	Si263	0.253050	0.157311	0.047059
Si	Si264	0.748122	0.163123	0.454983
Si	Si265	0.787282	0.659228	0.963666
Si	Si266	0.748477	0.319714	0.455988
Si	Si267	0.788275	0.814873	0.944315
Si	Si268	0.138755	0.812135	0.530088
Si	Si269	0.404241	0.312557	0.020024
Si	Si270	0.135343	0.657977	0.523970
Si	Si271	0.406052	0.158730	0.035089
Si	Si272	0.901551	0.163170	0.459670
Si	Si273	0.634073	0.662136	0.973259
Si	Si274	0.902136	0.316910	0.468838
Si	Si275	0.635208	0.816132	0.957977
Si	Si276	0.089024	0.863548	0.322254
Si	Si277	0.449531	0.360098	0.812508
Si	Si278	0.086994	0.617188	0.309331
Si	Si279	0.447733	0.115818	0.819687
Si	Si280	0.950143	0.111947	0.667258
Si	Si281	0.587894	0.616201	0.183049
Si	Si282	0.949878	0.355673	0.684408
Si	Si283	0.594824	0.859464	0.174966

Si	Si284	0.207354	0.822832	0.183035
Si	Si285	0.330271	0.324579	0.679043
Si	Si286	0.205032	0.666753	0.188763
Si	Si287	0.324005	0.170075	0.706483
Si	Si288	0.827452	0.151159	0.799234
Si	Si289	0.828423	0.307673	0.803517
Si	Si290	0.716490	0.806383	0.291354
Zn	Zn291	0.405611	0.745669	0.378917

C₄H₁₀-Phys.Ads-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/M1) Total energy = -1931.89802043 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.618761	0.717376	0.547733
H	H2	0.594255	0.781601	0.463204
H	H3	0.551753	0.704804	0.466525
H	H4	0.488874	0.795558	0.555796
H	H5	0.556453	0.809299	0.634465
H	H6	0.546878	0.691913	0.698220
H	H7	0.478119	0.678990	0.621578
H	H8	0.486420	0.782004	0.790755
H	H9	0.442417	0.705825	0.794382
H	H10	0.417188	0.770239	0.713324
C	C11	0.576546	0.742080	0.512845
C	C12	0.530484	0.770557	0.592101
C	C13	0.504814	0.717273	0.663874
C	C14	0.460168	0.745379	0.745174
O	O15	0.526791	0.042652	0.215283
O	O16	0.017970	0.550706	0.713749
O	O17	0.521773	0.451853	0.216935
O	O18	0.018419	0.937933	0.699460

0	019	0.517102	0.948500	0.794236
0	020	0.018493	0.456991	0.294934
0	021	0.514025	0.538626	0.792886
0	022	0.025954	0.047005	0.292405
0	023	0.410546	0.053669	0.296197
0	024	0.132850	0.551377	0.797823
0	025	0.402679	0.432936	0.288843
0	026	0.131855	0.938189	0.795224
0	027	0.626889	0.949442	0.693977
0	028	0.899010	0.437258	0.226381
0	029	0.635041	0.529870	0.734006
0	030	0.913336	0.050933	0.202754
0	031	0.438130	0.124233	0.135204
0	032	0.112373	0.629550	0.643312
0	033	0.443036	0.364204	0.131126
0	034	0.116394	0.865926	0.633194
0	035	0.615815	0.868876	0.847634
0	036	0.937372	0.378426	0.392635
0	037	0.600928	0.621369	0.868914
0	038	0.934022	0.128597	0.361566
0	039	0.423640	0.993244	0.121305
0	040	0.120279	0.499046	0.617278
0	041	0.418213	0.492648	0.114160
0	042	0.123244	0.997632	0.620774
0	043	0.626208	0.999770	0.875841
0	044	0.914744	0.509520	0.388466
0	045	0.603396	0.492875	0.918148
0	046	0.920437	0.998480	0.383473
0	047	0.342049	0.038822	0.460312
0	048	0.199521	0.542690	0.962197
0	049	0.340915	0.454856	0.458948
0	050	0.196710	0.953858	0.961844
0	051	0.694011	0.953224	0.527679
0	052	0.831852	0.424941	0.060725
0	053	0.705906	0.554256	0.576185
0	054	0.842222	0.052923	0.039214
0	055	0.333253	0.948357	0.314860
0	056	0.214204	0.449565	0.820750
0	057	0.336723	0.545032	0.312245
0	058	0.206519	0.045334	0.817637
0	059	0.712922	0.047984	0.666962
0	060	0.845136	0.544401	0.141887
0	061	0.725051	0.441809	0.674909
0	062	0.837490	0.946726	0.157318

0	063	0.280682	0.066491	0.291169
0	064	0.262777	0.568813	0.793912
0	065	0.271543	0.431341	0.297598
0	066	0.263001	0.928458	0.795815
0	067	0.756085	0.925395	0.694521
0	068	0.769061	0.454133	0.226858
0	069	0.761385	0.556042	0.754540
0	070	0.785056	0.061983	0.213041
0	071	0.321143	0.120336	0.610137
0	072	0.215914	0.620344	0.117678
0	073	0.317456	0.373918	0.609189
0	074	0.226821	0.873301	0.110661
0	075	0.727234	0.861779	0.393495
0	076	0.805460	0.353141	0.900964
0	077	0.706127	0.619858	0.410765
0	078	0.809842	0.125900	0.887876
0	079	0.221115	0.055755	0.525834
0	080	0.317968	0.557311	0.037244
0	081	0.219194	0.440546	0.523657
0	082	0.317953	0.950669	0.027503
0	083	0.817686	0.942738	0.468173
0	084	0.718893	0.442712	0.965755
0	085	0.819527	0.573621	0.484424
0	086	0.715862	0.062471	0.987569
0	087	0.308138	0.990564	0.635760
0	088	0.226268	0.489545	0.135770
0	089	0.305903	0.504316	0.633730
0	090	0.223698	0.003225	0.139659
0	091	0.723697	0.989597	0.345752
0	092	0.829878	0.482454	0.883400
0	093	0.732935	0.489984	0.408765
0	094	0.796934	0.993263	0.877211
0	095	0.128039	0.130169	0.607902
0	096	0.419958	0.625371	0.106191
0	097	0.124578	0.366858	0.602156
0	098	0.404169	0.863149	0.097509
0	099	0.905446	0.866257	0.377036
0	0100	0.622132	0.360911	0.912927
0	0101	0.917500	0.641674	0.404158
0	0102	0.622530	0.131547	0.897555
0	0103	0.100915	0.058463	0.450365
0	0104	0.432780	0.556152	0.943854
0	0105	0.100233	0.440721	0.444400
0	0106	0.435286	0.938670	0.944066

0	0107	0.936370	0.925453	0.546387
0	0108	0.616007	0.425553	0.084844
0	0109	0.938115	0.568595	0.562567
0	0110	0.592210	0.052991	0.047523
0	0111	0.151493	0.069977	0.269760
0	0112	0.390490	0.560078	0.757828
0	0113	0.143460	0.427222	0.258573
0	0114	0.391308	0.929950	0.758563
0	0115	0.892271	0.951010	0.728964
0	0116	0.643746	0.456652	0.273650
0	0117	0.891368	0.551364	0.745385
0	0118	0.654187	0.061904	0.220096
0	0119	0.113593	0.952070	0.334913
0	0120	0.426064	0.445056	0.838293
0	0121	0.112975	0.546126	0.325014
0	0122	0.431049	0.045980	0.828472
0	0123	0.957789	0.043220	0.625126
0	0124	0.599913	0.548761	0.149764
0	0125	0.945444	0.450365	0.644162
0	0126	0.609432	0.945457	0.159294
0	0127	0.226351	0.135932	0.148055
0	0128	0.316667	0.635998	0.647592
0	0129	0.225611	0.357567	0.150709
0	0130	0.312413	0.858672	0.647407
0	0131	0.810606	0.852888	0.826716
0	0132	0.720277	0.365532	0.354769
0	0133	0.832215	0.614743	0.891779
0	0134	0.721914	0.124059	0.354343
0	0135	0.517984	0.855098	0.194520
0	0136	0.019305	0.352305	0.717889
0	0137	0.527027	0.649775	0.215955
0	0138	0.016660	0.146886	0.711503
0	0139	0.517074	0.140948	0.780565
0	0140	0.024136	0.640640	0.287811
0	0141	0.520943	0.358876	0.787651
0	0142	0.021560	0.864484	0.284476
0	0143	0.407165	0.839925	0.291700
0	0144	0.137288	0.343761	0.796171
0	0145	0.410535	0.654420	0.297903
0	0146	0.131164	0.153772	0.801386
0	0147	0.634442	0.152634	0.703878
0	0148	0.908030	0.651999	0.208046
0	0149	0.640010	0.345690	0.717600
0	0150	0.913710	0.840985	0.182845

0	0151	0.444699	0.746806	0.163977
0	0152	0.096107	0.248830	0.673348
0	0153	0.589111	0.247889	0.825346
0	0154	0.955417	0.752194	0.316625
0	0155	0.339423	0.855731	0.455125
0	0156	0.210403	0.354731	0.956651
0	0157	0.336081	0.636470	0.454280
0	0158	0.209243	0.139659	0.954653
0	0159	0.704545	0.149433	0.541703
0	0160	0.816743	0.664693	0.072822
0	0161	0.703699	0.341235	0.548277
0	0162	0.840732	0.849966	0.020756
0	0163	0.276261	0.832842	0.285310
0	0164	0.267626	0.333182	0.782870
0	0165	0.281110	0.661428	0.278679
0	0166	0.260098	0.161154	0.775462
0	0167	0.764233	0.164920	0.713595
0	0168	0.783469	0.631682	0.256155
0	0169	0.769214	0.322362	0.715873
0	0170	0.783855	0.829722	0.196798
0	0171	0.301771	0.746625	0.549550
0	0172	0.248202	0.246720	0.053024
0	0173	0.740775	0.246302	0.420458
0	0174	0.800990	0.741074	0.917493
0	0175	0.216602	0.843810	0.512870
0	0176	0.330602	0.347975	0.033227
0	0177	0.215408	0.647488	0.523043
0	0178	0.329725	0.144132	0.027383
0	0179	0.825917	0.151100	0.467285
0	0180	0.712989	0.646932	0.958345
0	0181	0.823006	0.344796	0.473012
0	0182	0.716619	0.838062	0.964696
0	0183	0.133524	0.746651	0.565034
0	0184	0.409409	0.244430	0.074371
0	0185	0.908021	0.251007	0.418727
0	0186	0.630190	0.746188	0.910027
0	0187	0.096273	0.841749	0.440297
0	0188	0.443585	0.332984	0.938764
0	0189	0.094687	0.646097	0.450673
0	0190	0.446559	0.152558	0.943171
0	0191	0.941050	0.163294	0.554422
0	0192	0.601355	0.664301	0.056687
0	0193	0.933387	0.327946	0.574218
0	0194	0.595480	0.842166	0.038616

O	O195	0.147287	0.836176	0.257978
O	O196	0.396328	0.330904	0.753685
O	O197	0.151368	0.666874	0.275598
O	O198	0.389647	0.163242	0.766189
O	O199	0.889023	0.129778	0.730939
O	O200	0.655875	0.654383	0.234379
O	O201	0.892778	0.357625	0.757090
O	O202	0.643176	0.825266	0.222269
O	O203	0.220036	0.747838	0.162837
O	O204	0.319997	0.246988	0.657815
O	O205	0.846079	0.241182	0.815244
O	O206	0.727185	0.739200	0.340735
O	O207	0.757891	0.758072	0.606504
Al	Al208	0.818848	0.939197	0.786499
Al	Al209	0.719022	0.818580	0.276268
Si	Si210	0.741232	0.937849	0.433161
Si	Si211	0.717679	0.660680	0.308439
Si	Si212	0.449667	0.053581	0.191201
Si	Si213	0.095779	0.557499	0.691995
Si	Si214	0.446300	0.435484	0.187845
Si	Si215	0.097034	0.935395	0.686759
Si	Si216	0.595811	0.942117	0.804936
Si	Si217	0.942501	0.445655	0.326592
Si	Si218	0.589252	0.545865	0.829190
Si	Si219	0.948148	0.056542	0.310610
Si	Si220	0.341589	0.026919	0.341514
Si	Si221	0.202469	0.528084	0.844457
Si	Si222	0.338003	0.465982	0.339816
Si	Si223	0.199595	0.966387	0.843136
Si	Si224	0.697114	0.969931	0.645529
Si	Si225	0.836417	0.465155	0.164779
Si	Si226	0.706813	0.520346	0.684984
Si	Si227	0.844728	0.027200	0.152452
Si	Si228	0.297832	0.051373	0.558582
Si	Si229	0.240434	0.552493	0.064102
Si	Si230	0.295858	0.443250	0.556946
Si	Si231	0.241372	0.945193	0.060667
Si	Si232	0.796513	0.425641	0.952832
Si	Si233	0.741806	0.558885	0.469775
Si	Si234	0.791529	0.057575	0.946343
Si	Si235	0.143393	0.060365	0.551883
Si	Si236	0.396920	0.557710	0.050973
Si	Si237	0.141230	0.436841	0.547330
Si	Si238	0.395172	0.936435	0.047718

Si	Si239	0.895794	0.933382	0.443593
Si	Si240	0.640227	0.429927	0.970070
Si	Si241	0.897466	0.572683	0.459577
Si	Si242	0.639845	0.061489	0.951746
Si	Si243	0.097900	0.031565	0.336891
Si	Si244	0.440667	0.524623	0.833682
Si	Si245	0.093779	0.467502	0.330968
Si	Si246	0.443564	0.966040	0.831450
Si	Si247	0.949822	0.964262	0.652005
Si	Si248	0.595305	0.470483	0.180721
Si	Si249	0.947660	0.529862	0.667416
Si	Si250	0.595634	0.024953	0.160869
Si	Si251	0.220783	0.067897	0.211793
Si	Si252	0.318776	0.566375	0.708120
Si	Si253	0.216550	0.427080	0.210473
Si	Si254	0.318759	0.927679	0.709455
Si	Si255	0.716704	0.441730	0.315359
Si	Si256	0.828729	0.550567	0.818572
Si	Si257	0.721184	0.059240	0.283436
Si	Si258	0.444242	0.826066	0.186640
Si	Si259	0.094137	0.327718	0.697426
Si	Si260	0.450618	0.669359	0.195862
Si	Si261	0.092533	0.169997	0.698368
Si	Si262	0.590751	0.168709	0.801943
Si	Si263	0.951553	0.672124	0.304521
Si	Si264	0.593112	0.327824	0.811195
Si	Si265	0.949166	0.830744	0.289737
Si	Si266	0.339028	0.869120	0.336438
Si	Si267	0.207173	0.370043	0.838922
Si	Si268	0.340841	0.624285	0.335864
Si	Si269	0.201853	0.124902	0.837353
Si	Si270	0.703876	0.128534	0.657333
Si	Si271	0.838547	0.622765	0.169551
Si	Si272	0.709160	0.362686	0.664174
Si	Si273	0.842712	0.866538	0.140255
Si	Si274	0.292390	0.826206	0.541813
Si	Si275	0.253842	0.326569	0.048380
Si	Si276	0.292055	0.667122	0.543511
Si	Si277	0.253661	0.166900	0.045576
Si	Si278	0.748815	0.167914	0.445825
Si	Si279	0.790592	0.666155	0.959484
Si	Si280	0.746989	0.324131	0.449922
Si	Si281	0.792569	0.820552	0.935933
Si	Si282	0.140462	0.824702	0.537362

Si	Si283	0.406476	0.322449	0.044205
Si	Si284	0.139128	0.667540	0.545430
Si	Si285	0.406085	0.166192	0.044930
Si	Si286	0.902475	0.172818	0.450097
Si	Si287	0.636354	0.669699	0.948664
Si	Si288	0.900593	0.325621	0.464287
Si	Si289	0.638890	0.824123	0.941892
Si	Si290	0.094950	0.873549	0.329136
Si	Si291	0.446591	0.367054	0.829447
Si	Si292	0.095883	0.624869	0.334324
Si	Si293	0.445860	0.125450	0.829488
Si	Si294	0.950601	0.120796	0.656142
Si	Si295	0.595983	0.628919	0.164598
Si	Si296	0.947860	0.371814	0.673356
Si	Si297	0.592608	0.866062	0.154978
Si	Si298	0.217617	0.823809	0.204372
Si	Si299	0.325239	0.322380	0.700775
Si	Si300	0.217276	0.673077	0.208420
Si	Si301	0.322662	0.171813	0.702432
Si	Si302	0.827632	0.164846	0.787005
Si	Si303	0.828259	0.318721	0.797179
Zn	Zn304	0.772022	0.821289	0.698425
Zn	Zn305	0.739632	0.775757	0.478302

TS-C₄H₁₀-dehydro-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/TS1) Total energy = -1930.31485715 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.622872	0.673725	0.559130
H	H2	0.593045	0.735930	0.480443
H	H3	0.569546	0.811764	0.623583

H	H4	0.598483	0.751091	0.706570
H	H5	0.510352	0.672199	0.649483
H	H6	0.479481	0.734607	0.570276
H	H7	0.489226	0.746218	0.798001
H	H8	0.416156	0.731930	0.729965
H	H9	0.458053	0.808785	0.718215
H	H10	0.679429	0.747291	0.595801
C	C11	0.617889	0.727919	0.552392
C	C12	0.574235	0.757667	0.634669
C	C13	0.505491	0.726449	0.640773
C	C14	0.464832	0.754924	0.726592
O	O15	0.524083	0.044104	0.213636
O	O16	0.017073	0.555069	0.708716
O	O17	0.524672	0.445985	0.214177
O	O18	0.017882	0.938102	0.694860
O	O19	0.517073	0.947260	0.793217
O	O20	0.022628	0.456139	0.291924
O	O21	0.514656	0.542508	0.787027
O	O22	0.022812	0.040020	0.293624
O	O23	0.406712	0.058605	0.292308
O	O24	0.131000	0.552145	0.797717
O	O25	0.406529	0.433576	0.292615
O	O26	0.131097	0.939062	0.791436
O	O27	0.626117	0.956294	0.692570
O	O28	0.905319	0.440511	0.214502
O	O29	0.633316	0.531817	0.718086
O	O30	0.911184	0.055911	0.202660
O	O31	0.438075	0.127735	0.132278
O	O32	0.115976	0.628014	0.638714
O	O33	0.438808	0.363918	0.131813
O	O34	0.116443	0.865442	0.630749
O	O35	0.620228	0.871986	0.842132
O	O36	0.937676	0.376471	0.379431
O	O37	0.605805	0.624853	0.853406
O	O38	0.936955	0.126661	0.366489
O	O39	0.420389	0.996909	0.118810
O	O40	0.118194	0.496726	0.619205
O	O41	0.420375	0.493775	0.118996
O	O42	0.122564	0.997003	0.615651
O	O43	0.623641	0.002371	0.877467
O	O44	0.917261	0.507961	0.382155
O	O45	0.608479	0.496857	0.905740
O	O46	0.911877	0.997669	0.378907
O	O47	0.341150	0.040139	0.458076

0	048	0.201164	0.543431	0.960470
0	049	0.342394	0.456072	0.459440
0	050	0.195356	0.953867	0.958713
0	051	0.692169	0.953168	0.525398
0	052	0.836886	0.426801	0.050011
0	053	0.707254	0.554515	0.562785
0	054	0.842099	0.057442	0.036955
0	055	0.334100	0.950322	0.311750
0	056	0.212966	0.450482	0.818649
0	057	0.338509	0.545305	0.311705
0	058	0.206081	0.045827	0.815135
0	059	0.713919	0.051946	0.656962
0	060	0.845113	0.545552	0.134506
0	061	0.722553	0.441739	0.662528
0	062	0.839897	0.949661	0.151683
0	063	0.275746	0.066021	0.292007
0	064	0.260324	0.570214	0.789057
0	065	0.275309	0.430942	0.295565
0	066	0.262292	0.928987	0.793056
0	067	0.754849	0.929920	0.693259
0	068	0.774847	0.449955	0.218415
0	069	0.759548	0.555694	0.743377
0	070	0.782001	0.062128	0.208349
0	071	0.320527	0.121279	0.608273
0	072	0.222743	0.621210	0.114211
0	073	0.319113	0.374754	0.609094
0	074	0.226358	0.874173	0.108309
0	075	0.717706	0.860152	0.390745
0	076	0.805533	0.356497	0.890756
0	077	0.707306	0.617094	0.394841
0	078	0.807806	0.132720	0.888604
0	079	0.220640	0.056657	0.524698
0	080	0.321619	0.554508	0.030352
0	081	0.221498	0.445003	0.528177
0	082	0.316829	0.951201	0.023060
0	083	0.815144	0.933406	0.466829
0	084	0.720997	0.444863	0.963843
0	085	0.821215	0.573928	0.472768
0	086	0.715502	0.064731	0.985725
0	087	0.308399	0.991328	0.633745
0	088	0.229928	0.490412	0.134132
0	089	0.312920	0.504952	0.636212
0	090	0.223243	0.004320	0.135616
0	091	0.726360	0.987091	0.343192

0	092	0.829417	0.486189	0.874977
0	093	0.736294	0.488211	0.397803
0	094	0.798304	0.000193	0.871917
0	095	0.125868	0.129724	0.605005
0	096	0.420596	0.625805	0.103214
0	097	0.127562	0.365683	0.597584
0	098	0.404014	0.866087	0.096236
0	099	0.908042	0.864536	0.374486
0	0100	0.625770	0.364765	0.899754
0	0101	0.919916	0.640771	0.392948
0	0102	0.622543	0.134393	0.895624
0	0103	0.101534	0.058919	0.445565
0	0104	0.439743	0.551962	0.946231
0	0105	0.104422	0.442062	0.442171
0	0106	0.435158	0.941605	0.942787
0	0107	0.935746	0.927076	0.542226
0	0108	0.613585	0.427290	0.072052
0	0109	0.939540	0.570786	0.553536
0	0110	0.592288	0.058533	0.048500
0	0111	0.146972	0.069892	0.261562
0	0112	0.389456	0.567198	0.766136
0	0113	0.147497	0.427132	0.256584
0	0114	0.390903	0.930270	0.757567
0	0115	0.891935	0.951534	0.725304
0	0116	0.648710	0.460062	0.257675
0	0117	0.889612	0.552887	0.733432
0	0118	0.651589	0.059259	0.223960
0	0119	0.116701	0.951236	0.332758
0	0120	0.426689	0.447743	0.826573
0	0121	0.116117	0.546271	0.320763
0	0122	0.432169	0.046602	0.822183
0	0123	0.957329	0.044510	0.622890
0	0124	0.591595	0.548520	0.140084
0	0125	0.948213	0.453061	0.635622
0	0126	0.604666	0.946884	0.151392
0	0127	0.226412	0.136880	0.146128
0	0128	0.317571	0.637426	0.645792
0	0129	0.229320	0.358398	0.147318
0	0130	0.312721	0.859330	0.645487
0	0131	0.808172	0.857943	0.826686
0	0132	0.718628	0.364856	0.343986
0	0133	0.830312	0.618721	0.876596
0	0134	0.721102	0.120914	0.355648
0	0135	0.518276	0.852667	0.191301

0	0136	0.019374	0.353272	0.708731
0	0137	0.529078	0.655655	0.208029
0	0138	0.016054	0.147499	0.711615
0	0139	0.517707	0.142360	0.777127
0	0140	0.028188	0.641222	0.280983
0	0141	0.521210	0.360577	0.780872
0	0142	0.023521	0.865134	0.281215
0	0143	0.407925	0.841908	0.290233
0	0144	0.135824	0.344832	0.792500
0	0145	0.414338	0.653265	0.295833
0	0146	0.131516	0.154509	0.798369
0	0147	0.635068	0.154609	0.701776
0	0148	0.912805	0.651155	0.197148
0	0149	0.639156	0.343916	0.705411
0	0150	0.915811	0.843808	0.179010
0	0151	0.440234	0.747921	0.160843
0	0152	0.095826	0.248847	0.670101
0	0153	0.588752	0.250076	0.821520
0	0154	0.958092	0.751916	0.307386
0	0155	0.339597	0.858387	0.453179
0	0156	0.208225	0.354980	0.953984
0	0157	0.339636	0.637114	0.452934
0	0158	0.208526	0.139764	0.952935
0	0159	0.704416	0.157414	0.539261
0	0160	0.822443	0.665400	0.060705
0	0161	0.704316	0.339517	0.537615
0	0162	0.840736	0.850772	0.019707
0	0163	0.277210	0.834794	0.282888
0	0164	0.266265	0.334131	0.780607
0	0165	0.285230	0.662861	0.277121
0	0166	0.260788	0.161465	0.774951
0	0167	0.764979	0.167256	0.710814
0	0168	0.787269	0.637718	0.244995
0	0169	0.769153	0.323795	0.706760
0	0170	0.786563	0.833754	0.199181
0	0171	0.304653	0.747700	0.545948
0	0172	0.248628	0.247380	0.049339
0	0173	0.742878	0.246011	0.407591
0	0174	0.800424	0.744388	0.910745
0	0175	0.217229	0.843295	0.511044
0	0176	0.330370	0.348941	0.022332
0	0177	0.218084	0.648806	0.518193
0	0178	0.329496	0.144570	0.024163
0	0179	0.825787	0.150960	0.464299

O	O180	0.713967	0.649647	0.955148
O	O181	0.823059	0.345788	0.460857
O	O182	0.716151	0.839354	0.966729
O	O183	0.134410	0.746068	0.563040
O	O184	0.409134	0.246301	0.064593
O	O185	0.908283	0.250103	0.414644
O	O186	0.631464	0.748547	0.903625
O	O187	0.097156	0.841001	0.437843
O	O188	0.447230	0.340334	0.937916
O	O189	0.097470	0.646301	0.445819
O	O190	0.446699	0.151686	0.939493
O	O191	0.938515	0.165990	0.557279
O	O192	0.598540	0.662480	0.043502
O	O193	0.933289	0.331462	0.564278
O	O194	0.592155	0.843815	0.030444
O	O195	0.148529	0.834385	0.255985
O	O196	0.395462	0.330081	0.756251
O	O197	0.155582	0.666326	0.271215
O	O198	0.390235	0.164182	0.762736
O	O199	0.888701	0.128872	0.733462
O	O200	0.659018	0.649469	0.216688
O	O201	0.892428	0.361287	0.746549
O	O202	0.645056	0.827433	0.209875
O	O203	0.223796	0.748431	0.159966
O	O204	0.319432	0.247847	0.656655
O	O205	0.847991	0.244594	0.807214
O	O206	0.720826	0.738488	0.329904
O	O207	0.737006	0.766555	0.610267
Al	Al208	0.818425	0.943432	0.783902
Al	Al209	0.718553	0.819126	0.270764
Si	Si210	0.738655	0.934265	0.431344
Si	Si211	0.718335	0.660631	0.294663
Si	Si212	0.447329	0.056865	0.188659
Si	Si213	0.095575	0.557947	0.690217
Si	Si214	0.447668	0.434343	0.189258
Si	Si215	0.096522	0.935300	0.682823
Si	Si216	0.596088	0.945071	0.803374
Si	Si217	0.945745	0.445424	0.318087
Si	Si218	0.591253	0.548985	0.816985
Si	Si219	0.945747	0.055238	0.311109
Si	Si220	0.339325	0.028981	0.339190
Si	Si221	0.201440	0.529054	0.842431
Si	Si222	0.340643	0.466433	0.340277
Si	Si223	0.198739	0.966835	0.840091

Si	Si224	0.696462	0.973754	0.641816
Si	Si225	0.840732	0.465778	0.155236
Si	Si226	0.705805	0.520615	0.671601
Si	Si227	0.844081	0.030309	0.149609
Si	Si228	0.297348	0.052243	0.556865
Si	Si229	0.244309	0.552391	0.060606
Si	Si230	0.298700	0.445072	0.558795
Si	Si231	0.240442	0.945811	0.057252
Si	Si232	0.798201	0.428401	0.944804
Si	Si233	0.743842	0.558110	0.456576
Si	Si234	0.791287	0.062705	0.944317
Si	Si235	0.142627	0.060501	0.548366
Si	Si236	0.400158	0.556488	0.050193
Si	Si237	0.143191	0.437415	0.546897
Si	Si238	0.394065	0.938903	0.045526
Si	Si239	0.893482	0.930816	0.440482
Si	Si240	0.642214	0.432948	0.959814
Si	Si241	0.899472	0.572673	0.449820
Si	Si242	0.639171	0.064757	0.951543
Si	Si243	0.096893	0.029913	0.333371
Si	Si244	0.442517	0.527059	0.831780
Si	Si245	0.097573	0.467641	0.328244
Si	Si246	0.443671	0.966724	0.829163
Si	Si247	0.949298	0.965166	0.648172
Si	Si248	0.594907	0.470263	0.170745
Si	Si249	0.948227	0.532524	0.658880
Si	Si250	0.593169	0.026454	0.159604
Si	Si251	0.218235	0.068432	0.208563
Si	Si252	0.319831	0.568879	0.708955
Si	Si253	0.220416	0.427476	0.208140
Si	Si254	0.318557	0.928359	0.707492
Si	Si255	0.719571	0.440936	0.303461
Si	Si256	0.827253	0.552800	0.806988
Si	Si257	0.720345	0.057123	0.282812
Si	Si258	0.443350	0.827076	0.184151
Si	Si259	0.094387	0.327965	0.692268
Si	Si260	0.451236	0.670862	0.191876
Si	Si261	0.091880	0.170187	0.696102
Si	Si262	0.591019	0.170774	0.799217
Si	Si263	0.954964	0.671934	0.294847
Si	Si264	0.593731	0.329459	0.802047
Si	Si265	0.951254	0.831040	0.285294
Si	Si266	0.339657	0.871259	0.334387
Si	Si267	0.205564	0.370881	0.836211

Si	Si268	0.344191	0.624567	0.334540
Si	Si269	0.201784	0.125337	0.835374
Si	Si270	0.704406	0.132551	0.653076
Si	Si271	0.842037	0.624500	0.159449
Si	Si272	0.708531	0.362148	0.653083
Si	Si273	0.844355	0.869230	0.138540
Si	Si274	0.293357	0.827090	0.539490
Si	Si275	0.254207	0.327225	0.043221
Si	Si276	0.294532	0.668205	0.540653
Si	Si277	0.253482	0.167421	0.043070
Si	Si278	0.749108	0.168836	0.441382
Si	Si279	0.791646	0.668645	0.950367
Si	Si280	0.747252	0.323813	0.438348
Si	Si281	0.791931	0.823237	0.934761
Si	Si282	0.141085	0.824151	0.535239
Si	Si283	0.406293	0.324887	0.038850
Si	Si284	0.141495	0.667304	0.541313
Si	Si285	0.405793	0.167484	0.040019
Si	Si286	0.902583	0.172793	0.450258
Si	Si287	0.637488	0.671335	0.939272
Si	Si288	0.900676	0.326106	0.454582
Si	Si289	0.639185	0.826201	0.937561
Si	Si290	0.096693	0.872903	0.326734
Si	Si291	0.447526	0.369623	0.825258
Si	Si292	0.099302	0.625082	0.329350
Si	Si293	0.446487	0.126036	0.825232
Si	Si294	0.949684	0.121558	0.656854
Si	Si295	0.594794	0.628803	0.152902
Si	Si296	0.948504	0.374400	0.663821
Si	Si297	0.591260	0.866946	0.147410
Si	Si298	0.218976	0.824200	0.201823
Si	Si299	0.325023	0.322929	0.700622
Si	Si300	0.221918	0.673596	0.205403
Si	Si301	0.322594	0.172553	0.700618
Si	Si302	0.827750	0.167751	0.785253
Si	Si303	0.828619	0.321625	0.787555
Zn	Zn304	0.765343	0.825594	0.702141
Zn	Zn305	0.701323	0.774296	0.472297

M-C₄H₉Zn-OH-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/M2) Total energy = -1931.65794708 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b		20.050598		
_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.592336	0.694163	0.477140
H	H2	0.559464	0.769415	0.430186
H	H3	0.558813	0.816858	0.606200
H	H4	0.588636	0.740250	0.650974
H	H5	0.486498	0.683745	0.585509
H	H6	0.457299	0.761868	0.545484
H	H7	0.488106	0.724127	0.762385
H	H8	0.408507	0.733132	0.711144
H	H9	0.460165	0.803545	0.723112
H	H10	0.764858	0.730324	0.599519
C	C11	0.589194	0.748034	0.490281
C	C12	0.558677	0.762850	0.591931
C	C13	0.487807	0.737413	0.602109
C	C14	0.459344	0.750231	0.705563
O	O15	0.524748	0.042255	0.215711
O	O16	0.018891	0.552163	0.712167
O	O17	0.524687	0.446138	0.215594
O	O18	0.017066	0.936346	0.695552
O	O19	0.516669	0.940687	0.795171
O	O20	0.022272	0.455957	0.292882
O	O21	0.515335	0.540411	0.789055
O	O22	0.023349	0.040155	0.291043
O	O23	0.406768	0.057780	0.292240
O	O24	0.133476	0.551645	0.797761
O	O25	0.406234	0.432899	0.292226
O	O26	0.130141	0.939274	0.792413
O	O27	0.625596	0.956217	0.696847
O	O28	0.904090	0.435674	0.219144
O	O29	0.635179	0.531747	0.724293
O	O30	0.909325	0.063370	0.206554
O	O31	0.439634	0.124111	0.129384
O	O32	0.114586	0.628649	0.640892

0	033	0.440752	0.361791	0.134085
0	034	0.116568	0.863785	0.633514
0	035	0.622418	0.867458	0.840192
0	036	0.940267	0.376750	0.386737
0	037	0.604436	0.621507	0.862990
0	038	0.941375	0.126085	0.373416
0	039	0.421171	0.993292	0.121730
0	040	0.120837	0.497704	0.618067
0	041	0.420843	0.491221	0.116532
0	042	0.121137	0.995188	0.614679
0	043	0.621050	0.996801	0.884080
0	044	0.916356	0.507405	0.382608
0	045	0.607072	0.492272	0.908600
0	046	0.913088	0.997028	0.376204
0	047	0.341895	0.037604	0.458959
0	048	0.200947	0.540572	0.962214
0	049	0.342407	0.453912	0.460233
0	050	0.196188	0.951712	0.958712
0	051	0.693964	0.941959	0.535008
0	052	0.836067	0.424304	0.053357
0	053	0.707148	0.556604	0.567646
0	054	0.840192	0.066604	0.041023
0	055	0.336940	0.947535	0.312878
0	056	0.213088	0.448339	0.819194
0	057	0.337636	0.543786	0.313152
0	058	0.208021	0.043859	0.815617
0	059	0.715864	0.048541	0.655468
0	060	0.853671	0.543504	0.132037
0	061	0.724142	0.442529	0.664896
0	062	0.862247	0.950725	0.131305
0	063	0.275797	0.061893	0.293645
0	064	0.263207	0.567515	0.793648
0	065	0.275056	0.428960	0.297119
0	066	0.261062	0.925778	0.791578
0	067	0.754022	0.928163	0.704815
0	068	0.774860	0.456042	0.220190
0	069	0.761728	0.556075	0.746189
0	070	0.781100	0.040207	0.209081
0	071	0.319034	0.120131	0.606920
0	072	0.220193	0.618666	0.116389
0	073	0.320358	0.373265	0.611115
0	074	0.225094	0.871875	0.108654
0	075	0.719285	0.861036	0.388522
0	076	0.805384	0.352554	0.895228

0	077	0.713390	0.624685	0.404524
0	078	0.800766	0.128016	0.880058
0	079	0.220599	0.052990	0.524300
0	080	0.320586	0.553355	0.034367
0	081	0.221158	0.439703	0.527068
0	082	0.317296	0.947948	0.025708
0	083	0.815833	0.935233	0.465626
0	084	0.720843	0.442316	0.965167
0	085	0.822590	0.571285	0.482284
0	086	0.714573	0.060149	0.986725
0	087	0.309094	0.990308	0.635438
0	088	0.228912	0.487849	0.135956
0	089	0.309270	0.503523	0.635246
0	090	0.223099	0.002105	0.135815
0	091	0.718583	0.993724	0.362264
0	092	0.829526	0.481500	0.875432
0	093	0.733740	0.492790	0.399491
0	094	0.803699	0.994697	0.884773
0	095	0.127072	0.127731	0.605343
0	096	0.420988	0.623703	0.104013
0	097	0.125544	0.365611	0.602051
0	098	0.405326	0.862704	0.097174
0	099	0.908608	0.864186	0.374541
0	0100	0.626410	0.360577	0.903180
0	0101	0.919592	0.639546	0.399333
0	0102	0.624377	0.129404	0.890484
0	0103	0.101621	0.058128	0.444798
0	0104	0.436563	0.551547	0.944240
0	0105	0.103025	0.439714	0.444253
0	0106	0.435219	0.939830	0.944790
0	0107	0.935957	0.927242	0.541372
0	0108	0.614300	0.423536	0.075394
0	0109	0.941911	0.566335	0.556616
0	0110	0.591951	0.059568	0.050446
0	0111	0.147724	0.069578	0.260945
0	0112	0.391123	0.563216	0.760288
0	0113	0.146999	0.424850	0.259085
0	0114	0.390089	0.928836	0.760240
0	0115	0.890840	0.951379	0.723547
0	0116	0.648485	0.456340	0.261149
0	0117	0.891423	0.550755	0.737309
0	0118	0.652291	0.059954	0.225302
0	0119	0.116623	0.950911	0.331181
0	0120	0.428043	0.445177	0.827793

0	0121	0.116888	0.544381	0.324188
0	0122	0.436441	0.044149	0.822851
0	0123	0.958264	0.043917	0.623352
0	0124	0.595212	0.545942	0.140316
0	0125	0.949639	0.449660	0.642470
0	0126	0.606683	0.946896	0.151559
0	0127	0.230033	0.134432	0.147164
0	0128	0.315893	0.635556	0.646848
0	0129	0.229001	0.355776	0.149867
0	0130	0.314131	0.858039	0.644431
0	0131	0.813403	0.853623	0.826970
0	0132	0.725214	0.367378	0.347206
0	0133	0.832780	0.613822	0.883580
0	0134	0.731952	0.125508	0.339969
0	0135	0.520719	0.851886	0.190010
0	0136	0.020040	0.349600	0.717334
0	0137	0.528713	0.649551	0.212048
0	0138	0.018144	0.145103	0.714451
0	0139	0.519838	0.140925	0.773753
0	0140	0.026489	0.637015	0.284133
0	0141	0.522250	0.356700	0.783488
0	0142	0.024282	0.863427	0.281450
0	0143	0.410685	0.839199	0.290994
0	0144	0.137837	0.341104	0.795667
0	0145	0.412725	0.652158	0.296137
0	0146	0.133968	0.152858	0.798754
0	0147	0.637873	0.152278	0.696747
0	0148	0.910941	0.652955	0.203616
0	0149	0.639889	0.345301	0.707294
0	0150	0.916443	0.836005	0.181228
0	0151	0.444392	0.745390	0.162016
0	0152	0.097122	0.246890	0.670809
0	0153	0.593216	0.246902	0.818673
0	0154	0.961006	0.750176	0.316024
0	0155	0.340210	0.854252	0.452350
0	0156	0.210364	0.353950	0.956308
0	0157	0.338572	0.636052	0.453895
0	0158	0.209772	0.137268	0.954311
0	0159	0.704704	0.148738	0.529044
0	0160	0.822221	0.664056	0.065278
0	0161	0.705623	0.341010	0.539572
0	0162	0.844258	0.843853	0.019629
0	0163	0.279836	0.832383	0.280204
0	0164	0.268125	0.332411	0.782881

0	0165	0.283312	0.660727	0.278608
0	0166	0.263435	0.159427	0.777465
0	0167	0.768375	0.165188	0.698073
0	0168	0.785932	0.625329	0.245293
0	0169	0.769249	0.323776	0.709460
0	0170	0.787011	0.851692	0.198434
0	0171	0.301208	0.745850	0.547494
0	0172	0.249283	0.245220	0.050488
0	0173	0.744078	0.246882	0.411685
0	0174	0.801198	0.739514	0.909552
0	0175	0.217198	0.844149	0.511886
0	0176	0.331627	0.346459	0.027310
0	0177	0.216644	0.645876	0.518838
0	0178	0.331347	0.143484	0.021881
0	0179	0.828313	0.151829	0.465705
0	0180	0.715140	0.645388	0.957343
0	0181	0.825973	0.344442	0.468322
0	0182	0.719233	0.836789	0.964160
0	0183	0.135196	0.745564	0.561705
0	0184	0.411611	0.243836	0.066240
0	0185	0.911664	0.249996	0.417422
0	0186	0.633626	0.745324	0.907058
0	0187	0.096647	0.842442	0.440269
0	0188	0.447656	0.338322	0.939966
0	0189	0.095828	0.645041	0.447813
0	0190	0.448413	0.151221	0.936794
0	0191	0.939526	0.166831	0.562606
0	0192	0.602299	0.662740	0.052184
0	0193	0.936216	0.328608	0.570059
0	0194	0.595418	0.844087	0.029871
0	0195	0.150327	0.833180	0.260456
0	0196	0.396908	0.327468	0.757494
0	0197	0.153557	0.665010	0.272845
0	0198	0.392440	0.160197	0.758962
0	0199	0.890630	0.126682	0.737531
0	0200	0.657945	0.645405	0.228966
0	0201	0.892960	0.357504	0.751824
0	0202	0.648133	0.827176	0.209136
0	0203	0.222348	0.746257	0.161105
0	0204	0.320403	0.246055	0.657806
0	0205	0.845254	0.241137	0.808249
0	0206	0.732450	0.739073	0.314383
0	0207	0.750329	0.776105	0.592764
Al	Al208	0.821160	0.941379	0.791213

Al	Al209	0.723142	0.820683	0.268285
Si	Si210	0.738381	0.933393	0.435047
Si	Si211	0.722138	0.660816	0.296437
Si	Si212	0.448086	0.054430	0.189210
Si	Si213	0.097047	0.557378	0.691239
Si	Si214	0.448098	0.433207	0.189529
Si	Si215	0.095881	0.934072	0.683720
Si	Si216	0.595537	0.940763	0.806442
Si	Si217	0.945825	0.444105	0.321113
Si	Si218	0.591272	0.546510	0.822153
Si	Si219	0.946849	0.056596	0.312284
Si	Si220	0.340393	0.026305	0.339988
Si	Si221	0.202827	0.526960	0.844097
Si	Si222	0.340370	0.464882	0.341097
Si	Si223	0.198894	0.964988	0.840199
Si	Si224	0.696571	0.970540	0.647044
Si	Si225	0.842140	0.464907	0.157148
Si	Si226	0.706923	0.521193	0.675511
Si	Si227	0.848335	0.029542	0.147109
Si	Si228	0.297352	0.050125	0.556923
Si	Si229	0.243185	0.550184	0.063090
Si	Si230	0.298118	0.442440	0.558915
Si	Si231	0.240505	0.943327	0.057966
Si	Si232	0.797987	0.425042	0.947660
Si	Si233	0.744512	0.560936	0.461627
Si	Si234	0.790516	0.061359	0.946877
Si	Si235	0.142637	0.058459	0.547823
Si	Si236	0.399462	0.554935	0.050385
Si	Si237	0.142865	0.435799	0.548223
Si	Si238	0.394640	0.935815	0.047758
Si	Si239	0.893996	0.930961	0.439181
Si	Si240	0.642137	0.429210	0.962783
Si	Si241	0.900132	0.570432	0.454450
Si	Si242	0.638337	0.061529	0.952516
Si	Si243	0.097187	0.029639	0.332132
Si	Si244	0.442533	0.524827	0.831029
Si	Si245	0.097259	0.465910	0.330409
Si	Si246	0.444192	0.963850	0.830898
Si	Si247	0.949252	0.964610	0.647746
Si	Si248	0.595910	0.467970	0.172971
Si	Si249	0.949997	0.529320	0.663089
Si	Si250	0.594064	0.026242	0.161062
Si	Si251	0.219308	0.066143	0.209018
Si	Si252	0.319726	0.566551	0.708671

Si	Si253	0.219868	0.425055	0.210265
Si	Si254	0.318565	0.926513	0.707856
Si	Si255	0.720820	0.443333	0.306286
Si	Si256	0.828924	0.549537	0.810752
Si	Si257	0.721248	0.054923	0.283661
Si	Si258	0.446242	0.824669	0.184706
Si	Si259	0.095022	0.325602	0.696430
Si	Si260	0.451927	0.667949	0.193491
Si	Si261	0.093728	0.168185	0.697032
Si	Si262	0.593846	0.167726	0.794978
Si	Si263	0.954645	0.670525	0.300877
Si	Si264	0.595341	0.326894	0.803448
Si	Si265	0.952408	0.828369	0.288009
Si	Si266	0.341868	0.868199	0.333896
Si	Si267	0.207202	0.368798	0.838375
Si	Si268	0.342961	0.623158	0.335508
Si	Si269	0.203856	0.123290	0.836497
Si	Si270	0.706217	0.129089	0.645559
Si	Si271	0.843245	0.621215	0.162116
Si	Si272	0.709435	0.363052	0.655302
Si	Si273	0.850365	0.870502	0.134887
Si	Si274	0.293043	0.825500	0.539387
Si	Si275	0.255196	0.325112	0.046096
Si	Si276	0.292851	0.666215	0.541562
Si	Si277	0.255381	0.165374	0.043448
Si	Si278	0.752311	0.168341	0.436466
Si	Si279	0.792685	0.664744	0.954080
Si	Si280	0.750170	0.324657	0.442112
Si	Si281	0.794841	0.818488	0.934655
Si	Si282	0.141243	0.824050	0.536350
Si	Si283	0.407764	0.322602	0.041661
Si	Si284	0.140624	0.666411	0.542266
Si	Si285	0.407854	0.165477	0.038380
Si	Si286	0.905350	0.173022	0.454233
Si	Si287	0.638648	0.668640	0.945587
Si	Si288	0.903574	0.325219	0.460271
Si	Si289	0.641719	0.823506	0.937734
Si	Si290	0.097138	0.872396	0.327907
Si	Si291	0.448606	0.367013	0.827156
Si	Si292	0.098266	0.622888	0.331775
Si	Si293	0.449016	0.123923	0.823181
Si	Si294	0.951261	0.120508	0.659929
Si	Si295	0.596515	0.625921	0.159487
Si	Si296	0.949799	0.371020	0.670534

Si	Si297	0.594151	0.866597	0.147413
Si	Si298	0.219443	0.822177	0.202778
Si	Si299	0.326368	0.321021	0.702110
Si	Si300	0.220018	0.671554	0.206995
Si	Si301	0.323751	0.170377	0.700306
Si	Si302	0.826512	0.164751	0.781187
Si	Si303	0.828058	0.318899	0.790903
Zn	Zn304	0.769511	0.829067	0.700818
Zn	Zn305	0.678178	0.784499	0.473655

TS-C₄H₉Zn-HTransfer-Concerted-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/TS2)

Total energy = -1929.38299437 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.576403	0.752031	0.407882
H	H2	0.655113	0.754098	0.640997
H	H3	0.583271	0.839746	0.440571
H	H4	0.550206	0.818607	0.606927
H	H5	0.612677	0.752017	0.639764
H	H6	0.533141	0.672960	0.538255
H	H7	0.469292	0.731635	0.535226
H	H8	0.539419	0.684455	0.724965
H	H9	0.458428	0.664534	0.688075
H	H10	0.478427	0.747402	0.721510
C	C11	0.589053	0.788196	0.465380
C	C12	0.559943	0.775205	0.560201
C	C13	0.514137	0.717384	0.576210
C	C14	0.496625	0.702520	0.684069
O	O15	0.529922	0.042128	0.214570
O	O16	0.025269	0.545430	0.718485

0	017	0.526818	0.447353	0.220700
0	018	0.021682	0.932809	0.694286
0	019	0.519576	0.940304	0.792153
0	020	0.021952	0.455519	0.298660
0	021	0.519480	0.534040	0.798202
0	022	0.028081	0.046290	0.290906
0	023	0.413021	0.052248	0.294335
0	024	0.141070	0.554471	0.799075
0	025	0.406594	0.431235	0.288102
0	026	0.133469	0.938593	0.794982
0	027	0.628811	0.947159	0.691131
0	028	0.901870	0.438157	0.232704
0	029	0.641885	0.534998	0.744208
0	030	0.916027	0.052462	0.199776
0	031	0.440370	0.120748	0.131394
0	032	0.114054	0.628858	0.643264
0	033	0.447960	0.360975	0.132585
0	034	0.124772	0.865735	0.633082
0	035	0.621953	0.863479	0.841190
0	036	0.940785	0.378641	0.398321
0	037	0.599789	0.618106	0.885251
0	038	0.937040	0.129785	0.358834
0	039	0.427784	0.989566	0.121654
0	040	0.129787	0.498601	0.621364
0	041	0.426680	0.490001	0.112824
0	042	0.124682	0.997565	0.619964
0	043	0.626918	0.994005	0.875654
0	044	0.920094	0.509944	0.394894
0	045	0.608689	0.488238	0.923197
0	046	0.921032	0.000202	0.381169
0	047	0.345554	0.037339	0.459647
0	048	0.204835	0.538691	0.964521
0	049	0.345821	0.452480	0.459134
0	050	0.200468	0.950741	0.960751
0	051	0.696653	0.953689	0.526399
0	052	0.837550	0.424155	0.065027
0	053	0.710607	0.551137	0.582509
0	054	0.845931	0.052879	0.034606
0	055	0.338103	0.945579	0.316135
0	056	0.215428	0.447218	0.820001
0	057	0.339806	0.542606	0.312524
0	058	0.210472	0.043780	0.818669
0	059	0.714024	0.047276	0.669344
0	060	0.846623	0.544040	0.145786

0	061	0.727798	0.441603	0.689209
0	062	0.843803	0.946228	0.152295
0	063	0.282716	0.062460	0.291414
0	064	0.271822	0.563635	0.799490
0	065	0.275862	0.427944	0.298504
0	066	0.264471	0.926143	0.792822
0	067	0.757825	0.924730	0.693327
0	068	0.771851	0.452231	0.229134
0	069	0.769582	0.556741	0.757939
0	070	0.787400	0.060592	0.206815
0	071	0.321585	0.119337	0.608053
0	072	0.219752	0.618146	0.118303
0	073	0.322687	0.371476	0.609659
0	074	0.230345	0.870706	0.110267
0	075	0.725493	0.866400	0.386147
0	076	0.812100	0.349601	0.907519
0	077	0.713113	0.624036	0.424471
0	078	0.807452	0.120348	0.879498
0	079	0.223765	0.052081	0.523244
0	080	0.321915	0.551792	0.044792
0	081	0.224027	0.436727	0.522031
0	082	0.321808	0.947494	0.027606
0	083	0.820052	0.941313	0.465451
0	084	0.724529	0.439040	0.969441
0	085	0.825505	0.572583	0.495051
0	086	0.718885	0.054628	0.985099
0	087	0.311594	0.989417	0.635105
0	088	0.226845	0.487474	0.140408
0	089	0.308796	0.501533	0.633596
0	090	0.226871	0.000779	0.137996
0	091	0.727810	0.996784	0.349692
0	092	0.834973	0.478771	0.885254
0	093	0.738824	0.493911	0.410060
0	094	0.802902	0.987116	0.876727
0	095	0.132412	0.129462	0.604628
0	096	0.423615	0.622821	0.106754
0	097	0.129173	0.366117	0.604469
0	098	0.408736	0.859902	0.097277
0	099	0.909020	0.867974	0.370148
0	0100	0.627036	0.356615	0.920624
0	0101	0.922230	0.641776	0.411512
0	0102	0.627756	0.125845	0.893312
0	0103	0.103733	0.057324	0.447923
0	0104	0.433093	0.554806	0.942403

0	0105	0.103141	0.442234	0.449414
0	0106	0.438808	0.935475	0.943758
0	0107	0.939712	0.924536	0.540785
0	0108	0.623020	0.422537	0.091405
0	0109	0.944461	0.567519	0.569750
0	0110	0.595330	0.050045	0.046209
0	0111	0.153811	0.068525	0.266510
0	0112	0.397707	0.555541	0.752601
0	0113	0.146964	0.424085	0.265215
0	0114	0.393296	0.928450	0.759081
0	0115	0.895577	0.944770	0.724726
0	0116	0.647596	0.457856	0.279925
0	0117	0.899499	0.551770	0.754775
0	0118	0.656918	0.063766	0.218757
0	0119	0.116126	0.951099	0.332170
0	0120	0.429598	0.441949	0.840624
0	0121	0.116250	0.544914	0.324602
0	0122	0.438953	0.042730	0.828739
0	0123	0.960889	0.039998	0.626254
0	0124	0.601606	0.546049	0.150402
0	0125	0.947383	0.448605	0.651565
0	0126	0.613758	0.945147	0.163832
0	0127	0.231307	0.133358	0.147422
0	0128	0.319935	0.632680	0.649770
0	0129	0.226972	0.355169	0.152571
0	0130	0.316230	0.857263	0.645561
0	0131	0.810215	0.847674	0.822265
0	0132	0.724654	0.367844	0.363049
0	0133	0.837208	0.610775	0.902675
0	0134	0.727658	0.130821	0.344452
0	0135	0.523643	0.852436	0.193187
0	0136	0.025092	0.352174	0.721726
0	0137	0.528814	0.645714	0.220914
0	0138	0.020820	0.143978	0.708971
0	0139	0.521849	0.139376	0.778603
0	0140	0.025864	0.639093	0.290250
0	0141	0.526169	0.356456	0.794196
0	0142	0.026593	0.861214	0.282143
0	0143	0.413509	0.838197	0.291733
0	0144	0.143788	0.338003	0.796745
0	0145	0.411273	0.653543	0.298012
0	0146	0.135230	0.152153	0.798406
0	0147	0.639273	0.154854	0.701510
0	0148	0.908951	0.650525	0.214690

0	0149	0.644967	0.342748	0.725092
0	0150	0.919539	0.839487	0.177839
0	0151	0.449736	0.744186	0.164403
0	0152	0.098516	0.247242	0.671156
0	0153	0.593499	0.244623	0.831254
0	0154	0.957838	0.751675	0.317739
0	0155	0.345010	0.851237	0.454197
0	0156	0.215376	0.353750	0.957990
0	0157	0.338948	0.633056	0.456148
0	0158	0.210872	0.138952	0.954555
0	0159	0.706738	0.143366	0.535500
0	0160	0.816874	0.664664	0.080047
0	0161	0.708109	0.344519	0.555821
0	0162	0.844632	0.848829	0.016746
0	0163	0.282714	0.829927	0.282937
0	0164	0.274626	0.332950	0.785653
0	0165	0.281528	0.658332	0.282777
0	0166	0.264741	0.159290	0.777378
0	0167	0.769691	0.164547	0.703720
0	0168	0.784640	0.629833	0.262986
0	0169	0.774563	0.322234	0.721524
0	0170	0.790239	0.829511	0.195537
0	0171	0.307336	0.743618	0.552286
0	0172	0.251487	0.244918	0.053951
0	0173	0.742778	0.248098	0.429197
0	0174	0.805163	0.737678	0.919759
0	0175	0.221695	0.839480	0.509092
0	0176	0.334012	0.346469	0.039437
0	0177	0.218552	0.646429	0.525762
0	0178	0.332524	0.142489	0.022859
0	0179	0.828836	0.151393	0.465498
0	0180	0.716218	0.644580	0.959360
0	0181	0.827381	0.344472	0.480621
0	0182	0.719950	0.834577	0.964784
0	0183	0.136050	0.745733	0.564623
0	0184	0.412175	0.241472	0.075342
0	0185	0.911957	0.251104	0.422183
0	0186	0.631501	0.743489	0.916232
0	0187	0.100113	0.842237	0.441049
0	0188	0.445241	0.329687	0.940287
0	0189	0.098647	0.644759	0.450442
0	0190	0.449726	0.151588	0.940242
0	0191	0.944105	0.159718	0.553199
0	0192	0.609684	0.665510	0.069780

O	O193	0.938722	0.326522	0.578927
O	O194	0.598084	0.847152	0.033537
O	O195	0.153270	0.834666	0.260804
O	O196	0.402712	0.328117	0.752652
O	O197	0.152322	0.665838	0.273056
O	O198	0.394103	0.157782	0.761947
O	O199	0.893242	0.127804	0.731073
O	O200	0.655916	0.645871	0.251299
O	O201	0.899195	0.352452	0.763508
O	O202	0.650199	0.822881	0.212706
O	O203	0.224009	0.745493	0.163228
O	O204	0.324109	0.245033	0.659559
O	O205	0.847962	0.237083	0.818455
O	O206	0.727317	0.740238	0.340100
O	O207	0.722894	0.766026	0.609121
Al	Al208	0.822508	0.934063	0.783414
Al	Al209	0.724689	0.817826	0.273923
Si	Si210	0.743409	0.939578	0.430151
Si	Si211	0.720385	0.661145	0.317632
Si	Si212	0.452732	0.051259	0.189807
Si	Si213	0.102210	0.556627	0.694386
Si	Si214	0.451666	0.432533	0.188629
Si	Si215	0.100498	0.934129	0.685180
Si	Si216	0.598625	0.936951	0.802242
Si	Si217	0.946073	0.445755	0.332153
Si	Si218	0.593604	0.543772	0.838505
Si	Si219	0.950271	0.057333	0.308178
Si	Si220	0.344829	0.024528	0.341004
Si	Si221	0.208390	0.525850	0.846533
Si	Si222	0.341992	0.463506	0.339948
Si	Si223	0.202164	0.964740	0.842382
Si	Si224	0.699165	0.969621	0.644084
Si	Si225	0.839684	0.464737	0.169041
Si	Si226	0.712431	0.520905	0.693445
Si	Si227	0.848436	0.026940	0.148045
Si	Si228	0.300341	0.049591	0.556995
Si	Si229	0.243877	0.549105	0.067831
Si	Si230	0.300402	0.440283	0.556624
Si	Si231	0.244953	0.942399	0.059803
Si	Si232	0.802357	0.422780	0.957103
Si	Si233	0.747579	0.560243	0.477420
Si	Si234	0.794388	0.052635	0.942443
Si	Si235	0.146178	0.058960	0.549423
Si	Si236	0.401056	0.554644	0.052342

Si	Si237	0.146515	0.435929	0.549808
Si	Si238	0.399067	0.933159	0.047716
Si	Si239	0.897926	0.933440	0.439179
Si	Si240	0.646041	0.426049	0.976075
Si	Si241	0.902996	0.572563	0.467259
Si	Si242	0.642839	0.056121	0.949861
Si	Si243	0.100204	0.030498	0.334376
Si	Si244	0.444874	0.521311	0.834388
Si	Si245	0.097088	0.466450	0.334615
Si	Si246	0.447421	0.962343	0.831108
Si	Si247	0.953003	0.960411	0.648409
Si	Si248	0.599920	0.468301	0.185148
Si	Si249	0.953469	0.528024	0.674226
Si	Si250	0.599187	0.024481	0.161049
Si	Si251	0.223788	0.065259	0.210517
Si	Si252	0.324226	0.562465	0.708721
Si	Si253	0.219061	0.424201	0.213993
Si	Si254	0.321270	0.926118	0.708194
Si	Si255	0.720994	0.443261	0.320463
Si	Si256	0.835363	0.548843	0.825138
Si	Si257	0.724970	0.062665	0.280065
Si	Si258	0.449838	0.823602	0.186184
Si	Si259	0.098926	0.325672	0.698585
Si	Si260	0.453381	0.666766	0.197231
Si	Si261	0.096266	0.168249	0.695629
Si	Si262	0.595645	0.166457	0.801200
Si	Si263	0.953760	0.671433	0.309235
Si	Si264	0.597942	0.324632	0.818214
Si	Si265	0.953103	0.829713	0.286455
Si	Si266	0.344722	0.866233	0.335845
Si	Si267	0.212183	0.367676	0.839920
Si	Si268	0.342627	0.621791	0.337249
Si	Si269	0.205260	0.123444	0.837132
Si	Si270	0.707216	0.127651	0.653190
Si	Si271	0.839321	0.621987	0.176064
Si	Si272	0.713659	0.362718	0.672785
Si	Si273	0.848208	0.865706	0.136574
Si	Si274	0.297165	0.822994	0.540840
Si	Si275	0.257054	0.324809	0.051002
Si	Si276	0.295495	0.664328	0.545750
Si	Si277	0.256776	0.165151	0.044526
Si	Si278	0.751902	0.168641	0.443516
Si	Si279	0.793849	0.663767	0.965140
Si	Si280	0.750903	0.325815	0.457704

Si	Si281	0.795720	0.817384	0.934511
Si	Si282	0.145196	0.823470	0.536368
Si	Si283	0.409639	0.319770	0.046851
Si	Si284	0.141978	0.666553	0.545924
Si	Si285	0.408895	0.163892	0.042165
Si	Si286	0.905673	0.172282	0.449505
Si	Si287	0.639507	0.667902	0.958169
Si	Si288	0.904797	0.325171	0.469664
Si	Si289	0.642206	0.822269	0.941128
Si	Si290	0.099066	0.872167	0.328620
Si	Si291	0.450879	0.364130	0.831742
Si	Si292	0.098230	0.623504	0.334186
Si	Si293	0.450835	0.122720	0.827426
Si	Si294	0.954167	0.117831	0.655279
Si	Si295	0.599308	0.625579	0.173444
Si	Si296	0.952689	0.369812	0.678828
Si	Si297	0.597862	0.865750	0.152489
Si	Si298	0.222461	0.821518	0.204600
Si	Si299	0.330800	0.320406	0.701815
Si	Si300	0.219572	0.670906	0.209011
Si	Si301	0.326108	0.169294	0.701915
Si	Si302	0.829946	0.161929	0.783328
Si	Si303	0.833364	0.315538	0.802692
Zn	Zn304	0.759371	0.821418	0.700175
Zn	Zn305	0.689736	0.784913	0.478197

C₄H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/M3) Total energy = -1930.47936236 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.591288	0.714017	0.400671
---	----	----------	----------	----------

H	H2	0.705735	0.688550	0.699015
H	H3	0.593710	0.804647	0.374048
H	H4	0.551686	0.828944	0.539309
H	H5	0.692429	0.669262	0.741085
H	H6	0.560646	0.677522	0.573651
H	H7	0.483378	0.716294	0.567158
H	H8	0.589806	0.753651	0.718985
H	H9	0.518983	0.705601	0.743811
H	H10	0.511027	0.790675	0.710310
C	C11	0.587392	0.764911	0.427785
C	C12	0.559774	0.777145	0.517301
C	C13	0.535228	0.724906	0.587305
C	C14	0.539066	0.744966	0.696642
O	O15	0.527809	0.042852	0.211873
O	O16	0.022359	0.550746	0.714736
O	O17	0.526598	0.446883	0.215009
O	O18	0.020026	0.934885	0.691425
O	O19	0.519502	0.941813	0.790858
O	O20	0.023955	0.456909	0.294894
O	O21	0.518314	0.539866	0.792794
O	O22	0.026117	0.042732	0.291635
O	O23	0.410420	0.057048	0.291047
O	O24	0.137201	0.552391	0.799120
O	O25	0.408354	0.432472	0.291506
O	O26	0.132395	0.940575	0.791372
O	O27	0.627814	0.952069	0.688758
O	O28	0.904635	0.440930	0.224331
O	O29	0.638991	0.532795	0.732967
O	O30	0.914730	0.056422	0.199010
O	O31	0.440759	0.123501	0.127617
O	O32	0.116594	0.629600	0.643519
O	O33	0.443814	0.360972	0.134274
O	O34	0.122882	0.867606	0.629672
O	O35	0.623747	0.867455	0.837976
O	O36	0.941040	0.378476	0.388809
O	O37	0.604446	0.620990	0.873037
O	O38	0.938981	0.129308	0.361426
O	O39	0.424043	0.992323	0.120493
O	O40	0.124870	0.498985	0.619192
O	O41	0.422252	0.489937	0.115006
O	O42	0.122379	0.999479	0.616308
O	O43	0.626003	0.998002	0.873792
O	O44	0.920872	0.509923	0.389610
O	O45	0.608226	0.491601	0.915546

0	046	0.915612	0.000228	0.377215
0	047	0.345164	0.038909	0.457685
0	048	0.204566	0.541193	0.963106
0	049	0.345788	0.454671	0.460009
0	050	0.199277	0.952507	0.957478
0	051	0.694869	0.954469	0.523369
0	052	0.835992	0.424055	0.061038
0	053	0.711047	0.555604	0.575915
0	054	0.845773	0.057062	0.032514
0	055	0.338412	0.948412	0.312288
0	056	0.216483	0.448811	0.820150
0	057	0.340773	0.543910	0.312038
0	058	0.210088	0.045282	0.815125
0	059	0.713650	0.050766	0.661399
0	060	0.846569	0.545175	0.137488
0	061	0.724863	0.441244	0.671330
0	062	0.846209	0.948741	0.146794
0	063	0.279361	0.063624	0.291862
0	064	0.267120	0.567660	0.794729
0	065	0.277157	0.429277	0.297936
0	066	0.263367	0.927475	0.789547
0	067	0.756984	0.928931	0.690965
0	068	0.774355	0.454204	0.227481
0	069	0.766150	0.551989	0.754746
0	070	0.785479	0.060147	0.202959
0	071	0.320739	0.121520	0.605210
0	072	0.220080	0.618879	0.118698
0	073	0.322261	0.374274	0.611025
0	074	0.229003	0.871694	0.106358
0	075	0.719799	0.865249	0.383602
0	076	0.811211	0.352120	0.900877
0	077	0.712672	0.623679	0.412341
0	078	0.806733	0.125600	0.878949
0	079	0.223803	0.051749	0.523398
0	080	0.322995	0.556995	0.038547
0	081	0.224422	0.442026	0.525638
0	082	0.320888	0.947311	0.022327
0	083	0.817588	0.936869	0.462069
0	084	0.724130	0.442131	0.962607
0	085	0.825084	0.573623	0.484470
0	086	0.718334	0.058507	0.983528
0	087	0.314004	0.991611	0.634768
0	088	0.232012	0.488282	0.136634
0	089	0.312856	0.504611	0.635061

0	090	0.227930	0.001713	0.134956
0	091	0.727217	0.994061	0.344542
0	092	0.836635	0.481348	0.883776
0	093	0.736382	0.493256	0.406851
0	094	0.802382	0.992256	0.873915
0	095	0.132933	0.131253	0.602115
0	096	0.426229	0.622707	0.108047
0	097	0.130009	0.366944	0.601474
0	098	0.408763	0.861962	0.094588
0	099	0.909623	0.867394	0.367975
0	0100	0.627142	0.360053	0.911007
0	0101	0.922924	0.642102	0.402909
0	0102	0.627344	0.129879	0.892186
0	0103	0.105129	0.060180	0.443954
0	0104	0.437770	0.553480	0.945293
0	0105	0.105588	0.441976	0.445130
0	0106	0.439512	0.939402	0.942955
0	0107	0.937953	0.926417	0.537932
0	0108	0.621700	0.424885	0.082713
0	0109	0.943270	0.570156	0.563040
0	0110	0.594617	0.053608	0.044615
0	0111	0.150899	0.067954	0.259604
0	0112	0.395008	0.564155	0.759930
0	0113	0.148911	0.426848	0.259844
0	0114	0.392780	0.927304	0.759568
0	0115	0.894133	0.948794	0.721579
0	0116	0.648425	0.460121	0.270231
0	0117	0.895890	0.552803	0.745846
0	0118	0.655009	0.063815	0.218548
0	0119	0.117143	0.951246	0.333648
0	0120	0.429021	0.446115	0.830816
0	0121	0.118089	0.546379	0.324040
0	0122	0.437347	0.043684	0.821213
0	0123	0.960317	0.042411	0.621430
0	0124	0.597700	0.547542	0.144243
0	0125	0.948688	0.451489	0.644001
0	0126	0.611705	0.946687	0.158661
0	0127	0.231090	0.134212	0.145281
0	0128	0.319278	0.636592	0.648235
0	0129	0.229882	0.356467	0.150677
0	0130	0.315585	0.859106	0.642564
0	0131	0.810124	0.852077	0.819606
0	0132	0.722266	0.368294	0.355456
0	0133	0.834409	0.613699	0.892189

0	0134	0.727440	0.127962	0.344385
0	0135	0.523455	0.852523	0.190071
0	0136	0.023528	0.353472	0.715060
0	0137	0.531625	0.650695	0.219628
0	0138	0.021541	0.144692	0.707161
0	0139	0.522504	0.139315	0.774881
0	0140	0.029177	0.641073	0.286479
0	0141	0.524921	0.359552	0.786946
0	0142	0.026755	0.862945	0.279166
0	0143	0.413309	0.840819	0.289408
0	0144	0.140876	0.341896	0.794921
0	0145	0.414675	0.653581	0.299179
0	0146	0.136140	0.154342	0.795850
0	0147	0.640195	0.158096	0.700142
0	0148	0.913566	0.649276	0.205997
0	0149	0.643138	0.342655	0.715760
0	0150	0.919792	0.841177	0.174517
0	0151	0.447705	0.745447	0.163451
0	0152	0.098384	0.248872	0.669414
0	0153	0.590563	0.247306	0.826728
0	0154	0.958729	0.752138	0.310803
0	0155	0.343775	0.854929	0.451163
0	0156	0.212690	0.354086	0.956544
0	0157	0.339744	0.634516	0.454885
0	0158	0.210747	0.139608	0.952558
0	0159	0.706383	0.150434	0.533110
0	0160	0.822083	0.666927	0.071648
0	0161	0.707656	0.339133	0.547391
0	0162	0.844722	0.850083	0.013919
0	0163	0.282592	0.832822	0.279188
0	0164	0.271385	0.332944	0.783663
0	0165	0.285721	0.660859	0.278687
0	0166	0.266089	0.160412	0.776689
0	0167	0.770929	0.166280	0.700536
0	0168	0.788948	0.633688	0.255314
0	0169	0.772862	0.323812	0.715976
0	0170	0.790568	0.833868	0.194197
0	0171	0.307437	0.746139	0.546969
0	0172	0.251302	0.245828	0.052058
0	0173	0.745813	0.248172	0.415054
0	0174	0.804295	0.740689	0.913722
0	0175	0.220619	0.841358	0.506999
0	0176	0.333440	0.347169	0.030068
0	0177	0.218965	0.648395	0.522250

O	O178	0.332385	0.143620	0.020298
O	O179	0.829046	0.151484	0.463477
O	O180	0.716407	0.647967	0.961821
O	O181	0.826704	0.346665	0.470452
O	O182	0.720156	0.837519	0.963452
O	O183	0.136318	0.746820	0.564955
O	O184	0.412859	0.243434	0.065905
O	O185	0.911312	0.251621	0.417896
O	O186	0.632592	0.746385	0.911953
O	O187	0.099316	0.840819	0.438093
O	O188	0.448489	0.337911	0.940047
O	O189	0.098366	0.645642	0.450632
O	O190	0.449480	0.150870	0.935644
O	O191	0.943002	0.163714	0.554299
O	O192	0.604545	0.665659	0.059563
O	O193	0.937283	0.329686	0.571537
O	O194	0.596691	0.848996	0.028097
O	O195	0.153092	0.835535	0.258020
O	O196	0.400096	0.329000	0.755978
O	O197	0.156282	0.667307	0.276560
O	O198	0.395214	0.160249	0.756808
O	O199	0.894052	0.128521	0.731970
O	O200	0.660433	0.646444	0.235141
O	O201	0.897092	0.356974	0.755212
O	O202	0.649962	0.824454	0.205584
O	O203	0.224666	0.746651	0.161270
O	O204	0.323315	0.247110	0.657399
O	O205	0.849332	0.240461	0.811847
O	O206	0.726477	0.740871	0.332610
O	O207	0.740597	0.766911	0.596549
Al	Al208	0.821304	0.938332	0.781373
Al	Al209	0.723670	0.819549	0.268290
Si	Si210	0.740912	0.938068	0.427446
Si	Si211	0.722405	0.661683	0.306688
Si	Si212	0.450796	0.054019	0.187131
Si	Si213	0.100113	0.557802	0.693104
Si	Si214	0.450274	0.432744	0.188881
Si	Si215	0.098868	0.936017	0.681931
Si	Si216	0.598667	0.940484	0.800106
Si	Si217	0.947579	0.446737	0.325419
Si	Si218	0.593619	0.546369	0.829437
Si	Si219	0.948774	0.057289	0.307885
Si	Si220	0.343335	0.027219	0.338798
Si	Si221	0.206445	0.527414	0.845085

Si	Si222	0.342914	0.464988	0.340792
Si	Si223	0.201203	0.966326	0.838974
Si	Si224	0.698263	0.972715	0.640506
Si	Si225	0.840659	0.466122	0.163497
Si	Si226	0.710355	0.520244	0.683679
Si	Si227	0.848365	0.029501	0.145117
Si	Si228	0.300616	0.050888	0.555829
Si	Si229	0.245403	0.551367	0.064989
Si	Si230	0.301174	0.443667	0.558562
Si	Si231	0.244230	0.943309	0.055930
Si	Si232	0.801956	0.424772	0.952246
Si	Si233	0.747056	0.561268	0.469582
Si	Si234	0.793877	0.057240	0.940752
Si	Si235	0.146097	0.060580	0.546899
Si	Si236	0.401954	0.555603	0.052395
Si	Si237	0.146325	0.437542	0.548228
Si	Si238	0.398143	0.935261	0.045301
Si	Si239	0.895845	0.932690	0.436232
Si	Si240	0.645520	0.429122	0.967751
Si	Si241	0.902966	0.573564	0.459511
Si	Si242	0.642243	0.059903	0.948323
Si	Si243	0.099623	0.030382	0.332250
Si	Si244	0.444869	0.525482	0.832957
Si	Si245	0.099059	0.467770	0.331209
Si	Si246	0.447087	0.963582	0.828769
Si	Si247	0.951634	0.962953	0.645004
Si	Si248	0.598779	0.469569	0.177630
Si	Si249	0.951949	0.530927	0.667677
Si	Si250	0.597353	0.026118	0.158470
Si	Si251	0.222398	0.065933	0.207642
Si	Si252	0.323260	0.567216	0.709257
Si	Si253	0.221785	0.425840	0.211156
Si	Si254	0.321278	0.927257	0.706635
Si	Si255	0.720561	0.444164	0.314485
Si	Si256	0.833292	0.549492	0.819025
Si	Si257	0.723867	0.061207	0.277593
Si	Si258	0.449025	0.825092	0.183735
Si	Si259	0.097964	0.327531	0.695305
Si	Si260	0.454982	0.668397	0.197206
Si	Si261	0.096715	0.169814	0.693350
Si	Si262	0.595224	0.168917	0.798522
Si	Si263	0.956142	0.671890	0.302182
Si	Si264	0.596511	0.327000	0.810419
Si	Si265	0.953580	0.830612	0.282718

Si	Si266	0.344325	0.869171	0.332694
Si	Si267	0.210120	0.369214	0.838629
Si	Si268	0.344857	0.623089	0.336257
Si	Si269	0.205740	0.124851	0.834858
Si	Si270	0.707535	0.131403	0.649650
Si	Si271	0.842864	0.623421	0.167519
Si	Si272	0.711930	0.361666	0.662776
Si	Si273	0.848874	0.868121	0.133034
Si	Si274	0.296430	0.825465	0.537505
Si	Si275	0.256878	0.325701	0.047366
Si	Si276	0.295713	0.666816	0.542984
Si	Si277	0.256633	0.166076	0.042407
Si	Si278	0.752576	0.169537	0.439127
Si	Si279	0.794226	0.666679	0.959087
Si	Si280	0.750747	0.325398	0.447826
Si	Si281	0.795572	0.820323	0.930430
Si	Si282	0.144350	0.824340	0.534474
Si	Si283	0.409410	0.322334	0.042345
Si	Si284	0.142548	0.667722	0.545312
Si	Si285	0.408937	0.165238	0.037092
Si	Si286	0.905781	0.173362	0.448832
Si	Si287	0.639747	0.670285	0.951723
Si	Si288	0.904166	0.326665	0.461895
Si	Si289	0.642847	0.825111	0.937117
Si	Si290	0.099115	0.872550	0.326772
Si	Si291	0.450500	0.368148	0.828278
Si	Si292	0.100408	0.624993	0.334044
Si	Si293	0.450865	0.123387	0.822186
Si	Si294	0.954190	0.119719	0.654209
Si	Si295	0.598941	0.627230	0.165095
Si	Si296	0.951745	0.372693	0.671430
Si	Si297	0.596730	0.867294	0.146749
Si	Si298	0.222237	0.822963	0.201453
Si	Si299	0.329131	0.322009	0.701883
Si	Si300	0.221788	0.672364	0.208451
Si	Si301	0.326234	0.171248	0.699181
Si	Si302	0.830588	0.164620	0.781034
Si	Si303	0.832516	0.318462	0.795821
Zn	Zn304	0.765061	0.825380	0.689847
Zn	Zn305	0.701741	0.780916	0.475743

TS-C₄H₉-HTransfer-Stepwise-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/TS3) Total energy = -1929.37338476 eV
data_

```

_audit_creation_method    'Materials Studio'
_cell_length_a           20.357621
_cell_length_b           20.050598
_cell_length_c           13.476578
_cell_angle_alpha        90.000000
_cell_angle_beta         90.000000
_cell_angle_gamma        90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H    H1           0.732847           0.735353           0.616625
  H    H2           0.534617           0.844526           0.474782
  H    H3           0.558993           0.846470           0.606143
  H    H4           0.576795           0.727251           0.607479
  H    H5           0.638323           0.720550           0.489310
  H    H6           0.530197           0.722572           0.391399
  H    H7           0.473748           0.717946           0.489228
  H    H8           0.587972           0.618545           0.462882
  H    H9           0.505594           0.603474           0.427519
  H    H10          0.525588           0.614199           0.554274
  C    C11          0.562648           0.821787           0.534668
  C    C12          0.565996           0.749730           0.535483
  C    C13          0.524840           0.706214           0.468464
  C    C14          0.536856           0.631240           0.478866
  O    O15          0.524270           0.040764           0.216268
  O    O16          0.020067           0.552385           0.709088
  O    O17          0.527534           0.442689           0.214911
  O    O18          0.018979           0.936454           0.696358
  O    O19          0.519259           0.942426           0.797141
  O    O20          0.024579           0.452096           0.290315
  O    O21          0.516393           0.540665           0.784592
  O    O22          0.023475           0.036631           0.292707
  O    O23          0.405961           0.059260           0.290904
  O    O24          0.134709           0.553216           0.794877
  O    O25          0.408820           0.434041           0.291652
  O    O26          0.133013           0.937282           0.789959
  O    O27          0.628520           0.957247           0.700494
  O    O28          0.907405           0.430256           0.214686
  O    O29          0.635160           0.532310           0.716761
  O    O30          0.909110           0.063611           0.211760

```

0	031	0.441989	0.126058	0.130468
0	032	0.116107	0.625894	0.632891
0	033	0.439862	0.362963	0.131985
0	034	0.115554	0.860327	0.633292
0	035	0.623826	0.868208	0.844154
0	036	0.942100	0.373178	0.383813
0	037	0.606292	0.621577	0.857233
0	038	0.943399	0.121131	0.381317
0	039	0.420111	0.996029	0.119267
0	040	0.121965	0.494449	0.619151
0	041	0.426396	0.493807	0.117548
0	042	0.123649	0.990956	0.610719
0	043	0.624083	0.997407	0.887782
0	044	0.918217	0.504038	0.377254
0	045	0.609295	0.492526	0.902242
0	046	0.913122	0.992252	0.376906
0	047	0.342583	0.036774	0.457980
0	048	0.201566	0.540184	0.960004
0	049	0.343191	0.453976	0.458236
0	050	0.196937	0.950452	0.957262
0	051	0.695985	0.943708	0.537396
0	052	0.838530	0.421665	0.048482
0	053	0.706912	0.555823	0.559292
0	054	0.841481	0.069383	0.044799
0	055	0.339347	0.947217	0.310887
0	056	0.212461	0.448243	0.816680
0	057	0.338145	0.543744	0.311211
0	058	0.210012	0.042554	0.814328
0	059	0.716770	0.050944	0.654812
0	060	0.861046	0.539452	0.128171
0	061	0.720257	0.440216	0.654449
0	062	0.864016	0.952088	0.130809
0	063	0.274838	0.060167	0.293770
0	064	0.264454	0.566961	0.791961
0	065	0.277871	0.428154	0.293226
0	066	0.264097	0.924942	0.791818
0	067	0.756788	0.932010	0.707663
0	068	0.779049	0.453932	0.216261
0	069	0.762364	0.551365	0.737013
0	070	0.781015	0.039603	0.209900
0	071	0.321955	0.118999	0.607145
0	072	0.228055	0.619151	0.110990
0	073	0.323123	0.372981	0.609197
0	074	0.226025	0.871722	0.108449

0	075	0.714102	0.854743	0.397634
0	076	0.804027	0.355565	0.887468
0	077	0.720050	0.623221	0.395551
0	078	0.802021	0.133170	0.885813
0	079	0.222305	0.053220	0.525964
0	080	0.322439	0.545228	0.029218
0	081	0.222369	0.437797	0.526216
0	082	0.317869	0.947378	0.023630
0	083	0.815616	0.928736	0.464182
0	084	0.722033	0.443836	0.965633
0	085	0.824783	0.565275	0.480445
0	086	0.715707	0.063809	0.990263
0	087	0.311346	0.988953	0.634690
0	088	0.227505	0.488318	0.135317
0	089	0.310056	0.503161	0.633286
0	090	0.223961	0.002173	0.133396
0	091	0.718860	0.985743	0.358123
0	092	0.829949	0.485440	0.876090
0	093	0.734876	0.490380	0.394059
0	094	0.804780	0.999737	0.886451
0	095	0.125711	0.123850	0.606457
0	096	0.416759	0.625110	0.096585
0	097	0.126473	0.362816	0.599058
0	098	0.406610	0.864622	0.098133
0	099	0.912720	0.859248	0.383321
0	0100	0.630265	0.361467	0.896013
0	0101	0.918848	0.636390	0.395030
0	0102	0.624265	0.130029	0.892194
0	0103	0.104273	0.056098	0.443008
0	0104	0.439034	0.549820	0.941429
0	0105	0.104199	0.438998	0.443515
0	0106	0.436397	0.940159	0.944441
0	0107	0.933975	0.927059	0.547095
0	0108	0.613032	0.422614	0.068608
0	0109	0.945216	0.563611	0.550732
0	0110	0.592662	0.060468	0.052647
0	0111	0.147146	0.068397	0.257808
0	0112	0.392142	0.563366	0.758118
0	0113	0.149580	0.422171	0.259755
0	0114	0.393098	0.927424	0.758992
0	0115	0.894062	0.950621	0.732412
0	0116	0.652135	0.454180	0.252833
0	0117	0.892204	0.546496	0.729996
0	0118	0.651914	0.056546	0.227894

0	0119	0.118606	0.949006	0.328095
0	0120	0.429159	0.444919	0.822640
0	0121	0.117719	0.542307	0.320925
0	0122	0.435878	0.043909	0.821290
0	0123	0.957926	0.043654	0.627448
0	0124	0.594942	0.544081	0.137057
0	0125	0.955428	0.447767	0.637010
0	0126	0.605140	0.945610	0.148372
0	0127	0.230909	0.134319	0.147003
0	0128	0.316900	0.635184	0.644628
0	0129	0.231053	0.355784	0.146370
0	0130	0.316454	0.856593	0.644785
0	0131	0.810533	0.857418	0.836267
0	0132	0.727175	0.365026	0.340948
0	0133	0.831741	0.618057	0.865632
0	0134	0.730616	0.118893	0.346823
0	0135	0.520698	0.850663	0.194648
0	0136	0.020819	0.345570	0.714577
0	0137	0.526229	0.647333	0.203511
0	0138	0.018267	0.145090	0.717264
0	0139	0.520350	0.139871	0.773704
0	0140	0.025417	0.632921	0.280072
0	0141	0.523958	0.357333	0.780296
0	0142	0.024899	0.861691	0.281569
0	0143	0.409791	0.836362	0.290765
0	0144	0.138898	0.339897	0.792855
0	0145	0.410936	0.652840	0.289161
0	0146	0.134761	0.150628	0.799354
0	0147	0.638327	0.153395	0.698565
0	0148	0.909017	0.652936	0.200974
0	0149	0.640658	0.340028	0.701140
0	0150	0.914156	0.836637	0.188256
0	0151	0.444151	0.745765	0.156610
0	0152	0.099680	0.244196	0.669504
0	0153	0.591823	0.246897	0.820293
0	0154	0.963156	0.747235	0.314033
0	0155	0.340639	0.855297	0.452305
0	0156	0.211025	0.353319	0.953336
0	0157	0.342071	0.636179	0.452113
0	0158	0.212144	0.135614	0.953592
0	0159	0.705534	0.153333	0.532064
0	0160	0.828108	0.657483	0.053264
0	0161	0.706046	0.336463	0.532603
0	0162	0.841073	0.842220	0.029954

0	0163	0.279091	0.833046	0.281309
0	0164	0.269378	0.333197	0.780094
0	0165	0.280463	0.659865	0.282226
0	0166	0.263788	0.158881	0.775482
0	0167	0.768839	0.166421	0.702059
0	0168	0.782400	0.617400	0.227604
0	0169	0.770901	0.324048	0.702077
0	0170	0.785728	0.860614	0.211075
0	0171	0.303229	0.745445	0.544883
0	0172	0.250189	0.244733	0.048220
0	0173	0.746115	0.243876	0.403234
0	0174	0.801009	0.741418	0.910317
0	0175	0.218333	0.844024	0.514199
0	0176	0.332605	0.345919	0.021867
0	0177	0.219172	0.644861	0.513879
0	0178	0.333075	0.143388	0.023485
0	0179	0.828668	0.149728	0.466520
0	0180	0.716728	0.644948	0.952700
0	0181	0.826972	0.341450	0.463391
0	0182	0.717386	0.835345	0.972115
0	0183	0.137427	0.743655	0.558384
0	0184	0.413327	0.244675	0.063403
0	0185	0.913137	0.246497	0.416533
0	0186	0.633931	0.744858	0.905411
0	0187	0.098577	0.841503	0.439115
0	0188	0.449909	0.339752	0.938032
0	0189	0.098958	0.645720	0.439554
0	0190	0.449740	0.149965	0.937183
0	0191	0.938254	0.166707	0.567064
0	0192	0.603910	0.660250	0.048248
0	0193	0.936461	0.326588	0.567516
0	0194	0.593300	0.840057	0.033119
0	0195	0.150231	0.830504	0.258018
0	0196	0.398380	0.326187	0.756480
0	0197	0.151441	0.661712	0.259333
0	0198	0.392958	0.161075	0.760487
0	0199	0.890769	0.126503	0.742283
0	0200	0.654572	0.644366	0.229781
0	0201	0.893660	0.360083	0.747454
0	0202	0.647914	0.827540	0.213395
0	0203	0.225080	0.745853	0.159471
0	0204	0.321286	0.245572	0.656478
0	0205	0.847317	0.243753	0.805772
0	0206	0.740631	0.735355	0.293730

O	O207	0.725056	0.782902	0.615256
Al	Al208	0.822544	0.943895	0.796335
Al	Al209	0.723104	0.818742	0.272516
Si	Si210	0.737859	0.928694	0.436836
Si	Si211	0.724298	0.658087	0.286003
Si	Si212	0.448202	0.055556	0.188804
Si	Si213	0.098289	0.556400	0.688006
Si	Si214	0.450469	0.433384	0.188775
Si	Si215	0.097398	0.931732	0.682402
Si	Si216	0.598036	0.942034	0.809793
Si	Si217	0.948019	0.440166	0.317399
Si	Si218	0.592684	0.546624	0.816168
Si	Si219	0.947303	0.053246	0.316235
Si	Si220	0.340560	0.025993	0.338967
Si	Si221	0.203384	0.526988	0.841691
Si	Si222	0.342016	0.464878	0.339136
Si	Si223	0.201068	0.963652	0.838826
Si	Si224	0.698824	0.972762	0.649071
Si	Si225	0.846297	0.461431	0.152816
Si	Si226	0.706165	0.519322	0.666337
Si	Si227	0.849026	0.030433	0.149522
Si	Si228	0.299183	0.049319	0.557109
Si	Si229	0.245244	0.548299	0.059798
Si	Si230	0.299415	0.441758	0.557245
Si	Si231	0.241240	0.942825	0.056606
Si	Si232	0.798833	0.426571	0.944392
Si	Si233	0.746910	0.558910	0.455033
Si	Si234	0.791743	0.065511	0.950579
Si	Si235	0.143959	0.056090	0.547118
Si	Si236	0.400818	0.553397	0.046627
Si	Si237	0.143998	0.433663	0.547277
Si	Si238	0.395219	0.936964	0.046928
Si	Si239	0.894509	0.927159	0.442737
Si	Si240	0.643685	0.429637	0.957848
Si	Si241	0.901774	0.566652	0.450050
Si	Si242	0.639628	0.063068	0.955431
Si	Si243	0.098223	0.027537	0.330621
Si	Si244	0.443980	0.524384	0.827422
Si	Si245	0.098960	0.463695	0.328950
Si	Si246	0.445783	0.963908	0.830519
Si	Si247	0.949916	0.964295	0.652511
Si	Si248	0.597309	0.465943	0.168338
Si	Si249	0.952534	0.527323	0.657829
Si	Si250	0.593682	0.024880	0.161690

Si	Si251	0.219356	0.065573	0.207638
Si	Si252	0.320664	0.566192	0.706631
Si	Si253	0.221468	0.424320	0.208217
Si	Si254	0.321212	0.925387	0.707491
Si	Si255	0.723726	0.441179	0.300312
Si	Si256	0.829262	0.549240	0.802324
Si	Si257	0.721016	0.050245	0.285455
Si	Si258	0.446165	0.824342	0.184467
Si	Si259	0.096272	0.323020	0.693947
Si	Si260	0.449924	0.667817	0.185972
Si	Si261	0.094243	0.165944	0.697849
Si	Si262	0.593758	0.167835	0.796317
Si	Si263	0.954205	0.667992	0.297390
Si	Si264	0.596663	0.326183	0.799566
Si	Si265	0.953408	0.826026	0.291456
Si	Si266	0.342068	0.867979	0.333592
Si	Si267	0.207840	0.368559	0.835505
Si	Si268	0.342778	0.623108	0.333329
Si	Si269	0.205265	0.121906	0.835811
Si	Si270	0.706980	0.131450	0.647530
Si	Si271	0.845059	0.616929	0.153797
Si	Si272	0.709198	0.360145	0.647695
Si	Si273	0.848763	0.872758	0.142974
Si	Si274	0.294412	0.825183	0.539458
Si	Si275	0.256366	0.324614	0.042547
Si	Si276	0.294887	0.665772	0.538836
Si	Si277	0.256782	0.164815	0.043109
Si	Si278	0.752828	0.166561	0.436790
Si	Si279	0.794274	0.664332	0.945939
Si	Si280	0.751439	0.321572	0.435426
Si	Si281	0.793311	0.819136	0.942107
Si	Si282	0.142346	0.822510	0.535678
Si	Si283	0.408883	0.323321	0.038524
Si	Si284	0.142777	0.664911	0.535924
Si	Si285	0.409533	0.165928	0.038450
Si	Si286	0.905939	0.170472	0.457187
Si	Si287	0.640045	0.667601	0.941829
Si	Si288	0.904658	0.322255	0.457334
Si	Si289	0.640743	0.822247	0.941082
Si	Si290	0.098132	0.870664	0.326350
Si	Si291	0.450288	0.366929	0.824287
Si	Si292	0.098393	0.620783	0.324656
Si	Si293	0.449444	0.123542	0.823213
Si	Si294	0.951035	0.120280	0.663974

Si	Si295	0.595883	0.624073	0.155790
Si	Si296	0.951697	0.369593	0.666742
Si	Si297	0.593671	0.865145	0.149858
Si	Si298	0.220131	0.821475	0.201829
Si	Si299	0.327952	0.320645	0.700338
Si	Si300	0.221223	0.670552	0.202826
Si	Si301	0.324867	0.170070	0.699776
Si	Si302	0.827463	0.166879	0.784248
Si	Si303	0.828735	0.320866	0.785259
Zn	Zn304	0.760905	0.831759	0.716887
Zn	Zn305	0.658414	0.802047	0.495635

C₄H₈-Phys.Ads-ZnH-OH-ZnOZn²⁺(Fig. 4/M4) Total energy = -1930.66256420 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.810202	0.735191	0.597591
H	H2	0.556035	0.697773	0.423233
H	H3	0.524522	0.776689	0.370478
H	H4	0.464661	0.799892	0.522434
H	H5	0.660088	0.730428	0.546794
H	H6	0.529055	0.669346	0.596261
H	H7	0.445849	0.688319	0.617658
H	H8	0.561689	0.770755	0.696716
H	H9	0.510556	0.717179	0.767045
H	H10	0.477714	0.790850	0.713834
C	C11	0.526367	0.742397	0.432581
C	C12	0.493863	0.754417	0.516729
C	C13	0.494574	0.710771	0.607286
C	C14	0.512222	0.749657	0.701836
O	O15	0.524186	0.040592	0.216924

0	016	0.018814	0.553834	0.705904
0	017	0.525592	0.446139	0.214348
0	018	0.019012	0.937564	0.699099
0	019	0.519506	0.946338	0.795510
0	020	0.022461	0.455455	0.290863
0	021	0.516341	0.542107	0.784664
0	022	0.024537	0.037730	0.291577
0	023	0.406061	0.059033	0.291233
0	024	0.133267	0.551280	0.793196
0	025	0.406260	0.433054	0.288697
0	026	0.133762	0.937754	0.789383
0	027	0.630490	0.956033	0.702878
0	028	0.905367	0.433766	0.214270
0	029	0.635196	0.526646	0.718092
0	030	0.909076	0.059738	0.211538
0	031	0.441744	0.125307	0.129926
0	032	0.116483	0.626880	0.634255
0	033	0.441528	0.363500	0.129489
0	034	0.114719	0.861930	0.631847
0	035	0.620192	0.868754	0.847540
0	036	0.940608	0.374213	0.381725
0	037	0.609993	0.621433	0.851391
0	038	0.943509	0.122525	0.377430
0	039	0.420284	0.994841	0.120780
0	040	0.119822	0.495582	0.614972
0	041	0.423363	0.493697	0.115483
0	042	0.122317	0.992919	0.611106
0	043	0.624488	0.998328	0.888908
0	044	0.914767	0.504691	0.378762
0	045	0.607500	0.493523	0.905220
0	046	0.916361	0.993145	0.380461
0	047	0.342638	0.037145	0.457970
0	048	0.200668	0.541057	0.957937
0	049	0.342137	0.453956	0.456347
0	050	0.197561	0.951799	0.956466
0	051	0.696031	0.941985	0.538816
0	052	0.837317	0.425313	0.048230
0	053	0.705331	0.553183	0.559598
0	054	0.841681	0.065519	0.045489
0	055	0.337000	0.948016	0.310413
0	056	0.213598	0.448542	0.815508
0	057	0.336845	0.543649	0.309210
0	058	0.210945	0.042952	0.812291
0	059	0.720728	0.047247	0.659177

0	060	0.854566	0.543100	0.133075
0	061	0.725943	0.440114	0.657442
0	062	0.859786	0.948232	0.134389
0	063	0.275090	0.062029	0.293859
0	064	0.263026	0.567878	0.789077
0	065	0.275019	0.428850	0.292925
0	066	0.264525	0.924641	0.790961
0	067	0.759203	0.926579	0.706621
0	068	0.775915	0.453051	0.215889
0	069	0.761522	0.554609	0.737076
0	070	0.780375	0.039021	0.211123
0	071	0.322674	0.118550	0.608133
0	072	0.225142	0.619389	0.110535
0	073	0.321359	0.373002	0.606975
0	074	0.226667	0.872313	0.106810
0	075	0.722611	0.854902	0.399205
0	076	0.805136	0.354372	0.889692
0	077	0.709219	0.615485	0.390507
0	078	0.805716	0.132196	0.887886
0	079	0.222574	0.053156	0.526881
0	080	0.321260	0.548497	0.027251
0	081	0.221372	0.439102	0.525103
0	082	0.318412	0.948299	0.022051
0	083	0.817336	0.934207	0.468909
0	084	0.720592	0.442426	0.964070
0	085	0.820651	0.571009	0.474517
0	086	0.715747	0.065912	0.991059
0	087	0.311896	0.988412	0.634054
0	088	0.227693	0.488340	0.132361
0	089	0.310108	0.503261	0.631985
0	090	0.225098	0.002660	0.133427
0	091	0.718699	0.984738	0.359275
0	092	0.827719	0.483848	0.872579
0	093	0.735989	0.485607	0.396931
0	094	0.801758	0.998911	0.886330
0	095	0.126905	0.125802	0.605519
0	096	0.417537	0.625434	0.095844
0	097	0.126000	0.363721	0.598956
0	098	0.406673	0.863881	0.093509
0	099	0.910219	0.860529	0.381888
0	0100	0.626813	0.361717	0.897714
0	0101	0.918741	0.637471	0.394027
0	0102	0.623234	0.131174	0.894335
0	0103	0.104911	0.057798	0.442634

0	0104	0.438355	0.550230	0.940497
0	0105	0.103747	0.437382	0.440879
0	0106	0.437414	0.942688	0.943832
0	0107	0.936074	0.925392	0.548228
0	0108	0.612858	0.423309	0.070912
0	0109	0.940111	0.565225	0.551237
0	0110	0.593027	0.061250	0.054254
0	0111	0.147679	0.068839	0.257005
0	0112	0.391363	0.563346	0.757742
0	0113	0.146938	0.424012	0.255122
0	0114	0.393625	0.927451	0.759171
0	0115	0.893584	0.953621	0.730828
0	0116	0.649832	0.451256	0.257470
0	0117	0.891455	0.547619	0.731462
0	0118	0.651478	0.056081	0.230254
0	0119	0.119181	0.949936	0.329963
0	0120	0.430038	0.445223	0.821675
0	0121	0.117710	0.543152	0.323206
0	0122	0.433887	0.045519	0.818950
0	0123	0.959143	0.043995	0.624357
0	0124	0.599411	0.544915	0.141958
0	0125	0.953568	0.448890	0.636326
0	0126	0.605320	0.945777	0.147357
0	0127	0.231093	0.134963	0.146218
0	0128	0.317111	0.635403	0.642899
0	0129	0.229711	0.355916	0.145577
0	0130	0.318192	0.856198	0.644027
0	0131	0.819308	0.856804	0.833988
0	0132	0.726956	0.361592	0.340532
0	0133	0.832347	0.616243	0.870706
0	0134	0.731261	0.118056	0.348648
0	0135	0.520069	0.851172	0.191192
0	0136	0.020227	0.347356	0.714242
0	0137	0.527196	0.647739	0.201705
0	0138	0.019194	0.144794	0.716516
0	0139	0.520475	0.140573	0.773369
0	0140	0.026457	0.634268	0.280701
0	0141	0.522877	0.355700	0.778057
0	0142	0.024114	0.864099	0.284301
0	0143	0.408307	0.838509	0.286798
0	0144	0.137953	0.341524	0.793163
0	0145	0.412283	0.650961	0.288762
0	0146	0.135509	0.151285	0.798754
0	0147	0.639252	0.148679	0.700123

0	0148	0.911366	0.654490	0.199803
0	0149	0.640886	0.344025	0.702308
0	0150	0.915829	0.835129	0.187316
0	0151	0.443765	0.745697	0.157039
0	0152	0.098965	0.245424	0.670440
0	0153	0.594281	0.246893	0.815761
0	0154	0.963973	0.748448	0.316801
0	0155	0.340454	0.855580	0.450731
0	0156	0.211454	0.353987	0.952433
0	0157	0.340989	0.635851	0.450149
0	0158	0.212448	0.135126	0.952992
0	0159	0.707348	0.148732	0.534983
0	0160	0.827531	0.661673	0.055545
0	0161	0.706369	0.337537	0.534331
0	0162	0.843863	0.839553	0.026597
0	0163	0.277422	0.833354	0.281167
0	0164	0.268177	0.332562	0.778211
0	0165	0.282438	0.660949	0.277993
0	0166	0.264494	0.159695	0.775616
0	0167	0.769122	0.164825	0.705550
0	0168	0.784824	0.629752	0.235189
0	0169	0.770204	0.321705	0.704812
0	0170	0.786318	0.848305	0.205075
0	0171	0.302763	0.745644	0.543167
0	0172	0.249728	0.244991	0.046672
0	0173	0.745404	0.242239	0.408771
0	0174	0.801291	0.740537	0.905628
0	0175	0.218755	0.845336	0.515626
0	0176	0.332576	0.345929	0.023410
0	0177	0.218753	0.645230	0.513353
0	0178	0.333245	0.143953	0.022671
0	0179	0.830099	0.149241	0.467312
0	0180	0.717047	0.644807	0.955922
0	0181	0.826734	0.340970	0.464044
0	0182	0.720517	0.837625	0.964254
0	0183	0.138085	0.744635	0.560055
0	0184	0.413896	0.244674	0.063762
0	0185	0.913395	0.247165	0.415592
0	0186	0.636514	0.744891	0.904872
0	0187	0.099909	0.840833	0.437853
0	0188	0.448621	0.338911	0.935761
0	0189	0.098113	0.646849	0.441516
0	0190	0.450066	0.150260	0.936921
0	0191	0.940465	0.167049	0.564886

O	O192	0.600398	0.657507	0.041362
O	O193	0.937043	0.327729	0.566100
O	O194	0.598237	0.837488	0.036193
O	O195	0.148735	0.832299	0.254453
O	O196	0.397091	0.327359	0.754084
O	O197	0.152921	0.662628	0.263098
O	O198	0.393533	0.163764	0.760092
O	O199	0.891896	0.126430	0.740117
O	O200	0.656769	0.652337	0.218321
O	O201	0.892865	0.360004	0.746339
O	O202	0.646913	0.829345	0.219369
O	O203	0.223683	0.746473	0.158205
O	O204	0.320676	0.245760	0.654178
O	O205	0.848817	0.243044	0.806545
O	O206	0.730361	0.736518	0.323182
O	O207	0.793330	0.779690	0.585859
Al	Al208	0.823020	0.944272	0.796846
Al	Al209	0.722039	0.818964	0.275591
Si	Si210	0.739881	0.929645	0.439866
Si	Si211	0.720076	0.659577	0.290419
Si	Si212	0.448139	0.055089	0.189085
Si	Si213	0.097263	0.556688	0.686235
Si	Si214	0.449035	0.434142	0.186892
Si	Si215	0.097307	0.932999	0.682524
Si	Si216	0.597955	0.942728	0.811141
Si	Si217	0.945998	0.442139	0.317309
Si	Si218	0.592870	0.546026	0.815723
Si	Si219	0.948300	0.053257	0.315755
Si	Si220	0.340187	0.026598	0.338974
Si	Si221	0.202792	0.527155	0.839810
Si	Si222	0.340168	0.464850	0.337226
Si	Si223	0.201906	0.964154	0.837845
Si	Si224	0.700895	0.969168	0.651368
Si	Si225	0.843248	0.463927	0.153652
Si	Si226	0.706808	0.518378	0.667804
Si	Si227	0.847977	0.027329	0.150882
Si	Si228	0.299565	0.049220	0.557440
Si	Si229	0.244080	0.549399	0.058026
Si	Si230	0.298537	0.442232	0.555583
Si	Si231	0.241928	0.943673	0.055703
Si	Si232	0.797656	0.426230	0.943859
Si	Si233	0.743135	0.556219	0.454063
Si	Si234	0.791696	0.064818	0.951527
Si	Si235	0.144221	0.057390	0.547102

Si	Si236	0.399763	0.554491	0.045278
Si	Si237	0.143037	0.434051	0.545315
Si	Si238	0.395665	0.937304	0.045546
Si	Si239	0.895630	0.928204	0.444619
Si	Si240	0.641870	0.429788	0.959006
Si	Si241	0.898588	0.568562	0.448911
Si	Si242	0.639517	0.064005	0.956568
Si	Si243	0.098980	0.028549	0.330621
Si	Si244	0.443865	0.524879	0.826591
Si	Si245	0.097681	0.464704	0.327718
Si	Si246	0.445828	0.965804	0.829430
Si	Si247	0.950735	0.965152	0.652243
Si	Si248	0.597026	0.466408	0.170853
Si	Si249	0.950608	0.528406	0.657292
Si	Si250	0.593650	0.024906	0.162608
Si	Si251	0.219944	0.066327	0.207164
Si	Si252	0.320243	0.566499	0.705143
Si	Si253	0.219775	0.424994	0.206140
Si	Si254	0.321982	0.925021	0.707033
Si	Si255	0.722307	0.438045	0.301774
Si	Si256	0.828161	0.549521	0.803007
Si	Si257	0.720687	0.049666	0.287275
Si	Si258	0.445499	0.824676	0.181799
Si	Si259	0.095619	0.324347	0.694096
Si	Si260	0.450539	0.667759	0.185923
Si	Si261	0.094865	0.166912	0.697505
Si	Si262	0.594333	0.167283	0.795943
Si	Si263	0.955399	0.669344	0.297727
Si	Si264	0.596185	0.326677	0.798721
Si	Si265	0.953365	0.826983	0.292523
Si	Si266	0.340806	0.868684	0.332015
Si	Si267	0.207696	0.368987	0.834659
Si	Si268	0.343233	0.622927	0.331540
Si	Si269	0.205929	0.122187	0.835003
Si	Si270	0.708692	0.127514	0.650730
Si	Si271	0.844534	0.621823	0.156585
Si	Si272	0.710515	0.360694	0.649663
Si	Si273	0.849232	0.867898	0.140679
Si	Si274	0.294910	0.825456	0.538690
Si	Si275	0.256073	0.324888	0.042184
Si	Si276	0.294730	0.665952	0.537186
Si	Si277	0.256894	0.165117	0.042150
Si	Si278	0.753659	0.164689	0.439761
Si	Si279	0.794258	0.664799	0.947090

Si	Si280	0.751229	0.320371	0.437446
Si	Si281	0.796230	0.818659	0.936901
Si	Si282	0.142827	0.823325	0.535817
Si	Si283	0.409024	0.323202	0.037796
Si	Si284	0.142837	0.665884	0.537089
Si	Si285	0.409790	0.165960	0.038240
Si	Si286	0.906984	0.170927	0.455715
Si	Si287	0.640719	0.667269	0.938753
Si	Si288	0.904557	0.322855	0.456401
Si	Si289	0.643002	0.822358	0.940083
Si	Si290	0.098261	0.871775	0.326288
Si	Si291	0.449543	0.366807	0.822445
Si	Si292	0.099030	0.621781	0.326702
Si	Si293	0.449327	0.124799	0.822428
Si	Si294	0.952254	0.120478	0.661987
Si	Si295	0.596178	0.625412	0.151918
Si	Si296	0.950961	0.370559	0.665981
Si	Si297	0.594099	0.865263	0.150729
Si	Si298	0.219245	0.822235	0.200186
Si	Si299	0.326770	0.320863	0.698162
Si	Si300	0.221197	0.671251	0.202263
Si	Si301	0.325238	0.170783	0.699276
Si	Si302	0.829115	0.166059	0.785297
Si	Si303	0.829057	0.319937	0.786578
Zn	Zn304	0.790333	0.830170	0.699440
Zn	Zn305	0.706351	0.771656	0.483048

ZnH-OH-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/M5) Total energy = -1869.06417743 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.740267	0.729084	0.624445
H	H2	0.613246	0.745393	0.489926
O	O3	0.524730	0.041791	0.216781
O	O4	0.019725	0.552355	0.708226
O	O5	0.526725	0.443374	0.213287
O	O6	0.018791	0.936382	0.697358
O	O7	0.519256	0.941074	0.797846
O	O8	0.024432	0.453197	0.289484
O	O9	0.516489	0.540746	0.785464
O	O10	0.023667	0.036644	0.292555
O	O11	0.406187	0.058625	0.291501
O	O12	0.134080	0.551619	0.794890
O	O13	0.408276	0.433024	0.290898
O	O14	0.132981	0.937218	0.790334
O	O15	0.628246	0.957792	0.700776
O	O16	0.906639	0.431373	0.215270
O	O17	0.635440	0.530035	0.717705
O	O18	0.909107	0.063578	0.211393
O	O19	0.441271	0.125238	0.130338
O	O20	0.116439	0.626219	0.634850
O	O21	0.440167	0.362250	0.131238
O	O22	0.115390	0.860619	0.633290
O	O23	0.625365	0.868637	0.843852
O	O24	0.942929	0.373716	0.383563
O	O25	0.607784	0.621245	0.855841
O	O26	0.944088	0.122017	0.380149
O	O27	0.421238	0.994655	0.120716
O	O28	0.121476	0.494891	0.617367
O	O29	0.424178	0.492640	0.116506
O	O30	0.122956	0.991491	0.611444
O	O31	0.622901	0.997829	0.888231
O	O32	0.918104	0.504397	0.377807
O	O33	0.609020	0.492499	0.903414
O	O34	0.913089	0.993374	0.377371
O	O35	0.342560	0.036554	0.458260
O	O36	0.201453	0.539871	0.959569
O	O37	0.343258	0.453651	0.457975
O	O38	0.197216	0.951047	0.957341
O	O39	0.694523	0.939225	0.537672
O	O40	0.838107	0.423033	0.049481
O	O41	0.707564	0.556443	0.561449
O	O42	0.841230	0.067960	0.044633
O	O43	0.338450	0.947107	0.311038
O	O44	0.213153	0.447796	0.816445

0	045	0.338603	0.543420	0.310845
0	046	0.209660	0.042710	0.813582
0	047	0.717412	0.049236	0.649705
0	048	0.859533	0.541151	0.130181
0	049	0.723222	0.440700	0.654996
0	050	0.865222	0.951217	0.131220
0	051	0.275019	0.060496	0.293970
0	052	0.263752	0.566887	0.790929
0	053	0.277251	0.428226	0.293662
0	054	0.264018	0.924961	0.791897
0	055	0.756627	0.930472	0.706127
0	056	0.778126	0.455458	0.217018
0	057	0.762084	0.552745	0.739610
0	058	0.781324	0.037545	0.210529
0	059	0.321690	0.118674	0.607430
0	060	0.225607	0.618983	0.111246
0	061	0.322653	0.372275	0.608256
0	062	0.225946	0.871721	0.107980
0	063	0.718852	0.855651	0.394634
0	064	0.805125	0.354551	0.889277
0	065	0.716663	0.623608	0.397487
0	066	0.802632	0.132082	0.885516
0	067	0.222225	0.052498	0.526144
0	068	0.322102	0.548086	0.028962
0	069	0.222384	0.438031	0.526118
0	070	0.317966	0.948101	0.024901
0	071	0.816321	0.930907	0.467847
0	072	0.722052	0.443239	0.964714
0	073	0.823809	0.566899	0.477553
0	074	0.715694	0.063201	0.989729
0	075	0.311526	0.988743	0.634976
0	076	0.228671	0.488122	0.134439
0	077	0.310639	0.502415	0.633652
0	078	0.223427	0.002011	0.134248
0	079	0.719238	0.987460	0.361682
0	080	0.830252	0.484089	0.875102
0	081	0.733132	0.491018	0.394655
0	082	0.804284	0.998733	0.885574
0	083	0.126475	0.124407	0.606361
0	084	0.418359	0.624521	0.098668
0	085	0.126222	0.363164	0.598515
0	086	0.406081	0.863607	0.097126
0	087	0.910886	0.860477	0.380747
0	088	0.630093	0.361228	0.895540

0	089	0.919476	0.636805	0.394430
0	090	0.625061	0.130497	0.891465
0	091	0.104017	0.056511	0.443504
0	092	0.439041	0.550177	0.942010
0	093	0.104611	0.438679	0.442031
0	094	0.436152	0.940442	0.944768
0	095	0.935810	0.926586	0.545750
0	096	0.613377	0.421892	0.068702
0	097	0.943657	0.564219	0.551087
0	098	0.593081	0.062455	0.053117
0	099	0.147258	0.068954	0.258461
0	0100	0.391753	0.563016	0.759182
0	0101	0.149200	0.422621	0.257593
0	0102	0.393017	0.927025	0.759410
0	0103	0.893299	0.950979	0.729635
0	0104	0.651172	0.453456	0.253165
0	0105	0.891912	0.547175	0.730564
0	0106	0.652404	0.055917	0.228535
0	0107	0.119026	0.949457	0.329044
0	0108	0.429650	0.444854	0.823655
0	0109	0.118146	0.542583	0.320586
0	0110	0.436935	0.043454	0.820160
0	0111	0.958469	0.043566	0.626134
0	0112	0.595665	0.543809	0.136035
0	0113	0.954189	0.448073	0.637096
0	0114	0.604407	0.946661	0.145295
0	0115	0.231201	0.134173	0.146897
0	0116	0.317031	0.634618	0.644196
0	0117	0.231492	0.355677	0.146050
0	0118	0.316432	0.856424	0.644733
0	0119	0.811874	0.856479	0.833004
0	0120	0.727655	0.365503	0.341204
0	0121	0.833167	0.616665	0.869939
0	0122	0.731884	0.119946	0.344926
0	0123	0.520578	0.851361	0.191958
0	0124	0.020984	0.346632	0.714842
0	0125	0.528075	0.647581	0.203985
0	0126	0.018806	0.144603	0.717008
0	0127	0.520873	0.140086	0.773436
0	0128	0.026807	0.634296	0.280384
0	0129	0.524027	0.356954	0.779585
0	0130	0.024645	0.863068	0.282851
0	0131	0.409626	0.836986	0.289865
0	0132	0.139138	0.339854	0.792348

0	0133	0.413045	0.651872	0.291249
0	0134	0.135252	0.151543	0.799080
0	0135	0.638845	0.151179	0.697394
0	0136	0.911152	0.653962	0.200138
0	0137	0.640837	0.342240	0.700202
0	0138	0.915738	0.835529	0.186160
0	0139	0.444850	0.745332	0.158030
0	0140	0.098968	0.244619	0.669056
0	0141	0.593571	0.246887	0.816729
0	0142	0.963565	0.748135	0.315681
0	0143	0.340355	0.854899	0.451961
0	0144	0.211151	0.352910	0.953032
0	0145	0.341231	0.635859	0.451517
0	0146	0.211914	0.135230	0.953662
0	0147	0.706280	0.153250	0.530914
0	0148	0.827074	0.659494	0.056197
0	0149	0.707204	0.337124	0.533007
0	0150	0.843799	0.842648	0.025476
0	0151	0.278742	0.832789	0.281097
0	0152	0.269604	0.332589	0.779887
0	0153	0.283027	0.660046	0.278717
0	0154	0.264409	0.158854	0.776232
0	0155	0.769225	0.164358	0.701622
0	0156	0.785324	0.622185	0.234166
0	0157	0.770661	0.323527	0.703730
0	0158	0.787094	0.857019	0.205001
0	0159	0.302616	0.745188	0.545158
0	0160	0.250218	0.244439	0.048050
0	0161	0.746962	0.244480	0.403401
0	0162	0.802382	0.740760	0.908775
0	0163	0.218231	0.844038	0.514515
0	0164	0.332855	0.345254	0.021178
0	0165	0.218877	0.644755	0.514326
0	0166	0.333010	0.143068	0.022379
0	0167	0.829488	0.150061	0.465953
0	0168	0.717340	0.645116	0.953120
0	0169	0.827811	0.342162	0.463041
0	0170	0.719227	0.834977	0.970783
0	0171	0.137069	0.743702	0.558756
0	0172	0.413619	0.243969	0.062850
0	0173	0.913839	0.247045	0.416388
0	0174	0.635225	0.744860	0.904352
0	0175	0.098706	0.841470	0.439123
0	0176	0.450110	0.338831	0.937261

O	O177	0.098372	0.644720	0.441729
O	O178	0.450091	0.149033	0.937049
O	O179	0.938978	0.166778	0.566626
O	O180	0.603629	0.659961	0.046371
O	O181	0.937076	0.326863	0.567451
O	O182	0.594729	0.839931	0.031860
O	O183	0.149802	0.831134	0.257381
O	O184	0.398546	0.326594	0.755508
O	O185	0.153432	0.662528	0.263922
O	O186	0.393498	0.160619	0.760150
O	O187	0.891403	0.126031	0.741771
O	O188	0.657157	0.644013	0.225063
O	O189	0.893735	0.359301	0.747673
O	O190	0.648304	0.829964	0.212260
O	O191	0.224437	0.745935	0.159124
O	O192	0.321759	0.245159	0.656354
O	O193	0.847157	0.242832	0.805538
O	O194	0.735349	0.736993	0.303804
O	O195	0.740658	0.775832	0.606280
Al	Al196	0.822432	0.943365	0.794987
Al	Al197	0.723549	0.819980	0.269271
Si	Si198	0.738955	0.929291	0.437993
Si	Si199	0.723368	0.658998	0.288557
Si	Si200	0.448344	0.055091	0.189359
Si	Si201	0.098060	0.556130	0.687864
Si	Si202	0.449689	0.432939	0.187816
Si	Si203	0.097263	0.931859	0.682855
Si	Si204	0.597997	0.941867	0.810126
Si	Si205	0.948062	0.440896	0.317363
Si	Si206	0.592852	0.546174	0.816415
Si	Si207	0.947602	0.053788	0.315830
Si	Si208	0.340456	0.025783	0.339248
Si	Si209	0.203267	0.526457	0.841326
Si	Si210	0.341905	0.464583	0.338864
Si	Si211	0.201082	0.963840	0.838823
Si	Si212	0.698347	0.971216	0.647969
Si	Si213	0.845476	0.462799	0.153811
Si	Si214	0.706950	0.519366	0.668065
Si	Si215	0.849332	0.029447	0.149575
Si	Si216	0.299135	0.048959	0.557322
Si	Si217	0.244876	0.548856	0.059457
Si	Si218	0.299501	0.441489	0.556976
Si	Si219	0.241206	0.943085	0.056976
Si	Si220	0.798979	0.426071	0.944741

Si	Si221	0.745572	0.559392	0.455714
Si	Si222	0.791676	0.064504	0.950145
Si	Si223	0.143945	0.056243	0.547439
Si	Si224	0.400620	0.553880	0.047037
Si	Si225	0.143965	0.433835	0.546293
Si	Si226	0.395272	0.936540	0.047455
Si	Si227	0.894884	0.928036	0.442674
Si	Si228	0.643600	0.429258	0.957710
Si	Si229	0.901220	0.567393	0.449509
Si	Si230	0.639508	0.063525	0.955237
Si	Si231	0.098377	0.027915	0.331079
Si	Si232	0.444041	0.524465	0.828145
Si	Si233	0.099087	0.464022	0.327794
Si	Si234	0.445919	0.963398	0.830646
Si	Si235	0.950349	0.964272	0.651471
Si	Si236	0.596999	0.465708	0.167727
Si	Si237	0.951844	0.527671	0.657811
Si	Si238	0.593783	0.025788	0.161387
Si	Si239	0.219405	0.065695	0.208033
Si	Si240	0.320660	0.565830	0.706571
Si	Si241	0.221626	0.424366	0.207505
Si	Si242	0.321222	0.925089	0.707638
Si	Si243	0.722865	0.441598	0.300827
Si	Si244	0.829489	0.549086	0.803860
Si	Si245	0.721576	0.050458	0.285895
Si	Si246	0.446179	0.824165	0.184007
Si	Si247	0.096217	0.323476	0.693615
Si	Si248	0.451482	0.667518	0.187922
Si	Si249	0.094566	0.166339	0.697580
Si	Si250	0.594575	0.167553	0.794898
Si	Si251	0.955468	0.668862	0.297689
Si	Si252	0.597021	0.326508	0.798209
Si	Si253	0.953532	0.826640	0.291123
Si	Si254	0.341771	0.867807	0.333301
Si	Si255	0.208167	0.368174	0.835208
Si	Si256	0.343961	0.622798	0.333000
Si	Si257	0.205417	0.122034	0.835722
Si	Si258	0.707544	0.129993	0.645822
Si	Si259	0.845690	0.618992	0.156120
Si	Si260	0.710184	0.360860	0.648077
Si	Si261	0.850762	0.871550	0.139439
Si	Si262	0.294336	0.824916	0.539423
Si	Si263	0.256575	0.324296	0.042220
Si	Si264	0.294781	0.665511	0.538744

Si	Si265	0.256818	0.164543	0.042823
Si	Si266	0.753732	0.167010	0.435974
Si	Si267	0.794855	0.664373	0.947336
Si	Si268	0.752259	0.322159	0.435578
Si	Si269	0.794896	0.818751	0.939227
Si	Si270	0.142301	0.822530	0.535918
Si	Si271	0.409114	0.322606	0.037853
Si	Si272	0.142691	0.664838	0.537237
Si	Si273	0.409517	0.165234	0.037951
Si	Si274	0.906739	0.170953	0.456725
Si	Si275	0.640664	0.667559	0.940690
Si	Si276	0.905463	0.322810	0.457150
Si	Si277	0.642356	0.822210	0.940044
Si	Si278	0.098278	0.871203	0.326754
Si	Si279	0.450472	0.366813	0.823936
Si	Si280	0.099296	0.621108	0.326259
Si	Si281	0.450048	0.123124	0.822803
Si	Si282	0.951627	0.120083	0.663344
Si	Si283	0.596704	0.623869	0.154123
Si	Si284	0.951614	0.369859	0.666978
Si	Si285	0.593543	0.866134	0.147864
Si	Si286	0.219813	0.821565	0.201481
Si	Si287	0.328055	0.320371	0.699802
Si	Si288	0.221753	0.670719	0.203102
Si	Si289	0.325228	0.169764	0.699935
Si	Si290	0.827814	0.165862	0.783854
Si	Si291	0.828952	0.320174	0.786213
Zn	Zn292	0.766086	0.830869	0.709165
Zn	Zn293	0.676167	0.785506	0.479635

TS-H₂-Dis-ZnOZn²⁺ (Fig. 4/TS4) Total energy = -1867.77232936 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

H	H1	0.680502	0.745974	0.590109
H	H2	0.646771	0.736606	0.541641
O	O3	0.524681	0.040691	0.215276
O	O4	0.019599	0.552424	0.708034
O	O5	0.525842	0.446275	0.212304
O	O6	0.018507	0.935860	0.696148
O	O7	0.518877	0.940978	0.796528
O	O8	0.023824	0.454114	0.289773
O	O9	0.516199	0.540020	0.785932
O	O10	0.024056	0.037244	0.291716
O	O11	0.406654	0.058116	0.291354
O	O12	0.133737	0.550673	0.794909
O	O13	0.407775	0.432435	0.290263
O	O14	0.132371	0.937413	0.790187
O	O15	0.627587	0.956975	0.697956
O	O16	0.905494	0.434189	0.216182
O	O17	0.635444	0.529425	0.720021
O	O18	0.910064	0.060768	0.207626
O	O19	0.441168	0.124440	0.129574
O	O20	0.116832	0.626504	0.636257
O	O21	0.441524	0.362148	0.130864
O	O22	0.115990	0.861212	0.632569
O	O23	0.624676	0.868248	0.841728
O	O24	0.942162	0.374056	0.382652
O	O25	0.606579	0.621504	0.856557
O	O26	0.942970	0.123470	0.374674
O	O27	0.420611	0.993824	0.120785
O	O28	0.121110	0.495291	0.616315
O	O29	0.421741	0.491884	0.115588
O	O30	0.122591	0.992304	0.611775
O	O31	0.623062	0.997408	0.885441
O	O32	0.917856	0.504891	0.380047
O	O33	0.608323	0.493165	0.906045
O	O34	0.913506	0.994682	0.377263
O	O35	0.342693	0.036516	0.458038
O	O36	0.201306	0.539940	0.959245
O	O37	0.343309	0.453409	0.457763
O	O38	0.196681	0.951131	0.957156
O	O39	0.693810	0.945668	0.533164
O	O40	0.837644	0.426093	0.050672
O	O41	0.707731	0.554037	0.563710

0	042	0.842890	0.062884	0.039823
0	043	0.338123	0.947051	0.310989
0	044	0.213819	0.447691	0.816418
0	045	0.338971	0.543289	0.310753
0	046	0.209205	0.042813	0.813464
0	047	0.717504	0.049213	0.656716
0	048	0.853749	0.543939	0.136754
0	049	0.724519	0.440447	0.661217
0	050	0.858765	0.948459	0.137792
0	051	0.275537	0.060770	0.293420
0	052	0.263318	0.567054	0.790223
0	053	0.276610	0.428523	0.293941
0	054	0.263360	0.924950	0.791431
0	055	0.756021	0.928035	0.701416
0	056	0.775854	0.453783	0.218112
0	057	0.761919	0.553761	0.742707
0	058	0.780952	0.043893	0.206502
0	059	0.321327	0.118589	0.607043
0	060	0.223397	0.618858	0.111872
0	061	0.322078	0.372085	0.607984
0	062	0.226119	0.871802	0.107600
0	063	0.719970	0.859267	0.390962
0	064	0.807063	0.353830	0.892732
0	065	0.712546	0.620263	0.398932
0	066	0.803658	0.129556	0.883814
0	067	0.222143	0.052147	0.525201
0	068	0.321585	0.550979	0.028835
0	069	0.222307	0.438553	0.525521
0	070	0.317615	0.948286	0.023439
0	071	0.816289	0.932936	0.467345
0	072	0.722205	0.443209	0.962899
0	073	0.823116	0.569170	0.476202
0	074	0.716158	0.061737	0.988428
0	075	0.311213	0.988722	0.634693
0	076	0.229634	0.487985	0.133591
0	077	0.310736	0.502274	0.633455
0	078	0.223545	0.002038	0.134071
0	079	0.721378	0.988980	0.355655
0	080	0.831143	0.482873	0.873608
0	081	0.734379	0.489353	0.397059
0	082	0.802204	0.995987	0.881204
0	083	0.127454	0.125233	0.605739
0	084	0.420026	0.624053	0.099389
0	085	0.126574	0.363475	0.598330

0	086	0.404857	0.863004	0.095865
0	087	0.909081	0.861817	0.377298
0	088	0.628442	0.361535	0.898912
0	089	0.919835	0.637420	0.394061
0	090	0.625444	0.130054	0.891724
0	091	0.103715	0.057037	0.443483
0	092	0.438707	0.550144	0.942146
0	093	0.104614	0.438569	0.441303
0	094	0.436295	0.940305	0.944461
0	095	0.936307	0.926047	0.543649
0	096	0.615130	0.423619	0.071665
0	097	0.942684	0.565398	0.552212
0	098	0.593127	0.060154	0.051250
0	099	0.147715	0.069093	0.258717
0	0100	0.391480	0.562725	0.759402
0	0101	0.148617	0.423503	0.256225
0	0102	0.392427	0.927239	0.759611
0	0103	0.892828	0.951058	0.727125
0	0104	0.649491	0.452784	0.258490
0	0105	0.891879	0.549055	0.731927
0	0106	0.651822	0.058395	0.227061
0	0107	0.119057	0.949808	0.329612
0	0108	0.428984	0.444522	0.824497
0	0109	0.118028	0.543025	0.320644
0	0110	0.436944	0.043513	0.820377
0	0111	0.958923	0.043071	0.624182
0	0112	0.599404	0.545577	0.141209
0	0113	0.952314	0.448836	0.638194
0	0114	0.606984	0.946186	0.149058
0	0115	0.231216	0.134220	0.146595
0	0116	0.317327	0.634455	0.643822
0	0117	0.231004	0.355635	0.146346
0	0118	0.316236	0.856508	0.644437
0	0119	0.812123	0.854725	0.828791
0	0120	0.726467	0.364180	0.344096
0	0121	0.833750	0.615146	0.875738
0	0122	0.730925	0.122156	0.344520
0	0123	0.519826	0.852404	0.189118
0	0124	0.021319	0.348198	0.714574
0	0125	0.528907	0.648521	0.205872
0	0126	0.019167	0.144139	0.715328
0	0127	0.521161	0.140058	0.773729
0	0128	0.027587	0.635627	0.280731
0	0129	0.523756	0.356980	0.780272

0	0130	0.024406	0.864009	0.282920
0	0131	0.409493	0.837194	0.288932
0	0132	0.139279	0.340075	0.792304
0	0133	0.413676	0.651688	0.291845
0	0134	0.135404	0.152119	0.798484
0	0135	0.639155	0.152784	0.698096
0	0136	0.912482	0.654934	0.199506
0	0137	0.641130	0.342339	0.703744
0	0138	0.916740	0.834932	0.183463
0	0139	0.445092	0.745286	0.158105
0	0140	0.098376	0.245170	0.668962
0	0141	0.593019	0.246934	0.819517
0	0142	0.963378	0.749160	0.316457
0	0143	0.340638	0.854593	0.451579
0	0144	0.211518	0.353026	0.953140
0	0145	0.340896	0.635921	0.451010
0	0146	0.211671	0.135424	0.953450
0	0147	0.706583	0.150409	0.531968
0	0148	0.824807	0.661975	0.059173
0	0149	0.707677	0.338196	0.536969
0	0150	0.844834	0.843207	0.021243
0	0151	0.278517	0.832717	0.281001
0	0152	0.269668	0.332194	0.779991
0	0153	0.284066	0.660012	0.276739
0	0154	0.264744	0.158604	0.776447
0	0155	0.769528	0.165575	0.701717
0	0156	0.786895	0.632886	0.241180
0	0157	0.770736	0.322611	0.707891
0	0158	0.787189	0.844910	0.199721
0	0159	0.302866	0.745157	0.545249
0	0160	0.250228	0.244492	0.048015
0	0161	0.747135	0.244606	0.408890
0	0162	0.802045	0.740223	0.908445
0	0163	0.218415	0.843788	0.513499
0	0164	0.333014	0.345362	0.023023
0	0165	0.218787	0.644923	0.514637
0	0166	0.332886	0.143085	0.021924
0	0167	0.829757	0.149136	0.465747
0	0168	0.716607	0.644885	0.953682
0	0169	0.827788	0.343323	0.464884
0	0170	0.719699	0.835706	0.968272
0	0171	0.137035	0.743900	0.559044
0	0172	0.413587	0.243675	0.063887
0	0173	0.912794	0.247647	0.416355

O	O174	0.634890	0.745172	0.904878
O	O175	0.098759	0.841257	0.438598
O	O176	0.449484	0.337980	0.937038
O	O177	0.097979	0.644265	0.443380
O	O178	0.449881	0.149495	0.936623
O	O179	0.940542	0.165872	0.563320
O	O180	0.602945	0.660369	0.046368
O	O181	0.937789	0.327609	0.567144
O	O182	0.595285	0.841820	0.029976
O	O183	0.149495	0.831702	0.256627
O	O184	0.398482	0.326535	0.754759
O	O185	0.154401	0.663372	0.267063
O	O186	0.393790	0.160463	0.759197
O	O187	0.891780	0.126402	0.738759
O	O188	0.658175	0.650103	0.223867
O	O189	0.894160	0.358076	0.748335
O	O190	0.646618	0.826773	0.210365
O	O191	0.224076	0.746058	0.159011
O	O192	0.321594	0.244961	0.656012
O	O193	0.847883	0.241858	0.808449
O	O194	0.728101	0.739105	0.326089
O	O195	0.741269	0.765966	0.610063
Al	Al196	0.821014	0.941103	0.789817
Al	Al197	0.720973	0.820883	0.269257
Si	Si198	0.739040	0.932739	0.436002
Si	Si199	0.721123	0.660337	0.295028
Si	Si200	0.448281	0.054359	0.188707
Si	Si201	0.097894	0.556066	0.687865
Si	Si202	0.449163	0.433200	0.187120
Si	Si203	0.097020	0.932156	0.682398
Si	Si204	0.597799	0.941425	0.807474
Si	Si205	0.947462	0.441927	0.318088
Si	Si206	0.592362	0.546177	0.817870
Si	Si207	0.947706	0.054042	0.313293
Si	Si208	0.340683	0.025739	0.339053
Si	Si209	0.203223	0.526269	0.841069
Si	Si210	0.341696	0.464383	0.338674
Si	Si211	0.200528	0.963935	0.838566
Si	Si212	0.698341	0.971098	0.647053
Si	Si213	0.843262	0.464507	0.156121
Si	Si214	0.707394	0.519152	0.671825
Si	Si215	0.848487	0.028268	0.147905
Si	Si216	0.298983	0.048860	0.556883
Si	Si217	0.244383	0.549471	0.059307

Si	Si218	0.299379	0.441429	0.556698
Si	Si219	0.241004	0.943211	0.056431
Si	Si220	0.799445	0.426300	0.945088
Si	Si221	0.745123	0.557777	0.458285
Si	Si222	0.791851	0.061432	0.946876
Si	Si223	0.143964	0.056660	0.547192
Si	Si224	0.400186	0.554261	0.046967
Si	Si225	0.143911	0.434090	0.545701
Si	Si226	0.394786	0.936247	0.046491
Si	Si227	0.894655	0.929078	0.441361
Si	Si228	0.643559	0.429898	0.959375
Si	Si229	0.900912	0.568560	0.450198
Si	Si230	0.639963	0.062306	0.953694
Si	Si231	0.098499	0.028325	0.331099
Si	Si232	0.443663	0.524086	0.828436
Si	Si233	0.098735	0.464484	0.327385
Si	Si234	0.445862	0.963407	0.830218
Si	Si235	0.950204	0.963833	0.649734
Si	Si236	0.597515	0.466973	0.170481
Si	Si237	0.951112	0.528545	0.658696
Si	Si238	0.594191	0.025537	0.160820
Si	Si239	0.219679	0.065771	0.207839
Si	Si240	0.320551	0.565710	0.706349
Si	Si241	0.221383	0.424620	0.207152
Si	Si242	0.320793	0.925161	0.707524
Si	Si243	0.721778	0.440089	0.303682
Si	Si244	0.829689	0.549528	0.805739
Si	Si245	0.721479	0.053618	0.283205
Si	Si246	0.445613	0.824343	0.182754
Si	Si247	0.096249	0.324041	0.693482
Si	Si248	0.452080	0.667633	0.188663
Si	Si249	0.094757	0.166718	0.696850
Si	Si250	0.594731	0.167763	0.795851
Si	Si251	0.956176	0.669837	0.297904
Si	Si252	0.596542	0.326518	0.800835
Si	Si253	0.953345	0.827427	0.289783
Si	Si254	0.341633	0.867773	0.332968
Si	Si255	0.208404	0.368081	0.835252
Si	Si256	0.344251	0.622673	0.332648
Si	Si257	0.205317	0.122175	0.835462
Si	Si258	0.707802	0.129632	0.647995
Si	Si259	0.844700	0.622792	0.159203
Si	Si260	0.710761	0.360846	0.652520
Si	Si261	0.850042	0.867946	0.137188

Si	Si262	0.294455	0.824866	0.539107
Si	Si263	0.256590	0.324343	0.042699
Si	Si264	0.294772	0.665524	0.538665
Si	Si265	0.256727	0.164598	0.042494
Si	Si266	0.753759	0.166622	0.437825
Si	Si267	0.794082	0.664628	0.948779
Si	Si268	0.752196	0.322366	0.439418
Si	Si269	0.795202	0.818736	0.935610
Si	Si270	0.142446	0.822641	0.535474
Si	Si271	0.409267	0.322280	0.038455
Si	Si272	0.142662	0.664961	0.538261
Si	Si273	0.409420	0.165070	0.037762
Si	Si274	0.906691	0.170950	0.454609
Si	Si275	0.640208	0.667943	0.940508
Si	Si276	0.905261	0.323391	0.457418
Si	Si277	0.642771	0.822871	0.938128
Si	Si278	0.098200	0.871623	0.326624
Si	Si279	0.450052	0.366510	0.824063
Si	Si280	0.099647	0.621587	0.327565
Si	Si281	0.450181	0.123173	0.822533
Si	Si282	0.952177	0.119662	0.660941
Si	Si283	0.597438	0.625837	0.154925
Si	Si284	0.951429	0.370376	0.667287
Si	Si285	0.593278	0.866130	0.146384
Si	Si286	0.219619	0.821778	0.201171
Si	Si287	0.327882	0.320141	0.699452
Si	Si288	0.221635	0.670958	0.203424
Si	Si289	0.325272	0.169572	0.699641
Si	Si290	0.828430	0.165267	0.783471
Si	Si291	0.829805	0.319232	0.789103
Zn	Zn292	0.767678	0.824696	0.703841
Zn	Zn293	0.713677	0.772685	0.470269

C₄H₁₀-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 5/M1) Total energy = -1939.24721801 eV

data_

```

_audit_creation_method    'Materials Studio'
_cell_length_a            20.357621
_cell_length_b            20.050598
_cell_length_c            13.476578
_cell_angle_alpha        90.000000
_cell_angle_beta         90.000000
_cell_angle_gamma        90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'

```

loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.758272	0.753340	0.654768
H	H2	0.487878	0.647537	0.635141
H	H3	0.533516	0.592860	0.558697
H	H4	0.461941	0.632083	0.512026
H	H5	0.562705	0.688509	0.446183
H	H6	0.590614	0.702560	0.568825
H	H7	0.492143	0.774381	0.601276
H	H8	0.465237	0.761273	0.478699
H	H9	0.595160	0.829742	0.537053
H	H10	0.524101	0.870897	0.493442
H	H11	0.567582	0.816688	0.413648
C	C12	0.505136	0.639266	0.559133
C	C13	0.546176	0.698303	0.522543
C	C14	0.509395	0.765046	0.525226
C	C15	0.551430	0.823865	0.490477
O	O16	0.520382	0.035746	0.215936
O	O17	0.017695	0.541541	0.717889
O	O18	0.523982	0.440614	0.216277
O	O19	0.012262	0.935444	0.708162
O	O20	0.513463	0.947594	0.789541
O	O21	0.019037	0.455856	0.294131
O	O22	0.513529	0.539210	0.795796
O	O23	0.021057	0.040208	0.293547
O	O24	0.403802	0.056440	0.294265
O	O25	0.134941	0.556808	0.792430
O	O26	0.403203	0.432731	0.286007
O	O27	0.127870	0.940390	0.793781
O	O28	0.627426	0.944446	0.701878
O	O29	0.901909	0.436374	0.217528
O	O30	0.632720	0.536575	0.729291
O	O31	0.904394	0.043822	0.213293
O	O32	0.437878	0.121487	0.130809
O	O33	0.101402	0.623640	0.630527
O	O34	0.438980	0.363295	0.126168
O	O35	0.110514	0.864777	0.634807
O	O36	0.605084	0.863282	0.852815
O	O37	0.937575	0.371481	0.380131
O	O38	0.601186	0.618912	0.876670

0	039	0.931039	0.120634	0.370089
0	040	0.413618	0.992093	0.123618
0	041	0.121304	0.492942	0.621339
0	042	0.426725	0.494855	0.114710
0	043	0.110882	0.996178	0.616177
0	044	0.619412	0.992958	0.884625
0	045	0.912181	0.501704	0.386910
0	046	0.605983	0.487847	0.909466
0	047	0.920037	0.989605	0.391964
0	048	0.339664	0.038383	0.461751
0	049	0.196234	0.538076	0.960749
0	050	0.339843	0.451971	0.455318
0	051	0.196005	0.951840	0.958374
0	052	0.693583	0.940768	0.536601
0	053	0.838240	0.426369	0.048873
0	054	0.702983	0.537513	0.567557
0	055	0.838844	0.037860	0.043796
0	056	0.334663	0.946126	0.318066
0	057	0.203492	0.446112	0.816809
0	058	0.333451	0.542831	0.310025
0	059	0.207473	0.043836	0.814700
0	060	0.706226	0.045393	0.657138
0	061	0.849566	0.544558	0.132704
0	062	0.717184	0.437612	0.696672
0	063	0.828560	0.938872	0.175053
0	064	0.272673	0.060409	0.297010
0	065	0.265314	0.560672	0.797152
0	066	0.272715	0.427486	0.291501
0	067	0.257616	0.924426	0.788952
0	068	0.757971	0.930368	0.706895
0	069	0.772175	0.452459	0.212658
0	070	0.760528	0.557775	0.741311
0	071	0.775089	0.057294	0.211497
0	072	0.312954	0.119305	0.610814
0	073	0.224924	0.618800	0.109338
0	074	0.315254	0.371235	0.605384
0	075	0.219361	0.870498	0.108851
0	076	0.716454	0.873346	0.372772
0	077	0.806608	0.355459	0.892279
0	078	0.720951	0.631286	0.432144
0	079	0.810152	0.119055	0.895186
0	080	0.218649	0.043678	0.531860
0	081	0.315605	0.536648	0.035807
0	082	0.217641	0.437665	0.517637

0	083	0.317142	0.937126	0.021993
0	084	0.815051	0.932363	0.468500
0	085	0.720866	0.441827	0.966383
0	086	0.822703	0.560891	0.499126
0	087	0.715308	0.051166	0.985882
0	088	0.313779	0.988792	0.638623
0	089	0.215373	0.488692	0.139353
0	090	0.303006	0.501545	0.629717
0	091	0.229619	0.000597	0.133863
0	092	0.725851	0.004585	0.374336
0	093	0.827528	0.485345	0.873367
0	094	0.732771	0.504935	0.382371
0	095	0.799998	0.989104	0.870501
0	096	0.129102	0.127152	0.603492
0	097	0.401561	0.625180	0.103582
0	098	0.128025	0.360826	0.602151
0	099	0.410915	0.860858	0.098302
0	0100	0.907686	0.857007	0.388326
0	0101	0.628968	0.356907	0.904160
0	0102	0.911724	0.634141	0.403697
0	0103	0.622750	0.125097	0.901252
0	0104	0.103060	0.057348	0.443168
0	0105	0.428257	0.556552	0.941849
0	0106	0.095316	0.435871	0.449444
0	0107	0.438147	0.939664	0.947932
0	0108	0.930416	0.918419	0.557091
0	0109	0.614242	0.418369	0.075815
0	0110	0.945558	0.560407	0.557875
0	0111	0.594672	0.050016	0.057454
0	0112	0.145346	0.060539	0.256169
0	0113	0.391136	0.552991	0.752441
0	0114	0.143234	0.421349	0.267407
0	0115	0.387352	0.923695	0.768177
0	0116	0.885934	0.946495	0.738736
0	0117	0.646858	0.450007	0.261913
0	0118	0.890309	0.555449	0.737212
0	0119	0.646256	0.058494	0.239075
0	0120	0.110302	0.946484	0.336843
0	0121	0.429474	0.442400	0.843122
0	0122	0.114758	0.541935	0.335002
0	0123	0.426077	0.043252	0.826891
0	0124	0.947330	0.038179	0.630908
0	0125	0.594500	0.540380	0.139341
0	0126	0.938092	0.445911	0.651581

0	0127	0.608635	0.941718	0.170107
0	0128	0.224982	0.132616	0.150025
0	0129	0.315218	0.632423	0.650661
0	0130	0.221719	0.355458	0.148350
0	0131	0.313555	0.855843	0.645694
0	0132	0.818464	0.860271	0.844463
0	0133	0.730828	0.373541	0.356860
0	0134	0.828128	0.618639	0.879425
0	0135	0.720688	0.134768	0.348566
0	0136	0.521066	0.846283	0.204991
0	0137	0.021876	0.353216	0.717352
0	0138	0.513587	0.633993	0.205129
0	0139	0.018418	0.136253	0.709868
0	0140	0.517775	0.133809	0.783651
0	0141	0.019460	0.628202	0.291440
0	0142	0.522002	0.354451	0.789752
0	0143	0.020004	0.857700	0.285045
0	0144	0.406356	0.836431	0.292019
0	0145	0.139236	0.332127	0.793784
0	0146	0.401121	0.655497	0.295602
0	0147	0.133060	0.152532	0.796808
0	0148	0.634878	0.151295	0.707963
0	0149	0.907121	0.651641	0.207340
0	0150	0.638085	0.332448	0.710371
0	0151	0.907376	0.833042	0.195538
0	0152	0.444055	0.742777	0.162880
0	0153	0.089290	0.243836	0.668609
0	0154	0.586738	0.242246	0.832298
0	0155	0.958400	0.744395	0.323753
0	0156	0.335449	0.850449	0.452980
0	0157	0.207869	0.352388	0.955124
0	0158	0.331553	0.631838	0.456135
0	0159	0.205839	0.135451	0.956385
0	0160	0.702788	0.153084	0.542851
0	0161	0.825004	0.665407	0.062775
0	0162	0.706445	0.351489	0.546700
0	0163	0.832158	0.842145	0.037723
0	0164	0.275948	0.832422	0.279181
0	0165	0.270316	0.335788	0.784550
0	0166	0.270334	0.656908	0.286967
0	0167	0.263382	0.160512	0.784077
0	0168	0.765055	0.155014	0.716165
0	0169	0.780054	0.630513	0.240535
0	0170	0.768680	0.317833	0.711368

O	O171	0.777919	0.821212	0.214116
O	O172	0.298443	0.742834	0.551042
O	O173	0.243938	0.243591	0.052875
O	O174	0.740305	0.252073	0.425375
O	O175	0.794344	0.743226	0.914239
O	O176	0.213647	0.841596	0.518866
O	O177	0.327125	0.344136	0.031275
O	O178	0.212417	0.643337	0.530573
O	O179	0.326908	0.141597	0.027846
O	O180	0.822755	0.152371	0.469207
O	O181	0.713301	0.644884	0.966404
O	O182	0.828357	0.343212	0.479737
O	O183	0.712991	0.842553	0.961267
O	O184	0.131621	0.744158	0.572493
O	O185	0.406761	0.241767	0.074327
O	O186	0.909890	0.246190	0.419759
O	O187	0.630281	0.743232	0.919064
O	O188	0.094055	0.836667	0.442933
O	O189	0.439660	0.327159	0.935147
O	O190	0.098716	0.653659	0.438782
O	O191	0.442089	0.151206	0.939324
O	O192	0.937122	0.159468	0.560609
O	O193	0.600690	0.661220	0.064834
O	O194	0.943313	0.327505	0.566357
O	O195	0.595497	0.839936	0.045066
O	O196	0.146398	0.830372	0.261867
O	O197	0.397721	0.331981	0.747243
O	O198	0.142807	0.657809	0.252397
O	O199	0.392110	0.160587	0.756817
O	O200	0.891405	0.130197	0.742537
O	O201	0.638384	0.640126	0.252278
O	O202	0.895015	0.341673	0.749635
O	O203	0.648070	0.821247	0.223102
O	O204	0.219108	0.744585	0.161618
O	O205	0.317976	0.245940	0.659716
O	O206	0.836813	0.236545	0.825489
O	O207	0.717433	0.744193	0.343806
O	O208	0.745440	0.776712	0.594981
Al	Al209	0.712634	0.658412	0.303847
Si	Si210	0.444204	0.051628	0.190578
Si	Si211	0.094030	0.553650	0.689518
Si	Si212	0.447545	0.433025	0.185688
Si	Si213	0.090611	0.934367	0.687691
Si	Si214	0.591228	0.937143	0.808198

Si	Si215	0.942751	0.441380	0.320314
Si	Si216	0.589251	0.545757	0.829235
Si	Si217	0.943759	0.048719	0.317951
Si	Si218	0.337667	0.025252	0.343287
Si	Si219	0.200196	0.525161	0.842536
Si	Si220	0.337422	0.463701	0.336251
Si	Si221	0.197413	0.965088	0.839797
Si	Si222	0.696476	0.965150	0.650864
Si	Si223	0.840614	0.465613	0.154034
Si	Si224	0.703418	0.516907	0.683805
Si	Si225	0.836863	0.019208	0.160886
Si	Si226	0.295953	0.047765	0.561377
Si	Si227	0.238307	0.545817	0.062105
Si	Si228	0.294107	0.440481	0.552550
Si	Si229	0.240610	0.939962	0.056538
Si	Si230	0.738282	0.937477	0.437714
Si	Si231	0.798169	0.427422	0.945055
Si	Si232	0.745259	0.557373	0.470644
Si	Si233	0.791329	0.049401	0.948577
Si	Si234	0.140733	0.055912	0.548989
Si	Si235	0.392985	0.553325	0.049492
Si	Si236	0.140743	0.431980	0.548155
Si	Si237	0.394764	0.932464	0.048081
Si	Si238	0.893317	0.924553	0.450957
Si	Si239	0.642703	0.425995	0.963849
Si	Si240	0.898582	0.564063	0.460778
Si	Si241	0.638039	0.054902	0.956654
Si	Si242	0.094742	0.025948	0.332759
Si	Si243	0.440385	0.522420	0.834176
Si	Si244	0.093107	0.463729	0.336111
Si	Si245	0.441230	0.963772	0.832944
Si	Si246	0.943564	0.959512	0.659231
Si	Si247	0.595007	0.462778	0.173067
Si	Si248	0.947465	0.525568	0.667190
Si	Si249	0.592634	0.021258	0.170419
Si	Si250	0.218230	0.062651	0.209033
Si	Si251	0.318417	0.561222	0.707274
Si	Si252	0.213498	0.423813	0.211135
Si	Si253	0.317901	0.923916	0.709987
Si	Si254	0.815695	0.931933	0.789289
Si	Si255	0.720922	0.445026	0.303275
Si	Si256	0.826744	0.553549	0.808801
Si	Si257	0.716924	0.063190	0.293162
Si	Si258	0.445863	0.821347	0.189489

Si	Si259	0.094280	0.322295	0.695367
Si	Si260	0.440853	0.664434	0.191413
Si	Si261	0.092214	0.165131	0.694649
Si	Si262	0.590585	0.163407	0.806374
Si	Si263	0.949201	0.665005	0.306503
Si	Si264	0.593699	0.321236	0.809504
Si	Si265	0.948595	0.822585	0.297954
Si	Si266	0.337997	0.866334	0.335322
Si	Si267	0.205331	0.366566	0.837193
Si	Si268	0.334050	0.621711	0.337022
Si	Si269	0.202280	0.123110	0.837833
Si	Si270	0.702226	0.125895	0.656135
Si	Si271	0.838739	0.622567	0.162786
Si	Si272	0.707190	0.359675	0.666360
Si	Si273	0.836730	0.859241	0.154884
Si	Si274	0.290019	0.822474	0.542499
Si	Si275	0.250379	0.323486	0.047122
Si	Si276	0.289242	0.663175	0.546914
Si	Si277	0.250677	0.163753	0.046550
Si	Si278	0.746682	0.172993	0.446762
Si	Si279	0.789969	0.667506	0.955720
Si	Si280	0.751473	0.329698	0.452378
Si	Si281	0.789448	0.821879	0.940417
Si	Si282	0.137315	0.821955	0.541872
Si	Si283	0.403128	0.319377	0.041554
Si	Si284	0.136094	0.666095	0.543121
Si	Si285	0.403419	0.163902	0.042883
Si	Si286	0.900510	0.169063	0.454450
Si	Si287	0.636268	0.666740	0.957666
Si	Si288	0.904824	0.322201	0.461069
Si	Si289	0.636096	0.821962	0.944777
Si	Si290	0.092971	0.867667	0.331308
Si	Si291	0.447076	0.364116	0.828483
Si	Si292	0.094395	0.620241	0.329381
Si	Si293	0.444288	0.122074	0.826820
Si	Si294	0.948195	0.116382	0.661293
Si	Si295	0.588056	0.619334	0.167164
Si	Si296	0.949477	0.366994	0.671315
Si	Si297	0.593256	0.862484	0.160589
Si	Si298	0.215235	0.820486	0.202961
Si	Si299	0.325218	0.322031	0.699283
Si	Si300	0.214466	0.668630	0.202395
Si	Si301	0.321593	0.170448	0.702722
Si	Si302	0.825659	0.159627	0.794048

Si	Si303	0.826783	0.313564	0.794353
Si	Si304	0.715056	0.816796	0.287825
Zn	Zn305	0.730155	0.721713	0.491756

TS-C₄H₁₀-Dehydro-on-HydroxyO-ZnOH⁺ (Fig. 5/TS1)

Total energy = -1937.62921097 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.792079	0.754157	0.639534
H	H2	0.484300	0.804770	0.771315
H	H3	0.422728	0.748959	0.730418
H	H4	0.453639	0.810495	0.648868
H	H5	0.500804	0.694598	0.614299
H	H6	0.533427	0.693905	0.734941
H	H7	0.600717	0.796707	0.691070
H	H8	0.571311	0.791063	0.569130
H	H9	0.650663	0.682029	0.678256
H	H10	0.700146	0.745808	0.619631
H	H11	0.617875	0.672406	0.561853
C	C12	0.467274	0.775527	0.707713
C	C13	0.520428	0.726919	0.673215
C	C14	0.583115	0.761250	0.635234
C	C15	0.638039	0.711087	0.611824
O	O16	0.511162	0.031181	0.208840
O	O17	0.020945	0.533496	0.709431
O	O18	0.524368	0.440008	0.199689
O	O19	0.012810	0.945839	0.702569
O	O20	0.522030	0.958728	0.787228
O	O21	0.018095	0.455757	0.283410
O	O22	0.513507	0.547720	0.790971

0	023	0.021324	0.042773	0.289902
0	024	0.393047	0.062161	0.273832
0	025	0.137953	0.562573	0.780685
0	026	0.404301	0.452450	0.269003
0	027	0.135759	0.951422	0.759308
0	028	0.640596	0.933690	0.719382
0	029	0.901472	0.429973	0.206989
0	030	0.634519	0.540926	0.725834
0	031	0.895645	0.038945	0.245670
0	032	0.437917	0.116636	0.107791
0	033	0.097424	0.619455	0.614353
0	034	0.430387	0.366543	0.123718
0	035	0.098553	0.866678	0.617362
0	036	0.597748	0.870578	0.878899
0	037	0.939058	0.367991	0.369971
0	038	0.604061	0.622977	0.873632
0	039	0.940267	0.120993	0.387093
0	040	0.404011	0.988040	0.114132
0	041	0.129638	0.490662	0.617814
0	042	0.433718	0.497051	0.087506
0	043	0.101023	0.996637	0.580280
0	044	0.628706	0.999553	0.886769
0	045	0.908964	0.496991	0.374622
0	046	0.603756	0.491777	0.904152
0	047	0.938309	0.990073	0.417877
0	048	0.333947	0.059355	0.446122
0	049	0.198992	0.557982	0.951481
0	050	0.337405	0.451958	0.436038
0	051	0.199895	0.949938	0.928055
0	052	0.706823	0.928945	0.554596
0	053	0.837956	0.427763	0.038620
0	054	0.701507	0.534108	0.559831
0	055	0.834051	0.047895	0.075537
0	056	0.345791	0.947260	0.341960
0	057	0.190756	0.448670	0.839455
0	058	0.324307	0.553287	0.311402
0	059	0.215346	0.051941	0.804425
0	060	0.690841	0.045603	0.643146
0	061	0.851844	0.542495	0.134676
0	062	0.712462	0.436988	0.692437
0	063	0.816968	0.940040	0.187583
0	064	0.263623	0.042673	0.283773
0	065	0.268409	0.549390	0.787015
0	066	0.275009	0.436029	0.265028

0	067	0.265119	0.934563	0.759333
0	068	0.770167	0.956211	0.721388
0	069	0.771371	0.448890	0.203191
0	070	0.763880	0.555691	0.728578
0	071	0.766363	0.055712	0.241841
0	072	0.303719	0.132295	0.602542
0	073	0.234391	0.627978	0.108828
0	074	0.324525	0.376899	0.592320
0	075	0.209708	0.872082	0.082603
0	076	0.726543	0.867038	0.386508
0	077	0.806695	0.364159	0.875170
0	078	0.723163	0.625292	0.423972
0	079	0.821152	0.121661	0.916930
0	080	0.220225	0.039601	0.538194
0	081	0.314747	0.535543	0.035571
0	082	0.217529	0.429111	0.504611
0	083	0.318233	0.924699	0.999971
0	084	0.816189	0.952952	0.451123
0	085	0.722969	0.451918	0.952556
0	086	0.823081	0.554004	0.495634
0	087	0.715688	0.063532	0.997380
0	088	0.331636	0.004050	0.623790
0	089	0.205487	0.499053	0.125932
0	090	0.297471	0.505718	0.606310
0	091	0.237087	0.000570	0.101349
0	092	0.700860	0.996368	0.387453
0	093	0.832940	0.494079	0.869594
0	094	0.735138	0.498179	0.376867
0	095	0.804652	0.990725	0.904483
0	096	0.127669	0.126681	0.588382
0	097	0.400218	0.626124	0.096505
0	098	0.118648	0.360969	0.581971
0	099	0.418011	0.858341	0.078368
0	0100	0.906478	0.861408	0.407942
0	0101	0.635318	0.363159	0.892150
0	0102	0.916048	0.626923	0.408017
0	0103	0.617382	0.130105	0.913061
0	0104	0.120545	0.064915	0.415389
0	0105	0.417877	0.567138	0.923064
0	0106	0.094998	0.446881	0.439957
0	0107	0.440983	0.944438	0.937214
0	0108	0.911053	0.923174	0.581462
0	0109	0.619966	0.420441	0.066776
0	0110	0.946162	0.542088	0.551715

0	0111	0.593482	0.049054	0.061342
0	0112	0.141144	0.039619	0.222994
0	0113	0.392388	0.538403	0.732664
0	0114	0.144276	0.427194	0.260009
0	0115	0.396212	0.931154	0.753245
0	0116	0.894463	0.951734	0.773592
0	0117	0.646109	0.448607	0.255685
0	0118	0.894464	0.563415	0.731231
0	0119	0.635484	0.060399	0.247578
0	0120	0.101562	0.943961	0.344939
0	0121	0.438775	0.446459	0.853941
0	0122	0.109388	0.548459	0.317119
0	0123	0.429445	0.049895	0.821392
0	0124	0.933379	0.044840	0.646503
0	0125	0.597541	0.541218	0.134254
0	0126	0.928497	0.441578	0.677862
0	0127	0.605299	0.941797	0.174403
0	0128	0.222491	0.126972	0.143642
0	0129	0.319271	0.631100	0.650919
0	0130	0.216382	0.365934	0.126901
0	0131	0.326861	0.871115	0.616135
0	0132	0.811471	0.865654	0.851373
0	0133	0.728885	0.367992	0.344528
0	0134	0.823329	0.627295	0.863591
0	0135	0.704761	0.128727	0.376004
0	0136	0.513808	0.849991	0.213117
0	0137	0.020377	0.349769	0.712644
0	0138	0.511102	0.629770	0.199722
0	0139	0.021088	0.135439	0.702621
0	0140	0.520461	0.141005	0.779873
0	0141	0.019406	0.642532	0.287630
0	0142	0.523732	0.356393	0.788069
0	0143	0.012839	0.853210	0.291660
0	0144	0.391106	0.833215	0.267323
0	0145	0.142075	0.334174	0.771690
0	0146	0.399213	0.659998	0.287865
0	0147	0.137930	0.156724	0.780872
0	0148	0.643270	0.155751	0.723574
0	0149	0.902457	0.651990	0.213523
0	0150	0.636885	0.329733	0.701103
0	0151	0.895952	0.836235	0.214101
0	0152	0.448462	0.742059	0.153164
0	0153	0.088481	0.243649	0.652501
0	0154	0.588870	0.247029	0.838250

0	0155	0.943351	0.745296	0.339365
0	0156	0.323349	0.831097	0.429564
0	0157	0.206434	0.335472	0.937175
0	0158	0.333940	0.645423	0.455676
0	0159	0.203074	0.143067	0.949250
0	0160	0.715582	0.164496	0.565418
0	0161	0.831986	0.659968	0.053376
0	0162	0.704817	0.353907	0.536578
0	0163	0.830835	0.847104	0.045415
0	0164	0.263231	0.861601	0.260612
0	0165	0.270850	0.356986	0.768792
0	0166	0.267880	0.669870	0.291318
0	0167	0.269059	0.170145	0.785847
0	0168	0.771386	0.128418	0.735516
0	0169	0.774141	0.630549	0.225064
0	0170	0.768193	0.318996	0.698135
0	0171	0.765627	0.820396	0.209676
0	0172	0.296615	0.746833	0.572691
0	0173	0.240253	0.243836	0.067323
0	0174	0.741221	0.250279	0.423460
0	0175	0.793810	0.748258	0.921952
0	0176	0.212352	0.844259	0.529796
0	0177	0.323908	0.340357	0.019044
0	0178	0.214925	0.645267	0.535131
0	0179	0.323690	0.145370	0.021520
0	0180	0.822342	0.148056	0.456270
0	0181	0.714109	0.648655	0.969597
0	0182	0.827178	0.346072	0.469635
0	0183	0.710403	0.845545	0.973498
0	0184	0.130872	0.743434	0.574074
0	0185	0.406219	0.242525	0.073512
0	0186	0.908223	0.246296	0.422542
0	0187	0.629970	0.746744	0.921668
0	0188	0.102114	0.825602	0.428365
0	0189	0.440445	0.327634	0.933693
0	0190	0.107319	0.658293	0.427994
0	0191	0.435320	0.162601	0.923907
0	0192	0.926547	0.165825	0.573195
0	0193	0.599586	0.662386	0.063673
0	0194	0.941826	0.336005	0.559486
0	0195	0.596799	0.831224	0.065773
0	0196	0.136238	0.838028	0.238252
0	0197	0.398739	0.342377	0.746713
0	0198	0.142443	0.664040	0.238515

O	O199	0.395677	0.162911	0.735969
O	O200	0.899044	0.146051	0.763580
O	O201	0.634694	0.641233	0.252775
O	O202	0.895169	0.322315	0.742921
O	O203	0.638378	0.826473	0.252825
O	O204	0.222054	0.753816	0.159442
O	O205	0.318836	0.256071	0.660113
O	O206	0.815473	0.237112	0.831111
O	O207	0.714892	0.740878	0.346537
O	O208	0.755842	0.771200	0.600192
Al	Al209	0.711369	0.656295	0.300000
Si	Si210	0.436920	0.049636	0.175132
Si	Si211	0.096083	0.551522	0.679629
Si	Si212	0.447492	0.439223	0.169727
Si	Si213	0.087930	0.940216	0.664768
Si	Si214	0.596777	0.940780	0.819136
Si	Si215	0.942434	0.437681	0.309299
Si	Si216	0.589732	0.550729	0.824468
Si	Si217	0.947865	0.048413	0.335045
Si	Si218	0.333940	0.027371	0.335856
Si	Si219	0.199310	0.529125	0.839251
Si	Si220	0.335358	0.473318	0.320327
Si	Si221	0.203964	0.971943	0.812752
Si	Si222	0.702256	0.966176	0.660693
Si	Si223	0.840531	0.463084	0.146836
Si	Si224	0.703118	0.516702	0.677098
Si	Si225	0.828428	0.020413	0.188130
Si	Si226	0.297213	0.059101	0.552691
Si	Si227	0.238438	0.555615	0.055862
Si	Si228	0.294099	0.440730	0.535274
Si	Si229	0.241352	0.936622	0.028502
Si	Si230	0.738042	0.936371	0.445065
Si	Si231	0.799977	0.434192	0.933550
Si	Si232	0.745943	0.552073	0.463895
Si	Si233	0.793655	0.056037	0.972892
Si	Si234	0.142502	0.057252	0.530616
Si	Si235	0.391834	0.556668	0.036015
Si	Si236	0.140524	0.432237	0.535978
Si	Si237	0.394930	0.929199	0.032380
Si	Si238	0.892710	0.931456	0.464812
Si	Si239	0.645730	0.431694	0.954123
Si	Si240	0.898786	0.555083	0.456858
Si	Si241	0.639103	0.060492	0.964542
Si	Si242	0.096016	0.022839	0.318759

Si	Si243	0.440777	0.525075	0.825623
Si	Si244	0.091665	0.469645	0.324369
Si	Si245	0.447133	0.971039	0.823856
Si	Si246	0.938121	0.966308	0.675616
Si	Si247	0.596879	0.462998	0.163938
Si	Si248	0.947338	0.520131	0.668152
Si	Si249	0.586540	0.020648	0.173681
Si	Si250	0.216218	0.052147	0.188102
Si	Si251	0.319112	0.555719	0.694783
Si	Si252	0.210705	0.432434	0.194120
Si	Si253	0.329469	0.935595	0.688085
Si	Si254	0.819919	0.941495	0.812290
Si	Si255	0.720645	0.441028	0.294671
Si	Si256	0.828612	0.559510	0.799098
Si	Si257	0.702246	0.059984	0.312984
Si	Si258	0.442878	0.820661	0.178213
Si	Si259	0.092315	0.322097	0.679902
Si	Si260	0.440328	0.664475	0.184292
Si	Si261	0.093717	0.165536	0.681165
Si	Si262	0.592348	0.168254	0.813628
Si	Si263	0.945143	0.666652	0.311740
Si	Si264	0.595942	0.324084	0.804821
Si	Si265	0.939903	0.823889	0.313227
Si	Si266	0.330669	0.868722	0.324223
Si	Si267	0.202789	0.369221	0.828629
Si	Si268	0.331843	0.632027	0.336919
Si	Si269	0.205853	0.130435	0.830329
Si	Si270	0.705617	0.123369	0.667416
Si	Si271	0.838310	0.620973	0.158613
Si	Si272	0.704933	0.359838	0.656695
Si	Si273	0.827979	0.861336	0.163878
Si	Si274	0.289568	0.823541	0.537559
Si	Si275	0.247014	0.321667	0.038171
Si	Si276	0.291156	0.667587	0.552378
Si	Si277	0.247361	0.165105	0.044576
Si	Si278	0.746003	0.172694	0.455093
Si	Si279	0.790628	0.670328	0.952676
Si	Si280	0.750508	0.329104	0.444234
Si	Si281	0.786717	0.826293	0.949299
Si	Si282	0.135985	0.820278	0.537153
Si	Si283	0.400436	0.319679	0.037442
Si	Si284	0.137738	0.666498	0.538000
Si	Si285	0.400689	0.166663	0.032005
Si	Si286	0.899417	0.169914	0.459918

Si	Si287	0.636928	0.669613	0.958285
Si	Si288	0.903827	0.324050	0.455384
Si	Si289	0.633821	0.823426	0.959947
Si	Si290	0.088344	0.865329	0.325434
Si	Si291	0.449992	0.368103	0.830231
Si	Si292	0.094675	0.628018	0.318309
Si	Si293	0.445207	0.129054	0.815382
Si	Si294	0.945114	0.123046	0.671670
Si	Si295	0.587030	0.619186	0.164888
Si	Si296	0.946247	0.362607	0.672964
Si	Si297	0.588524	0.862607	0.175957
Si	Si298	0.207803	0.831187	0.186231
Si	Si299	0.328134	0.333132	0.692945
Si	Si300	0.216498	0.677855	0.199334
Si	Si301	0.322160	0.179281	0.696289
Si	Si302	0.826693	0.158509	0.810501
Si	Si303	0.821823	0.311813	0.787160
Si	Si304	0.711295	0.815418	0.297786
Zn	Zn305	0.710789	0.716757	0.493683

M-C₄H₉Zn-OH₂-ZnOH⁺ (Fig. 5/M2) Total energy = -1938.95629429 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.791891	0.731885	0.526176
H	H2	0.457947	0.768866	0.788556
H	H3	0.380597	0.754455	0.732027
H	H4	0.429971	0.821876	0.692545
H	H5	0.435873	0.726657	0.571226
H	H6	0.463942	0.673451	0.665969
H	H7	0.563612	0.746272	0.687517

H	H8	0.535733	0.798114	0.591103
H	H9	0.568111	0.648543	0.569225
H	H10	0.758576	0.762226	0.620321
H	H11	0.539174	0.699648	0.472464
C	C12	0.431240	0.770092	0.717903
C	C13	0.464310	0.725537	0.640632
C	C14	0.535421	0.746346	0.617988
C	C15	0.567517	0.700135	0.541933
O	O16	0.489263	0.028534	0.215744
O	O17	0.995974	0.530957	0.714044
O	O18	0.501565	0.433872	0.208098
O	O19	0.982353	0.933173	0.706750
O	O20	0.487086	0.944945	0.792569
O	O21	0.996491	0.451236	0.292052
O	O22	0.490370	0.539205	0.792862
O	O23	0.993263	0.036758	0.292089
O	O24	0.372952	0.057460	0.290534
O	O25	0.112813	0.558476	0.787026
O	O26	0.382588	0.441987	0.283856
O	O27	0.099325	0.942079	0.787873
O	O28	0.600467	0.941296	0.703150
O	O29	0.881207	0.434163	0.208096
O	O30	0.610803	0.537323	0.727053
O	O31	0.873469	0.040081	0.220808
O	O32	0.411972	0.114926	0.122716
O	O33	0.072977	0.617074	0.621296
O	O34	0.407096	0.359976	0.133527
O	O35	0.079994	0.861197	0.634670
O	O36	0.579710	0.859856	0.853176
O	O37	0.911811	0.364901	0.368034
O	O38	0.578411	0.616246	0.878032
O	O39	0.906097	0.115896	0.376477
O	O40	0.380190	0.986563	0.126257
O	O41	0.103596	0.488137	0.621155
O	O42	0.407063	0.490629	0.102854
O	O43	0.078436	0.991932	0.606832
O	O44	0.594543	0.989297	0.886011
O	O45	0.887724	0.495095	0.381607
O	O46	0.582208	0.484154	0.903378
O	O47	0.896947	0.984345	0.396797
O	O48	0.311709	0.041307	0.461955
O	O49	0.172579	0.542760	0.959477
O	O50	0.316583	0.448236	0.451816
O	O51	0.167558	0.949622	0.952796

0	052	0.667043	0.925714	0.539614
0	053	0.815490	0.423694	0.041766
0	054	0.678406	0.529088	0.562348
0	055	0.807532	0.030858	0.051905
0	056	0.314468	0.943089	0.328453
0	057	0.170934	0.444470	0.825377
0	058	0.304155	0.545247	0.317472
0	059	0.180868	0.043908	0.813627
0	060	0.680392	0.038133	0.643300
0	061	0.823595	0.540997	0.129551
0	062	0.690882	0.433740	0.698269
0	063	0.800329	0.932860	0.184505
0	064	0.242031	0.051014	0.298167
0	065	0.243485	0.552637	0.796643
0	066	0.252597	0.427783	0.283334
0	067	0.228782	0.924512	0.782139
0	068	0.731131	0.925177	0.708848
0	069	0.750409	0.444406	0.207753
0	070	0.739552	0.553711	0.732097
0	071	0.743901	0.049158	0.221271
0	072	0.278327	0.122872	0.607690
0	073	0.208096	0.618893	0.110301
0	074	0.297067	0.371318	0.606803
0	075	0.187159	0.868012	0.102966
0	076	0.687792	0.868595	0.368276
0	077	0.785719	0.355769	0.882036
0	078	0.698371	0.623151	0.428417
0	079	0.786359	0.113567	0.903134
0	080	0.190832	0.037057	0.534464
0	081	0.292256	0.531177	0.035233
0	082	0.194924	0.427852	0.513039
0	083	0.288585	0.930027	0.015523
0	084	0.785144	0.932976	0.459171
0	085	0.698718	0.440562	0.957517
0	086	0.799227	0.552215	0.499482
0	087	0.685777	0.051857	0.991792
0	088	0.291377	0.994251	0.642356
0	089	0.188679	0.489160	0.136410
0	090	0.274211	0.500791	0.621493
0	091	0.205136	0.997167	0.127614
0	092	0.685611	0.000286	0.381709
0	093	0.806383	0.485825	0.869091
0	094	0.712977	0.496544	0.378806
0	095	0.766009	0.985285	0.876290

0	096	0.102334	0.122477	0.603942
0	097	0.377724	0.620458	0.102743
0	098	0.103053	0.355912	0.599690
0	099	0.381696	0.855465	0.095376
0	0100	0.879287	0.852144	0.395555
0	0101	0.607871	0.353796	0.897666
0	0102	0.887807	0.626789	0.406330
0	0103	0.591101	0.121131	0.904878
0	0104	0.078887	0.057669	0.437487
0	0105	0.401200	0.557758	0.934313
0	0106	0.071203	0.432950	0.449553
0	0107	0.412043	0.937692	0.950806
0	0108	0.893606	0.915623	0.564569
0	0109	0.593556	0.415236	0.069533
0	0110	0.922897	0.548154	0.555034
0	0111	0.564080	0.044295	0.058606
0	0112	0.116601	0.051597	0.248266
0	0113	0.367937	0.541848	0.743938
0	0114	0.122102	0.420651	0.269313
0	0115	0.359413	0.924689	0.772270
0	0116	0.857395	0.949332	0.747601
0	0117	0.624469	0.447826	0.255482
0	0118	0.869837	0.558190	0.735673
0	0119	0.614549	0.057964	0.240158
0	0120	0.080000	0.942267	0.342598
0	0121	0.411044	0.439711	0.849168
0	0122	0.089464	0.539818	0.337956
0	0123	0.401999	0.042247	0.832046
0	0124	0.917194	0.036799	0.631728
0	0125	0.568475	0.536494	0.133789
0	0126	0.905369	0.440288	0.665767
0	0127	0.582353	0.938390	0.174549
0	0128	0.198721	0.127789	0.151922
0	0129	0.293072	0.628889	0.653875
0	0130	0.197508	0.355873	0.145247
0	0131	0.289960	0.861309	0.639498
0	0132	0.792292	0.858040	0.847129
0	0133	0.704483	0.366595	0.349742
0	0134	0.801045	0.619019	0.872444
0	0135	0.690537	0.130312	0.354299
0	0136	0.491404	0.845884	0.203374
0	0137	0.996077	0.350117	0.713382
0	0138	0.489017	0.629639	0.206006
0	0139	0.992088	0.132099	0.710153

0	0140	0.489805	0.134865	0.780989
0	0141	0.995547	0.626978	0.293284
0	0142	0.497486	0.347952	0.790759
0	0143	0.990550	0.852598	0.289643
0	0144	0.376185	0.829412	0.287798
0	0145	0.112922	0.328136	0.791217
0	0146	0.375896	0.654215	0.293793
0	0147	0.106157	0.151581	0.796799
0	0148	0.608676	0.139815	0.710914
0	0149	0.883152	0.645724	0.208904
0	0150	0.611694	0.328797	0.703445
0	0151	0.877489	0.826652	0.202206
0	0152	0.420543	0.738533	0.158947
0	0153	0.062027	0.239972	0.665629
0	0154	0.566452	0.238106	0.828955
0	0155	0.928779	0.739315	0.330805
0	0156	0.306159	0.839564	0.448812
0	0157	0.180429	0.345070	0.953422
0	0158	0.308413	0.638563	0.458845
0	0159	0.177887	0.134244	0.957953
0	0160	0.677856	0.153120	0.548639
0	0161	0.805302	0.661612	0.058380
0	0162	0.682072	0.351373	0.542203
0	0163	0.806475	0.840742	0.040338
0	0164	0.245729	0.838323	0.274266
0	0165	0.243466	0.340275	0.781589
0	0166	0.244615	0.660428	0.291302
0	0167	0.236599	0.161332	0.787351
0	0168	0.738603	0.141819	0.723010
0	0169	0.755078	0.629550	0.234459
0	0170	0.742069	0.313169	0.706378
0	0171	0.747194	0.814394	0.210537
0	0172	0.269718	0.742271	0.568161
0	0173	0.216472	0.240386	0.060113
0	0174	0.715184	0.248474	0.426340
0	0175	0.768305	0.741801	0.916314
0	0176	0.185929	0.839720	0.523343
0	0177	0.300899	0.338343	0.024873
0	0178	0.188835	0.640211	0.536681
0	0179	0.299349	0.139337	0.027668
0	0180	0.795898	0.147560	0.468396
0	0181	0.689441	0.642814	0.970632
0	0182	0.803405	0.341419	0.474071
0	0183	0.686788	0.840916	0.964493

O	O184	0.106050	0.740231	0.576978
O	O185	0.380269	0.238199	0.078376
O	O186	0.883304	0.242194	0.420027
O	O187	0.605681	0.740708	0.921725
O	O188	0.067918	0.829825	0.443156
O	O189	0.418154	0.324927	0.942262
O	O190	0.079976	0.655604	0.433202
O	O191	0.412456	0.154385	0.934531
O	O192	0.907996	0.159009	0.565554
O	O193	0.575916	0.658691	0.066707
O	O194	0.920472	0.330601	0.556998
O	O195	0.567860	0.838924	0.045003
O	O196	0.116645	0.828490	0.259177
O	O197	0.371615	0.329738	0.756878
O	O198	0.118319	0.651871	0.244812
O	O199	0.364073	0.154884	0.750135
O	O200	0.866266	0.129344	0.749537
O	O201	0.614537	0.632018	0.252906
O	O202	0.870476	0.323755	0.738827
O	O203	0.617388	0.815697	0.223148
O	O204	0.192716	0.744018	0.161779
O	O205	0.291621	0.246846	0.663381
O	O206	0.802268	0.231645	0.829991
O	O207	0.687344	0.738734	0.343226
O	O208	0.751691	0.751985	0.550798
Al	Al209	0.688831	0.653135	0.304614
Si	Si210	0.413927	0.047070	0.188113
Si	Si211	0.071332	0.548516	0.685167
Si	Si212	0.424088	0.431952	0.182001
Si	Si213	0.060561	0.932248	0.683690
Si	Si214	0.564885	0.933937	0.810147
Si	Si215	0.919529	0.436423	0.313125
Si	Si216	0.566376	0.544316	0.826504
Si	Si217	0.916748	0.044575	0.321892
Si	Si218	0.310211	0.022984	0.344891
Si	Si219	0.175140	0.524353	0.842586
Si	Si220	0.314197	0.465696	0.334392
Si	Si221	0.169206	0.964943	0.834860
Si	Si222	0.669522	0.958296	0.649577
Si	Si223	0.817535	0.461555	0.148105
Si	Si224	0.679915	0.513207	0.679813
Si	Si225	0.806362	0.013211	0.169453
Si	Si226	0.267789	0.049043	0.561673
Si	Si227	0.215554	0.545732	0.060778

Si	Si228	0.270836	0.436751	0.548776
Si	Si229	0.212209	0.936008	0.050317
Si	Si230	0.706989	0.931796	0.435807
Si	Si231	0.776247	0.426544	0.937382
Si	Si232	0.721876	0.550505	0.466683
Si	Si233	0.761763	0.045604	0.955852
Si	Si234	0.112907	0.052320	0.545973
Si	Si235	0.369637	0.550173	0.044300
Si	Si236	0.118257	0.426617	0.546208
Si	Si237	0.365511	0.927606	0.047118
Si	Si238	0.863695	0.921605	0.453141
Si	Si239	0.620821	0.423240	0.957036
Si	Si240	0.874449	0.555151	0.459686
Si	Si241	0.608861	0.051601	0.959797
Si	Si242	0.067037	0.021873	0.330645
Si	Si243	0.417687	0.519446	0.830915
Si	Si244	0.069695	0.461184	0.336416
Si	Si245	0.415112	0.962573	0.836270
Si	Si246	0.912694	0.958702	0.662826
Si	Si247	0.572237	0.458856	0.166661
Si	Si248	0.923337	0.519240	0.668206
Si	Si249	0.562681	0.017119	0.172448
Si	Si250	0.190757	0.056303	0.206414
Si	Si251	0.294549	0.555522	0.704286
Si	Si252	0.190498	0.424132	0.208205
Si	Si253	0.292097	0.926847	0.708789
Si	Si254	0.786985	0.930410	0.794569
Si	Si255	0.698101	0.439184	0.297624
Si	Si256	0.804076	0.553349	0.803190
Si	Si257	0.683842	0.058942	0.298994
Si	Si258	0.417736	0.816901	0.186508
Si	Si259	0.068236	0.318356	0.692605
Si	Si260	0.416660	0.660544	0.190122
Si	Si261	0.065479	0.161690	0.693959
Si	Si262	0.564046	0.158993	0.806338
Si	Si263	0.923636	0.659872	0.309258
Si	Si264	0.570552	0.317127	0.805701
Si	Si265	0.919356	0.817366	0.304084
Si	Si266	0.310398	0.862690	0.334258
Si	Si267	0.177158	0.364543	0.837373
Si	Si268	0.308563	0.624520	0.340387
Si	Si269	0.175272	0.122842	0.839050
Si	Si270	0.676369	0.118318	0.656922
Si	Si271	0.814853	0.619145	0.160178

Si	Si272	0.681388	0.356816	0.662227
Si	Si273	0.807914	0.853859	0.159026
Si	Si274	0.262585	0.820697	0.544972
Si	Si275	0.224203	0.319753	0.046135
Si	Si276	0.265029	0.662729	0.553433
Si	Si277	0.223266	0.160818	0.048975
Si	Si278	0.719846	0.169722	0.449354
Si	Si279	0.765776	0.665314	0.955062
Si	Si280	0.726307	0.326802	0.448420
Si	Si281	0.763226	0.820017	0.943841
Si	Si282	0.109936	0.817877	0.544171
Si	Si283	0.376818	0.315771	0.044521
Si	Si284	0.112170	0.663057	0.542343
Si	Si285	0.376011	0.161500	0.041022
Si	Si286	0.873545	0.165768	0.457125
Si	Si287	0.612227	0.664077	0.960299
Si	Si288	0.879642	0.319785	0.454729
Si	Si289	0.610045	0.819592	0.946932
Si	Si290	0.064206	0.863248	0.333242
Si	Si291	0.424273	0.360690	0.834357
Si	Si292	0.071103	0.618318	0.327383
Si	Si293	0.416806	0.121478	0.824609
Si	Si294	0.920446	0.114689	0.664639
Si	Si295	0.563575	0.614688	0.167501
Si	Si296	0.922956	0.361321	0.668525
Si	Si297	0.564711	0.859696	0.161456
Si	Si298	0.185668	0.820320	0.199963
Si	Si299	0.300906	0.322719	0.702422
Si	Si300	0.191079	0.667893	0.202087
Si	Si301	0.292732	0.170459	0.702274
Si	Si302	0.798331	0.153770	0.800514
Si	Si303	0.800171	0.307290	0.789122
Si	Si304	0.685066	0.809822	0.286333
Zn	Zn305	0.657823	0.715122	0.496428

TS-C₄H₉ZnOH₂-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 5/TS2)

Total energy = -1936.97142925 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578
_cell_angle_alpha	90.000000

```

_cell_angle_beta      90.000000
_cell_angle_gamma     90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1      0.693205      0.779508      0.608478
  H      H2      0.603255      0.755842      0.640295
  H      H3      0.527605      0.653005      0.462027
  H      H4      0.533064      0.734386      0.403295
  H      H5      0.494607      0.787882      0.550246
  H      H6      0.493695      0.647459      0.643298
  H      H7      0.424622      0.681923      0.585858
  H      H8      0.491439      0.739490      0.772061
  H      H9      0.414682      0.698077      0.766688
  H      H10     0.423924      0.777003      0.710026
  H      H11     0.561621      0.760712      0.637069
  C      C12     0.539281      0.705824      0.471704
  C      C13     0.509245      0.735685      0.557080
  C      C14     0.468960      0.694998      0.628531
  C      C15     0.448785      0.729551      0.724967
  O      O16     0.487347      0.026506      0.212497
  O      O17     0.997650      0.529794      0.709968
  O      O18     0.501925      0.434715      0.206064
  O      O19     0.985131      0.938549      0.701283
  O      O20     0.492146      0.952154      0.788909
  O      O21     0.995995      0.457182      0.293406
  O      O22     0.490648      0.540788      0.791105
  O      O23     0.996772      0.038780      0.292853
  O      O24     0.369886      0.056475      0.281955
  O      O25     0.113614      0.556487      0.787854
  O      O26     0.381799      0.451499      0.274343
  O      O27     0.106331      0.955634      0.764830
  O      O28     0.608006      0.942214      0.708397
  O      O29     0.881234      0.433140      0.209917
  O      O30     0.611663      0.534257      0.726698
  O      O31     0.872159      0.036959      0.240751
  O      O32     0.411730      0.110849      0.113643
  O      O33     0.077571      0.614552      0.620229
  O      O34     0.406146      0.360095      0.136498
  O      O35     0.079571      0.864393      0.627657

```

0	036	0.578427	0.864658	0.860048
0	037	0.916260	0.365726	0.369621
0	038	0.579712	0.619932	0.868348
0	039	0.913902	0.117585	0.385755
0	040	0.378614	0.982219	0.122365
0	041	0.107942	0.484969	0.624423
0	042	0.411433	0.488906	0.089936
0	043	0.072639	0.993856	0.582424
0	044	0.598618	0.993896	0.888670
0	045	0.884468	0.493828	0.383853
0	046	0.581667	0.488870	0.907185
0	047	0.909778	0.986303	0.414164
0	048	0.303450	0.060550	0.448188
0	049	0.179354	0.560870	0.955587
0	050	0.313777	0.443793	0.438459
0	051	0.174911	0.938406	0.927317
0	052	0.682553	0.921096	0.553821
0	053	0.814846	0.422561	0.043580
0	054	0.681031	0.530442	0.565023
0	055	0.806344	0.043124	0.074399
0	056	0.322587	0.943958	0.360161
0	057	0.166288	0.445510	0.860821
0	058	0.299065	0.549097	0.321801
0	059	0.193950	0.047104	0.819129
0	060	0.676769	0.042539	0.630872
0	061	0.825287	0.540418	0.129944
0	062	0.694416	0.433436	0.696299
0	063	0.793441	0.936063	0.188746
0	064	0.240957	0.031805	0.280941
0	065	0.243818	0.540243	0.788773
0	066	0.252432	0.432756	0.265285
0	067	0.234389	0.930619	0.752178
0	068	0.738463	0.945333	0.725799
0	069	0.750349	0.445630	0.208831
0	070	0.740891	0.553143	0.737058
0	071	0.742642	0.051281	0.244495
0	072	0.275979	0.129955	0.608948
0	073	0.216311	0.626852	0.115894
0	074	0.308459	0.374442	0.600585
0	075	0.182200	0.869534	0.090185
0	076	0.691810	0.864703	0.380982
0	077	0.782880	0.358011	0.881179
0	078	0.687258	0.620358	0.425886
0	079	0.794895	0.116518	0.916069

0	080	0.192650	0.036552	0.545985
0	081	0.294310	0.533869	0.040009
0	082	0.196831	0.420470	0.516508
0	083	0.291846	0.920185	0.007677
0	084	0.789581	0.942215	0.444657
0	085	0.699378	0.445694	0.956917
0	086	0.798272	0.561618	0.492540
0	087	0.688481	0.058485	0.994202
0	088	0.306312	0.001743	0.624616
0	089	0.183683	0.498666	0.128317
0	090	0.277661	0.502971	0.606215
0	091	0.206650	0.999399	0.095940
0	092	0.675759	0.995352	0.391871
0	093	0.809855	0.487352	0.873141
0	094	0.714137	0.494879	0.382469
0	095	0.777812	0.985836	0.903029
0	096	0.100629	0.124145	0.594209
0	097	0.384010	0.619114	0.104615
0	098	0.094563	0.355307	0.587423
0	099	0.392924	0.853652	0.081713
0	0100	0.884871	0.855974	0.403988
0	0101	0.609049	0.359034	0.894972
0	0102	0.896664	0.624945	0.402535
0	0103	0.590196	0.125062	0.910398
0	0104	0.094802	0.063711	0.419795
0	0105	0.398522	0.562222	0.928359
0	0106	0.076671	0.441940	0.444401
0	0107	0.412916	0.942780	0.941933
0	0108	0.884226	0.918533	0.577235
0	0109	0.595515	0.416712	0.069797
0	0110	0.920000	0.547179	0.556236
0	0111	0.567460	0.046867	0.062834
0	0112	0.116814	0.037250	0.227922
0	0113	0.368776	0.536805	0.738392
0	0114	0.121249	0.425699	0.260652
0	0115	0.365753	0.927666	0.759359
0	0116	0.865386	0.951948	0.766510
0	0117	0.624345	0.452386	0.255778
0	0118	0.871929	0.559754	0.739603
0	0119	0.611790	0.057863	0.248274
0	0120	0.079117	0.941993	0.351247
0	0121	0.413813	0.441369	0.855227
0	0122	0.091284	0.545909	0.326131
0	0123	0.402798	0.046698	0.821840

0	0124	0.911896	0.040306	0.638229
0	0125	0.567152	0.537777	0.130648
0	0126	0.904431	0.440594	0.671013
0	0127	0.582859	0.939179	0.175065
0	0128	0.200190	0.123718	0.151985
0	0129	0.292454	0.627443	0.658704
0	0130	0.192172	0.365764	0.124742
0	0131	0.303297	0.868956	0.614345
0	0132	0.791739	0.860630	0.852373
0	0133	0.701196	0.366452	0.347015
0	0134	0.801685	0.620175	0.877216
0	0135	0.681408	0.126954	0.375923
0	0136	0.493681	0.844371	0.208373
0	0137	0.994294	0.347844	0.714110
0	0138	0.494171	0.633336	0.210417
0	0139	0.994474	0.131960	0.708209
0	0140	0.492135	0.139887	0.780207
0	0141	0.001508	0.638596	0.285637
0	0142	0.497455	0.349044	0.791146
0	0143	0.992886	0.851374	0.290931
0	0144	0.374124	0.835907	0.275586
0	0145	0.114424	0.336147	0.780261
0	0146	0.380753	0.651057	0.297485
0	0147	0.110817	0.147172	0.789330
0	0148	0.612966	0.142463	0.717633
0	0149	0.887624	0.645169	0.205033
0	0150	0.611213	0.331709	0.701408
0	0151	0.877805	0.835901	0.208288
0	0152	0.420528	0.738313	0.161953
0	0153	0.064796	0.240132	0.666954
0	0154	0.569408	0.241843	0.831557
0	0155	0.924103	0.741859	0.329824
0	0156	0.299659	0.822851	0.430151
0	0157	0.186725	0.326030	0.937462
0	0158	0.313460	0.641494	0.464476
0	0159	0.176936	0.141293	0.958300
0	0160	0.689136	0.165499	0.565169
0	0161	0.800993	0.661285	0.064610
0	0162	0.682974	0.350628	0.540219
0	0163	0.805623	0.843183	0.046390
0	0164	0.246235	0.862137	0.259159
0	0165	0.242688	0.360420	0.766466
0	0166	0.250792	0.669009	0.297855
0	0167	0.240753	0.167243	0.792577

O	O168	0.742095	0.130063	0.738187
O	O169	0.762921	0.626904	0.247426
O	O170	0.741212	0.311945	0.705431
O	O171	0.749129	0.814386	0.218006
O	O172	0.275066	0.743350	0.579535
O	O173	0.216531	0.240980	0.077679
O	O174	0.717668	0.248721	0.421928
O	O175	0.769695	0.743595	0.922897
O	O176	0.188870	0.838162	0.529532
O	O177	0.301916	0.335297	0.025380
O	O178	0.192019	0.644184	0.535046
O	O179	0.298725	0.142795	0.025566
O	O180	0.797752	0.146468	0.460674
O	O181	0.687984	0.645217	0.969807
O	O182	0.803526	0.344402	0.466579
O	O183	0.686760	0.842279	0.968196
O	O184	0.106488	0.740143	0.581293
O	O185	0.383712	0.237190	0.080074
O	O186	0.884086	0.243605	0.421413
O	O187	0.605198	0.743657	0.918321
O	O188	0.074048	0.824743	0.438942
O	O189	0.420541	0.325673	0.945782
O	O190	0.082157	0.656406	0.434321
O	O191	0.410883	0.157048	0.929677
O	O192	0.904561	0.163056	0.572044
O	O193	0.570776	0.658651	0.056931
O	O194	0.917392	0.332286	0.559026
O	O195	0.569350	0.836661	0.050624
O	O196	0.118858	0.833691	0.254311
O	O197	0.370285	0.332706	0.763654
O	O198	0.125305	0.661553	0.248045
O	O199	0.367024	0.161450	0.743254
O	O200	0.870951	0.136319	0.759251
O	O201	0.622386	0.635011	0.235671
O	O202	0.868976	0.323175	0.741650
O	O203	0.619594	0.819193	0.231067
O	O204	0.203064	0.752115	0.166850
O	O205	0.288639	0.253913	0.667323
O	O206	0.797391	0.232929	0.834004
O	O207	0.686701	0.737004	0.345723
O	O208	0.671572	0.736529	0.611655
Al	Al209	0.691660	0.653140	0.302368
Si	Si210	0.412367	0.044240	0.181634
Si	Si211	0.073679	0.546362	0.684613

Si	Si212	0.424913	0.433949	0.176574
Si	Si213	0.061621	0.938078	0.668786
Si	Si214	0.568911	0.938423	0.813019
Si	Si215	0.919889	0.437767	0.314760
Si	Si216	0.566915	0.545882	0.824633
Si	Si217	0.922189	0.045209	0.333333
Si	Si218	0.309073	0.023057	0.342036
Si	Si219	0.175736	0.525482	0.847529
Si	Si220	0.311712	0.469104	0.324709
Si	Si221	0.177337	0.967874	0.815731
Si	Si222	0.676434	0.963435	0.656094
Si	Si223	0.817964	0.461139	0.149409
Si	Si224	0.682451	0.513090	0.681728
Si	Si225	0.803773	0.016526	0.187530
Si	Si226	0.269583	0.057465	0.556900
Si	Si227	0.218367	0.555348	0.060289
Si	Si228	0.273734	0.435148	0.541115
Si	Si229	0.214211	0.931828	0.031087
Si	Si230	0.710566	0.931108	0.441920
Si	Si231	0.776615	0.428461	0.938493
Si	Si232	0.720750	0.552007	0.466301
Si	Si233	0.766599	0.051093	0.971371
Si	Si234	0.115152	0.054933	0.535605
Si	Si235	0.372292	0.551406	0.041271
Si	Si236	0.119229	0.426141	0.542969
Si	Si237	0.368738	0.924957	0.038237
Si	Si238	0.866985	0.925359	0.459881
Si	Si239	0.621718	0.427311	0.957113
Si	Si240	0.874577	0.556996	0.458120
Si	Si241	0.611508	0.055982	0.963711
Si	Si242	0.071534	0.020476	0.323380
Si	Si243	0.418072	0.520160	0.829112
Si	Si244	0.071016	0.467563	0.330400
Si	Si245	0.418341	0.967483	0.827518
Si	Si246	0.911877	0.962165	0.670496
Si	Si247	0.572588	0.460764	0.165682
Si	Si248	0.923216	0.519517	0.669627
Si	Si249	0.562601	0.017662	0.175100
Si	Si250	0.191441	0.047515	0.189733
Si	Si251	0.295269	0.551108	0.698887
Si	Si252	0.187717	0.431113	0.194670
Si	Si253	0.301885	0.932830	0.687807
Si	Si254	0.793440	0.936410	0.811422
Si	Si255	0.697622	0.440282	0.298011

Si	Si256	0.805965	0.554945	0.807062
Si	Si257	0.678236	0.057546	0.314639
Si	Si258	0.420381	0.817696	0.181661
Si	Si259	0.066917	0.319563	0.687279
Si	Si260	0.420397	0.660307	0.193179
Si	Si261	0.067754	0.161113	0.689764
Si	Si262	0.566141	0.162686	0.809961
Si	Si263	0.926775	0.662747	0.305813
Si	Si264	0.571545	0.320468	0.805100
Si	Si265	0.919925	0.820804	0.308312
Si	Si266	0.310391	0.866467	0.330435
Si	Si267	0.177705	0.367332	0.835568
Si	Si268	0.311550	0.627412	0.345630
Si	Si269	0.179895	0.125636	0.840109
Si	Si270	0.680383	0.120396	0.663681
Si	Si271	0.817470	0.618161	0.163464
Si	Si272	0.682001	0.357052	0.660121
Si	Si273	0.806716	0.857644	0.164656
Si	Si274	0.266216	0.818755	0.539012
Si	Si275	0.224542	0.317571	0.042216
Si	Si276	0.267933	0.664214	0.558213
Si	Si277	0.222913	0.162469	0.052295
Si	Si278	0.721578	0.171592	0.455536
Si	Si279	0.765054	0.666637	0.958385
Si	Si280	0.726375	0.327434	0.444668
Si	Si281	0.763504	0.821808	0.948819
Si	Si282	0.112112	0.816977	0.544170
Si	Si283	0.378176	0.314854	0.046800
Si	Si284	0.114460	0.663657	0.543190
Si	Si285	0.376137	0.161818	0.037613
Si	Si286	0.875179	0.167444	0.459889
Si	Si287	0.611319	0.666515	0.954219
Si	Si288	0.880069	0.321571	0.454010
Si	Si289	0.610258	0.821441	0.949725
Si	Si290	0.066391	0.863091	0.333362
Si	Si291	0.425345	0.362262	0.838437
Si	Si292	0.075174	0.625213	0.323908
Si	Si293	0.418024	0.126115	0.818953
Si	Si294	0.920385	0.118037	0.669479
Si	Si295	0.565444	0.616591	0.160562
Si	Si296	0.921066	0.361391	0.671221
Si	Si297	0.566593	0.860033	0.165845
Si	Si298	0.187395	0.829078	0.193834
Si	Si299	0.302571	0.330195	0.700698

Si	Si300	0.198527	0.676192	0.207001
Si	Si301	0.293528	0.177026	0.703029
Si	Si302	0.801296	0.154211	0.810554
Si	Si303	0.797960	0.307897	0.790511
Si	Si304	0.687064	0.809572	0.293618
Zn	Zn305	0.640099	0.704404	0.486005

C₄H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 5/M5) Total energy = -1938.19078482 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.816366	0.764003	0.611912
H	H2	0.660560	0.805391	0.623659
H	H3	0.550720	0.540339	0.437964
H	H4	0.681555	0.725315	0.684533
H	H5	0.592690	0.669220	0.597761
H	H6	0.551190	0.525975	0.488464
H	H7	0.572954	0.797639	0.479649
H	H8	0.517538	0.783296	0.576364
H	H9	0.538578	0.686706	0.401652
H	H10	0.470523	0.740502	0.419263
H	H11	0.483941	0.673565	0.501939
C	C12	0.653204	0.751820	0.628575
C	C13	0.600858	0.722279	0.584411
C	C14	0.550010	0.757663	0.523206
C	C15	0.508540	0.711851	0.457397
O	O16	0.516381	0.033243	0.216370
O	O17	0.026430	0.533735	0.712901
O	O18	0.518930	0.442532	0.210298
O	O19	0.010748	0.930545	0.703745
O	O20	0.514173	0.946136	0.788397
O	O21	0.011899	0.457450	0.288985

0	022	0.518647	0.535859	0.789183
0	023	0.020568	0.042671	0.292859
0	024	0.399669	0.057421	0.291585
0	025	0.148644	0.562802	0.760218
0	026	0.392560	0.430729	0.251183
0	027	0.127416	0.943234	0.784957
0	028	0.629959	0.938101	0.706346
0	029	0.890697	0.430957	0.233708
0	030	0.644210	0.547800	0.751557
0	031	0.900538	0.037411	0.224667
0	032	0.437157	0.121334	0.129382
0	033	0.095458	0.614609	0.598125
0	034	0.445743	0.365875	0.098592
0	035	0.110604	0.860460	0.633917
0	036	0.601833	0.858608	0.855944
0	037	0.941381	0.370606	0.390989
0	038	0.590205	0.615718	0.899587
0	039	0.930106	0.120655	0.372648
0	040	0.408549	0.992698	0.121733
0	041	0.124978	0.485361	0.605429
0	042	0.432489	0.497465	0.089575
0	043	0.104998	0.990797	0.602502
0	044	0.620597	0.987717	0.887800
0	045	0.910644	0.499425	0.397940
0	046	0.603301	0.483692	0.914803
0	047	0.928699	0.990152	0.405925
0	048	0.337898	0.039464	0.460118
0	049	0.200427	0.549568	0.937963
0	050	0.338170	0.444908	0.428799
0	051	0.195037	0.949461	0.951120
0	052	0.696716	0.934243	0.543775
0	053	0.833479	0.426459	0.060812
0	054	0.701419	0.535518	0.578889
0	055	0.835265	0.037219	0.054970
0	056	0.338517	0.943330	0.321381
0	057	0.194607	0.445438	0.815137
0	058	0.334863	0.544260	0.297359
0	059	0.208722	0.044584	0.812862
0	060	0.704327	0.042574	0.660314
0	061	0.845789	0.543358	0.150761
0	062	0.711194	0.437129	0.711093
0	063	0.823591	0.934566	0.180063
0	064	0.268508	0.053025	0.296126
0	065	0.277423	0.545193	0.781369

0	066	0.262725	0.436443	0.271201
0	067	0.256769	0.924522	0.781286
0	068	0.760994	0.929947	0.712979
0	069	0.762155	0.453042	0.219090
0	070	0.773691	0.551720	0.738795
0	071	0.771441	0.051665	0.224307
0	072	0.310139	0.118718	0.611479
0	073	0.228742	0.623663	0.093200
0	074	0.320639	0.364463	0.580353
0	075	0.217552	0.870496	0.104425
0	076	0.714102	0.874088	0.374039
0	077	0.810621	0.352878	0.903487
0	078	0.715756	0.630590	0.445178
0	079	0.809374	0.113389	0.898860
0	080	0.218749	0.036892	0.537541
0	081	0.315820	0.535551	0.027799
0	082	0.218046	0.426375	0.499977
0	083	0.316457	0.934281	0.014043
0	084	0.812729	0.944122	0.454528
0	085	0.720305	0.439458	0.964909
0	086	0.819521	0.559618	0.504444
0	087	0.712888	0.049269	0.992458
0	088	0.320159	0.988338	0.637242
0	089	0.206882	0.493579	0.114264
0	090	0.304232	0.494869	0.603746
0	091	0.231287	0.000587	0.124373
0	092	0.708558	0.005764	0.382882
0	093	0.830842	0.482146	0.882805
0	094	0.726694	0.504073	0.392437
0	095	0.798028	0.982641	0.884471
0	096	0.129175	0.121462	0.604286
0	097	0.404019	0.627198	0.081373
0	098	0.123775	0.353693	0.582756
0	099	0.410749	0.861450	0.094068
0	0100	0.904806	0.860128	0.391726
0	0101	0.626513	0.353231	0.913763
0	0102	0.913515	0.631378	0.415909
0	0103	0.620478	0.119805	0.902528
0	0104	0.108948	0.059481	0.435591
0	0105	0.420841	0.558874	0.916132
0	0106	0.096272	0.431159	0.431519
0	0107	0.439314	0.942222	0.947201
0	0108	0.917113	0.916402	0.567276
0	0109	0.617569	0.418128	0.083776

0	0110	0.941008	0.556091	0.570406
0	0111	0.590366	0.045652	0.057685
0	0112	0.143281	0.055627	0.245088
0	0113	0.399978	0.537753	0.722094
0	0114	0.134273	0.427372	0.242717
0	0115	0.387527	0.919956	0.769678
0	0116	0.887932	0.944347	0.755251
0	0117	0.638631	0.448180	0.274542
0	0118	0.902874	0.554258	0.760090
0	0119	0.641875	0.063039	0.237241
0	0120	0.106632	0.945646	0.337312
0	0121	0.435434	0.438513	0.840999
0	0122	0.108448	0.543263	0.329752
0	0123	0.425242	0.041574	0.819170
0	0124	0.942683	0.035341	0.638859
0	0125	0.596564	0.540581	0.145942
0	0126	0.936127	0.442027	0.667849
0	0127	0.608453	0.941928	0.177818
0	0128	0.226847	0.131139	0.150313
0	0129	0.320997	0.623600	0.636316
0	0130	0.215462	0.360772	0.128799
0	0131	0.315720	0.855081	0.641577
0	0132	0.816520	0.854970	0.849300
0	0133	0.725868	0.372934	0.365292
0	0134	0.827689	0.615097	0.889311
0	0135	0.717434	0.135778	0.351980
0	0136	0.518041	0.848502	0.207764
0	0137	0.026762	0.351194	0.715801
0	0138	0.507358	0.629596	0.201911
0	0139	0.018609	0.131451	0.710640
0	0140	0.517364	0.132248	0.781170
0	0141	0.014164	0.631018	0.289451
0	0142	0.525745	0.349748	0.786930
0	0143	0.016566	0.855762	0.288169
0	0144	0.401571	0.829434	0.284404
0	0145	0.148914	0.325987	0.771563
0	0146	0.389770	0.661109	0.271793
0	0147	0.133065	0.152641	0.795328
0	0148	0.635563	0.150022	0.711755
0	0149	0.895725	0.654556	0.222958
0	0150	0.645488	0.324308	0.722290
0	0151	0.903605	0.829557	0.201525
0	0152	0.448642	0.742959	0.149535
0	0153	0.086614	0.238926	0.660395

0	0154	0.586481	0.238145	0.840568
0	0155	0.954000	0.744553	0.335752
0	0156	0.335208	0.843445	0.448964
0	0157	0.213056	0.343146	0.936229
0	0158	0.331267	0.635510	0.441883
0	0159	0.205042	0.135583	0.956299
0	0160	0.702467	0.150345	0.546807
0	0161	0.817344	0.661125	0.072455
0	0162	0.708913	0.352752	0.556966
0	0163	0.828891	0.838123	0.043513
0	0164	0.271116	0.834902	0.277550
0	0165	0.278186	0.350008	0.766492
0	0166	0.258843	0.651271	0.281833
0	0167	0.263378	0.162282	0.785364
0	0168	0.765835	0.150813	0.719483
0	0169	0.768097	0.628460	0.247873
0	0170	0.776874	0.323368	0.717212
0	0171	0.774061	0.816057	0.219324
0	0172	0.299371	0.739316	0.555682
0	0173	0.243445	0.243124	0.055760
0	0174	0.738366	0.252073	0.434267
0	0175	0.791099	0.738860	0.921371
0	0176	0.214170	0.837388	0.518841
0	0177	0.327286	0.342803	0.029136
0	0178	0.213849	0.640357	0.526694
0	0179	0.326679	0.142114	0.024922
0	0180	0.821288	0.151443	0.470052
0	0181	0.709510	0.639847	0.964997
0	0182	0.828040	0.343852	0.479910
0	0183	0.710410	0.839660	0.964262
0	0184	0.131304	0.739863	0.568844
0	0185	0.408718	0.241274	0.068594
0	0186	0.909606	0.245382	0.426533
0	0187	0.626608	0.740496	0.927969
0	0188	0.095147	0.834516	0.441080
0	0189	0.431487	0.317516	0.915165
0	0190	0.108746	0.662407	0.415371
0	0191	0.441907	0.147009	0.937118
0	0192	0.934773	0.155960	0.564768
0	0193	0.605959	0.664035	0.082728
0	0194	0.939402	0.325157	0.576316
0	0195	0.593515	0.841581	0.049403
0	0196	0.142188	0.831300	0.256031
0	0197	0.404016	0.335545	0.724585

O	O198	0.134698	0.651521	0.223724
O	O199	0.391810	0.160289	0.754749
O	O200	0.892499	0.131343	0.749819
O	O201	0.627322	0.637707	0.273913
O	O202	0.902859	0.333140	0.765926
O	O203	0.644304	0.820137	0.228089
O	O204	0.216412	0.745472	0.158954
O	O205	0.317692	0.245686	0.658576
O	O206	0.831846	0.233415	0.834823
O	O207	0.709382	0.743857	0.353073
O	O208	0.803762	0.771019	0.543539
Al	Al209	0.703978	0.657586	0.318655
Si	Si210	0.440949	0.051247	0.189010
Si	Si211	0.098855	0.549007	0.668475
Si	Si212	0.446451	0.434512	0.162565
Si	Si213	0.088778	0.931455	0.680985
Si	Si214	0.591169	0.933010	0.810998
Si	Si215	0.938717	0.439733	0.328432
Si	Si216	0.590110	0.545478	0.839858
Si	Si217	0.944078	0.047714	0.324450
Si	Si218	0.335900	0.023008	0.342656
Si	Si219	0.205339	0.525388	0.823811
Si	Si220	0.332304	0.463979	0.312237
Si	Si221	0.197081	0.965377	0.833203
Si	Si222	0.698361	0.962177	0.656245
Si	Si223	0.833148	0.464396	0.166973
Si	Si224	0.707759	0.517295	0.695403
Si	Si225	0.832870	0.014993	0.170898
Si	Si226	0.296283	0.046385	0.562095
Si	Si227	0.238153	0.550740	0.043700
Si	Si228	0.295302	0.432580	0.528525
Si	Si229	0.239995	0.938477	0.049178
Si	Si230	0.734235	0.938965	0.438019
Si	Si231	0.798517	0.425350	0.953205
Si	Si232	0.741478	0.556917	0.479924
Si	Si233	0.789364	0.045979	0.957368
Si	Si234	0.140646	0.052039	0.545187
Si	Si235	0.393252	0.554889	0.029009
Si	Si236	0.140970	0.424435	0.530235
Si	Si237	0.393557	0.932843	0.044518
Si	Si238	0.890484	0.926920	0.454948
Si	Si239	0.642287	0.423386	0.969611
Si	Si240	0.896274	0.561832	0.471376
Si	Si241	0.636201	0.050681	0.959660

Si	Si242	0.094452	0.025475	0.328287
Si	Si243	0.443514	0.517677	0.818049
Si	Si244	0.087858	0.464930	0.322743
Si	Si245	0.441510	0.962658	0.830696
Si	Si246	0.939653	0.956572	0.666156
Si	Si247	0.593192	0.462650	0.178265
Si	Si248	0.951200	0.521397	0.678206
Si	Si249	0.589491	0.020782	0.172635
Si	Si250	0.217589	0.059470	0.203928
Si	Si251	0.325338	0.549982	0.685439
Si	Si252	0.205224	0.429920	0.188597
Si	Si253	0.319605	0.922603	0.707121
Si	Si254	0.816110	0.928590	0.799812
Si	Si255	0.713681	0.444635	0.313299
Si	Si256	0.833609	0.550383	0.818637
Si	Si257	0.710155	0.063562	0.298871
Si	Si258	0.444884	0.820227	0.183925
Si	Si259	0.096166	0.317622	0.682484
Si	Si260	0.438023	0.664741	0.175697
Si	Si261	0.091636	0.161374	0.692707
Si	Si262	0.589932	0.160335	0.808983
Si	Si263	0.944022	0.665526	0.316189
Si	Si264	0.595997	0.316594	0.816264
Si	Si265	0.944797	0.821875	0.304619
Si	Si266	0.336333	0.863005	0.332471
Si	Si267	0.209107	0.366224	0.821900
Si	Si268	0.328538	0.622902	0.323180
Si	Si269	0.202216	0.123687	0.837422
Si	Si270	0.702192	0.123310	0.659796
Si	Si271	0.829935	0.621472	0.175873
Si	Si272	0.710567	0.359367	0.676741
Si	Si273	0.832753	0.854879	0.160979
Si	Si274	0.290622	0.818676	0.541526
Si	Si275	0.250062	0.322245	0.037498
Si	Si276	0.290935	0.660129	0.539334
Si	Si277	0.250556	0.163391	0.046366
Si	Si278	0.745064	0.172531	0.450592
Si	Si279	0.786431	0.663123	0.962747
Si	Si280	0.750405	0.329918	0.459414
Si	Si281	0.786807	0.817654	0.945987
Si	Si282	0.137482	0.818190	0.540197
Si	Si283	0.403240	0.317146	0.027895
Si	Si284	0.137314	0.664183	0.527419
Si	Si285	0.403543	0.162938	0.039873

Si	Si286	0.899286	0.167860	0.458250
Si	Si287	0.633210	0.664751	0.969925
Si	Si288	0.904579	0.321301	0.468132
Si	Si289	0.633278	0.819679	0.950259
Si	Si290	0.090270	0.866659	0.330476
Si	Si291	0.449205	0.360476	0.816519
Si	Si292	0.091210	0.621837	0.314540
Si	Si293	0.443712	0.120300	0.823417
Si	Si294	0.946689	0.113853	0.666072
Si	Si295	0.585198	0.618255	0.178385
Si	Si296	0.951171	0.363026	0.681411
Si	Si297	0.591278	0.863132	0.165541
Si	Si298	0.211790	0.821392	0.199490
Si	Si299	0.329960	0.323801	0.683106
Si	Si300	0.209528	0.667710	0.189538
Si	Si301	0.320798	0.170514	0.702293
Si	Si302	0.824786	0.156669	0.800181
Si	Si303	0.830658	0.311373	0.805076
Si	Si304	0.711144	0.814512	0.293575
Zn	Zn305	0.729505	0.725073	0.505997

TS-C₄H₁₀-Dehydro-on-FrameworkO-ZnOH⁺ (Fig. 5/TS3)

Total energy = -1937.43408024 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.802204	0.801238	0.619378
H	H2	0.448745	0.609393	0.513902
H	H3	0.479463	0.530009	0.480097
H	H4	0.488611	0.598562	0.398379
H	H5	0.593753	0.573617	0.485827

H	H6	0.555014	0.582429	0.601450
H	H7	0.528152	0.700951	0.562646
H	H8	0.569422	0.694734	0.448800
H	H9	0.644010	0.662484	0.642310
H	H10	0.624302	0.744087	0.616860
H	H11	0.680377	0.657846	0.509130
C	C12	0.489095	0.583750	0.476474
C	C13	0.554921	0.600652	0.524855
C	C14	0.569249	0.675930	0.525223
C	C15	0.633915	0.695830	0.579742
O	O16	0.514374	0.031678	0.215325
O	O17	0.029139	0.532360	0.710382
O	O18	0.517394	0.446540	0.209689
O	O19	0.011236	0.931873	0.699646
O	O20	0.515592	0.948524	0.785941
O	O21	0.010747	0.458140	0.288661
O	O22	0.521482	0.535073	0.787995
O	O23	0.020943	0.044227	0.293350
O	O24	0.397168	0.061237	0.286210
O	O25	0.152541	0.560848	0.751103
O	O26	0.389316	0.434940	0.238284
O	O27	0.128764	0.950375	0.775647
O	O28	0.633844	0.933103	0.711751
O	O29	0.888073	0.429218	0.243623
O	O30	0.648790	0.546810	0.759140
O	O31	0.898547	0.039377	0.233605
O	O32	0.439479	0.121450	0.123955
O	O33	0.095458	0.613457	0.592265
O	O34	0.448637	0.368214	0.093646
O	O35	0.110897	0.861833	0.631561
O	O36	0.597722	0.860055	0.864095
O	O37	0.944259	0.371105	0.398297
O	O38	0.589168	0.617221	0.899728
O	O39	0.933735	0.121683	0.380297
O	O40	0.405560	0.993634	0.119585
O	O41	0.125392	0.484204	0.597426
O	O42	0.435739	0.499786	0.079626
O	O43	0.102127	0.991588	0.591190
O	O44	0.621129	0.989283	0.887960
O	O45	0.913218	0.499584	0.404987
O	O46	0.603044	0.485954	0.921652
O	O47	0.932736	0.990813	0.411971
O	O48	0.336258	0.048606	0.455996
O	O49	0.205998	0.560478	0.927794

0	050	0.336180	0.442143	0.415795
0	051	0.195893	0.948823	0.942641
0	052	0.701138	0.941993	0.550174
0	053	0.832874	0.425264	0.068544
0	054	0.707253	0.531803	0.587317
0	055	0.835096	0.039880	0.062208
0	056	0.344486	0.944970	0.331180
0	057	0.194918	0.446426	0.828565
0	058	0.333887	0.547476	0.296380
0	059	0.211855	0.048911	0.814397
0	060	0.703131	0.043000	0.681503
0	061	0.842244	0.541424	0.162102
0	062	0.716514	0.436329	0.722630
0	063	0.820592	0.937558	0.187274
0	064	0.266439	0.047387	0.291655
0	065	0.280651	0.538440	0.771800
0	066	0.259660	0.442263	0.258434
0	067	0.257538	0.929506	0.771533
0	068	0.765267	0.931056	0.719211
0	069	0.759375	0.448092	0.224939
0	070	0.778784	0.551682	0.746240
0	071	0.769416	0.055611	0.228652
0	072	0.307411	0.122370	0.612181
0	073	0.231348	0.630627	0.087822
0	074	0.328458	0.364230	0.570570
0	075	0.214277	0.874131	0.100222
0	076	0.711395	0.876260	0.382846
0	077	0.810089	0.354419	0.908174
0	078	0.706551	0.623292	0.449977
0	079	0.809871	0.113104	0.903241
0	080	0.219349	0.036212	0.540371
0	081	0.317702	0.540063	0.025828
0	082	0.220169	0.421702	0.500272
0	083	0.316838	0.931850	0.008867
0	084	0.813182	0.949803	0.447213
0	085	0.721046	0.442290	0.969534
0	086	0.819614	0.564881	0.499762
0	087	0.712961	0.049375	0.995664
0	088	0.325856	0.991975	0.630911
0	089	0.204572	0.501450	0.102714
0	090	0.309522	0.494739	0.591081
0	091	0.233395	0.004230	0.112240
0	092	0.704930	0.007449	0.384307
0	093	0.834111	0.483518	0.892979

0	094	0.728430	0.497058	0.400847
0	095	0.800566	0.981703	0.893683
0	096	0.129600	0.121937	0.602178
0	097	0.408133	0.629796	0.075792
0	098	0.119203	0.353154	0.572932
0	099	0.413939	0.863014	0.088738
0	0100	0.905690	0.861397	0.399172
0	0101	0.626936	0.355820	0.919398
0	0102	0.918963	0.631709	0.419076
0	0103	0.620671	0.121075	0.906941
0	0104	0.114665	0.064070	0.428538
0	0105	0.420581	0.562158	0.908196
0	0106	0.101993	0.431370	0.420250
0	0107	0.439873	0.946471	0.944291
0	0108	0.910493	0.919709	0.573734
0	0109	0.619207	0.420359	0.089956
0	0110	0.937628	0.558064	0.578154
0	0111	0.590052	0.044787	0.059086
0	0112	0.142398	0.050908	0.235986
0	0113	0.403617	0.536207	0.714587
0	0114	0.131478	0.432923	0.227840
0	0115	0.388488	0.922720	0.767093
0	0116	0.891417	0.944656	0.764942
0	0117	0.635863	0.448953	0.282015
0	0118	0.907873	0.554637	0.771016
0	0119	0.639313	0.065689	0.239108
0	0120	0.105170	0.946725	0.342406
0	0121	0.436487	0.439852	0.840352
0	0122	0.107333	0.545779	0.324002
0	0123	0.427122	0.044491	0.814102
0	0124	0.940722	0.037432	0.645129
0	0125	0.599539	0.542970	0.152873
0	0126	0.935353	0.442838	0.673353
0	0127	0.609668	0.942765	0.181843
0	0128	0.226805	0.132158	0.151759
0	0129	0.322894	0.622089	0.631938
0	0130	0.212748	0.368977	0.110903
0	0131	0.318163	0.858815	0.635792
0	0132	0.818639	0.854416	0.855560
0	0133	0.719326	0.367348	0.369510
0	0134	0.830558	0.616304	0.898166
0	0135	0.714410	0.137945	0.356957
0	0136	0.517106	0.851365	0.210710
0	0137	0.027275	0.351783	0.714473

0	0138	0.508207	0.631429	0.202398
0	0139	0.021068	0.131771	0.711654
0	0140	0.519894	0.135439	0.781333
0	0141	0.015511	0.636050	0.285549
0	0142	0.527879	0.351641	0.788700
0	0143	0.015228	0.857203	0.290246
0	0144	0.398379	0.829516	0.277660
0	0145	0.151764	0.330766	0.760537
0	0146	0.389413	0.663399	0.266034
0	0147	0.136490	0.156187	0.792520
0	0148	0.640067	0.155976	0.718896
0	0149	0.895077	0.653573	0.226532
0	0150	0.648501	0.324814	0.729405
0	0151	0.901150	0.833040	0.207538
0	0152	0.451375	0.744953	0.146319
0	0153	0.087047	0.239849	0.657998
0	0154	0.587068	0.240476	0.848222
0	0155	0.951740	0.746197	0.337962
0	0156	0.334289	0.838062	0.444162
0	0157	0.220233	0.332760	0.922692
0	0158	0.330939	0.641393	0.437967
0	0159	0.205339	0.141237	0.957296
0	0160	0.704822	0.142842	0.552635
0	0161	0.810632	0.658094	0.082577
0	0162	0.711199	0.355925	0.564064
0	0163	0.825849	0.841163	0.050996
0	0164	0.268661	0.845063	0.274281
0	0165	0.279795	0.360569	0.752827
0	0166	0.258669	0.654503	0.278597
0	0167	0.267434	0.166119	0.789541
0	0168	0.770592	0.151790	0.722344
0	0169	0.769337	0.628061	0.264099
0	0170	0.780089	0.321790	0.721337
0	0171	0.772030	0.818707	0.227623
0	0172	0.298517	0.739821	0.562440
0	0173	0.244517	0.246087	0.064453
0	0174	0.737750	0.250390	0.450328
0	0175	0.792281	0.739358	0.932329
0	0176	0.214453	0.837183	0.518345
0	0177	0.328987	0.344289	0.029136
0	0178	0.214499	0.640722	0.525799
0	0179	0.326892	0.145234	0.026740
0	0180	0.821754	0.149326	0.469765
0	0181	0.709050	0.639722	0.962445

O	O182	0.827087	0.346314	0.475760
O	O183	0.709840	0.841008	0.964068
O	O184	0.131150	0.739728	0.568402
O	O185	0.411124	0.242991	0.067842
O	O186	0.908491	0.246073	0.431489
O	O187	0.626621	0.741558	0.929398
O	O188	0.095685	0.833039	0.439468
O	O189	0.431371	0.318042	0.912226
O	O190	0.111262	0.664191	0.411412
O	O191	0.440331	0.149944	0.932920
O	O192	0.932756	0.158264	0.571920
O	O193	0.607068	0.664780	0.083118
O	O194	0.934235	0.325570	0.582966
O	O195	0.595510	0.840076	0.056783
O	O196	0.140192	0.834773	0.252893
O	O197	0.406621	0.337518	0.721839
O	O198	0.135649	0.654162	0.218510
O	O199	0.394834	0.162979	0.748046
O	O200	0.896753	0.134425	0.760012
O	O201	0.627936	0.643948	0.275122
O	O202	0.905068	0.334090	0.774830
O	O203	0.642456	0.820855	0.237930
O	O204	0.217349	0.750454	0.158988
O	O205	0.317574	0.249154	0.659141
O	O206	0.833005	0.234203	0.844079
O	O207	0.709766	0.745965	0.363803
O	O208	0.788352	0.799818	0.550774
Al	Al209	0.703296	0.661219	0.326129
Si	Si210	0.439837	0.051973	0.185479
Si	Si211	0.100560	0.547638	0.662156
Si	Si212	0.446906	0.437764	0.155522
Si	Si213	0.088828	0.934088	0.674221
Si	Si214	0.591525	0.933185	0.813544
Si	Si215	0.939302	0.439583	0.334123
Si	Si216	0.591480	0.545944	0.842906
Si	Si217	0.945384	0.048945	0.330051
Si	Si218	0.335799	0.025112	0.341187
Si	Si219	0.208467	0.526088	0.819282
Si	Si220	0.329756	0.466849	0.302024
Si	Si221	0.198510	0.969319	0.826436
Si	Si222	0.701246	0.962893	0.665382
Si	Si223	0.830870	0.462002	0.175571
Si	Si224	0.712872	0.516191	0.704814
Si	Si225	0.831200	0.017828	0.178140

Si	Si226	0.296852	0.050299	0.560285
Si	Si227	0.240143	0.558274	0.036241
Si	Si228	0.298294	0.430731	0.519839
Si	Si229	0.240148	0.939449	0.041669
Si	Si230	0.734057	0.942779	0.441244
Si	Si231	0.799158	0.426427	0.959890
Si	Si232	0.742119	0.552243	0.484365
Si	Si233	0.789974	0.046362	0.963397
Si	Si234	0.141458	0.053470	0.540718
Si	Si235	0.395488	0.558193	0.022528
Si	Si236	0.142063	0.423018	0.522781
Si	Si237	0.393803	0.933961	0.040487
Si	Si238	0.889899	0.929610	0.458397
Si	Si239	0.643009	0.425809	0.975362
Si	Si240	0.897781	0.563508	0.474702
Si	Si241	0.636430	0.051116	0.961889
Si	Si242	0.095374	0.026293	0.325568
Si	Si243	0.445315	0.518447	0.813534
Si	Si244	0.087993	0.467270	0.314659
Si	Si245	0.442752	0.965585	0.827297
Si	Si246	0.938680	0.958403	0.670602
Si	Si247	0.593032	0.465011	0.183199
Si	Si248	0.952232	0.521897	0.683639
Si	Si249	0.588605	0.021090	0.174513
Si	Si250	0.217371	0.058182	0.198203
Si	Si251	0.328839	0.547490	0.677035
Si	Si252	0.202764	0.436537	0.174520
Si	Si253	0.322080	0.926338	0.701029
Si	Si254	0.819066	0.928715	0.807881
Si	Si255	0.710893	0.440200	0.319171
Si	Si256	0.837798	0.551362	0.827976
Si	Si257	0.707227	0.066151	0.302006
Si	Si258	0.445299	0.822000	0.181079
Si	Si259	0.096115	0.318992	0.676656
Si	Si260	0.439671	0.666967	0.172379
Si	Si261	0.093453	0.162567	0.691142
Si	Si262	0.591768	0.163209	0.813839
Si	Si263	0.944889	0.667061	0.317315
Si	Si264	0.597474	0.318487	0.821793
Si	Si265	0.943500	0.823988	0.309083
Si	Si266	0.336151	0.864709	0.331097
Si	Si267	0.211963	0.367868	0.815714
Si	Si268	0.328379	0.626491	0.319929
Si	Si269	0.204824	0.127985	0.838533

Si	Si270	0.704797	0.123266	0.668924
Si	Si271	0.827712	0.619975	0.185683
Si	Si272	0.713811	0.359443	0.684093
Si	Si273	0.829928	0.857953	0.168255
Si	Si274	0.291009	0.818562	0.540484
Si	Si275	0.251699	0.323209	0.031915
Si	Si276	0.291405	0.661358	0.538403
Si	Si277	0.250890	0.166478	0.049282
Si	Si278	0.744915	0.170351	0.457106
Si	Si279	0.785828	0.662869	0.969449
Si	Si280	0.749152	0.329267	0.465296
Si	Si281	0.786562	0.818598	0.952020
Si	Si282	0.137777	0.818087	0.539222
Si	Si283	0.404923	0.318550	0.025954
Si	Si284	0.138012	0.664575	0.524645
Si	Si285	0.404305	0.164887	0.037775
Si	Si286	0.899425	0.168381	0.463368
Si	Si287	0.633119	0.665605	0.969837
Si	Si288	0.903568	0.322225	0.471978
Si	Si289	0.632615	0.820361	0.954567
Si	Si290	0.089291	0.867930	0.331036
Si	Si291	0.450730	0.361952	0.815290
Si	Si292	0.092352	0.624888	0.309935
Si	Si293	0.445274	0.123197	0.819601
Si	Si294	0.947551	0.115764	0.672009
Si	Si295	0.586421	0.621155	0.180781
Si	Si296	0.950592	0.363719	0.686342
Si	Si297	0.591474	0.863934	0.171705
Si	Si298	0.210240	0.826634	0.197153
Si	Si299	0.333111	0.327359	0.677246
Si	Si300	0.210430	0.672201	0.185873
Si	Si301	0.321991	0.173881	0.702026
Si	Si302	0.827273	0.157763	0.806917
Si	Si303	0.832417	0.311762	0.812005
Si	Si304	0.709605	0.816249	0.302940
Zn	Zn305	0.715226	0.749208	0.531508

M-C₄H₉ZnOH-HO-ZnOH⁺ (Fig. 5/M4) Total energy = -1937.86118469 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta      90.000000
_cell_angle_gamma     90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1          0.831461      0.745894      0.627019
  H      H2          0.465546      0.645783      0.554669
  H      H3          0.512617      0.572801      0.572848
  H      H4          0.520713      0.619537      0.461397
  H      H5          0.615133      0.639191      0.585932
  H      H6          0.558243      0.669348      0.670531
  H      H7          0.525267      0.759670      0.552474
  H      H8          0.584511      0.732886      0.467305
  H      H9          0.612393      0.782605      0.679743
  H      H10         0.620215      0.831341      0.572091
  H      H11         0.668551      0.628901      0.476885
  C      C12         0.513788      0.623261      0.541949
  C      C13         0.567563      0.665474      0.590463
  C      C14         0.573845      0.735759      0.547189
  C      C15         0.624091      0.780345      0.600393
  O      O16         0.520170      0.035897      0.216914
  O      O17         0.022379      0.536615      0.717898
  O      O18         0.524626      0.439622      0.216577
  O      O19         0.011873      0.933271      0.708309
  O      O20         0.513877      0.945777      0.789008
  O      O21         0.018583      0.457086      0.295049
  O      O22         0.516872      0.533620      0.793907
  O      O23         0.021914      0.039426      0.293123
  O      O24         0.403305      0.057009      0.294019
  O      O25         0.141132      0.561023      0.783861
  O      O26         0.402178      0.433592      0.278672
  O      O27         0.127998      0.940787      0.791435
  O      O28         0.628671      0.943070      0.703892
  O      O29         0.900208      0.433073      0.226686
  O      O30         0.639157      0.534931      0.740454
  O      O31         0.904546      0.044851      0.215065
  O      O32         0.437640      0.119618      0.128635
  O      O33         0.098894      0.620373      0.619632
  O      O34         0.441182      0.362800      0.122279

```

0	035	0.110440	0.863773	0.633522
0	036	0.605465	0.861980	0.854222
0	037	0.942212	0.370727	0.387731
0	038	0.596766	0.617206	0.881949
0	039	0.933778	0.121199	0.370933
0	040	0.413393	0.989985	0.126017
0	041	0.125983	0.490716	0.619101
0	042	0.431361	0.494426	0.107645
0	043	0.108326	0.995153	0.613195
0	044	0.618555	0.991701	0.886423
0	045	0.913222	0.500142	0.394807
0	046	0.605948	0.486283	0.917823
0	047	0.921607	0.990284	0.394293
0	048	0.339726	0.039477	0.462077
0	049	0.198853	0.541153	0.956453
0	050	0.341227	0.450989	0.449938
0	051	0.196527	0.951573	0.956077
0	052	0.695659	0.943227	0.539420
0	053	0.838117	0.422660	0.056564
0	054	0.708323	0.532760	0.578515
0	055	0.839239	0.035358	0.044833
0	056	0.337368	0.945246	0.321207
0	057	0.200574	0.446343	0.816640
0	058	0.333859	0.543978	0.307968
0	059	0.207863	0.044147	0.813617
0	060	0.710935	0.042737	0.671668
0	061	0.845759	0.540557	0.143307
0	062	0.723313	0.435213	0.708756
0	063	0.829734	0.939148	0.180401
0	064	0.272161	0.057840	0.297307
0	065	0.271372	0.556023	0.795949
0	066	0.271738	0.429503	0.287534
0	067	0.257341	0.924514	0.785989
0	068	0.758443	0.923405	0.708518
0	069	0.770288	0.444924	0.218866
0	070	0.767274	0.556078	0.750882
0	071	0.775114	0.057472	0.211514
0	072	0.311249	0.119637	0.611404
0	073	0.231010	0.620435	0.105259
0	074	0.320090	0.369659	0.600242
0	075	0.219848	0.871128	0.107194
0	076	0.714995	0.873081	0.376696
0	077	0.807304	0.352599	0.898511
0	078	0.706400	0.617609	0.436187

0	079	0.809720	0.112755	0.892703
0	080	0.219116	0.040137	0.534913
0	081	0.318233	0.534714	0.034051
0	082	0.219830	0.432813	0.513725
0	083	0.318082	0.936682	0.018914
0	084	0.815041	0.934181	0.466466
0	085	0.722718	0.441484	0.967649
0	086	0.822746	0.565901	0.495612
0	087	0.715223	0.047902	0.988114
0	088	0.317459	0.989405	0.639486
0	089	0.215086	0.490483	0.134669
0	090	0.303591	0.499563	0.624407
0	091	0.231707	0.001165	0.130422
0	092	0.723721	0.004756	0.373632
0	093	0.832874	0.481650	0.881006
0	094	0.737878	0.491836	0.395894
0	095	0.798318	0.982176	0.874819
0	096	0.130399	0.125733	0.603048
0	097	0.404584	0.624500	0.099618
0	098	0.127887	0.358579	0.597306
0	099	0.410390	0.859289	0.096230
0	0100	0.908397	0.857681	0.388834
0	0101	0.629749	0.355517	0.910563
0	0102	0.920156	0.632539	0.409880
0	0103	0.624845	0.123718	0.901561
0	0104	0.105739	0.057379	0.440777
0	0105	0.428588	0.557219	0.935265
0	0106	0.097386	0.435828	0.446374
0	0107	0.440156	0.940513	0.949299
0	0108	0.928467	0.917679	0.558812
0	0109	0.619460	0.416903	0.083465
0	0110	0.942724	0.558275	0.567222
0	0111	0.593808	0.050782	0.057733
0	0112	0.145603	0.058299	0.252593
0	0113	0.395701	0.547738	0.743759
0	0114	0.142406	0.423085	0.262096
0	0115	0.387335	0.922834	0.771368
0	0116	0.885814	0.943285	0.742215
0	0117	0.645829	0.452141	0.270898
0	0118	0.897291	0.556584	0.752981
0	0119	0.646028	0.060545	0.238235
0	0120	0.110672	0.945339	0.337189
0	0121	0.430829	0.439999	0.845273
0	0122	0.115183	0.542851	0.333733

0	0123	0.427809	0.042807	0.826044
0	0124	0.945626	0.036531	0.635148
0	0125	0.595900	0.539548	0.141688
0	0126	0.935009	0.444407	0.663278
0	0127	0.608957	0.942876	0.169897
0	0128	0.226331	0.132475	0.151093
0	0129	0.318056	0.629764	0.648630
0	0130	0.221456	0.357129	0.144190
0	0131	0.315507	0.856298	0.644613
0	0132	0.819412	0.853965	0.845634
0	0133	0.723585	0.364459	0.358835
0	0134	0.831231	0.614238	0.897692
0	0135	0.722132	0.135126	0.348815
0	0136	0.520202	0.848599	0.204539
0	0137	0.023918	0.353098	0.716683
0	0138	0.514150	0.632280	0.207360
0	0139	0.020338	0.133224	0.710651
0	0140	0.519428	0.133572	0.784176
0	0141	0.021192	0.629900	0.286004
0	0142	0.524734	0.353372	0.791848
0	0143	0.019904	0.856930	0.285237
0	0144	0.405278	0.833681	0.289423
0	0145	0.142726	0.329819	0.788222
0	0146	0.400527	0.656659	0.291553
0	0147	0.134962	0.153619	0.795684
0	0148	0.636875	0.150027	0.709014
0	0149	0.904368	0.648405	0.214133
0	0150	0.642398	0.331697	0.716939
0	0151	0.906660	0.831950	0.196896
0	0152	0.447429	0.742127	0.159839
0	0153	0.088315	0.242345	0.666247
0	0154	0.589035	0.241031	0.834782
0	0155	0.958443	0.743876	0.324086
0	0156	0.336231	0.847165	0.452112
0	0157	0.209761	0.350610	0.951003
0	0158	0.332819	0.633221	0.454318
0	0159	0.205515	0.135017	0.957219
0	0160	0.704518	0.142730	0.543823
0	0161	0.812797	0.660948	0.080910
0	0162	0.709821	0.353003	0.553494
0	0163	0.831405	0.844441	0.040641
0	0164	0.274694	0.834266	0.279313
0	0165	0.273717	0.340541	0.780804
0	0166	0.269739	0.657757	0.287000

0	0167	0.265685	0.160499	0.787419
0	0168	0.767268	0.156166	0.715902
0	0169	0.780523	0.622245	0.264037
0	0170	0.773389	0.315151	0.715260
0	0171	0.776462	0.822786	0.216786
0	0172	0.298704	0.741848	0.555176
0	0173	0.243978	0.243403	0.053686
0	0174	0.740672	0.248320	0.440514
0	0175	0.797421	0.739485	0.927031
0	0176	0.214623	0.840771	0.519889
0	0177	0.328148	0.343103	0.030758
0	0178	0.213679	0.641811	0.531596
0	0179	0.326892	0.141490	0.026281
0	0180	0.824700	0.148460	0.470324
0	0181	0.711243	0.642453	0.962326
0	0182	0.828126	0.344680	0.474218
0	0183	0.713303	0.839110	0.961252
0	0184	0.132806	0.742856	0.572435
0	0185	0.407290	0.240625	0.075176
0	0186	0.909644	0.245572	0.424434
0	0187	0.628108	0.741904	0.920443
0	0188	0.095745	0.834757	0.441365
0	0189	0.439869	0.323346	0.932918
0	0190	0.103530	0.657475	0.430477
0	0191	0.442089	0.151299	0.937930
0	0192	0.938860	0.157618	0.562361
0	0193	0.601911	0.661101	0.068939
0	0194	0.938930	0.326807	0.573366
0	0195	0.596141	0.839905	0.046876
0	0196	0.145722	0.829839	0.258412
0	0197	0.401040	0.330989	0.743998
0	0198	0.143744	0.655857	0.242355
0	0199	0.393872	0.159575	0.754054
0	0200	0.893538	0.131229	0.745250
0	0201	0.639001	0.638560	0.256173
0	0202	0.899136	0.336690	0.760778
0	0203	0.646992	0.822999	0.226533
0	0204	0.221082	0.745499	0.159408
0	0205	0.318320	0.245769	0.660896
0	0206	0.836488	0.233227	0.835061
0	0207	0.715763	0.743539	0.343638
0	0208	0.803263	0.737233	0.570760
Al	Al209	0.711623	0.660625	0.311479
Si	Si210	0.443939	0.050721	0.190712

Si	Si211	0.097182	0.552189	0.684293
Si	Si212	0.448999	0.432872	0.181152
Si	Si213	0.090042	0.933345	0.686079
Si	Si214	0.591478	0.935780	0.809588
Si	Si215	0.943591	0.440489	0.326741
Si	Si216	0.590663	0.543086	0.835241
Si	Si217	0.944913	0.048851	0.318978
Si	Si218	0.338050	0.024665	0.344040
Si	Si219	0.202978	0.525847	0.838817
Si	Si220	0.337339	0.464506	0.331388
Si	Si221	0.197552	0.965234	0.837615
Si	Si222	0.698555	0.963611	0.655381
Si	Si223	0.838918	0.461149	0.162330
Si	Si224	0.709813	0.514438	0.696121
Si	Si225	0.837358	0.018962	0.162851
Si	Si226	0.296525	0.047429	0.562411
Si	Si227	0.240977	0.546893	0.058168
Si	Si228	0.296304	0.438090	0.547571
Si	Si229	0.241600	0.939977	0.053819
Si	Si230	0.737894	0.938205	0.437460
Si	Si231	0.800144	0.424765	0.950981
Si	Si232	0.747150	0.548642	0.477440
Si	Si233	0.790999	0.044589	0.949876
Si	Si234	0.141189	0.054426	0.548236
Si	Si235	0.395582	0.552925	0.044717
Si	Si236	0.142890	0.429718	0.544609
Si	Si237	0.395328	0.931657	0.047739
Si	Si238	0.893334	0.924867	0.451202
Si	Si239	0.644711	0.424625	0.969740
Si	Si240	0.900480	0.564377	0.465906
Si	Si241	0.638202	0.053531	0.957944
Si	Si242	0.095718	0.024844	0.331375
Si	Si243	0.442616	0.519548	0.830659
Si	Si244	0.093488	0.464723	0.333812
Si	Si245	0.442202	0.963265	0.833652
Si	Si246	0.942618	0.957575	0.661450
Si	Si247	0.596496	0.462483	0.177682
Si	Si248	0.948994	0.523815	0.676006
Si	Si249	0.592410	0.022114	0.170808
Si	Si250	0.219020	0.061629	0.207743
Si	Si251	0.321907	0.557783	0.702914
Si	Si252	0.212930	0.425599	0.206504
Si	Si253	0.319159	0.923918	0.709879
Si	Si254	0.815910	0.926382	0.792323

Si	Si255	0.719375	0.438090	0.309778
Si	Si256	0.832282	0.551950	0.821483
Si	Si257	0.716689	0.063736	0.292647
Si	Si258	0.446252	0.820643	0.187608
Si	Si259	0.095412	0.320815	0.692165
Si	Si260	0.442297	0.663963	0.189034
Si	Si261	0.093271	0.163917	0.693794
Si	Si262	0.592431	0.162395	0.807435
Si	Si263	0.950522	0.664338	0.308566
Si	Si264	0.596195	0.320214	0.814055
Si	Si265	0.948320	0.821988	0.298892
Si	Si266	0.338361	0.865104	0.335118
Si	Si267	0.206875	0.366756	0.833714
Si	Si268	0.334256	0.622842	0.335194
Si	Si269	0.203315	0.123274	0.838344
Si	Si270	0.704637	0.122925	0.660252
Si	Si271	0.834534	0.617803	0.177671
Si	Si272	0.711804	0.358340	0.673488
Si	Si273	0.835849	0.859491	0.158665
Si	Si274	0.290940	0.821392	0.543129
Si	Si275	0.251084	0.323163	0.045084
Si	Si276	0.290468	0.662224	0.546882
Si	Si277	0.250861	0.163541	0.046844
Si	Si278	0.748204	0.168585	0.450754
Si	Si279	0.788359	0.663923	0.967133
Si	Si280	0.750802	0.327055	0.457141
Si	Si281	0.790283	0.818922	0.944919
Si	Si282	0.138170	0.820729	0.541305
Si	Si283	0.404034	0.317827	0.040203
Si	Si284	0.137219	0.665505	0.538609
Si	Si285	0.403519	0.163080	0.041792
Si	Si286	0.901986	0.167728	0.456558
Si	Si287	0.634524	0.665582	0.959650
Si	Si288	0.904816	0.321823	0.464727
Si	Si289	0.635882	0.820536	0.946684
Si	Si290	0.093145	0.866537	0.330227
Si	Si291	0.449060	0.362055	0.828036
Si	Si292	0.096076	0.621338	0.323323
Si	Si293	0.445547	0.121706	0.825807
Si	Si294	0.949272	0.114912	0.663519
Si	Si295	0.589106	0.618445	0.170511
Si	Si296	0.949335	0.365371	0.678277
Si	Si297	0.593417	0.863473	0.162302
Si	Si298	0.215356	0.821139	0.201264

Si	Si299	0.328126	0.322332	0.696724
Si	Si300	0.216568	0.669176	0.198353
Si	Si301	0.322336	0.170214	0.703408
Si	Si302	0.826607	0.157560	0.796554
Si	Si303	0.829224	0.310205	0.802009
Si	Si304	0.713996	0.815270	0.292032
Zn	Zn305	0.717403	0.758684	0.589632

TS-C₄H₉ZnOH-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 5/TS4)

Total energy = -1936.51906512 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.851316	0.746200	0.560141
H	H2	0.643106	0.811254	0.578342
H	H3	0.643445	0.638331	0.503217
H	H4	0.670653	0.760841	0.681237
H	H5	0.583572	0.685944	0.652087
H	H6	0.612995	0.654692	0.537084
H	H7	0.561517	0.762060	0.455786
H	H8	0.518387	0.779764	0.565487
H	H9	0.511886	0.646285	0.453064
H	H10	0.449993	0.707847	0.458444
H	H11	0.471247	0.663038	0.567077
C	C12	0.653768	0.760656	0.604239
C	C13	0.597769	0.717357	0.589287
C	C14	0.541954	0.739028	0.523465
C	C15	0.490829	0.685748	0.499327
O	O16	0.518548	0.035179	0.213787
O	O17	0.027602	0.532758	0.711412
O	O18	0.518300	0.443991	0.210170
O	O19	0.012838	0.930340	0.703074

0	020	0.515248	0.945106	0.785564
0	021	0.011337	0.457698	0.289206
0	022	0.520789	0.535014	0.787262
0	023	0.022204	0.043589	0.290390
0	024	0.401846	0.056225	0.290136
0	025	0.150368	0.562830	0.754962
0	026	0.391201	0.429522	0.245481
0	027	0.129221	0.943661	0.784390
0	028	0.631804	0.934313	0.705504
0	029	0.889616	0.429090	0.238800
0	030	0.646957	0.547714	0.753468
0	031	0.902613	0.037091	0.221213
0	032	0.437523	0.122356	0.128924
0	033	0.094473	0.614121	0.594133
0	034	0.448068	0.367098	0.093874
0	035	0.113052	0.860818	0.633203
0	036	0.601197	0.857770	0.857443
0	037	0.943388	0.370870	0.395402
0	038	0.589962	0.615523	0.899096
0	039	0.930979	0.122392	0.367285
0	040	0.411302	0.993446	0.118208
0	041	0.125225	0.485287	0.601088
0	042	0.432966	0.498603	0.087256
0	043	0.106681	0.991154	0.601820
0	044	0.621408	0.987156	0.884915
0	045	0.911253	0.499108	0.401562
0	046	0.604452	0.483667	0.915970
0	047	0.930018	0.992808	0.404896
0	048	0.339799	0.039104	0.458753
0	049	0.201343	0.549681	0.933449
0	050	0.338804	0.444711	0.424392
0	051	0.196491	0.950334	0.951170
0	052	0.697977	0.940359	0.541883
0	053	0.834229	0.425528	0.064061
0	054	0.704894	0.530800	0.581539
0	055	0.837566	0.034353	0.050721
0	056	0.338228	0.943387	0.319238
0	057	0.195008	0.445157	0.811369
0	058	0.336187	0.543999	0.292850
0	059	0.210054	0.045243	0.812453
0	060	0.705299	0.041283	0.673671
0	061	0.843342	0.541383	0.158384
0	062	0.712976	0.435847	0.717841
0	063	0.823784	0.935060	0.181431

0	064	0.270682	0.054842	0.294886
0	065	0.278954	0.543846	0.777873
0	066	0.261501	0.437413	0.268833
0	067	0.258536	0.925176	0.782005
0	068	0.763020	0.925956	0.709044
0	069	0.760741	0.447298	0.220615
0	070	0.776657	0.550492	0.741131
0	071	0.773959	0.054644	0.218691
0	072	0.311361	0.117936	0.610497
0	073	0.228860	0.625344	0.087426
0	074	0.322894	0.362833	0.574746
0	075	0.218450	0.871859	0.105353
0	076	0.717279	0.873864	0.377942
0	077	0.811528	0.351781	0.906667
0	078	0.706447	0.623541	0.446879
0	079	0.811912	0.110546	0.894779
0	080	0.220164	0.036715	0.534504
0	081	0.316947	0.537753	0.023517
0	082	0.219569	0.425962	0.498884
0	083	0.317953	0.934038	0.013696
0	084	0.814917	0.945413	0.456346
0	085	0.720883	0.438017	0.967551
0	086	0.819127	0.564387	0.499123
0	087	0.714946	0.047348	0.989082
0	088	0.320643	0.987282	0.635112
0	089	0.208298	0.495521	0.110930
0	090	0.307748	0.493126	0.601291
0	091	0.233969	0.001899	0.123438
0	092	0.712044	0.005739	0.375749
0	093	0.831819	0.480912	0.886406
0	094	0.730168	0.496919	0.396554
0	095	0.799041	0.980060	0.880411
0	096	0.131344	0.121672	0.602395
0	097	0.405476	0.628619	0.079046
0	098	0.124103	0.353593	0.579513
0	099	0.412206	0.861848	0.094843
0	0100	0.906957	0.862678	0.388747
0	0101	0.625769	0.352881	0.916559
0	0102	0.920296	0.630775	0.418737
0	0103	0.623696	0.119334	0.899397
0	0104	0.109747	0.059306	0.434329
0	0105	0.422988	0.559764	0.913743
0	0106	0.098845	0.430592	0.426785
0	0107	0.440272	0.940121	0.944626

0	0108	0.920406	0.916613	0.564776
0	0109	0.617763	0.419182	0.086014
0	0110	0.937892	0.556057	0.575237
0	0111	0.592288	0.045846	0.054481
0	0112	0.145265	0.055874	0.244229
0	0113	0.401999	0.539281	0.719849
0	0114	0.133306	0.429326	0.236486
0	0115	0.388870	0.918856	0.766346
0	0116	0.889631	0.939688	0.753491
0	0117	0.637590	0.447457	0.278038
0	0118	0.905503	0.553504	0.766857
0	0119	0.644260	0.064935	0.233267
0	0120	0.107455	0.945860	0.334987
0	0121	0.436167	0.439016	0.838123
0	0122	0.107994	0.543993	0.327162
0	0123	0.426422	0.040374	0.818098
0	0124	0.942492	0.034564	0.641658
0	0125	0.598436	0.541607	0.150881
0	0126	0.935866	0.441463	0.671212
0	0127	0.610093	0.943245	0.176625
0	0128	0.227715	0.132322	0.149064
0	0129	0.321274	0.622558	0.632582
0	0130	0.215464	0.362800	0.123797
0	0131	0.314163	0.854091	0.641144
0	0132	0.816883	0.851857	0.848484
0	0133	0.721743	0.367170	0.366317
0	0134	0.828045	0.613571	0.894845
0	0135	0.720257	0.136297	0.350171
0	0136	0.519453	0.850103	0.208810
0	0137	0.027807	0.350979	0.713853
0	0138	0.506853	0.628955	0.203192
0	0139	0.020688	0.130331	0.708851
0	0140	0.519053	0.130712	0.780851
0	0141	0.014840	0.632886	0.283885
0	0142	0.527144	0.349997	0.786060
0	0143	0.017902	0.855573	0.284904
0	0144	0.403393	0.829968	0.285411
0	0145	0.150466	0.325414	0.767849
0	0146	0.389001	0.662130	0.269555
0	0147	0.134913	0.153578	0.793051
0	0148	0.636624	0.151885	0.709474
0	0149	0.893873	0.653468	0.227419
0	0150	0.647908	0.322960	0.725947
0	0151	0.904214	0.829840	0.199965

0	0152	0.450880	0.743688	0.150396
0	0153	0.087091	0.238759	0.657548
0	0154	0.586106	0.237689	0.841305
0	0155	0.954837	0.745251	0.334758
0	0156	0.335977	0.844463	0.448857
0	0157	0.216017	0.342760	0.931474
0	0158	0.329681	0.634147	0.438343
0	0159	0.206048	0.136915	0.954887
0	0160	0.704503	0.141377	0.545381
0	0161	0.813997	0.658374	0.078735
0	0162	0.710573	0.353551	0.560584
0	0163	0.828738	0.839623	0.043577
0	0164	0.273059	0.833497	0.276554
0	0165	0.279485	0.350864	0.760545
0	0166	0.258556	0.649985	0.277281
0	0167	0.265308	0.162591	0.784216
0	0168	0.766976	0.152444	0.718289
0	0169	0.766860	0.626657	0.256658
0	0170	0.779545	0.322735	0.719160
0	0171	0.774671	0.816454	0.220169
0	0172	0.300815	0.738630	0.552530
0	0173	0.244152	0.244342	0.054879
0	0174	0.738181	0.249331	0.444461
0	0175	0.791884	0.737266	0.927135
0	0176	0.214373	0.835377	0.515061
0	0177	0.328729	0.343469	0.028767
0	0178	0.213209	0.641010	0.525447
0	0179	0.327558	0.143556	0.023621
0	0180	0.823485	0.149711	0.470458
0	0181	0.708743	0.638730	0.966133
0	0182	0.827663	0.344003	0.476554
0	0183	0.710754	0.838986	0.963245
0	0184	0.129712	0.739791	0.566768
0	0185	0.410869	0.242015	0.065825
0	0186	0.910063	0.245524	0.427460
0	0187	0.626480	0.739974	0.928576
0	0188	0.094474	0.835770	0.440596
0	0189	0.431251	0.317764	0.911486
0	0190	0.109211	0.663105	0.411661
0	0191	0.442800	0.146000	0.935984
0	0192	0.938568	0.153508	0.560699
0	0193	0.604615	0.663785	0.082815
0	0194	0.936652	0.324314	0.579684
0	0195	0.595067	0.841129	0.051375

O	O196	0.143969	0.830931	0.257000
O	O197	0.405792	0.336326	0.720656
O	O198	0.135109	0.651550	0.219471
O	O199	0.393710	0.159179	0.752977
O	O200	0.894219	0.134339	0.746090
O	O201	0.626225	0.642511	0.275331
O	O202	0.905091	0.332243	0.770802
O	O203	0.645549	0.822486	0.231532
O	O204	0.217077	0.746093	0.156503
O	O205	0.320161	0.245055	0.656584
O	O206	0.832751	0.232546	0.838026
O	O207	0.710010	0.744935	0.356619
O	O208	0.824278	0.749006	0.501350
Al	Al209	0.702805	0.659652	0.324377
Si	Si210	0.442730	0.051774	0.187009
Si	Si211	0.099290	0.548668	0.664814
Si	Si212	0.446791	0.435177	0.159387
Si	Si213	0.090839	0.931702	0.680280
Si	Si214	0.591997	0.931518	0.809666
Si	Si215	0.938933	0.439496	0.331638
Si	Si216	0.591628	0.544996	0.840077
Si	Si217	0.945610	0.048956	0.321163
Si	Si218	0.337419	0.023093	0.341117
Si	Si219	0.206402	0.525055	0.819532
Si	Si220	0.332078	0.463750	0.307954
Si	Si221	0.198635	0.966068	0.833205
Si	Si222	0.699860	0.961430	0.657576
Si	Si223	0.832099	0.461964	0.171389
Si	Si224	0.710545	0.515751	0.698871
Si	Si225	0.834660	0.015003	0.167809
Si	Si226	0.297587	0.045851	0.560259
Si	Si227	0.239105	0.552178	0.039111
Si	Si228	0.297174	0.431604	0.525094
Si	Si229	0.241608	0.939212	0.049096
Si	Si230	0.736614	0.941112	0.436629
Si	Si231	0.799220	0.424183	0.956498
Si	Si232	0.741423	0.553360	0.480029
Si	Si233	0.791309	0.043439	0.953480
Si	Si234	0.142165	0.052077	0.543462
Si	Si235	0.394544	0.556390	0.026269
Si	Si236	0.142131	0.424115	0.526835
Si	Si237	0.395240	0.932598	0.043155
Si	Si238	0.892883	0.928761	0.453207
Si	Si239	0.642626	0.423122	0.971801

Si	Si240	0.896968	0.562819	0.472726
Si	Si241	0.638239	0.049917	0.956463
Si	Si242	0.095798	0.025758	0.326536
Si	Si243	0.445212	0.518169	0.815769
Si	Si244	0.087935	0.465560	0.319395
Si	Si245	0.442608	0.961332	0.828397
Si	Si246	0.941416	0.955394	0.665712
Si	Si247	0.593312	0.463421	0.180845
Si	Si248	0.951374	0.520804	0.681422
Si	Si249	0.591506	0.022094	0.169958
Si	Si250	0.219459	0.060600	0.202926
Si	Si251	0.327120	0.549252	0.682376
Si	Si252	0.204971	0.431551	0.184421
Si	Si253	0.320147	0.921942	0.705747
Si	Si254	0.817415	0.924992	0.797406
Si	Si255	0.712745	0.439949	0.315616
Si	Si256	0.835353	0.549464	0.823197
Si	Si257	0.712857	0.065041	0.294139
Si	Si258	0.446681	0.820973	0.184813
Si	Si259	0.097012	0.317457	0.679534
Si	Si260	0.438610	0.665435	0.174915
Si	Si261	0.093248	0.161407	0.690501
Si	Si262	0.591240	0.160289	0.807701
Si	Si263	0.945002	0.665998	0.316621
Si	Si264	0.596717	0.316211	0.817950
Si	Si265	0.945852	0.822330	0.302649
Si	Si266	0.337443	0.863085	0.331936
Si	Si267	0.210701	0.366105	0.817419
Si	Si268	0.328154	0.622377	0.319463
Si	Si269	0.203739	0.124497	0.836103
Si	Si270	0.703416	0.121769	0.661753
Si	Si271	0.827700	0.619701	0.182803
Si	Si272	0.712689	0.358673	0.680522
Si	Si273	0.832941	0.855341	0.161374
Si	Si274	0.290812	0.818024	0.539786
Si	Si275	0.251342	0.323198	0.034691
Si	Si276	0.290589	0.659547	0.536443
Si	Si277	0.251426	0.164644	0.045160
Si	Si278	0.746813	0.169532	0.452295
Si	Si279	0.785823	0.661407	0.967489
Si	Si280	0.749799	0.328085	0.462233
Si	Si281	0.787164	0.816525	0.946971
Si	Si282	0.137523	0.818050	0.538462
Si	Si283	0.404657	0.317829	0.025123

Si	Si284	0.136510	0.664316	0.524481
Si	Si285	0.404632	0.163533	0.038379
Si	Si286	0.901071	0.167406	0.456329
Si	Si287	0.632669	0.664175	0.970625
Si	Si288	0.904375	0.321240	0.469610
Si	Si289	0.633548	0.819077	0.951273
Si	Si290	0.091009	0.866848	0.329089
Si	Si291	0.450243	0.360966	0.813622
Si	Si292	0.091405	0.622635	0.310609
Si	Si293	0.445134	0.119082	0.822401
Si	Si294	0.948539	0.113541	0.664346
Si	Si295	0.585177	0.619529	0.180790
Si	Si296	0.951346	0.362454	0.683742
Si	Si297	0.592930	0.864243	0.166924
Si	Si298	0.213096	0.821521	0.199050
Si	Si299	0.331929	0.323546	0.678858
Si	Si300	0.209741	0.668044	0.185161
Si	Si301	0.322669	0.170010	0.700829
Si	Si302	0.826324	0.156730	0.798777
Si	Si303	0.832396	0.310583	0.808419
Si	Si304	0.712593	0.814556	0.296339
Zn	Zn305	0.736314	0.745356	0.525658

C₄H₁₀-Phys.Ads-ZnH⁺ (Fig. 6/M1) Total energy = -1933.49955536 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.742015	0.761636	0.586873
H	H2	0.496840	0.818840	0.581795
H	H3	0.537804	0.853321	0.477888
H	H4	0.583501	0.815805	0.574608

H	H5	0.573643	0.740207	0.423033
H	H6	0.487955	0.742446	0.434505
H	H7	0.495000	0.688121	0.601157
H	H8	0.580981	0.686954	0.593532
H	H9	0.487375	0.611912	0.452946
H	H10	0.535037	0.575609	0.548839
H	H11	0.573790	0.610741	0.443437
C	C12	0.538259	0.811814	0.530807
C	C13	0.533665	0.744403	0.477685
C	C14	0.535978	0.684360	0.548321
C	C15	0.532901	0.616743	0.495512
O	O16	0.520372	0.035083	0.216742
O	O17	0.020171	0.542978	0.715438
O	O18	0.526743	0.439628	0.213765
O	O19	0.012455	0.935449	0.706111
O	O20	0.515245	0.948062	0.788932
O	O21	0.022126	0.455121	0.292440
O	O22	0.515522	0.540584	0.792814
O	O23	0.020874	0.037964	0.294471
O	O24	0.402714	0.059201	0.290955
O	O25	0.136651	0.557020	0.793150
O	O26	0.407057	0.436139	0.287991
O	O27	0.128989	0.939839	0.789324
O	O28	0.629165	0.949389	0.702010
O	O29	0.905166	0.438326	0.213829
O	O30	0.634865	0.537209	0.726509
O	O31	0.904419	0.046116	0.213376
O	O32	0.440760	0.121173	0.126679
O	O33	0.106077	0.623972	0.630370
O	O34	0.437988	0.362816	0.130264
O	O35	0.109690	0.864740	0.629927
O	O36	0.608519	0.863952	0.848308
O	O37	0.938731	0.371388	0.375475
O	O38	0.603821	0.619352	0.874448
O	O39	0.933390	0.120569	0.371917
O	O40	0.413957	0.992097	0.123226
O	O41	0.124568	0.493110	0.621889
O	O42	0.429444	0.494285	0.112995
O	O43	0.110101	0.996225	0.612454
O	O44	0.620201	0.992848	0.887458
O	O45	0.915455	0.501913	0.384852
O	O46	0.607525	0.488059	0.906156
O	O47	0.917388	0.989927	0.390848
O	O48	0.339935	0.039097	0.459507

0	049	0.198296	0.540109	0.961517
0	050	0.341909	0.452636	0.455971
0	051	0.196619	0.951182	0.954587
0	052	0.694052	0.937532	0.536480
0	053	0.840160	0.427202	0.046393
0	054	0.705524	0.538463	0.565218
0	055	0.838859	0.038446	0.043692
0	056	0.338436	0.946381	0.316546
0	057	0.205782	0.446914	0.819352
0	058	0.334332	0.544290	0.311871
0	059	0.207837	0.043856	0.812136
0	060	0.711480	0.045812	0.648441
0	061	0.851505	0.545835	0.129233
0	062	0.719493	0.438361	0.693872
0	063	0.830510	0.939769	0.175463
0	064	0.271349	0.057841	0.295760
0	065	0.267144	0.561651	0.797333
0	066	0.276622	0.427788	0.290160
0	067	0.258784	0.924924	0.785347
0	068	0.759095	0.930023	0.705788
0	069	0.775227	0.453683	0.210820
0	070	0.762705	0.558324	0.739549
0	071	0.774823	0.056931	0.211883
0	072	0.312880	0.121141	0.607025
0	073	0.229267	0.618297	0.112038
0	074	0.318817	0.373184	0.608077
0	075	0.222541	0.869338	0.103453
0	076	0.712919	0.874537	0.368645
0	077	0.808812	0.356596	0.889370
0	078	0.723794	0.632389	0.429802
0	079	0.811287	0.121178	0.896445
0	080	0.219366	0.042960	0.532214
0	081	0.317990	0.535486	0.034873
0	082	0.219876	0.436389	0.517387
0	083	0.318297	0.939185	0.017686
0	084	0.814234	0.927728	0.465369
0	085	0.722956	0.442968	0.962888
0	086	0.825202	0.560687	0.496302
0	087	0.715596	0.053698	0.986529
0	088	0.316679	0.991075	0.638135
0	089	0.217511	0.487983	0.138469
0	090	0.303120	0.503334	0.628679
0	091	0.229194	0.999431	0.130910
0	092	0.726872	0.005688	0.377103

0	093	0.830214	0.486589	0.871334
0	094	0.734491	0.506152	0.379835
0	095	0.798573	0.991830	0.868697
0	096	0.129859	0.127112	0.603029
0	097	0.403916	0.624438	0.101255
0	098	0.129220	0.361115	0.601604
0	099	0.410251	0.861150	0.095834
0	0100	0.910486	0.856585	0.388811
0	0101	0.631471	0.357345	0.900869
0	0102	0.913655	0.634370	0.400632
0	0103	0.621622	0.125218	0.901388
0	0104	0.105091	0.059049	0.440510
0	0105	0.430379	0.555823	0.939815
0	0106	0.097364	0.437123	0.449517
0	0107	0.440313	0.940827	0.947500
0	0108	0.928870	0.919593	0.557071
0	0109	0.616592	0.418758	0.072544
0	0110	0.948070	0.561526	0.555336
0	0111	0.595287	0.051223	0.059192
0	0112	0.144477	0.059649	0.251981
0	0113	0.392819	0.553427	0.750483
0	0114	0.146840	0.420940	0.268800
0	0115	0.388826	0.924885	0.768281
0	0116	0.886470	0.950325	0.738806
0	0117	0.649592	0.450863	0.258252
0	0118	0.892664	0.556355	0.734594
0	0119	0.646156	0.057690	0.241549
0	0120	0.111885	0.946461	0.338196
0	0121	0.431973	0.442702	0.839036
0	0122	0.117280	0.541955	0.332798
0	0123	0.428368	0.044240	0.826152
0	0124	0.949370	0.039435	0.628719
0	0125	0.595457	0.540560	0.136231
0	0126	0.941050	0.447087	0.649039
0	0127	0.609263	0.941737	0.169230
0	0128	0.226253	0.131452	0.148415
0	0129	0.316898	0.633752	0.650736
0	0130	0.224599	0.354928	0.148859
0	0131	0.316956	0.857932	0.642866
0	0132	0.820744	0.863100	0.845238
0	0133	0.733353	0.374795	0.354252
0	0134	0.830827	0.619935	0.876706
0	0135	0.720829	0.135282	0.348587
0	0136	0.521274	0.846555	0.200723

0	0137	0.022801	0.353079	0.716326
0	0138	0.516213	0.635449	0.202206
0	0139	0.019329	0.137628	0.709523
0	0140	0.518565	0.135812	0.780388
0	0141	0.022058	0.628435	0.290000
0	0142	0.523403	0.353230	0.788604
0	0143	0.021454	0.858556	0.283115
0	0144	0.407033	0.835065	0.288948
0	0145	0.139864	0.333823	0.793863
0	0146	0.403603	0.655785	0.292654
0	0147	0.134060	0.152791	0.796456
0	0148	0.636621	0.147563	0.707519
0	0149	0.910252	0.652114	0.204177
0	0150	0.638923	0.334169	0.706510
0	0151	0.908090	0.833280	0.195762
0	0152	0.444876	0.742750	0.158093
0	0153	0.091468	0.244338	0.668395
0	0154	0.590804	0.242288	0.828392
0	0155	0.961006	0.744585	0.321834
0	0156	0.337116	0.850085	0.450417
0	0157	0.208459	0.351846	0.955717
0	0158	0.336706	0.634670	0.456483
0	0159	0.207840	0.134913	0.954848
0	0160	0.704468	0.156832	0.542819
0	0161	0.827724	0.666841	0.060005
0	0162	0.708349	0.352229	0.543873
0	0163	0.833578	0.843388	0.037563
0	0164	0.276329	0.834551	0.277398
0	0165	0.270786	0.336068	0.784639
0	0166	0.272776	0.659191	0.289312
0	0167	0.264326	0.160384	0.781992
0	0168	0.766460	0.155133	0.716587
0	0169	0.783098	0.632462	0.238085
0	0170	0.769077	0.317743	0.709759
0	0171	0.778351	0.822864	0.213288
0	0172	0.299733	0.744166	0.551952
0	0173	0.245159	0.243028	0.052731
0	0174	0.742485	0.253302	0.421622
0	0175	0.797456	0.744899	0.912324
0	0176	0.215581	0.843444	0.518829
0	0177	0.328471	0.343407	0.028625
0	0178	0.215888	0.643437	0.526722
0	0179	0.328641	0.141613	0.027211
0	0180	0.823851	0.152943	0.467037

O	O181	0.716075	0.646475	0.963311
O	O182	0.830427	0.343952	0.478024
O	O183	0.714766	0.843013	0.960158
O	O184	0.135376	0.744112	0.570582
O	O185	0.408500	0.241972	0.073509
O	O186	0.911478	0.246564	0.418189
O	O187	0.631883	0.744029	0.916719
O	O188	0.097383	0.834129	0.438178
O	O189	0.443302	0.330054	0.938148
O	O190	0.100884	0.652816	0.438469
O	O191	0.442787	0.153426	0.935899
O	O192	0.936950	0.161370	0.561715
O	O193	0.603710	0.661627	0.062459
O	O194	0.946154	0.329153	0.562555
O	O195	0.596167	0.841868	0.040601
O	O196	0.147283	0.832235	0.255269
O	O197	0.398474	0.329980	0.751460
O	O198	0.145484	0.658396	0.252412
O	O199	0.392780	0.160307	0.753139
O	O200	0.892568	0.129295	0.743379
O	O201	0.641389	0.639152	0.249515
O	O202	0.895470	0.342893	0.744417
O	O203	0.648190	0.820133	0.218061
O	O204	0.221628	0.744630	0.160662
O	O205	0.318431	0.247041	0.658857
O	O206	0.839154	0.237573	0.822892
O	O207	0.717953	0.744930	0.341381
Al	Al208	0.715175	0.658880	0.301809
Si	Si209	0.444736	0.052119	0.188957
Si	Si210	0.096943	0.554161	0.689163
Si	Si211	0.449740	0.433423	0.186153
Si	Si212	0.090702	0.934160	0.684020
Si	Si213	0.593082	0.938575	0.807799
Si	Si214	0.945404	0.441801	0.317286
Si	Si215	0.591378	0.546487	0.826385
Si	Si216	0.943792	0.048810	0.318297
Si	Si217	0.338064	0.025555	0.341120
Si	Si218	0.202192	0.526174	0.843534
Si	Si219	0.340069	0.465142	0.337039
Si	Si220	0.198173	0.964923	0.836142
Si	Si221	0.698422	0.966041	0.648794
Si	Si222	0.843170	0.466917	0.151150
Si	Si223	0.705758	0.517777	0.681294
Si	Si224	0.837299	0.020144	0.161003

Si	Si225	0.296886	0.048719	0.559668
Si	Si226	0.241024	0.545744	0.062587
Si	Si227	0.296108	0.441180	0.553075
Si	Si228	0.241701	0.939774	0.052390
Si	Si229	0.737528	0.936502	0.435909
Si	Si230	0.800384	0.428556	0.942297
Si	Si231	0.747597	0.558501	0.468180
Si	Si232	0.791435	0.051362	0.948721
Si	Si233	0.141436	0.056247	0.547376
Si	Si234	0.395403	0.552510	0.047632
Si	Si235	0.142894	0.432177	0.548018
Si	Si236	0.395510	0.933253	0.046185
Si	Si237	0.893024	0.923977	0.449793
Si	Si238	0.644871	0.426572	0.960522
Si	Si239	0.901000	0.564392	0.458215
Si	Si240	0.638158	0.055831	0.957959
Si	Si241	0.095391	0.025681	0.331590
Si	Si242	0.442605	0.522786	0.831451
Si	Si243	0.095848	0.463739	0.335465
Si	Si244	0.443141	0.964753	0.832423
Si	Si245	0.943947	0.961053	0.658220
Si	Si246	0.597246	0.462990	0.169962
Si	Si247	0.949990	0.526786	0.664700
Si	Si248	0.592859	0.021179	0.171404
Si	Si249	0.217931	0.061306	0.206462
Si	Si250	0.319783	0.562327	0.706824
Si	Si251	0.216637	0.423550	0.211165
Si	Si252	0.320102	0.925481	0.708251
Si	Si253	0.816439	0.934207	0.789185
Si	Si254	0.723390	0.446285	0.300674
Si	Si255	0.829148	0.554691	0.806378
Si	Si256	0.717154	0.063350	0.294294
Si	Si257	0.446178	0.821120	0.185773
Si	Si258	0.095552	0.322877	0.695061
Si	Si259	0.443028	0.664577	0.188232
Si	Si260	0.093434	0.165623	0.694174
Si	Si261	0.591986	0.163179	0.804456
Si	Si262	0.951698	0.665229	0.304036
Si	Si263	0.595891	0.321537	0.806585
Si	Si264	0.950463	0.822751	0.296995
Si	Si265	0.339581	0.866482	0.332990
Si	Si266	0.206268	0.367214	0.838043
Si	Si267	0.336906	0.623361	0.337339
Si	Si268	0.203427	0.123027	0.836308

Si	Si269	0.704681	0.126207	0.654111
Si	Si270	0.841379	0.623865	0.159891
Si	Si271	0.708618	0.360594	0.663496
Si	Si272	0.837828	0.860146	0.154740
Si	Si273	0.291983	0.823673	0.541174
Si	Si274	0.251887	0.322942	0.046757
Si	Si275	0.292194	0.664386	0.546191
Si	Si276	0.252239	0.163249	0.045528
Si	Si277	0.747939	0.174500	0.445250
Si	Si278	0.792783	0.668972	0.952833
Si	Si279	0.753604	0.330817	0.449676
Si	Si280	0.791486	0.823171	0.939642
Si	Si281	0.139401	0.821818	0.539017
Si	Si282	0.404623	0.319882	0.042372
Si	Si283	0.139603	0.665954	0.541493
Si	Si284	0.405135	0.164412	0.040720
Si	Si285	0.901702	0.169820	0.454225
Si	Si286	0.638838	0.667505	0.955064
Si	Si287	0.906760	0.322943	0.458158
Si	Si288	0.637965	0.822772	0.941817
Si	Si289	0.094823	0.867703	0.328313
Si	Si290	0.449117	0.364089	0.829087
Si	Si291	0.096831	0.620263	0.328428
Si	Si292	0.445381	0.123275	0.824058
Si	Si293	0.949195	0.117344	0.661149
Si	Si294	0.590534	0.619604	0.164519
Si	Si295	0.951230	0.367997	0.668182
Si	Si296	0.593610	0.862687	0.156914
Si	Si297	0.217006	0.821059	0.199383
Si	Si298	0.326541	0.322515	0.700725
Si	Si299	0.217443	0.669148	0.203390
Si	Si300	0.322103	0.171150	0.700185
Si	Si301	0.827207	0.160346	0.794099
Si	Si302	0.828092	0.314438	0.791316
Si	Si303	0.714449	0.817064	0.284647
Zn	Zn304	0.730780	0.724366	0.491183

TS-C₄H₁₀-Dehydro-on-ZnH⁺ (Fig. 6/TS1) Total energy = -1930.75923127 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578

```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta      90.000000
_cell_angle_gamma     90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1          0.720341      0.751690      0.603801
  H      H2          0.488835      0.753793      0.813570
  H      H3          0.411578      0.740040      0.756438
  H      H4          0.457412      0.812243      0.727308
  H      H5          0.466623      0.726963      0.590709
  H      H6          0.496402      0.667989      0.676091
  H      H7          0.594485      0.739512      0.708611
  H      H8          0.565305      0.799522      0.624275
  H      H9          0.595806      0.654348      0.565987
  H      H10         0.667703      0.738711      0.593145
  H      H11         0.572040      0.719783      0.484347
  C      C12         0.461332      0.759017      0.744037
  C      C13         0.495267      0.721561      0.659435
  C      C14         0.565781      0.745709      0.640019
  C      C15         0.598598      0.708406      0.553371
  O      O16         0.522088      0.034578      0.221794
  O      O17         0.024261      0.536710      0.719144
  O      O18         0.531699      0.437122      0.214638
  O      O19         0.015297      0.938726      0.715116
  O      O20         0.520199      0.952061      0.798249
  O      O21         0.026990      0.454444      0.297031
  O      O22         0.519909      0.542914      0.798540
  O      O23         0.026179      0.041437      0.297833
  O      O24         0.405749      0.061397      0.296596
  O      O25         0.140358      0.559443      0.796810
  O      O26         0.413239      0.441756      0.293515
  O      O27         0.133325      0.942044      0.793814
  O      O28         0.634218      0.940521      0.711384
  O      O29         0.911966      0.434035      0.213120
  O      O30         0.638837      0.539777      0.728105
  O      O31         0.906010      0.040008      0.230642
  O      O32         0.443785      0.120813      0.129964
  O      O33         0.105189      0.622552      0.632489
  O      O34         0.437502      0.364274      0.138046

```

0	035	0.109357	0.865338	0.637155
0	036	0.608225	0.866469	0.867928
0	037	0.943666	0.367598	0.374816
0	038	0.609675	0.621518	0.877133
0	039	0.938578	0.119615	0.382856
0	040	0.414269	0.992057	0.130348
0	041	0.131841	0.493083	0.627345
0	042	0.435171	0.495655	0.115413
0	043	0.112159	0.996669	0.616126
0	044	0.629051	0.996919	0.888080
0	045	0.916996	0.497355	0.384866
0	046	0.613728	0.490034	0.908132
0	047	0.933310	0.988447	0.408623
0	048	0.344488	0.042534	0.467255
0	049	0.202067	0.543793	0.967055
0	050	0.346800	0.453498	0.460667
0	051	0.200029	0.954243	0.960251
0	052	0.700299	0.930391	0.547072
0	053	0.847007	0.428490	0.045527
0	054	0.708347	0.532079	0.565253
0	055	0.839270	0.034901	0.062560
0	056	0.344463	0.947717	0.327596
0	057	0.205117	0.447833	0.828759
0	058	0.337028	0.547312	0.320369
0	059	0.211231	0.046718	0.817910
0	060	0.703833	0.044045	0.647030
0	061	0.858447	0.543906	0.138899
0	062	0.719578	0.436638	0.701147
0	063	0.827332	0.936572	0.194072
0	064	0.274933	0.057968	0.304029
0	065	0.271201	0.559872	0.803183
0	066	0.282906	0.429978	0.292810
0	067	0.263281	0.928282	0.792174
0	068	0.765802	0.937050	0.714590
0	069	0.781456	0.448208	0.211154
0	070	0.767400	0.556790	0.736455
0	071	0.777592	0.055944	0.232745
0	072	0.313204	0.124172	0.613730
0	073	0.236179	0.621766	0.116765
0	074	0.325335	0.374577	0.613541
0	075	0.221970	0.871523	0.108997
0	076	0.724762	0.868417	0.382188
0	077	0.815178	0.360894	0.886200
0	078	0.726319	0.626193	0.431546

0	079	0.821178	0.118610	0.914351
0	080	0.223591	0.041117	0.539685
0	081	0.322640	0.536930	0.039457
0	082	0.224972	0.434591	0.521369
0	083	0.321520	0.935859	0.021698
0	084	0.818440	0.941945	0.465191
0	085	0.729068	0.444972	0.965260
0	086	0.829023	0.556357	0.500692
0	087	0.718249	0.058249	0.999845
0	088	0.322988	0.994591	0.646415
0	089	0.221742	0.491638	0.143932
0	090	0.306377	0.504349	0.632373
0	091	0.237461	0.000775	0.135916
0	092	0.714631	0.000080	0.383454
0	093	0.835427	0.491228	0.874039
0	094	0.741949	0.501513	0.380085
0	095	0.798860	0.990815	0.886245
0	096	0.135332	0.127164	0.608679
0	097	0.407511	0.625619	0.109989
0	098	0.132822	0.361046	0.605435
0	099	0.413804	0.860610	0.102886
0	0100	0.910833	0.857378	0.404412
0	0101	0.638850	0.359447	0.900097
0	0102	0.919604	0.628908	0.408036
0	0103	0.623672	0.128214	0.913714
0	0104	0.110895	0.060085	0.444676
0	0105	0.434523	0.560553	0.944844
0	0106	0.102003	0.438192	0.454702
0	0107	0.444626	0.940966	0.955737
0	0108	0.924469	0.919831	0.575474
0	0109	0.621844	0.418743	0.072618
0	0110	0.952253	0.550023	0.558236
0	0111	0.595655	0.047283	0.062531
0	0112	0.149391	0.056557	0.255688
0	0113	0.396810	0.551972	0.755570
0	0114	0.152676	0.423637	0.274671
0	0115	0.393589	0.927105	0.775957
0	0116	0.891529	0.952040	0.761195
0	0117	0.655296	0.449244	0.258137
0	0118	0.897658	0.561924	0.737503
0	0119	0.647734	0.062312	0.242525
0	0120	0.112298	0.945892	0.346266
0	0121	0.437862	0.444806	0.851142
0	0122	0.119750	0.543691	0.339268

0	0123	0.431758	0.045942	0.837515
0	0124	0.946888	0.040974	0.642647
0	0125	0.598418	0.539302	0.139400
0	0126	0.935658	0.443644	0.672738
0	0127	0.612924	0.942405	0.180307
0	0128	0.230368	0.131951	0.156141
0	0129	0.320983	0.634134	0.659080
0	0130	0.229292	0.358420	0.152290
0	0131	0.320849	0.861288	0.649815
0	0132	0.819587	0.863403	0.855056
0	0133	0.736604	0.370724	0.354754
0	0134	0.829508	0.624375	0.873806
0	0135	0.718632	0.131663	0.367269
0	0136	0.521514	0.850606	0.214974
0	0137	0.026296	0.353282	0.720403
0	0138	0.519840	0.633505	0.210923
0	0139	0.024887	0.135832	0.714661
0	0140	0.522712	0.136152	0.788207
0	0141	0.026734	0.632434	0.294821
0	0142	0.527721	0.355850	0.794991
0	0143	0.020714	0.857522	0.295541
0	0144	0.404981	0.832566	0.294831
0	0145	0.143404	0.333026	0.797087
0	0146	0.408093	0.657473	0.301740
0	0147	0.138944	0.156124	0.801370
0	0148	0.642153	0.149909	0.720723
0	0149	0.914091	0.653055	0.212171
0	0150	0.641296	0.330957	0.707447
0	0151	0.906626	0.831558	0.211376
0	0152	0.451615	0.743080	0.166848
0	0153	0.093932	0.244357	0.670841
0	0154	0.592334	0.244178	0.837219
0	0155	0.959748	0.743974	0.337756
0	0156	0.337304	0.849504	0.457484
0	0157	0.210450	0.349969	0.960116
0	0158	0.338930	0.638282	0.464549
0	0159	0.210201	0.137033	0.962331
0	0160	0.712350	0.161492	0.560193
0	0161	0.835798	0.662141	0.061274
0	0162	0.712347	0.353411	0.546144
0	0163	0.836504	0.845764	0.048186
0	0164	0.274220	0.841277	0.285487
0	0165	0.274156	0.340353	0.789112
0	0166	0.277296	0.662734	0.295713

O	O167	0.269660	0.162876	0.792067
O	O168	0.771885	0.139110	0.733408
O	O169	0.787163	0.632183	0.239048
O	O170	0.771956	0.316770	0.711099
O	O171	0.776508	0.816542	0.216593
O	O172	0.301444	0.745702	0.565191
O	O173	0.248078	0.244071	0.062951
O	O174	0.747716	0.251696	0.428821
O	O175	0.798403	0.746608	0.925446
O	O176	0.217097	0.844382	0.530871
O	O177	0.331481	0.343005	0.029091
O	O178	0.218539	0.644224	0.538327
O	O179	0.331451	0.143051	0.032620
O	O180	0.827505	0.150024	0.472455
O	O181	0.719048	0.647088	0.975514
O	O182	0.834584	0.345077	0.480064
O	O183	0.716273	0.844708	0.975593
O	O184	0.136907	0.744293	0.580678
O	O185	0.411322	0.242996	0.081519
O	O186	0.914455	0.245411	0.427046
O	O187	0.635310	0.745302	0.927052
O	O188	0.100628	0.832972	0.445410
O	O189	0.448865	0.330873	0.946422
O	O190	0.106591	0.656095	0.442223
O	O191	0.445150	0.157605	0.940682
O	O192	0.938593	0.162202	0.572597
O	O193	0.603886	0.660318	0.067177
O	O194	0.951264	0.334003	0.563886
O	O195	0.598461	0.838563	0.058216
O	O196	0.145932	0.832438	0.259326
O	O197	0.402299	0.333020	0.760913
O	O198	0.150351	0.658382	0.255782
O	O199	0.397443	0.159930	0.756057
O	O200	0.899984	0.136789	0.759252
O	O201	0.645794	0.636878	0.252479
O	O202	0.900395	0.326832	0.744960
O	O203	0.647072	0.821909	0.239025
O	O204	0.225300	0.747578	0.167919
O	O205	0.323019	0.249302	0.667621
O	O206	0.830117	0.235915	0.836551
O	O207	0.717571	0.740499	0.349913
Al	Al208	0.719819	0.655469	0.305241
Si	Si209	0.446674	0.052403	0.193942
Si	Si210	0.100283	0.552902	0.693144

Si	Si211	0.453948	0.435076	0.190261
Si	Si212	0.093051	0.935850	0.690233
Si	Si213	0.597526	0.939139	0.817933
Si	Si214	0.950249	0.438567	0.318155
Si	Si215	0.596361	0.548600	0.829323
Si	Si216	0.950060	0.047675	0.330401
Si	Si217	0.342326	0.027201	0.349331
Si	Si218	0.204769	0.527498	0.849496
Si	Si219	0.345077	0.467993	0.342297
Si	Si220	0.201942	0.967750	0.841728
Si	Si221	0.701140	0.963597	0.656523
Si	Si222	0.849585	0.464386	0.153248
Si	Si223	0.708687	0.516034	0.682980
Si	Si224	0.837640	0.016704	0.179732
Si	Si225	0.300766	0.050818	0.567100
Si	Si226	0.245829	0.548817	0.067382
Si	Si227	0.300969	0.441558	0.557528
Si	Si228	0.245213	0.940473	0.057263
Si	Si229	0.740332	0.935585	0.443699
Si	Si230	0.806388	0.431474	0.942359
Si	Si231	0.751845	0.553381	0.470011
Si	Si232	0.794638	0.050848	0.965790
Si	Si233	0.145754	0.056231	0.552609
Si	Si234	0.399943	0.554714	0.052929
Si	Si235	0.147977	0.431988	0.552517
Si	Si236	0.398447	0.932476	0.052888
Si	Si237	0.896667	0.926721	0.463035
Si	Si238	0.651114	0.428137	0.961454
Si	Si239	0.904771	0.558244	0.462130
Si	Si240	0.641744	0.057599	0.965604
Si	Si241	0.099634	0.025679	0.336753
Si	Si242	0.447253	0.524754	0.838372
Si	Si243	0.100288	0.465015	0.340816
Si	Si244	0.447476	0.966651	0.841471
Si	Si245	0.944528	0.962678	0.673524
Si	Si246	0.601989	0.461504	0.171191
Si	Si247	0.952270	0.522978	0.672384
Si	Si248	0.594763	0.021489	0.177033
Si	Si249	0.223158	0.061165	0.212675
Si	Si250	0.323660	0.561834	0.712635
Si	Si251	0.221878	0.426589	0.215537
Si	Si252	0.324896	0.928521	0.715705
Si	Si253	0.819111	0.936160	0.803674
Si	Si254	0.728983	0.442380	0.300570

Si	Si255	0.832526	0.558007	0.806249
Si	Si256	0.714951	0.062165	0.306472
Si	Si257	0.448177	0.821389	0.194851
Si	Si258	0.098842	0.322746	0.698466
Si	Si259	0.447501	0.664938	0.197047
Si	Si260	0.098015	0.166005	0.698683
Si	Si261	0.595217	0.164952	0.814975
Si	Si262	0.954810	0.664899	0.313190
Si	Si263	0.599754	0.322455	0.810191
Si	Si264	0.949708	0.822157	0.312269
Si	Si265	0.339982	0.867725	0.340809
Si	Si266	0.208423	0.367871	0.843305
Si	Si267	0.340521	0.626346	0.345645
Si	Si268	0.207428	0.125733	0.843444
Si	Si269	0.707804	0.123594	0.665959
Si	Si270	0.847257	0.622421	0.164578
Si	Si271	0.710881	0.359378	0.666166
Si	Si272	0.837197	0.857937	0.167014
Si	Si273	0.293761	0.825009	0.551015
Si	Si274	0.255083	0.323666	0.051437
Si	Si275	0.294810	0.665966	0.556139
Si	Si276	0.255231	0.164455	0.053094
Si	Si277	0.751550	0.173532	0.457074
Si	Si278	0.795479	0.669327	0.959117
Si	Si279	0.757790	0.329979	0.452950
Si	Si280	0.792640	0.824742	0.952080
Si	Si281	0.140893	0.821926	0.548121
Si	Si282	0.407464	0.320601	0.048389
Si	Si283	0.141872	0.666617	0.548594
Si	Si284	0.407894	0.165873	0.046307
Si	Si285	0.905136	0.168830	0.463514
Si	Si286	0.642011	0.668063	0.962501
Si	Si287	0.910855	0.322969	0.461421
Si	Si288	0.639751	0.823361	0.957578
Si	Si289	0.095189	0.867161	0.336262
Si	Si290	0.453914	0.366138	0.838008
Si	Si291	0.101190	0.622377	0.333187
Si	Si292	0.449015	0.124783	0.830681
Si	Si293	0.952163	0.119159	0.672628
Si	Si294	0.593420	0.617908	0.169563
Si	Si295	0.953234	0.364686	0.675421
Si	Si296	0.594884	0.863577	0.172598
Si	Si297	0.216904	0.823869	0.205731
Si	Si298	0.331120	0.325093	0.707954

Si	Si299	0.222411	0.671598	0.208848
Si	Si300	0.325810	0.173071	0.707382
Si	Si301	0.830716	0.157432	0.809880
Si	Si302	0.829629	0.311303	0.794602
Si	Si303	0.716564	0.813481	0.296014
Zn	Zn304	0.695987	0.713365	0.492229

M-C₄H₉Zn-ZnH⁺ (Fig. 6/M2) Total energy = -1925.44771910 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.458361	0.796640	0.778096
H	H2	0.386235	0.755837	0.736651
H	H3	0.424011	0.817092	0.661547
H	H4	0.447561	0.696947	0.605586
H	H5	0.488762	0.683949	0.718537
H	H6	0.565427	0.781227	0.671050
H	H7	0.525248	0.783681	0.555865
H	H8	0.610508	0.671252	0.643593
H	H9	0.554957	0.653683	0.547295
C	C10	0.433683	0.775917	0.712832
C	C11	0.475959	0.722334	0.663857
C	C12	0.539118	0.750288	0.616944
C	C13	0.584018	0.693878	0.581469
O	O14	0.489866	0.028609	0.212329
O	O15	0.992631	0.532644	0.709725
O	O16	0.500867	0.432801	0.207060
O	O17	0.984059	0.933773	0.707078
O	O18	0.489277	0.950101	0.792546
O	O19	0.995343	0.452273	0.290193
O	O20	0.489455	0.540271	0.791627

0	021	0.995347	0.035467	0.289644
0	022	0.374559	0.057258	0.289786
0	023	0.108944	0.556113	0.787927
0	024	0.381824	0.440582	0.283877
0	025	0.101825	0.941437	0.786138
0	026	0.603083	0.938498	0.704783
0	027	0.881306	0.430039	0.203996
0	028	0.607319	0.527164	0.718161
0	029	0.874093	0.033760	0.225839
0	030	0.412007	0.116118	0.122416
0	031	0.073867	0.617413	0.622001
0	032	0.405825	0.360896	0.130678
0	033	0.080291	0.861122	0.633126
0	034	0.576956	0.863235	0.860411
0	035	0.913067	0.362907	0.365047
0	036	0.585277	0.616577	0.859208
0	037	0.909079	0.114658	0.375116
0	038	0.380225	0.987765	0.123574
0	039	0.100667	0.487874	0.620087
0	040	0.406179	0.491939	0.104771
0	041	0.079762	0.991963	0.605838
0	042	0.598856	0.993066	0.882778
0	043	0.883990	0.492123	0.377300
0	044	0.582033	0.486368	0.902689
0	045	0.903623	0.983490	0.403430
0	046	0.312816	0.041165	0.460720
0	047	0.171895	0.542526	0.958173
0	048	0.315464	0.449305	0.451411
0	049	0.168748	0.950696	0.952312
0	050	0.670764	0.923518	0.542122
0	051	0.816176	0.422025	0.035812
0	052	0.677242	0.526777	0.555561
0	053	0.807494	0.030945	0.058543
0	054	0.313765	0.943935	0.325292
0	055	0.173084	0.444816	0.822879
0	056	0.304899	0.545301	0.315130
0	057	0.181860	0.044309	0.811999
0	058	0.674825	0.039452	0.635475
0	059	0.826110	0.538177	0.127110
0	060	0.693845	0.429843	0.687645
0	061	0.793948	0.931470	0.187389
0	062	0.243677	0.053579	0.296708
0	063	0.240073	0.556189	0.793331
0	064	0.251439	0.428347	0.283225

0	065	0.231733	0.925442	0.783648
0	066	0.734413	0.933128	0.710613
0	067	0.750562	0.441445	0.201210
0	068	0.735122	0.551385	0.728299
0	069	0.745580	0.050674	0.229181
0	070	0.280054	0.122564	0.606852
0	071	0.208419	0.619661	0.107645
0	072	0.295050	0.371818	0.605511
0	073	0.187255	0.869521	0.103385
0	074	0.695582	0.860205	0.378597
0	075	0.781787	0.355970	0.875453
0	076	0.689961	0.616513	0.415317
0	077	0.793304	0.114133	0.909640
0	078	0.191997	0.037475	0.533659
0	079	0.292149	0.531800	0.032513
0	080	0.193586	0.429680	0.512627
0	081	0.289657	0.928521	0.014008
0	082	0.787595	0.938053	0.456328
0	083	0.697833	0.440818	0.957421
0	084	0.796699	0.555243	0.490382
0	085	0.687722	0.056294	0.992460
0	086	0.292547	0.993680	0.640631
0	087	0.189030	0.490123	0.135510
0	088	0.273943	0.501443	0.621662
0	089	0.208788	0.998397	0.126045
0	090	0.680769	0.991102	0.375231
0	091	0.804205	0.486065	0.865402
0	092	0.714703	0.490407	0.374680
0	093	0.768456	0.986480	0.882078
0	094	0.102599	0.122651	0.601786
0	095	0.376614	0.621412	0.102985
0	096	0.101731	0.356066	0.597173
0	097	0.384169	0.856390	0.094626
0	098	0.879947	0.852554	0.397337
0	099	0.607829	0.355865	0.890715
0	0100	0.889784	0.623921	0.397749
0	0101	0.592544	0.124597	0.905034
0	0102	0.080490	0.056965	0.435622
0	0103	0.402489	0.558603	0.935574
0	0104	0.070460	0.433312	0.446936
0	0105	0.412983	0.937966	0.948854
0	0106	0.892040	0.914617	0.569371
0	0107	0.590990	0.413328	0.065112
0	0108	0.919794	0.546168	0.549491

0	0109	0.565022	0.045711	0.055631
0	0110	0.118452	0.049796	0.246480
0	0111	0.365873	0.542826	0.746860
0	0112	0.121004	0.421049	0.266243
0	0113	0.362347	0.924460	0.768883
0	0114	0.860487	0.949970	0.754247
0	0115	0.624779	0.446324	0.249867
0	0116	0.865777	0.557454	0.729249
0	0117	0.615330	0.056816	0.237087
0	0118	0.081517	0.941003	0.342091
0	0119	0.410693	0.440666	0.849700
0	0120	0.089130	0.540168	0.335399
0	0121	0.399896	0.043088	0.831421
0	0122	0.917022	0.036362	0.632999
0	0123	0.567048	0.534361	0.129474
0	0124	0.903942	0.439560	0.663232
0	0125	0.581771	0.938226	0.167536
0	0126	0.198105	0.128685	0.150218
0	0127	0.294230	0.629787	0.651838
0	0128	0.197952	0.356863	0.143147
0	0129	0.289891	0.860671	0.639950
0	0130	0.790769	0.859528	0.848367
0	0131	0.703254	0.361877	0.341466
0	0132	0.796738	0.619114	0.865504
0	0133	0.685583	0.122959	0.366535
0	0134	0.491916	0.845692	0.206517
0	0135	0.994302	0.349142	0.710506
0	0136	0.490341	0.629982	0.201122
0	0137	0.992596	0.132073	0.708785
0	0138	0.490305	0.133673	0.781757
0	0139	0.998307	0.630151	0.287986
0	0140	0.496478	0.350025	0.786701
0	0141	0.990379	0.852454	0.289845
0	0142	0.375422	0.829896	0.286912
0	0143	0.111091	0.330185	0.789454
0	0144	0.379408	0.652873	0.294833
0	0145	0.106897	0.151744	0.794652
0	0146	0.608681	0.142216	0.710656
0	0147	0.886691	0.644950	0.200953
0	0148	0.610236	0.328241	0.697528
0	0149	0.876722	0.829322	0.203289
0	0150	0.420695	0.738991	0.159333
0	0151	0.062341	0.240090	0.664230
0	0152	0.563845	0.239958	0.826575

0	0153	0.927147	0.739196	0.327123
0	0154	0.306618	0.842058	0.448741
0	0155	0.179195	0.345513	0.951673
0	0156	0.308987	0.638157	0.457032
0	0157	0.178284	0.134865	0.955991
0	0158	0.684528	0.159288	0.556973
0	0159	0.806441	0.657690	0.052555
0	0160	0.680961	0.345418	0.534806
0	0161	0.805074	0.840742	0.041548
0	0162	0.244852	0.838458	0.275126
0	0163	0.241859	0.338152	0.779776
0	0164	0.248721	0.661980	0.286742
0	0165	0.237398	0.161812	0.785544
0	0166	0.737580	0.133124	0.733963
0	0167	0.759928	0.628020	0.232015
0	0168	0.740395	0.308349	0.700800
0	0169	0.747149	0.810041	0.211283
0	0170	0.270574	0.742572	0.564441
0	0171	0.216279	0.241117	0.058301
0	0172	0.717602	0.244413	0.417457
0	0173	0.769090	0.742094	0.916415
0	0174	0.186276	0.840056	0.522363
0	0175	0.300378	0.338765	0.020794
0	0176	0.189468	0.640069	0.535318
0	0177	0.299323	0.139860	0.026973
0	0178	0.797467	0.143710	0.463625
0	0179	0.688208	0.645034	0.971143
0	0180	0.802676	0.340036	0.466808
0	0181	0.685868	0.839581	0.965130
0	0182	0.107249	0.740035	0.576498
0	0183	0.379799	0.239103	0.076785
0	0184	0.883413	0.240454	0.417727
0	0185	0.604381	0.740951	0.914191
0	0186	0.068448	0.828513	0.441904
0	0187	0.418148	0.325036	0.939670
0	0188	0.079923	0.654774	0.433431
0	0189	0.412622	0.154901	0.934094
0	0190	0.908273	0.158063	0.564113
0	0191	0.567971	0.652956	0.048251
0	0192	0.918505	0.329747	0.554402
0	0193	0.569036	0.831716	0.050094
0	0194	0.116024	0.827206	0.257176
0	0195	0.370361	0.331692	0.755190
0	0196	0.121893	0.652673	0.246657

O	O197	0.365101	0.156580	0.749302
O	O198	0.866737	0.130693	0.748420
O	O199	0.618163	0.635865	0.230025
O	O200	0.868466	0.322916	0.735831
O	O201	0.617700	0.819629	0.231687
O	O202	0.194042	0.744860	0.159258
O	O203	0.292370	0.247051	0.660689
O	O204	0.800350	0.230990	0.828859
O	O205	0.684742	0.734020	0.341323
Al	Al206	0.689854	0.649651	0.292896
Si	Si207	0.414428	0.047625	0.186277
Si	Si208	0.068860	0.548399	0.684287
Si	Si209	0.423180	0.431903	0.181561
Si	Si210	0.061973	0.932279	0.682747
Si	Si211	0.566566	0.936398	0.811576
Si	Si212	0.918724	0.434588	0.309879
Si	Si213	0.566698	0.542630	0.819130
Si	Si214	0.919566	0.042205	0.323882
Si	Si215	0.311086	0.023745	0.343421
Si	Si216	0.173570	0.524720	0.840980
Si	Si217	0.313578	0.465709	0.333662
Si	Si218	0.171007	0.965350	0.834146
Si	Si219	0.670720	0.959336	0.649865
Si	Si220	0.818465	0.458619	0.143239
Si	Si221	0.678577	0.508795	0.672304
Si	Si222	0.805366	0.011607	0.175117
Si	Si223	0.269023	0.048898	0.560613
Si	Si224	0.215447	0.546248	0.058825
Si	Si225	0.269561	0.437830	0.548283
Si	Si226	0.213593	0.936574	0.049495
Si	Si227	0.709421	0.928807	0.437448
Si	Si228	0.774848	0.426202	0.933189
Si	Si229	0.719742	0.547453	0.458739
Si	Si230	0.764336	0.047217	0.960569
Si	Si231	0.113944	0.052314	0.544585
Si	Si232	0.369307	0.551017	0.044443
Si	Si233	0.116680	0.427121	0.544488
Si	Si234	0.366617	0.927908	0.045435
Si	Si235	0.865734	0.921894	0.456113
Si	Si236	0.619882	0.423848	0.953846
Si	Si237	0.872577	0.554250	0.452944
Si	Si238	0.611185	0.054821	0.958583
Si	Si239	0.068882	0.020592	0.329145
Si	Si240	0.417212	0.520393	0.831516

Si	Si241	0.068832	0.461710	0.333898
Si	Si242	0.416099	0.963922	0.834764
Si	Si243	0.913419	0.958474	0.665884
Si	Si244	0.571110	0.457010	0.162938
Si	Si245	0.920409	0.518917	0.663407
Si	Si246	0.563081	0.017184	0.168570
Si	Si247	0.192346	0.057018	0.204796
Si	Si248	0.293402	0.556900	0.703883
Si	Si249	0.190027	0.424784	0.206686
Si	Si250	0.293853	0.926737	0.708046
Si	Si251	0.788772	0.932740	0.798300
Si	Si252	0.698388	0.435180	0.291107
Si	Si253	0.800495	0.552862	0.797707
Si	Si254	0.682189	0.055154	0.301867
Si	Si255	0.418197	0.817374	0.186905
Si	Si256	0.067078	0.318681	0.690477
Si	Si257	0.417520	0.660767	0.189067
Si	Si258	0.065894	0.161756	0.692097
Si	Si259	0.563795	0.160568	0.806010
Si	Si260	0.925074	0.659888	0.303345
Si	Si261	0.569379	0.318468	0.800563
Si	Si262	0.918850	0.817862	0.304595
Si	Si263	0.309874	0.863635	0.333435
Si	Si264	0.176361	0.364745	0.835414
Si	Si265	0.310621	0.624437	0.338596
Si	Si266	0.176026	0.123253	0.837124
Si	Si267	0.676682	0.118552	0.659827
Si	Si268	0.818231	0.616817	0.154914
Si	Si269	0.680869	0.352856	0.654712
Si	Si270	0.806143	0.853210	0.160210
Si	Si271	0.262934	0.821292	0.543990
Si	Si272	0.223769	0.320448	0.043717
Si	Si273	0.265626	0.662967	0.551274
Si	Si274	0.223173	0.161533	0.047428
Si	Si275	0.721307	0.167291	0.450988
Si	Si276	0.764921	0.665045	0.951514
Si	Si277	0.726115	0.322995	0.440684
Si	Si278	0.762614	0.820058	0.943966
Si	Si279	0.110430	0.817576	0.543143
Si	Si280	0.376234	0.316364	0.041597
Si	Si281	0.112705	0.662792	0.542067
Si	Si282	0.375897	0.162225	0.040270
Si	Si283	0.874820	0.163949	0.454890
Si	Si284	0.611444	0.663481	0.948967

Si	Si285	0.879298	0.318283	0.450977
Si	Si286	0.609224	0.818504	0.947816
Si	Si287	0.064378	0.862280	0.332301
Si	Si288	0.423603	0.361817	0.832343
Si	Si289	0.072537	0.619139	0.326087
Si	Si290	0.416757	0.121962	0.824256
Si	Si291	0.920774	0.114521	0.663980
Si	Si292	0.562477	0.613742	0.154348
Si	Si293	0.921175	0.360567	0.665777
Si	Si294	0.564993	0.859040	0.163320
Si	Si295	0.185617	0.820671	0.199070
Si	Si296	0.299888	0.322920	0.700608
Si	Si297	0.193366	0.668805	0.200041
Si	Si298	0.293703	0.170932	0.700736
Si	Si299	0.799551	0.152279	0.804024
Si	Si300	0.797949	0.305880	0.785041
Si	Si301	0.686360	0.807668	0.289260
Zn	Zn302	0.647537	0.708416	0.475560

TS-C₄H₉Zn-HTransfer-Concerted-ZnH⁺ (Fig. 6/TS2)

Total energy = -1923.67412690 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.673743	0.784755	0.623449
H	H2	0.672310	0.699858	0.675012
H	H3	0.556941	0.687389	0.630904
H	H4	0.565468	0.699477	0.482016
H	H5	0.566992	0.830966	0.550281
H	H6	0.535056	0.810268	0.666843
H	H7	0.474374	0.768022	0.467109

H	H8	0.443235	0.828034	0.551458
H	H9	0.444570	0.742785	0.584897
C	C10	0.652302	0.735163	0.621820
C	C11	0.582449	0.730798	0.601118
C	C12	0.540022	0.792006	0.590033
C	C13	0.471663	0.781913	0.545559
O	O14	0.484946	0.024685	0.205564
O	O15	0.991048	0.530857	0.704621
O	O16	0.497565	0.431652	0.200567
O	O17	0.987842	0.942152	0.702463
O	O18	0.496661	0.955421	0.783190
O	O19	0.991747	0.452641	0.286188
O	O20	0.485933	0.541823	0.788489
O	O21	0.994386	0.035498	0.286005
O	O22	0.366234	0.053982	0.269131
O	O23	0.106293	0.554948	0.786364
O	O24	0.378113	0.446339	0.272781
O	O25	0.112788	0.943690	0.749300
O	O26	0.615841	0.928708	0.720702
O	O27	0.877320	0.425549	0.203544
O	O28	0.604672	0.527610	0.716187
O	O29	0.868684	0.030334	0.242413
O	O30	0.411599	0.109645	0.103893
O	O31	0.073544	0.616189	0.620410
O	O32	0.400965	0.359058	0.128626
O	O33	0.068519	0.863515	0.606215
O	O34	0.569127	0.867626	0.880310
O	O35	0.912728	0.362233	0.366715
O	O36	0.581601	0.619874	0.851254
O	O37	0.913059	0.114564	0.381227
O	O38	0.378953	0.980940	0.108302
O	O39	0.101581	0.486400	0.619530
O	O40	0.406315	0.489127	0.090008
O	O41	0.072830	0.994447	0.576538
O	O42	0.601602	0.996516	0.886298
O	O43	0.879503	0.490164	0.374044
O	O44	0.578933	0.490497	0.902344
O	O45	0.911899	0.983869	0.415544
O	O46	0.304310	0.057342	0.439013
O	O47	0.171807	0.553546	0.954200
O	O48	0.310904	0.447008	0.439373
O	O49	0.175018	0.940598	0.918949
O	O50	0.680212	0.922281	0.553902
O	O51	0.812452	0.420605	0.035347

0	052	0.675552	0.527189	0.555890
0	053	0.807256	0.039927	0.072582
0	054	0.317714	0.941551	0.345899
0	055	0.164481	0.443768	0.843123
0	056	0.298970	0.548071	0.313885
0	057	0.190582	0.044745	0.800028
0	058	0.666258	0.039911	0.641480
0	059	0.824883	0.535987	0.128992
0	060	0.690046	0.429129	0.685882
0	061	0.786975	0.933263	0.186231
0	062	0.236828	0.033641	0.275514
0	063	0.237484	0.546787	0.786650
0	064	0.248399	0.430953	0.268665
0	065	0.242111	0.928431	0.751600
0	066	0.745449	0.948410	0.717569
0	067	0.746770	0.440748	0.200512
0	068	0.733253	0.549666	0.729305
0	069	0.739758	0.050396	0.239028
0	070	0.277355	0.128794	0.597747
0	071	0.208816	0.621085	0.112818
0	072	0.299099	0.374176	0.597700
0	073	0.182876	0.863791	0.073978
0	074	0.702057	0.856959	0.390244
0	075	0.776348	0.357557	0.872914
0	076	0.681830	0.613228	0.412449
0	077	0.798676	0.115216	0.914950
0	078	0.192446	0.036741	0.536036
0	079	0.289007	0.530858	0.034414
0	080	0.191258	0.424528	0.509406
0	081	0.292148	0.917316	0.996508
0	082	0.791040	0.944155	0.452590
0	083	0.695778	0.445990	0.954907
0	084	0.792905	0.556804	0.483568
0	085	0.690236	0.061095	0.992821
0	086	0.305617	0.000606	0.616222
0	087	0.180885	0.491439	0.125430
0	088	0.271163	0.502798	0.608087
0	089	0.207852	0.993231	0.092736
0	090	0.676687	0.986478	0.383276
0	091	0.804692	0.486719	0.866271
0	092	0.709889	0.486934	0.375503
0	093	0.776797	0.985241	0.900318
0	094	0.099249	0.124578	0.581406
0	095	0.375366	0.618689	0.101897

0	096	0.091959	0.356435	0.584620
0	097	0.393526	0.851715	0.073015
0	098	0.882651	0.854401	0.405964
0	099	0.607778	0.360726	0.885463
0	0100	0.891574	0.620982	0.397076
0	0101	0.590553	0.127284	0.911782
0	0102	0.093979	0.060213	0.409913
0	0103	0.394761	0.561646	0.927404
0	0104	0.069756	0.441716	0.440827
0	0105	0.413099	0.937498	0.929351
0	0106	0.887586	0.916310	0.579778
0	0107	0.589553	0.414169	0.061670
0	0108	0.914573	0.541139	0.548130
0	0109	0.568934	0.047366	0.061417
0	0110	0.113693	0.031459	0.217966
0	0111	0.363011	0.536992	0.738301
0	0112	0.117671	0.421081	0.259821
0	0113	0.372965	0.926265	0.741717
0	0114	0.869019	0.946831	0.771629
0	0115	0.620864	0.442364	0.249277
0	0116	0.864261	0.558062	0.728971
0	0117	0.608774	0.052250	0.249079
0	0118	0.075515	0.937867	0.344006
0	0119	0.410262	0.441559	0.852442
0	0120	0.085785	0.542834	0.316999
0	0121	0.401996	0.044673	0.816409
0	0122	0.907141	0.038976	0.642419
0	0123	0.567536	0.533908	0.131076
0	0124	0.900397	0.437901	0.669435
0	0125	0.578836	0.936248	0.165319
0	0126	0.194288	0.119320	0.139156
0	0127	0.290306	0.628329	0.652984
0	0128	0.192209	0.358414	0.130688
0	0129	0.303254	0.868012	0.603695
0	0130	0.787345	0.859712	0.850277
0	0131	0.700779	0.358593	0.338557
0	0132	0.793919	0.619549	0.865328
0	0133	0.678963	0.118989	0.378694
0	0134	0.488405	0.844195	0.209572
0	0135	0.991263	0.346078	0.710683
0	0136	0.488774	0.627696	0.199957
0	0137	0.995208	0.128993	0.701165
0	0138	0.493640	0.136088	0.778384
0	0139	0.996838	0.637370	0.281707

0	0140	0.495047	0.351525	0.785830
0	0141	0.987378	0.848029	0.286718
0	0142	0.365632	0.831449	0.263606
0	0143	0.111667	0.330892	0.775846
0	0144	0.377891	0.652577	0.292991
0	0145	0.112998	0.149193	0.775513
0	0146	0.616000	0.149264	0.721239
0	0147	0.882496	0.644731	0.201074
0	0148	0.607791	0.326416	0.695243
0	0149	0.869506	0.832402	0.211454
0	0150	0.420360	0.736483	0.154281
0	0151	0.060547	0.239458	0.655387
0	0152	0.562402	0.243087	0.833375
0	0153	0.918684	0.739212	0.330290
0	0154	0.292347	0.821980	0.420467
0	0155	0.178207	0.330613	0.940030
0	0156	0.309144	0.639960	0.458234
0	0157	0.176924	0.136078	0.944992
0	0158	0.690407	0.159374	0.565473
0	0159	0.799760	0.654634	0.054854
0	0160	0.678217	0.344908	0.532094
0	0161	0.802213	0.840262	0.044624
0	0162	0.237843	0.859702	0.250741
0	0163	0.240833	0.350151	0.769382
0	0164	0.247533	0.666841	0.290596
0	0165	0.243888	0.163150	0.783190
0	0166	0.744094	0.123211	0.737327
0	0167	0.757114	0.623294	0.236657
0	0168	0.738454	0.308621	0.697117
0	0169	0.739549	0.812258	0.211196
0	0170	0.270155	0.742955	0.571107
0	0171	0.212531	0.236742	0.065437
0	0172	0.715110	0.241903	0.418754
0	0173	0.766432	0.741856	0.919626
0	0174	0.185353	0.840358	0.529471
0	0175	0.297197	0.332478	0.017255
0	0176	0.188387	0.641880	0.531265
0	0177	0.296747	0.138967	0.020456
0	0178	0.796958	0.141414	0.456618
0	0179	0.683592	0.644685	0.967375
0	0180	0.800035	0.339012	0.463848
0	0181	0.683428	0.840033	0.966318
0	0182	0.103945	0.739342	0.572307
0	0183	0.380197	0.235669	0.072257

O	O184	0.882161	0.240071	0.418278
O	O185	0.600839	0.742314	0.914033
O	O186	0.078387	0.817479	0.420755
O	O187	0.416110	0.324435	0.937825
O	O188	0.077185	0.650213	0.432116
O	O189	0.407098	0.156890	0.920472
O	O190	0.903620	0.159743	0.567868
O	O191	0.562019	0.649644	0.041323
O	O192	0.913896	0.329828	0.556354
O	O193	0.573167	0.822134	0.065464
O	O194	0.110550	0.834211	0.231592
O	O195	0.369183	0.334439	0.753557
O	O196	0.121010	0.660213	0.246899
O	O197	0.369761	0.158522	0.731183
O	O198	0.872528	0.140741	0.757459
O	O199	0.617354	0.640872	0.220017
O	O200	0.865684	0.320200	0.739211
O	O201	0.612629	0.824761	0.254456
O	O202	0.197554	0.748043	0.158779
O	O203	0.290693	0.251602	0.658591
O	O204	0.791475	0.231346	0.830839
O	O205	0.684686	0.732487	0.344003
Al	Al206	0.686169	0.650301	0.291146
Si	Si207	0.410732	0.042447	0.170817
Si	Si208	0.067573	0.546943	0.681728
Si	Si209	0.420229	0.431737	0.172855
Si	Si210	0.061503	0.935995	0.658468
Si	Si211	0.570578	0.937243	0.819000
Si	Si212	0.915867	0.432880	0.308204
Si	Si213	0.563253	0.544734	0.815885
Si	Si214	0.920983	0.041356	0.331273
Si	Si215	0.306205	0.021281	0.331584
Si	Si216	0.170198	0.524385	0.842139
Si	Si217	0.309149	0.467953	0.323522
Si	Si218	0.180041	0.964508	0.804756
Si	Si219	0.676896	0.960596	0.659694
Si	Si220	0.815275	0.456481	0.143305
Si	Si221	0.676288	0.508353	0.672172
Si	Si222	0.800917	0.013236	0.185410
Si	Si223	0.269738	0.055994	0.547207
Si	Si224	0.212691	0.549677	0.057267
Si	Si225	0.267835	0.436911	0.539066
Si	Si226	0.214693	0.928733	0.021263
Si	Si227	0.713034	0.927809	0.444574

Si	Si228	0.772233	0.427514	0.932087
Si	Si229	0.715762	0.545784	0.456270
Si	Si230	0.767967	0.050520	0.969551
Si	Si231	0.114800	0.054344	0.525926
Si	Si232	0.366482	0.550344	0.038974
Si	Si233	0.113887	0.427667	0.538513
Si	Si234	0.369095	0.922110	0.026724
Si	Si235	0.868206	0.924161	0.463359
Si	Si236	0.618074	0.427751	0.951071
Si	Si237	0.869516	0.552237	0.450125
Si	Si238	0.613157	0.057910	0.963055
Si	Si239	0.069265	0.016361	0.315030
Si	Si240	0.413633	0.520565	0.827170
Si	Si241	0.066146	0.464472	0.325207
Si	Si242	0.420951	0.966034	0.817314
Si	Si243	0.912949	0.960866	0.673664
Si	Si244	0.568868	0.455988	0.160883
Si	Si245	0.917490	0.517073	0.663288
Si	Si246	0.560609	0.015081	0.171106
Si	Si247	0.188385	0.043951	0.181391
Si	Si248	0.290285	0.553124	0.697388
Si	Si249	0.185097	0.425834	0.195815
Si	Si250	0.305350	0.931209	0.678284
Si	Si251	0.794593	0.935386	0.810036
Si	Si252	0.694708	0.432427	0.290116
Si	Si253	0.799044	0.553117	0.797924
Si	Si254	0.676463	0.051844	0.312189
Si	Si255	0.417050	0.815673	0.175190
Si	Si256	0.063784	0.318083	0.681878
Si	Si257	0.416230	0.658876	0.187126
Si	Si258	0.067059	0.160636	0.678329
Si	Si259	0.565453	0.163960	0.811159
Si	Si260	0.921910	0.660657	0.302305
Si	Si261	0.568008	0.320357	0.799950
Si	Si262	0.914668	0.818227	0.308718
Si	Si263	0.303287	0.863950	0.319446
Si	Si264	0.174003	0.364141	0.831352
Si	Si265	0.308886	0.626614	0.339378
Si	Si266	0.180511	0.123125	0.826212
Si	Si267	0.679546	0.117968	0.666927
Si	Si268	0.814353	0.614341	0.156945
Si	Si269	0.677987	0.352167	0.652023
Si	Si270	0.800062	0.854697	0.162992
Si	Si271	0.262477	0.818600	0.531638

Si	Si272	0.220268	0.314948	0.039035
Si	Si273	0.264418	0.663524	0.552122
Si	Si274	0.220088	0.158235	0.041449
Si	Si275	0.720417	0.165246	0.454517
Si	Si276	0.760814	0.664304	0.951963
Si	Si277	0.723544	0.320963	0.438884
Si	Si278	0.760027	0.819959	0.946423
Si	Si279	0.109050	0.815387	0.532008
Si	Si280	0.373794	0.313313	0.038881
Si	Si281	0.110924	0.661775	0.539179
Si	Si282	0.373758	0.160219	0.029576
Si	Si283	0.873990	0.163696	0.456030
Si	Si284	0.607103	0.663971	0.944774
Si	Si285	0.877037	0.317850	0.451252
Si	Si286	0.606737	0.817835	0.956490
Si	Si287	0.062956	0.859523	0.320352
Si	Si288	0.422309	0.362931	0.832076
Si	Si289	0.070311	0.622280	0.319918
Si	Si290	0.418037	0.123972	0.811786
Si	Si291	0.919680	0.117104	0.667403
Si	Si292	0.560517	0.613678	0.150353
Si	Si293	0.917616	0.358816	0.668672
Si	Si294	0.563346	0.856914	0.173277
Si	Si295	0.182064	0.825876	0.180077
Si	Si296	0.299801	0.327801	0.695735
Si	Si297	0.193596	0.672793	0.201974
Si	Si298	0.295820	0.174528	0.692764
Si	Si299	0.801614	0.152876	0.808823
Si	Si300	0.793475	0.305799	0.785004
Si	Si301	0.684666	0.807600	0.298988
Zn	Zn302	0.647976	0.697759	0.481288

C₄H₈-Phys.Ads-ZnH⁺ (Fig. 6/M3) Total energy = -1925.17689047 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

<u>_atom_site_type_symbol</u>				
<u>_atom_site_label</u>				
<u>_atom_site_fract_x</u>				
<u>_atom_site_fract_y</u>				
<u>_atom_site_fract_z</u>				
H	H1	0.808024	0.745264	0.558238
H	H2	0.472137	0.669830	0.458415
H	H3	0.504180	0.749106	0.427440
H	H4	0.476779	0.733094	0.550083
H	H5	0.591901	0.663124	0.446665
H	H6	0.568824	0.647755	0.570288
H	H7	0.611782	0.788409	0.504212
H	H8	0.659664	0.696423	0.672255
H	H9	0.682974	0.784304	0.648861
C	C10	0.501874	0.711231	0.486016
C	C11	0.571056	0.686534	0.513013
C	C12	0.615165	0.742061	0.546513
C	C13	0.656289	0.740299	0.624972
O	O14	0.517732	0.031300	0.214582
O	O15	0.029445	0.528946	0.709424
O	O16	0.520132	0.441401	0.203073
O	O17	0.015603	0.933874	0.704519
O	O18	0.521376	0.948411	0.786428
O	O19	0.012858	0.452227	0.279780
O	O20	0.521987	0.538750	0.784826
O	O21	0.024339	0.044459	0.293646
O	O22	0.400319	0.058935	0.285087
O	O23	0.152973	0.554909	0.751780
O	O24	0.392628	0.429754	0.235843
O	O25	0.135385	0.943277	0.774743
O	O26	0.639375	0.925823	0.713537
O	O27	0.890391	0.422205	0.233103
O	O28	0.648997	0.552377	0.750742
O	O29	0.902775	0.034784	0.232506
O	O30	0.442370	0.121395	0.124955
O	O31	0.098019	0.610096	0.593818
O	O32	0.449702	0.365836	0.086112
O	O33	0.109227	0.858153	0.628829
O	O34	0.600723	0.862243	0.874472
O	O35	0.945348	0.366275	0.389595
O	O36	0.592712	0.617251	0.899189
O	O37	0.933453	0.118465	0.378923
O	O38	0.410076	0.993388	0.115947
O	O39	0.125271	0.480307	0.596141

0	040	0.436945	0.497349	0.077873
0	041	0.107298	0.988247	0.592321
0	042	0.628997	0.991828	0.881125
0	043	0.914538	0.495094	0.392067
0	044	0.605855	0.485401	0.910162
0	045	0.937539	0.987743	0.410973
0	046	0.341187	0.043923	0.455855
0	047	0.208609	0.557570	0.926090
0	048	0.337552	0.436943	0.412741
0	049	0.199945	0.946710	0.944239
0	050	0.703670	0.926633	0.547307
0	051	0.834892	0.422958	0.058757
0	052	0.701675	0.535849	0.574135
0	053	0.838065	0.039866	0.063787
0	054	0.346437	0.942817	0.325483
0	055	0.197606	0.441772	0.831544
0	056	0.337404	0.542393	0.293596
0	057	0.213741	0.045538	0.813090
0	058	0.691516	0.039666	0.649560
0	059	0.852710	0.537750	0.154597
0	060	0.699823	0.435303	0.702910
0	061	0.823912	0.934716	0.183155
0	062	0.269535	0.047170	0.293305
0	063	0.281382	0.533389	0.768352
0	064	0.263028	0.437605	0.253698
0	065	0.264945	0.927265	0.776629
0	066	0.769865	0.943334	0.713181
0	067	0.763040	0.450477	0.215359
0	068	0.778227	0.539336	0.729934
0	069	0.773810	0.051348	0.233661
0	070	0.312467	0.117899	0.611998
0	071	0.229814	0.627907	0.087236
0	072	0.325561	0.359975	0.567674
0	073	0.219119	0.869229	0.099109
0	074	0.729177	0.867291	0.379725
0	075	0.812631	0.354533	0.897125
0	076	0.725053	0.626252	0.436742
0	077	0.817440	0.115724	0.907322
0	078	0.223861	0.032982	0.539022
0	079	0.318946	0.538999	0.027683
0	080	0.220049	0.420936	0.495045
0	081	0.321062	0.928861	0.009395
0	082	0.817627	0.949906	0.456838
0	083	0.723165	0.441475	0.959655

0	084	0.822472	0.550237	0.502371
0	085	0.717454	0.052005	0.994254
0	086	0.329406	0.986819	0.629785
0	087	0.205693	0.498228	0.100931
0	088	0.311241	0.491337	0.586985
0	089	0.237906	0.999166	0.115997
0	090	0.706792	0.997857	0.383223
0	091	0.835789	0.485404	0.886921
0	092	0.727655	0.498320	0.390423
0	093	0.805677	0.984420	0.892250
0	094	0.134066	0.118508	0.601873
0	095	0.411476	0.627483	0.073064
0	096	0.120594	0.349714	0.569045
0	097	0.419149	0.862180	0.090603
0	098	0.904736	0.859117	0.399635
0	099	0.629881	0.355219	0.907827
0	0100	0.914124	0.626192	0.415212
0	0101	0.619659	0.121472	0.915249
0	0102	0.118418	0.060060	0.428920
0	0103	0.420050	0.559009	0.905771
0	0104	0.100931	0.429017	0.418071
0	0105	0.443504	0.942785	0.942336
0	0106	0.918507	0.917157	0.573966
0	0107	0.620352	0.419420	0.078373
0	0108	0.944161	0.548346	0.566925
0	0109	0.595413	0.036415	0.059063
0	0110	0.145708	0.046156	0.236474
0	0111	0.404424	0.533042	0.711715
0	0112	0.134802	0.428505	0.227080
0	0113	0.395433	0.917883	0.762968
0	0114	0.894644	0.939304	0.765607
0	0115	0.639342	0.444911	0.270596
0	0116	0.905895	0.554078	0.756888
0	0117	0.643528	0.060767	0.239440
0	0118	0.103915	0.943283	0.342409
0	0119	0.442054	0.438201	0.836395
0	0120	0.106578	0.542235	0.319249
0	0121	0.429025	0.040663	0.811757
0	0122	0.939323	0.036120	0.649625
0	0123	0.598624	0.540568	0.146743
0	0124	0.936194	0.438094	0.675143
0	0125	0.609810	0.938340	0.189071
0	0126	0.228543	0.128040	0.149954
0	0127	0.323109	0.618770	0.630476

0	0128	0.214672	0.365684	0.106366
0	0129	0.319993	0.853526	0.638666
0	0130	0.810435	0.856615	0.848381
0	0131	0.726155	0.367840	0.358711
0	0132	0.822420	0.618021	0.871279
0	0133	0.715250	0.129452	0.364389
0	0134	0.517732	0.846256	0.219171
0	0135	0.028815	0.347186	0.711659
0	0136	0.508871	0.628887	0.205160
0	0137	0.024390	0.127932	0.709380
0	0138	0.523053	0.130844	0.781389
0	0139	0.014261	0.633224	0.286867
0	0140	0.529872	0.348226	0.779543
0	0141	0.014790	0.852446	0.291851
0	0142	0.396289	0.825068	0.276593
0	0143	0.153406	0.328258	0.756475
0	0144	0.388480	0.660123	0.262804
0	0145	0.139313	0.153547	0.791494
0	0146	0.644915	0.151421	0.726813
0	0147	0.894428	0.653570	0.223580
0	0148	0.650203	0.316101	0.720470
0	0149	0.900704	0.828455	0.208172
0	0150	0.452302	0.742222	0.146518
0	0151	0.089896	0.236141	0.654885
0	0152	0.587076	0.238460	0.846538
0	0153	0.949213	0.742554	0.341657
0	0154	0.335462	0.839649	0.445946
0	0155	0.219994	0.325430	0.919875
0	0156	0.333233	0.635284	0.436239
0	0157	0.208325	0.138007	0.955812
0	0158	0.706599	0.155060	0.557609
0	0159	0.827296	0.650725	0.060592
0	0160	0.708811	0.349621	0.550830
0	0161	0.833956	0.841606	0.041269
0	0162	0.266659	0.843414	0.279173
0	0163	0.281646	0.356168	0.752795
0	0164	0.258151	0.646869	0.278743
0	0165	0.270393	0.162263	0.787809
0	0166	0.773764	0.129257	0.722502
0	0167	0.766849	0.623851	0.231096
0	0168	0.780942	0.331281	0.708755
0	0169	0.769991	0.816519	0.207119
0	0170	0.301857	0.736437	0.556362
0	0171	0.247846	0.242313	0.064655

O	O172	0.742715	0.248586	0.431480
O	O173	0.793236	0.739928	0.926749
O	O174	0.215954	0.834106	0.521728
O	O175	0.330169	0.341211	0.021408
O	O176	0.216080	0.638304	0.522246
O	O177	0.329574	0.141145	0.026407
O	O178	0.823083	0.146909	0.473433
O	O179	0.711428	0.640880	0.969858
O	O180	0.829138	0.344020	0.474176
O	O181	0.711861	0.839571	0.975206
O	O182	0.132331	0.736123	0.567470
O	O183	0.412733	0.240871	0.061257
O	O184	0.909034	0.242640	0.428460
O	O185	0.628687	0.741409	0.931717
O	O186	0.099160	0.828338	0.436219
O	O187	0.433262	0.315710	0.904811
O	O188	0.110588	0.659226	0.412012
O	O189	0.443282	0.144580	0.932725
O	O190	0.936328	0.155524	0.569703
O	O191	0.606046	0.663775	0.083890
O	O192	0.938955	0.324062	0.575224
O	O193	0.596903	0.835184	0.065455
O	O194	0.139198	0.833495	0.247146
O	O195	0.407964	0.337994	0.715323
O	O196	0.134802	0.652485	0.219178
O	O197	0.398219	0.160362	0.748333
O	O198	0.900473	0.139375	0.758986
O	O199	0.629698	0.638067	0.274597
O	O200	0.905558	0.324814	0.765223
O	O201	0.642779	0.818424	0.249302
O	O202	0.219595	0.746756	0.163760
O	O203	0.320899	0.245477	0.657947
O	O204	0.819924	0.233292	0.825429
O	O205	0.721533	0.739055	0.349279
Al	Al206	0.708966	0.654097	0.312243
Si	Si207	0.443174	0.051077	0.184352
Si	Si208	0.101288	0.543506	0.662103
Si	Si209	0.448915	0.434039	0.151004
Si	Si210	0.092540	0.930964	0.674928
Si	Si211	0.596976	0.932253	0.815062
Si	Si212	0.941016	0.434019	0.323948
Si	Si213	0.593173	0.548137	0.836795
Si	Si214	0.948564	0.046483	0.329245
Si	Si215	0.339054	0.022813	0.340092

Si	Si216	0.210093	0.521431	0.818861
Si	Si217	0.332735	0.461762	0.298807
Si	Si218	0.203483	0.965647	0.827411
Si	Si219	0.701306	0.959648	0.657044
Si	Si220	0.835237	0.459343	0.166010
Si	Si221	0.707259	0.515382	0.689976
Si	Si222	0.834643	0.015042	0.178152
Si	Si223	0.301420	0.045971	0.559852
Si	Si224	0.241052	0.555841	0.035646
Si	Si225	0.298323	0.427416	0.516108
Si	Si226	0.244449	0.935718	0.042745
Si	Si227	0.739792	0.935548	0.440938
Si	Si228	0.801325	0.426082	0.950286
Si	Si229	0.744639	0.551939	0.475775
Si	Si230	0.794750	0.048219	0.963695
Si	Si231	0.145997	0.049992	0.540697
Si	Si232	0.396856	0.555889	0.021002
Si	Si233	0.142127	0.420295	0.519570
Si	Si234	0.398198	0.932004	0.039817
Si	Si235	0.894523	0.928138	0.460378
Si	Si236	0.645112	0.425151	0.964328
Si	Si237	0.898930	0.555207	0.468635
Si	Si238	0.640604	0.050344	0.962480
Si	Si239	0.097910	0.023200	0.325901
Si	Si240	0.447059	0.517300	0.810508
Si	Si241	0.089009	0.463278	0.310593
Si	Si242	0.447345	0.962311	0.825568
Si	Si243	0.942296	0.956726	0.673180
Si	Si244	0.594856	0.461933	0.174186
Si	Si245	0.953497	0.517326	0.677506
Si	Si246	0.591713	0.016823	0.175940
Si	Si247	0.220553	0.054726	0.199002
Si	Si248	0.329678	0.543738	0.674034
Si	Si249	0.205168	0.432681	0.171463
Si	Si250	0.327031	0.921905	0.701554
Si	Si251	0.820058	0.931228	0.804735
Si	Si252	0.714381	0.440394	0.309026
Si	Si253	0.835394	0.549102	0.812523
Si	Si254	0.710235	0.059482	0.305030
Si	Si255	0.446291	0.818757	0.183355
Si	Si256	0.097898	0.315479	0.672977
Si	Si257	0.440756	0.664044	0.171706
Si	Si258	0.096699	0.159240	0.689563
Si	Si259	0.593577	0.160495	0.817261

Si	Si260	0.942965	0.663631	0.316715
Si	Si261	0.599248	0.315125	0.813707
Si	Si262	0.942659	0.820174	0.310305
Si	Si263	0.335996	0.862893	0.331146
Si	Si264	0.213402	0.363289	0.814605
Si	Si265	0.329321	0.621037	0.317917
Si	Si266	0.207556	0.124701	0.837123
Si	Si267	0.704497	0.118753	0.664674
Si	Si268	0.833298	0.616238	0.169283
Si	Si269	0.709874	0.357955	0.670458
Si	Si270	0.832772	0.855625	0.159852
Si	Si271	0.292901	0.815744	0.540955
Si	Si272	0.253300	0.318887	0.028430
Si	Si273	0.293278	0.657662	0.535384
Si	Si274	0.253585	0.162718	0.048373
Si	Si275	0.747088	0.169952	0.456442
Si	Si276	0.788491	0.662055	0.957897
Si	Si277	0.751837	0.327128	0.454475
Si	Si278	0.787525	0.818815	0.948830
Si	Si279	0.139003	0.814436	0.538397
Si	Si280	0.406370	0.316094	0.018365
Si	Si281	0.139256	0.660872	0.524061
Si	Si282	0.406758	0.162075	0.036181
Si	Si283	0.900717	0.165518	0.462840
Si	Si284	0.634944	0.665286	0.972113
Si	Si285	0.905364	0.319368	0.466579
Si	Si286	0.634715	0.819319	0.962289
Si	Si287	0.089555	0.864346	0.329272
Si	Si288	0.453358	0.360254	0.808616
Si	Si289	0.091381	0.621537	0.309406
Si	Si290	0.448151	0.119114	0.818848
Si	Si291	0.949806	0.114825	0.671910
Si	Si292	0.586668	0.617956	0.180092
Si	Si293	0.952392	0.358920	0.681835
Si	Si294	0.591936	0.859583	0.179945
Si	Si295	0.211184	0.823654	0.197648
Si	Si296	0.334055	0.324330	0.674596
Si	Si297	0.210263	0.668244	0.187145
Si	Si298	0.325541	0.170342	0.701221
Si	Si299	0.827848	0.154505	0.802965
Si	Si300	0.830154	0.311301	0.799352
Si	Si301	0.716003	0.811382	0.295710
Zn	Zn302	0.749895	0.718164	0.499331

TS-C₄H₁₀-Dehydro-on-FrameworkO-ZnH⁺ (Fig. 6/TS3)

Total energy = -1931.44571421 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.449081	0.609673	0.514980
H	H2	0.479959	0.530494	0.480518
H	H3	0.488509	0.599259	0.399028
H	H4	0.593988	0.574190	0.485776
H	H5	0.555590	0.583126	0.601668
H	H6	0.528237	0.701357	0.562511
H	H7	0.570095	0.695555	0.449157
H	H8	0.642379	0.663738	0.644756
H	H9	0.623095	0.745291	0.617197
H	H10	0.681816	0.656688	0.507112
H	H11	0.778976	0.791047	0.563292
C	C12	0.489381	0.584282	0.477053
C	C13	0.555300	0.601314	0.525028
C	C14	0.569661	0.676590	0.525536
C	C15	0.633770	0.696769	0.581206
O	O16	0.514226	0.032217	0.215330
O	O17	0.029028	0.532538	0.710795
O	O18	0.517323	0.446115	0.209784
O	O19	0.011493	0.931783	0.699846
O	O20	0.515664	0.948935	0.786183
O	O21	0.010688	0.458268	0.288683
O	O22	0.521415	0.534769	0.788453
O	O23	0.020978	0.044512	0.293050
O	O24	0.397019	0.061480	0.286179
O	O25	0.152507	0.560695	0.751334
O	O26	0.389144	0.434554	0.237858
O	O27	0.128963	0.950585	0.775649

0	028	0.633622	0.933477	0.711393
0	029	0.887986	0.429252	0.243714
0	030	0.648600	0.546648	0.758900
0	031	0.898582	0.040424	0.232571
0	032	0.439299	0.121527	0.123791
0	033	0.095482	0.613444	0.592483
0	034	0.448732	0.368391	0.092892
0	035	0.111395	0.861860	0.631840
0	036	0.598054	0.860030	0.863446
0	037	0.944175	0.371149	0.398161
0	038	0.589241	0.617124	0.899715
0	039	0.933736	0.121769	0.380397
0	040	0.405470	0.993608	0.119673
0	041	0.125039	0.484134	0.597639
0	042	0.435830	0.500026	0.079929
0	043	0.102232	0.991494	0.591115
0	044	0.621224	0.989245	0.888187
0	045	0.913266	0.499644	0.405104
0	046	0.603354	0.485834	0.921671
0	047	0.932323	0.990618	0.410068
0	048	0.336369	0.048700	0.456097
0	049	0.206193	0.560226	0.927820
0	050	0.336149	0.441776	0.415550
0	051	0.195777	0.948799	0.942633
0	052	0.701052	0.940751	0.549738
0	053	0.833095	0.424792	0.068372
0	054	0.707335	0.531640	0.587151
0	055	0.835075	0.039679	0.061368
0	056	0.344547	0.945147	0.331133
0	057	0.194834	0.446187	0.828677
0	058	0.333941	0.547185	0.296301
0	059	0.212238	0.048927	0.814595
0	060	0.703335	0.042820	0.679549
0	061	0.842643	0.541181	0.160948
0	062	0.716499	0.436315	0.722530
0	063	0.821000	0.938058	0.187591
0	064	0.266348	0.047448	0.291869
0	065	0.280594	0.538040	0.771506
0	066	0.259548	0.442039	0.258403
0	067	0.257750	0.929457	0.771633
0	068	0.765171	0.930769	0.718381
0	069	0.759419	0.448220	0.224486
0	070	0.778596	0.551763	0.746463
0	071	0.769416	0.055969	0.228143

0	072	0.307312	0.122315	0.612364
0	073	0.231137	0.630627	0.087785
0	074	0.328280	0.364212	0.570453
0	075	0.214116	0.873954	0.099990
0	076	0.712647	0.875320	0.383234
0	077	0.810301	0.354204	0.907926
0	078	0.706810	0.623652	0.450107
0	079	0.809630	0.113466	0.903310
0	080	0.219390	0.036184	0.540093
0	081	0.317588	0.539807	0.026510
0	082	0.220051	0.421954	0.500340
0	083	0.316663	0.932121	0.008752
0	084	0.813037	0.948774	0.449258
0	085	0.721131	0.441793	0.969765
0	086	0.819659	0.565001	0.499863
0	087	0.712956	0.049302	0.995712
0	088	0.325849	0.991964	0.630898
0	089	0.204301	0.501481	0.102956
0	090	0.309745	0.494791	0.590605
0	091	0.233078	0.004021	0.112586
0	092	0.705259	0.007205	0.383601
0	093	0.833954	0.483393	0.892927
0	094	0.728445	0.497606	0.400191
0	095	0.800313	0.982192	0.892038
0	096	0.129710	0.121824	0.602415
0	097	0.407824	0.629975	0.075417
0	098	0.119324	0.353104	0.573082
0	099	0.413540	0.862906	0.088217
0	0100	0.904780	0.860651	0.400023
0	0101	0.626886	0.355624	0.919147
0	0102	0.918953	0.631846	0.419409
0	0103	0.620920	0.121115	0.906594
0	0104	0.114447	0.064176	0.428723
0	0105	0.420159	0.561931	0.908195
0	0106	0.101841	0.431374	0.420435
0	0107	0.439741	0.946636	0.944267
0	0108	0.911378	0.919675	0.573006
0	0109	0.619103	0.419756	0.089812
0	0110	0.937606	0.558156	0.578329
0	0111	0.589945	0.045604	0.059031
0	0112	0.142396	0.051283	0.236224
0	0113	0.403655	0.535767	0.714651
0	0114	0.131367	0.432750	0.228029
0	0115	0.388713	0.922679	0.766823

0	0116	0.891358	0.944676	0.764157
0	0117	0.635901	0.449217	0.281542
0	0118	0.907650	0.554549	0.771071
0	0119	0.639180	0.065808	0.239299
0	0120	0.105077	0.946932	0.342163
0	0121	0.436444	0.439596	0.840793
0	0122	0.107361	0.545733	0.324038
0	0123	0.426745	0.044564	0.814068
0	0124	0.941033	0.037289	0.644466
0	0125	0.598864	0.542474	0.151242
0	0126	0.935491	0.442862	0.673178
0	0127	0.609284	0.943280	0.181065
0	0128	0.227001	0.132071	0.151731
0	0129	0.323116	0.621985	0.632124
0	0130	0.212588	0.368980	0.110728
0	0131	0.318297	0.858803	0.635608
0	0132	0.818887	0.854691	0.855795
0	0133	0.719399	0.367843	0.369548
0	0134	0.830566	0.616169	0.898694
0	0135	0.714324	0.137865	0.357042
0	0136	0.516791	0.851803	0.209844
0	0137	0.027371	0.351755	0.714423
0	0138	0.508034	0.631159	0.201793
0	0139	0.020995	0.131697	0.711551
0	0140	0.519841	0.135151	0.781303
0	0141	0.015533	0.636069	0.285835
0	0142	0.527763	0.351445	0.788562
0	0143	0.014837	0.857521	0.291482
0	0144	0.398017	0.829666	0.277020
0	0145	0.151779	0.330425	0.760723
0	0146	0.389277	0.663191	0.265791
0	0147	0.136387	0.155931	0.792687
0	0148	0.639900	0.155540	0.718535
0	0149	0.894874	0.653247	0.226847
0	0150	0.648481	0.324729	0.729255
0	0151	0.901044	0.833433	0.207902
0	0152	0.451354	0.744939	0.146374
0	0153	0.087014	0.239725	0.658041
0	0154	0.586961	0.240319	0.847798
0	0155	0.951436	0.746118	0.337891
0	0156	0.334388	0.838109	0.443867
0	0157	0.220371	0.332486	0.922687
0	0158	0.330898	0.641034	0.437959
0	0159	0.205325	0.141256	0.957365

0	0160	0.704668	0.143449	0.552429
0	0161	0.810403	0.658120	0.083047
0	0162	0.711041	0.355825	0.563973
0	0163	0.826388	0.841887	0.050534
0	0164	0.268209	0.845632	0.274466
0	0165	0.279736	0.360427	0.752804
0	0166	0.258581	0.654143	0.278674
0	0167	0.267325	0.166333	0.789533
0	0168	0.770458	0.151502	0.722163
0	0169	0.769277	0.626574	0.264307
0	0170	0.780074	0.321819	0.721076
0	0171	0.771763	0.819352	0.226132
0	0172	0.299002	0.739738	0.562251
0	0173	0.244499	0.246046	0.064774
0	0174	0.738012	0.250631	0.449598
0	0175	0.792601	0.739456	0.932981
0	0176	0.214691	0.836879	0.518237
0	0177	0.328965	0.344240	0.029406
0	0178	0.214629	0.640811	0.526383
0	0179	0.326884	0.145332	0.026396
0	0180	0.821672	0.149259	0.469592
0	0181	0.709084	0.639827	0.962498
0	0182	0.827065	0.346622	0.476153
0	0183	0.710027	0.840964	0.964181
0	0184	0.131078	0.739720	0.568522
0	0185	0.411167	0.243028	0.067894
0	0186	0.908173	0.246189	0.431389
0	0187	0.626552	0.741596	0.929642
0	0188	0.095909	0.833341	0.439732
0	0189	0.431111	0.317678	0.911915
0	0190	0.111474	0.664086	0.411592
0	0191	0.440375	0.150012	0.932834
0	0192	0.932631	0.158314	0.571874
0	0193	0.607076	0.664653	0.083152
0	0194	0.934471	0.325614	0.582705
0	0195	0.595402	0.840686	0.056052
0	0196	0.139751	0.834857	0.252662
0	0197	0.406521	0.337588	0.721624
0	0198	0.135559	0.654214	0.218606
0	0199	0.394801	0.163131	0.748014
0	0200	0.896552	0.133846	0.759686
0	0201	0.627970	0.642328	0.274888
0	0202	0.905151	0.334060	0.774469
0	0203	0.642223	0.821830	0.237633

O	O204	0.217391	0.750436	0.159609
O	O205	0.317577	0.249148	0.658845
O	O206	0.833192	0.234125	0.843260
O	O207	0.710207	0.745385	0.360716
Al	Al208	0.703257	0.661075	0.325239
Si	Si209	0.439623	0.052128	0.185406
Si	Si210	0.100459	0.547640	0.662448
Si	Si211	0.446882	0.437709	0.155337
Si	Si212	0.089084	0.934072	0.674325
Si	Si213	0.591589	0.933299	0.813467
Si	Si214	0.939258	0.439653	0.334085
Si	Si215	0.591499	0.545818	0.842988
Si	Si216	0.945353	0.049395	0.329117
Si	Si217	0.335774	0.025252	0.341274
Si	Si218	0.208491	0.525838	0.819313
Si	Si219	0.329728	0.466557	0.301822
Si	Si220	0.198739	0.969346	0.826474
Si	Si221	0.701161	0.962621	0.664795
Si	Si222	0.830970	0.461868	0.175123
Si	Si223	0.712780	0.516209	0.704806
Si	Si224	0.831243	0.018274	0.177462
Si	Si225	0.296878	0.050294	0.560313
Si	Si226	0.240052	0.558189	0.036452
Si	Si227	0.298248	0.430722	0.519648
Si	Si228	0.239978	0.939404	0.041690
Si	Si229	0.733855	0.942569	0.440675
Si	Si230	0.799243	0.426134	0.959794
Si	Si231	0.742204	0.552236	0.484374
Si	Si232	0.789839	0.046362	0.962681
Si	Si233	0.141510	0.053443	0.540755
Si	Si234	0.395318	0.558178	0.022651
Si	Si235	0.141959	0.423053	0.522949
Si	Si236	0.393636	0.934035	0.040370
Si	Si237	0.890180	0.929804	0.458090
Si	Si238	0.643053	0.425511	0.975304
Si	Si239	0.897834	0.563514	0.474847
Si	Si240	0.636442	0.051241	0.961865
Si	Si241	0.095358	0.026524	0.325595
Si	Si242	0.445241	0.518177	0.813782
Si	Si243	0.087946	0.467234	0.314779
Si	Si244	0.442726	0.965721	0.827280
Si	Si245	0.939006	0.958293	0.670429
Si	Si246	0.592855	0.464704	0.182709
Si	Si247	0.952169	0.521952	0.683836

Si	Si248	0.588356	0.021569	0.174283
Si	Si249	0.217363	0.058195	0.198339
Si	Si250	0.328956	0.547288	0.676959
Si	Si251	0.202610	0.436453	0.174550
Si	Si252	0.322232	0.926279	0.700940
Si	Si253	0.819005	0.928512	0.807029
Si	Si254	0.710911	0.440546	0.318713
Si	Si255	0.837621	0.551376	0.828205
Si	Si256	0.707253	0.066284	0.301596
Si	Si257	0.445081	0.822071	0.180614
Si	Si258	0.096181	0.318861	0.676721
Si	Si259	0.439548	0.666911	0.172126
Si	Si260	0.093435	0.162456	0.691260
Si	Si261	0.591715	0.163042	0.813563
Si	Si262	0.944821	0.666896	0.317323
Si	Si263	0.597393	0.318351	0.821567
Si	Si264	0.943217	0.823955	0.309360
Si	Si265	0.335998	0.864910	0.330865
Si	Si266	0.211956	0.367645	0.815792
Si	Si267	0.328375	0.626200	0.319897
Si	Si268	0.204866	0.127983	0.838618
Si	Si269	0.704718	0.123169	0.668439
Si	Si270	0.827600	0.619496	0.185651
Si	Si271	0.713744	0.359446	0.683997
Si	Si272	0.829973	0.858456	0.167823
Si	Si273	0.291298	0.818457	0.540293
Si	Si274	0.251697	0.323126	0.032027
Si	Si275	0.291648	0.661240	0.538542
Si	Si276	0.250928	0.166478	0.049275
Si	Si277	0.744895	0.170590	0.456897
Si	Si278	0.785845	0.662961	0.969739
Si	Si279	0.749150	0.329526	0.465170
Si	Si280	0.786832	0.818766	0.951945
Si	Si281	0.138031	0.818052	0.539398
Si	Si282	0.404899	0.318517	0.025770
Si	Si283	0.138127	0.664530	0.524920
Si	Si284	0.404270	0.164988	0.037593
Si	Si285	0.899303	0.168507	0.463351
Si	Si286	0.633112	0.665597	0.969839
Si	Si287	0.903485	0.322362	0.471938
Si	Si288	0.632784	0.820455	0.954247
Si	Si289	0.089208	0.868110	0.331284
Si	Si290	0.450625	0.361768	0.815215
Si	Si291	0.092418	0.624857	0.310110

Si	Si292	0.445169	0.123205	0.819539
Si	Si293	0.947536	0.115605	0.671773
Si	Si294	0.586239	0.620578	0.180294
Si	Si295	0.950731	0.363743	0.686140
Si	Si296	0.591223	0.864423	0.171013
Si	Si297	0.209989	0.826712	0.197216
Si	Si298	0.333026	0.327353	0.677084
Si	Si299	0.210399	0.672113	0.186028
Si	Si300	0.321931	0.173959	0.702027
Si	Si301	0.827204	0.157630	0.806598
Si	Si302	0.832499	0.311721	0.811565
Si	Si303	0.709564	0.815801	0.301984
Zn	Zn304	0.717708	0.749456	0.542685

M-C₄H₉ZnH-OH-ZnH⁺ (Fig. 6/M4) Total energy = -1931.69991174 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.807776	0.779235	0.608041
H	H2	0.480862	0.781998	0.740184
H	H3	0.421745	0.763971	0.648074
H	H4	0.471967	0.835631	0.636931
H	H5	0.512418	0.745469	0.523243
H	H6	0.518265	0.689617	0.623778
H	H7	0.602178	0.763698	0.703423
H	H8	0.596855	0.819064	0.602605
H	H9	0.639853	0.672972	0.589346
H	H10	0.683320	0.647157	0.468477
H	H11	0.634876	0.729596	0.487495
C	C12	0.471282	0.783271	0.660132
C	C13	0.522479	0.742541	0.603344

C	C14	0.592949	0.766244	0.623330
C	C15	0.645580	0.725702	0.567488
O	O16	0.518941	0.037191	0.216895
O	O17	0.017423	0.544829	0.717816
O	O18	0.525869	0.439830	0.216564
O	O19	0.010744	0.937087	0.708015
O	O20	0.512013	0.944897	0.791281
O	O21	0.021907	0.456592	0.295555
O	O22	0.514301	0.541741	0.793613
O	O23	0.020556	0.041364	0.291960
O	O24	0.402293	0.060760	0.293421
O	O25	0.133394	0.556948	0.797811
O	O26	0.406744	0.436890	0.293659
O	O27	0.126267	0.941297	0.793845
O	O28	0.625804	0.949319	0.704666
O	O29	0.905486	0.433868	0.216976
O	O30	0.633009	0.533185	0.724966
O	O31	0.901990	0.059324	0.218830
O	O32	0.438771	0.122875	0.127924
O	O33	0.104777	0.626507	0.636366
O	O34	0.435630	0.363274	0.135534
O	O35	0.108527	0.865937	0.634105
O	O36	0.608623	0.867111	0.855668
O	O37	0.941314	0.371228	0.381237
O	O38	0.605062	0.622289	0.864426
O	O39	0.938038	0.121884	0.383700
O	O40	0.411820	0.993766	0.125026
O	O41	0.121914	0.495708	0.623866
O	O42	0.426875	0.494574	0.118404
O	O43	0.110104	0.997487	0.616622
O	O44	0.613973	0.997550	0.887059
O	O45	0.913173	0.500756	0.386091
O	O46	0.607445	0.492210	0.909199
O	O47	0.918130	0.990795	0.386438
O	O48	0.339214	0.040503	0.462464
O	O49	0.197982	0.540092	0.964486
O	O50	0.341557	0.453950	0.460917
O	O51	0.193880	0.954231	0.959081
O	O52	0.695811	0.936180	0.544866
O	O53	0.839765	0.424513	0.048246
O	O54	0.706882	0.540880	0.568462
O	O55	0.838054	0.049436	0.047471
O	O56	0.336399	0.948739	0.318691
O	O57	0.204867	0.448175	0.820155

0	058	0.334214	0.545472	0.316471
0	059	0.204770	0.045766	0.815044
0	060	0.708244	0.046427	0.656163
0	061	0.855228	0.542320	0.131842
0	062	0.721545	0.437870	0.690254
0	063	0.850062	0.944442	0.165646
0	064	0.271377	0.061530	0.298574
0	065	0.263729	0.564304	0.798636
0	066	0.275974	0.429144	0.295463
0	067	0.255999	0.927071	0.790115
0	068	0.755001	0.931796	0.718573
0	069	0.775979	0.451102	0.213137
0	070	0.760041	0.557808	0.746718
0	071	0.772422	0.045770	0.215315
0	072	0.311124	0.122754	0.608956
0	073	0.226736	0.620383	0.113706
0	074	0.318826	0.374215	0.612693
0	075	0.218072	0.872600	0.108540
0	076	0.715098	0.869264	0.381598
0	077	0.803055	0.355981	0.891045
0	078	0.712022	0.623591	0.422174
0	079	0.802614	0.119629	0.891390
0	080	0.217662	0.045299	0.531642
0	081	0.318413	0.540967	0.036117
0	082	0.219900	0.439337	0.524849
0	083	0.315466	0.939819	0.021725
0	084	0.814438	0.934482	0.466170
0	085	0.722185	0.445691	0.967186
0	086	0.823501	0.566696	0.489881
0	087	0.713888	0.048690	0.987380
0	088	0.312853	0.992947	0.641032
0	089	0.220346	0.489994	0.141805
0	090	0.305900	0.504545	0.634572
0	091	0.228250	0.002600	0.134582
0	092	0.717663	0.002199	0.380593
0	093	0.830420	0.484561	0.873237
0	094	0.736484	0.495911	0.387732
0	095	0.804871	0.987768	0.880655
0	096	0.127956	0.128578	0.603381
0	097	0.406996	0.625573	0.107204
0	098	0.127598	0.363610	0.604247
0	099	0.407737	0.862340	0.099615
0	0100	0.908474	0.858006	0.389827
0	0101	0.631131	0.361205	0.900299

0	0102	0.919171	0.633272	0.401839
0	0103	0.625689	0.128853	0.902549
0	0104	0.101897	0.057940	0.443218
0	0105	0.433193	0.555886	0.945886
0	0106	0.098957	0.439053	0.450609
0	0107	0.436830	0.941248	0.949690
0	0108	0.929839	0.923279	0.555336
0	0109	0.614685	0.420309	0.073479
0	0110	0.944218	0.559515	0.558193
0	0111	0.593607	0.056205	0.059704
0	0112	0.144610	0.063634	0.256522
0	0113	0.390636	0.559879	0.759426
0	0114	0.146604	0.422256	0.268485
0	0115	0.385379	0.926666	0.770004
0	0116	0.883869	0.949288	0.736741
0	0117	0.649595	0.453618	0.257861
0	0118	0.889823	0.558969	0.738285
0	0119	0.644613	0.059990	0.241595
0	0120	0.110239	0.948145	0.334058
0	0121	0.429518	0.445287	0.837512
0	0122	0.117969	0.543118	0.331961
0	0123	0.429364	0.044800	0.827673
0	0124	0.947743	0.041643	0.633344
0	0125	0.591924	0.541691	0.137538
0	0126	0.936900	0.447783	0.658100
0	0127	0.607320	0.944775	0.165018
0	0128	0.226067	0.134592	0.150965
0	0129	0.314380	0.635999	0.652834
0	0130	0.226484	0.357037	0.150964
0	0131	0.311226	0.860075	0.645656
0	0132	0.821063	0.859466	0.845019
0	0133	0.727763	0.368280	0.349240
0	0134	0.828638	0.617218	0.886761
0	0135	0.725268	0.131857	0.347387
0	0136	0.519444	0.850278	0.202396
0	0137	0.021066	0.354324	0.718516
0	0138	0.519295	0.640178	0.208523
0	0139	0.020028	0.138286	0.715043
0	0140	0.520665	0.136152	0.784298
0	0141	0.024780	0.631091	0.285540
0	0142	0.522766	0.356558	0.789337
0	0143	0.018884	0.859786	0.283238
0	0144	0.405589	0.837776	0.293146
0	0145	0.138263	0.335173	0.795971

0	0146	0.407122	0.655039	0.299836
0	0147	0.136313	0.157414	0.795967
0	0148	0.638325	0.153159	0.708977
0	0149	0.910752	0.651724	0.205945
0	0150	0.638560	0.335804	0.706984
0	0151	0.904723	0.827718	0.199144
0	0152	0.443867	0.744719	0.164712
0	0153	0.089667	0.246242	0.668556
0	0154	0.589539	0.245289	0.830649
0	0155	0.961803	0.744917	0.325481
0	0156	0.334313	0.853008	0.453623
0	0157	0.207072	0.354278	0.958203
0	0158	0.334343	0.636784	0.459214
0	0159	0.206275	0.137071	0.957505
0	0160	0.702679	0.152457	0.539854
0	0161	0.820474	0.663214	0.071439
0	0162	0.707119	0.350278	0.542369
0	0163	0.835866	0.843837	0.037365
0	0164	0.274744	0.836770	0.279870
0	0165	0.269183	0.336559	0.787637
0	0166	0.277531	0.662093	0.286116
0	0167	0.267326	0.159594	0.787687
0	0168	0.769295	0.156387	0.708095
0	0169	0.787517	0.620473	0.252674
0	0170	0.769104	0.317305	0.708300
0	0171	0.773472	0.843616	0.209085
0	0172	0.296575	0.746384	0.553703
0	0173	0.244927	0.245390	0.053617
0	0174	0.743738	0.250022	0.423627
0	0175	0.797880	0.742616	0.920155
0	0176	0.211973	0.844673	0.517965
0	0177	0.328356	0.345374	0.027029
0	0178	0.213153	0.645501	0.528807
0	0179	0.327561	0.143534	0.027418
0	0180	0.824765	0.150567	0.471582
0	0181	0.712645	0.646638	0.966537
0	0182	0.828088	0.346688	0.472192
0	0183	0.715877	0.842254	0.962703
0	0184	0.131207	0.745823	0.569590
0	0185	0.408028	0.243716	0.072317
0	0186	0.909570	0.247237	0.424074
0	0187	0.631430	0.745690	0.915384
0	0188	0.092586	0.839025	0.441640
0	0189	0.445270	0.335164	0.942410

O	O190	0.097098	0.650492	0.443210
O	O191	0.442041	0.154467	0.936395
O	O192	0.935570	0.165173	0.571330
O	O193	0.596027	0.659866	0.053935
O	O194	0.940369	0.330796	0.568691
O	O195	0.597791	0.839449	0.046788
O	O196	0.145361	0.831260	0.260947
O	O197	0.397423	0.330144	0.757432
O	O198	0.149371	0.661459	0.262076
O	O199	0.395106	0.160204	0.751298
O	O200	0.893685	0.130461	0.752634
O	O201	0.647458	0.642366	0.234910
O	O202	0.894566	0.341988	0.753064
O	O203	0.645615	0.825886	0.228831
O	O204	0.221062	0.747034	0.162130
O	O205	0.318198	0.247783	0.663037
O	O206	0.834836	0.237152	0.827131
O	O207	0.728469	0.745305	0.322031
Al	Al208	0.718955	0.662231	0.294303
Si	Si209	0.443137	0.053823	0.190256
Si	Si210	0.094465	0.555954	0.692933
Si	Si211	0.448391	0.433857	0.190908
Si	Si212	0.089138	0.935545	0.687536
Si	Si213	0.590067	0.939744	0.811071
Si	Si214	0.945670	0.440790	0.320386
Si	Si215	0.590511	0.547493	0.824839
Si	Si216	0.944302	0.053184	0.320762
Si	Si217	0.337367	0.027822	0.343801
Si	Si218	0.200187	0.527192	0.846096
Si	Si219	0.339651	0.466354	0.342077
Si	Si220	0.195276	0.967052	0.840425
Si	Si221	0.696409	0.966622	0.655936
Si	Si222	0.844296	0.463579	0.153548
Si	Si223	0.705613	0.516919	0.683756
Si	Si224	0.840543	0.024550	0.161954
Si	Si225	0.294892	0.050462	0.561387
Si	Si226	0.241199	0.548111	0.064801
Si	Si227	0.296498	0.442798	0.558864
Si	Si228	0.239000	0.942262	0.056715
Si	Si229	0.736448	0.935391	0.441399
Si	Si230	0.798852	0.427876	0.945098
Si	Si231	0.747239	0.553094	0.467762
Si	Si232	0.790177	0.051137	0.951404
Si	Si233	0.139664	0.057200	0.549033

Si	Si234	0.396244	0.554391	0.052404
Si	Si235	0.142323	0.434684	0.551331
Si	Si236	0.392840	0.934254	0.049284
Si	Si237	0.892771	0.926648	0.448928
Si	Si238	0.643963	0.429541	0.962257
Si	Si239	0.900947	0.564671	0.457746
Si	Si240	0.636964	0.058054	0.958783
Si	Si241	0.094188	0.027575	0.331952
Si	Si242	0.441609	0.525354	0.835040
Si	Si243	0.096306	0.465088	0.336415
Si	Si244	0.440656	0.964762	0.834522
Si	Si245	0.942536	0.962530	0.658921
Si	Si246	0.595554	0.464385	0.171176
Si	Si247	0.946894	0.527621	0.669164
Si	Si248	0.591286	0.024073	0.170755
Si	Si249	0.217645	0.064745	0.209803
Si	Si250	0.318458	0.565450	0.711116
Si	Si251	0.217502	0.425288	0.213766
Si	Si252	0.316220	0.927393	0.711200
Si	Si253	0.816648	0.932630	0.794653
Si	Si254	0.722550	0.441815	0.300161
Si	Si255	0.827474	0.554227	0.812148
Si	Si256	0.715313	0.059460	0.296015
Si	Si257	0.444707	0.823530	0.189909
Si	Si258	0.093957	0.324556	0.696923
Si	Si259	0.444984	0.666519	0.194618
Si	Si260	0.093268	0.167656	0.695488
Si	Si261	0.593424	0.166104	0.806726
Si	Si262	0.953864	0.665898	0.304228
Si	Si263	0.595152	0.324344	0.807225
Si	Si264	0.948571	0.822540	0.299489
Si	Si265	0.337652	0.868930	0.336029
Si	Si266	0.204773	0.368543	0.840114
Si	Si267	0.338328	0.624711	0.340524
Si	Si268	0.203627	0.125024	0.838826
Si	Si269	0.704250	0.127013	0.653970
Si	Si270	0.842271	0.619105	0.167155
Si	Si271	0.708525	0.359914	0.661922
Si	Si272	0.840530	0.864649	0.153124
Si	Si273	0.288213	0.825898	0.542890
Si	Si274	0.251894	0.325216	0.047699
Si	Si275	0.289453	0.666567	0.548334
Si	Si276	0.251457	0.165550	0.047215
Si	Si277	0.749126	0.171047	0.445807

Si	Si278	0.790011	0.667145	0.961125
Si	Si279	0.751714	0.328374	0.447321
Si	Si280	0.792504	0.821787	0.942201
Si	Si281	0.135835	0.823947	0.540462
Si	Si282	0.404340	0.322049	0.044031
Si	Si283	0.136616	0.667165	0.544542
Si	Si284	0.404123	0.165930	0.040881
Si	Si285	0.902133	0.170676	0.462156
Si	Si286	0.636214	0.668532	0.951207
Si	Si287	0.904854	0.324069	0.461437
Si	Si288	0.638598	0.823641	0.946168
Si	Si289	0.091946	0.869435	0.329519
Si	Si290	0.448612	0.366863	0.831463
Si	Si291	0.097729	0.621484	0.330715
Si	Si292	0.446576	0.123756	0.825013
Si	Si293	0.949097	0.119010	0.668268
Si	Si294	0.590372	0.621591	0.160700
Si	Si295	0.948302	0.368622	0.674502
Si	Si296	0.592825	0.865075	0.161042
Si	Si297	0.214821	0.822895	0.203060
Si	Si298	0.325857	0.323199	0.705091
Si	Si299	0.218863	0.671641	0.205602
Si	Si300	0.322986	0.171571	0.702820
Si	Si301	0.825066	0.160401	0.793998
Si	Si302	0.825432	0.313880	0.794398
Si	Si303	0.716163	0.819997	0.285527
Zn	Zn304	0.736780	0.756238	0.590111

TS-C₄H₉ZnH-HTransfer-Concerted-ZnH⁺ (Fig. 6/TS4)

Total energy = -1930.55803973 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

H	H1	0.645977	0.809874	0.574718
H	H2	0.645155	0.638679	0.501457
H	H3	0.670159	0.761550	0.681808
H	H4	0.585379	0.685125	0.650974
H	H5	0.614128	0.655273	0.535211
H	H6	0.562892	0.762088	0.455569
H	H7	0.520094	0.779160	0.565774
H	H8	0.512836	0.646718	0.450561
H	H9	0.451195	0.708453	0.457994
H	H10	0.472610	0.662361	0.565261
H	H11	0.817928	0.742454	0.524355
C	C12	0.655443	0.759823	0.603768
C	C13	0.599681	0.716404	0.588069
C	C14	0.543460	0.738715	0.523063
C	C15	0.492163	0.685781	0.498007
O	O16	0.518229	0.035420	0.213841
O	O17	0.027583	0.533355	0.711420
O	O18	0.517796	0.443936	0.210195
O	O19	0.012657	0.930837	0.703100
O	O20	0.515182	0.945528	0.785976
O	O21	0.011221	0.457343	0.288555
O	O22	0.520975	0.534778	0.787247
O	O23	0.022100	0.044012	0.290234
O	O24	0.401441	0.056888	0.289826
O	O25	0.150838	0.562430	0.753501
O	O26	0.390582	0.429429	0.244289
O	O27	0.129085	0.944023	0.783978
O	O28	0.631605	0.934522	0.705970
O	O29	0.889148	0.428864	0.239830
O	O30	0.647181	0.548203	0.754435
O	O31	0.902426	0.038314	0.220688
O	O32	0.437461	0.122563	0.128494
O	O33	0.094685	0.613831	0.593150
O	O34	0.447921	0.367163	0.093169
O	O35	0.112458	0.860364	0.633875
O	O36	0.600986	0.857925	0.857949
O	O37	0.943407	0.371402	0.396719
O	O38	0.589378	0.615487	0.899987
O	O39	0.931019	0.122005	0.368555
O	O40	0.410903	0.993589	0.118573
O	O41	0.124132	0.484633	0.600439

0	042	0.432964	0.498628	0.086553
0	043	0.106735	0.990563	0.600813
0	044	0.621261	0.987224	0.885507
0	045	0.912151	0.500064	0.401091
0	046	0.604515	0.483718	0.916241
0	047	0.929888	0.991514	0.402573
0	048	0.339696	0.039550	0.458428
0	049	0.201920	0.550992	0.931961
0	050	0.338113	0.443769	0.422995
0	051	0.196396	0.949496	0.950507
0	052	0.697513	0.940521	0.542062
0	053	0.834141	0.424704	0.064621
0	054	0.704385	0.530917	0.582167
0	055	0.837460	0.034836	0.050408
0	056	0.339090	0.943370	0.319448
0	057	0.195055	0.445102	0.812710
0	058	0.336212	0.543989	0.292894
0	059	0.210275	0.045196	0.813128
0	060	0.705422	0.041244	0.674193
0	061	0.843246	0.540815	0.157591
0	062	0.713008	0.436122	0.718476
0	063	0.824150	0.935796	0.181409
0	064	0.270313	0.053902	0.294595
0	065	0.279355	0.543058	0.776443
0	066	0.260920	0.438084	0.267220
0	067	0.258309	0.925182	0.780830
0	068	0.762804	0.925764	0.708987
0	069	0.760447	0.447329	0.221045
0	070	0.776821	0.550634	0.741434
0	071	0.773607	0.054939	0.218514
0	072	0.311390	0.117911	0.610730
0	073	0.228472	0.625805	0.087121
0	074	0.323123	0.362800	0.574431
0	075	0.218352	0.871665	0.105254
0	076	0.717918	0.873839	0.378142
0	077	0.810958	0.351623	0.906871
0	078	0.707109	0.623744	0.447546
0	079	0.811431	0.110719	0.894457
0	080	0.220260	0.036637	0.534637
0	081	0.316909	0.538290	0.023668
0	082	0.219358	0.425609	0.499689
0	083	0.317809	0.934136	0.013641
0	084	0.814573	0.945728	0.457609
0	085	0.720738	0.438005	0.968721

0	086	0.818787	0.563099	0.499748
0	087	0.714831	0.047438	0.989213
0	088	0.321093	0.987196	0.634516
0	089	0.207651	0.495866	0.108906
0	090	0.308466	0.493373	0.599399
0	091	0.233194	0.001795	0.122608
0	092	0.712036	0.005946	0.375921
0	093	0.831492	0.480817	0.887079
0	094	0.729136	0.496559	0.397132
0	095	0.798930	0.980103	0.880311
0	096	0.131321	0.121231	0.602713
0	097	0.406166	0.628672	0.078082
0	098	0.123124	0.353010	0.578115
0	099	0.412005	0.861971	0.094635
0	0100	0.904513	0.861085	0.390327
0	0101	0.625823	0.352934	0.916658
0	0102	0.917622	0.631867	0.419137
0	0103	0.623646	0.119454	0.899395
0	0104	0.109899	0.059554	0.434122
0	0105	0.422695	0.559568	0.912893
0	0106	0.099242	0.430118	0.425414
0	0107	0.440301	0.940700	0.945057
0	0108	0.920656	0.916789	0.564298
0	0109	0.617183	0.419022	0.086113
0	0110	0.937720	0.556521	0.575442
0	0111	0.592196	0.046431	0.054821
0	0112	0.145037	0.056023	0.243868
0	0113	0.402474	0.539088	0.718808
0	0114	0.132881	0.429752	0.234736
0	0115	0.388769	0.919372	0.767089
0	0116	0.889351	0.939878	0.753087
0	0117	0.637153	0.446967	0.278015
0	0118	0.905555	0.552987	0.767550
0	0119	0.643902	0.064893	0.233831
0	0120	0.106953	0.946111	0.335060
0	0121	0.436072	0.438840	0.837389
0	0122	0.107677	0.543910	0.327151
0	0123	0.426426	0.040872	0.818304
0	0124	0.942024	0.034715	0.640918
0	0125	0.598189	0.541476	0.151323
0	0126	0.936408	0.441599	0.670578
0	0127	0.609563	0.943388	0.176290
0	0128	0.228151	0.132118	0.149153
0	0129	0.321833	0.622594	0.632075

0	0130	0.215104	0.363192	0.122286
0	0131	0.315281	0.853967	0.641311
0	0132	0.816815	0.851880	0.848422
0	0133	0.721478	0.366853	0.366302
0	0134	0.828256	0.613431	0.895625
0	0135	0.720133	0.136529	0.350139
0	0136	0.519020	0.850206	0.208893
0	0137	0.027724	0.350600	0.713948
0	0138	0.507029	0.629300	0.203497
0	0139	0.020697	0.129826	0.708917
0	0140	0.519136	0.131030	0.780488
0	0141	0.014391	0.632751	0.286214
0	0142	0.527263	0.349997	0.785907
0	0143	0.016874	0.855815	0.287698
0	0144	0.402514	0.829266	0.284625
0	0145	0.150857	0.325655	0.766110
0	0146	0.388495	0.662158	0.268185
0	0147	0.134843	0.153340	0.793255
0	0148	0.636905	0.152033	0.709625
0	0149	0.894062	0.652668	0.226550
0	0150	0.648096	0.323144	0.726084
0	0151	0.904024	0.830534	0.200192
0	0152	0.450951	0.743720	0.149670
0	0153	0.086927	0.238357	0.657611
0	0154	0.586288	0.237805	0.841342
0	0155	0.952952	0.745096	0.335002
0	0156	0.335922	0.844415	0.448791
0	0157	0.215752	0.341272	0.930366
0	0158	0.329921	0.634620	0.437713
0	0159	0.205880	0.137265	0.955119
0	0160	0.704367	0.140872	0.545251
0	0161	0.813007	0.658122	0.079402
0	0162	0.710601	0.354170	0.560760
0	0163	0.828895	0.840323	0.043228
0	0164	0.271969	0.834385	0.277491
0	0165	0.279830	0.351497	0.760251
0	0166	0.257965	0.649483	0.277258
0	0167	0.265292	0.162542	0.784451
0	0168	0.767304	0.152575	0.717538
0	0169	0.767392	0.625506	0.258034
0	0170	0.779682	0.323051	0.719029
0	0171	0.774364	0.817491	0.219268
0	0172	0.300631	0.738687	0.552518
0	0173	0.244644	0.244326	0.055776

O	O174	0.737914	0.249335	0.445572
O	O175	0.792124	0.737301	0.927907
O	O176	0.214622	0.836091	0.516782
O	O177	0.328507	0.343808	0.027644
O	O178	0.213603	0.640591	0.525434
O	O179	0.327599	0.143404	0.022872
O	O180	0.823371	0.149810	0.470475
O	O181	0.708572	0.638751	0.965161
O	O182	0.827484	0.344107	0.476449
O	O183	0.710701	0.838842	0.963298
O	O184	0.130412	0.739651	0.566742
O	O185	0.410268	0.242222	0.065672
O	O186	0.909998	0.245673	0.427521
O	O187	0.626185	0.739978	0.928861
O	O188	0.095109	0.835878	0.441005
O	O189	0.431220	0.317633	0.911000
O	O190	0.109930	0.663345	0.411320
O	O191	0.443089	0.146640	0.935750
O	O192	0.938287	0.154070	0.561393
O	O193	0.605222	0.663710	0.083471
O	O194	0.936059	0.324010	0.580443
O	O195	0.595079	0.840874	0.051873
O	O196	0.142835	0.831350	0.256264
O	O197	0.406018	0.335925	0.720138
O	O198	0.134389	0.651374	0.218984
O	O199	0.393704	0.159621	0.752923
O	O200	0.894400	0.134191	0.746752
O	O201	0.626605	0.642043	0.275904
O	O202	0.905030	0.333015	0.771599
O	O203	0.645086	0.822918	0.232560
O	O204	0.216596	0.746208	0.157632
O	O205	0.319690	0.245141	0.656682
O	O206	0.832817	0.232687	0.837688
O	O207	0.711701	0.744734	0.354826
Al	Al208	0.703230	0.659752	0.324568
Si	Si209	0.442467	0.052091	0.186877
Si	Si210	0.099209	0.548476	0.664091
Si	Si211	0.446489	0.435186	0.158756
Si	Si212	0.090624	0.931644	0.680104
Si	Si213	0.591868	0.931655	0.810130
Si	Si214	0.938976	0.439606	0.331935
Si	Si215	0.591573	0.545119	0.840576
Si	Si216	0.945473	0.049054	0.320795
Si	Si217	0.337422	0.023095	0.340933

Si	Si218	0.206782	0.525044	0.818672
Si	Si219	0.331598	0.463695	0.306923
Si	Si220	0.198620	0.965945	0.832781
Si	Si221	0.699622	0.961405	0.657855
Si	Si222	0.831851	0.461491	0.171658
Si	Si223	0.710527	0.516047	0.699561
Si	Si224	0.834521	0.015749	0.167518
Si	Si225	0.297716	0.045911	0.560168
Si	Si226	0.239011	0.552844	0.038169
Si	Si227	0.297154	0.431344	0.524426
Si	Si228	0.241384	0.938956	0.048685
Si	Si229	0.736263	0.941277	0.436941
Si	Si230	0.798986	0.423974	0.957075
Si	Si231	0.740985	0.552859	0.480504
Si	Si232	0.791094	0.043565	0.953219
Si	Si233	0.142218	0.051856	0.543288
Si	Si234	0.394620	0.556478	0.025612
Si	Si235	0.141721	0.423636	0.526200
Si	Si236	0.395072	0.932818	0.043299
Si	Si237	0.892370	0.928666	0.453215
Si	Si238	0.642466	0.423118	0.972160
Si	Si239	0.896553	0.562915	0.473181
Si	Si240	0.638100	0.050125	0.956733
Si	Si241	0.095669	0.026049	0.326386
Si	Si242	0.445306	0.517984	0.815113
Si	Si243	0.087850	0.465432	0.318490
Si	Si244	0.442602	0.961839	0.828815
Si	Si245	0.941224	0.955572	0.665502
Si	Si246	0.592860	0.463251	0.180964
Si	Si247	0.951395	0.521026	0.681561
Si	Si248	0.591196	0.022276	0.170091
Si	Si249	0.219277	0.060340	0.202560
Si	Si250	0.327656	0.549087	0.681191
Si	Si251	0.204534	0.432020	0.182656
Si	Si252	0.320464	0.922040	0.705559
Si	Si253	0.817239	0.924938	0.797301
Si	Si254	0.712248	0.439662	0.315761
Si	Si255	0.835352	0.549372	0.823809
Si	Si256	0.712635	0.065216	0.294235
Si	Si257	0.446376	0.820887	0.184467
Si	Si258	0.096802	0.317165	0.678843
Si	Si259	0.438765	0.665488	0.174329
Si	Si260	0.093207	0.161039	0.690692
Si	Si261	0.591352	0.160429	0.807652

Si	Si262	0.944230	0.665670	0.316784
Si	Si263	0.596845	0.316332	0.817991
Si	Si264	0.944837	0.822409	0.303382
Si	Si265	0.337169	0.863081	0.331922
Si	Si266	0.210807	0.366000	0.816928
Si	Si267	0.327974	0.622418	0.318940
Si	Si268	0.203737	0.124475	0.836410
Si	Si269	0.703533	0.121679	0.661769
Si	Si270	0.827495	0.618968	0.182746
Si	Si271	0.712771	0.359051	0.680729
Si	Si272	0.832826	0.856125	0.160937
Si	Si273	0.291124	0.818149	0.540198
Si	Si274	0.251243	0.323042	0.033984
Si	Si275	0.290924	0.659594	0.536130
Si	Si276	0.251601	0.164635	0.045244
Si	Si277	0.746640	0.169506	0.452493
Si	Si278	0.785652	0.661365	0.967619
Si	Si279	0.749587	0.328150	0.462537
Si	Si280	0.787191	0.816621	0.946971
Si	Si281	0.137818	0.818067	0.539189
Si	Si282	0.404400	0.317953	0.024510
Si	Si283	0.137032	0.664227	0.524294
Si	Si284	0.404562	0.163738	0.037993
Si	Si285	0.900951	0.167586	0.456803
Si	Si286	0.632528	0.664210	0.970828
Si	Si287	0.904192	0.321327	0.470091
Si	Si288	0.633431	0.819049	0.951546
Si	Si289	0.090610	0.867107	0.329786
Si	Si290	0.450312	0.360802	0.813155
Si	Si291	0.091315	0.622583	0.310933
Si	Si292	0.445233	0.119559	0.822240
Si	Si293	0.948421	0.113561	0.664525
Si	Si294	0.585369	0.619475	0.181295
Si	Si295	0.951303	0.362539	0.684036
Si	Si296	0.592596	0.864305	0.167245
Si	Si297	0.212426	0.821806	0.199409
Si	Si298	0.332024	0.323595	0.678613
Si	Si299	0.209203	0.668022	0.185263
Si	Si300	0.322553	0.170103	0.700963
Si	Si301	0.826311	0.156844	0.798612
Si	Si302	0.832328	0.310797	0.808535
Si	Si303	0.712597	0.814628	0.296194
Zn	Zn304	0.743049	0.742862	0.535355

C₄H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnH⁺ (Fig. 6/M5)

Total energy = -1932.30596876 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.556269	0.818868	0.589307
H	H2	0.667122	0.693679	0.696428
H	H3	0.510313	0.809402	0.706908
H	H4	0.449878	0.715447	0.640555
H	H5	0.634662	0.707742	0.683708
H	H6	0.533069	0.739509	0.451717
H	H7	0.449141	0.718447	0.450095
H	H8	0.559532	0.628300	0.529618
H	H9	0.513920	0.616503	0.418989
H	H10	0.474966	0.608905	0.536211
H	H11	0.782356	0.753145	0.581359
C	C12	0.519297	0.792069	0.631895
C	C13	0.486309	0.740399	0.594084
C	C14	0.494964	0.711698	0.491984
C	C15	0.511838	0.636900	0.494144
O	O16	0.517160	0.032155	0.215197
O	O17	0.028309	0.529264	0.710436
O	O18	0.518050	0.442232	0.204112
O	O19	0.015228	0.934898	0.706128
O	O20	0.521397	0.950316	0.787833
O	O21	0.010879	0.452638	0.280733
O	O22	0.520513	0.538508	0.786675
O	O23	0.023683	0.045183	0.295069
O	O24	0.399477	0.059116	0.285292
O	O25	0.152104	0.555090	0.750975
O	O26	0.390338	0.429362	0.234690

0	027	0.135649	0.942702	0.774422
0	028	0.639170	0.925779	0.715548
0	029	0.887937	0.422985	0.235883
0	030	0.647900	0.550715	0.754975
0	031	0.902236	0.033395	0.233875
0	032	0.441643	0.122083	0.125629
0	033	0.096108	0.610693	0.594261
0	034	0.448859	0.366984	0.084875
0	035	0.107298	0.858525	0.628191
0	036	0.598929	0.863003	0.876786
0	037	0.943785	0.367696	0.392575
0	038	0.590660	0.617032	0.901892
0	039	0.931758	0.118987	0.378324
0	040	0.409769	0.994019	0.115969
0	041	0.123219	0.480855	0.595383
0	042	0.435299	0.498490	0.078500
0	043	0.106605	0.988847	0.592938
0	044	0.629601	0.992079	0.882703
0	045	0.913296	0.496701	0.393395
0	046	0.603113	0.485305	0.914053
0	047	0.937303	0.988474	0.413174
0	048	0.340510	0.044146	0.455982
0	049	0.207456	0.557854	0.925227
0	050	0.335767	0.436282	0.412092
0	051	0.199611	0.946688	0.944349
0	052	0.702945	0.927623	0.548441
0	053	0.832330	0.423445	0.061410
0	054	0.700297	0.536462	0.577316
0	055	0.837889	0.039355	0.064959
0	056	0.345559	0.942871	0.325772
0	057	0.196518	0.441907	0.830937
0	058	0.336987	0.542397	0.294282
0	059	0.212941	0.045609	0.813130
0	060	0.691329	0.039771	0.652573
0	061	0.850099	0.538388	0.156756
0	062	0.701331	0.435463	0.705387
0	063	0.821821	0.934609	0.184482
0	064	0.268709	0.047184	0.293578
0	065	0.280391	0.533312	0.767667
0	066	0.260835	0.438995	0.253599
0	067	0.265386	0.927767	0.777399
0	068	0.769816	0.943130	0.714020
0	069	0.760601	0.451290	0.218280
0	070	0.777236	0.541306	0.732415

0	071	0.773451	0.052060	0.234577
0	072	0.312285	0.117649	0.612717
0	073	0.226979	0.628036	0.086819
0	074	0.324007	0.359852	0.567637
0	075	0.219152	0.868792	0.098823
0	076	0.729690	0.867473	0.381448
0	077	0.811213	0.354296	0.899910
0	078	0.723417	0.627649	0.439693
0	079	0.818706	0.114768	0.907864
0	080	0.223533	0.032797	0.540150
0	081	0.316992	0.539382	0.028771
0	082	0.218572	0.421259	0.495781
0	083	0.320725	0.929328	0.009767
0	084	0.817226	0.950679	0.458759
0	085	0.721140	0.441395	0.960846
0	086	0.820613	0.551311	0.503710
0	087	0.717499	0.053301	0.995371
0	088	0.329514	0.986492	0.629599
0	089	0.203352	0.498181	0.099703
0	090	0.310576	0.491387	0.586289
0	091	0.236987	0.998882	0.116502
0	092	0.706538	0.997898	0.383626
0	093	0.834052	0.484840	0.888488
0	094	0.724793	0.499942	0.392587
0	095	0.804548	0.983736	0.893911
0	096	0.134032	0.119022	0.601998
0	097	0.409209	0.628514	0.072147
0	098	0.118997	0.350115	0.569594
0	099	0.418621	0.862713	0.091706
0	0100	0.903948	0.859846	0.400978
0	0101	0.627501	0.355133	0.911080
0	0102	0.912245	0.627777	0.418637
0	0103	0.618930	0.121748	0.916751
0	0104	0.118474	0.060354	0.429326
0	0105	0.417565	0.559116	0.905640
0	0106	0.099695	0.428824	0.417797
0	0107	0.443223	0.942747	0.942890
0	0108	0.918136	0.917209	0.575616
0	0109	0.619410	0.419400	0.081761
0	0110	0.942031	0.549017	0.569397
0	0111	0.595542	0.036367	0.060404
0	0112	0.144861	0.046163	0.236688
0	0113	0.403463	0.533346	0.711375
0	0114	0.132666	0.429068	0.226622

0	0115	0.395752	0.918106	0.763188
0	0116	0.894314	0.939574	0.767415
0	0117	0.636887	0.444780	0.274039
0	0118	0.905029	0.553730	0.759853
0	0119	0.643042	0.061240	0.240758
0	0120	0.102825	0.943625	0.343294
0	0121	0.439916	0.438293	0.836586
0	0122	0.104595	0.542543	0.319870
0	0123	0.427756	0.041154	0.813315
0	0124	0.938123	0.036383	0.650610
0	0125	0.597973	0.540808	0.149755
0	0126	0.935227	0.438192	0.676211
0	0127	0.608933	0.938708	0.191434
0	0128	0.227794	0.127918	0.150104
0	0129	0.322084	0.618830	0.629911
0	0130	0.212991	0.365711	0.107179
0	0131	0.319591	0.853266	0.639763
0	0132	0.810368	0.856292	0.849439
0	0133	0.724713	0.368960	0.362299
0	0134	0.822609	0.617595	0.875941
0	0135	0.714896	0.129649	0.365867
0	0136	0.516836	0.846366	0.220546
0	0137	0.027875	0.347256	0.713081
0	0138	0.506479	0.628292	0.203916
0	0139	0.024235	0.127486	0.709334
0	0140	0.522527	0.130544	0.782483
0	0141	0.012071	0.633448	0.288612
0	0142	0.528440	0.348485	0.781148
0	0143	0.013927	0.852638	0.292628
0	0144	0.395083	0.824989	0.277161
0	0145	0.152675	0.328122	0.756621
0	0146	0.386238	0.660704	0.261982
0	0147	0.138962	0.153952	0.791620
0	0148	0.644492	0.151901	0.728499
0	0149	0.891502	0.653875	0.227249
0	0150	0.649190	0.317146	0.723607
0	0151	0.899647	0.829111	0.209388
0	0152	0.451359	0.742577	0.146884
0	0153	0.088772	0.236307	0.655217
0	0154	0.585665	0.238548	0.847829
0	0155	0.947515	0.743246	0.343287
0	0156	0.334222	0.839758	0.446558
0	0157	0.219077	0.325985	0.920397
0	0158	0.331273	0.635940	0.435759

0	0159	0.207734	0.137931	0.956042
0	0160	0.705977	0.154804	0.559178
0	0161	0.824132	0.652074	0.064613
0	0162	0.707806	0.349374	0.553833
0	0163	0.832573	0.841494	0.042603
0	0164	0.265531	0.843527	0.279816
0	0165	0.280869	0.356040	0.753194
0	0166	0.256068	0.645496	0.278272
0	0167	0.270074	0.162190	0.788340
0	0168	0.773365	0.130124	0.724218
0	0169	0.763967	0.623654	0.234694
0	0170	0.780133	0.329975	0.711353
0	0171	0.769141	0.815887	0.208872
0	0172	0.299903	0.736487	0.556733
0	0173	0.246396	0.242466	0.064975
0	0174	0.741224	0.248927	0.433107
0	0175	0.792311	0.739849	0.927899
0	0176	0.215101	0.834976	0.523543
0	0177	0.328819	0.341578	0.023176
0	0178	0.214431	0.638000	0.522831
0	0179	0.328898	0.141896	0.026954
0	0180	0.822481	0.147963	0.475235
0	0181	0.709836	0.641048	0.969846
0	0182	0.827892	0.343969	0.476412
0	0183	0.710814	0.839646	0.975097
0	0184	0.131446	0.736489	0.567830
0	0185	0.412022	0.241628	0.062200
0	0186	0.908556	0.243311	0.429276
0	0187	0.626735	0.741694	0.933840
0	0188	0.099084	0.828117	0.435642
0	0189	0.430848	0.315755	0.904588
0	0190	0.108978	0.659608	0.412552
0	0191	0.442624	0.145501	0.933402
0	0192	0.936624	0.155386	0.569217
0	0193	0.605508	0.663876	0.086021
0	0194	0.937482	0.323745	0.577610
0	0195	0.596698	0.835641	0.067649
0	0196	0.138146	0.834531	0.246171
0	0197	0.407055	0.338157	0.714699
0	0198	0.132568	0.652865	0.219632
0	0199	0.397897	0.160855	0.748749
0	0200	0.900378	0.140571	0.758573
0	0201	0.626104	0.639234	0.277540
0	0202	0.904741	0.325563	0.768108

O	O203	0.641973	0.818910	0.251695
O	O204	0.218245	0.746606	0.164951
O	O205	0.320066	0.245386	0.658021
O	O206	0.820167	0.233133	0.829040
O	O207	0.720737	0.739239	0.351416
Al	Al208	0.705348	0.654073	0.314411
Si	Si209	0.442576	0.051655	0.184741
Si	Si210	0.099840	0.543890	0.662100
Si	Si211	0.447225	0.434741	0.150837
Si	Si212	0.091936	0.931359	0.675272
Si	Si213	0.596695	0.932913	0.816818
Si	Si214	0.939183	0.434945	0.325885
Si	Si215	0.591355	0.547838	0.839665
Si	Si216	0.947838	0.046691	0.330343
Si	Si217	0.338296	0.022897	0.340320
Si	Si218	0.209095	0.521526	0.818179
Si	Si219	0.331065	0.461827	0.298504
Si	Si220	0.203429	0.965634	0.827516
Si	Si221	0.700941	0.959595	0.658822
Si	Si222	0.832711	0.459939	0.168553
Si	Si223	0.706542	0.515749	0.693194
Si	Si224	0.833836	0.014804	0.179352
Si	Si225	0.301189	0.045809	0.560343
Si	Si226	0.239018	0.556057	0.035326
Si	Si227	0.296993	0.427318	0.515945
Si	Si228	0.244057	0.935657	0.042906
Si	Si229	0.739406	0.936089	0.442530
Si	Si230	0.799327	0.425978	0.952434
Si	Si231	0.742561	0.552680	0.478656
Si	Si232	0.794690	0.047995	0.964755
Si	Si233	0.145793	0.050276	0.541275
Si	Si234	0.394827	0.556524	0.021058
Si	Si235	0.140596	0.420525	0.519661
Si	Si236	0.397840	0.932380	0.040345
Si	Si237	0.894092	0.928870	0.462190
Si	Si238	0.643071	0.425143	0.967164
Si	Si239	0.897282	0.556119	0.470801
Si	Si240	0.640599	0.050799	0.963855
Si	Si241	0.097310	0.023566	0.326607
Si	Si242	0.445388	0.517399	0.810868
Si	Si243	0.087212	0.463535	0.310805
Si	Si244	0.447031	0.962950	0.826362
Si	Si245	0.941736	0.957121	0.674800
Si	Si246	0.593195	0.462164	0.176837

Si	Si247	0.952227	0.517442	0.679532
Si	Si248	0.591214	0.017229	0.177345
Si	Si249	0.219763	0.054650	0.199238
Si	Si250	0.328754	0.543775	0.673463
Si	Si251	0.203148	0.433107	0.171223
Si	Si252	0.327272	0.921857	0.701948
Si	Si253	0.819598	0.930989	0.806001
Si	Si254	0.712054	0.441131	0.312082
Si	Si255	0.834434	0.549201	0.815425
Si	Si256	0.709840	0.059866	0.306066
Si	Si257	0.445446	0.819008	0.184369
Si	Si258	0.096818	0.315607	0.673601
Si	Si259	0.438767	0.664458	0.171133
Si	Si260	0.096315	0.159409	0.689715
Si	Si261	0.592828	0.160623	0.818624
Si	Si262	0.941067	0.664232	0.318979
Si	Si263	0.597677	0.315422	0.816039
Si	Si264	0.941695	0.820901	0.311381
Si	Si265	0.334950	0.862979	0.331800
Si	Si266	0.212568	0.363378	0.814777
Si	Si267	0.327689	0.621003	0.317645
Si	Si268	0.207062	0.124759	0.837335
Si	Si269	0.704083	0.118938	0.666658
Si	Si270	0.830403	0.616690	0.172456
Si	Si271	0.709454	0.357896	0.673405
Si	Si272	0.831447	0.855638	0.161006
Si	Si273	0.292059	0.815994	0.541982
Si	Si274	0.251961	0.319134	0.029226
Si	Si275	0.291589	0.657789	0.535322
Si	Si276	0.252754	0.162908	0.048698
Si	Si277	0.746293	0.170281	0.458111
Si	Si278	0.786962	0.662285	0.960181
Si	Si279	0.750521	0.327330	0.457068
Si	Si280	0.786518	0.818751	0.949549
Si	Si281	0.138194	0.814811	0.538662
Si	Si282	0.405046	0.316651	0.018715
Si	Si283	0.137772	0.661174	0.524560
Si	Si284	0.406071	0.162832	0.036890
Si	Si285	0.900109	0.166062	0.463229
Si	Si286	0.633342	0.665472	0.973496
Si	Si287	0.904205	0.319744	0.468662
Si	Si288	0.633491	0.819620	0.963637
Si	Si289	0.088884	0.864704	0.329321
Si	Si290	0.451702	0.360416	0.808855

Si	Si291	0.089449	0.621849	0.310161
Si	Si292	0.447479	0.119510	0.819765
Si	Si293	0.949520	0.115068	0.671949
Si	Si294	0.584689	0.618242	0.181611
Si	Si295	0.951337	0.359013	0.683858
Si	Si296	0.591074	0.859982	0.181961
Si	Si297	0.210382	0.823787	0.197786
Si	Si298	0.333044	0.324279	0.674519
Si	Si299	0.208179	0.668068	0.187341
Si	Si300	0.325148	0.170351	0.701645
Si	Si301	0.828011	0.154655	0.804255
Si	Si302	0.829471	0.311134	0.802324
Si	Si303	0.715149	0.812054	0.297503
Zn	Zn304	0.751747	0.718307	0.493704

C₄H₈-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 8/M1 in Blue) Total energy = -1930.84961895 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.815012	0.760014	0.616418
H	H2	0.653950	0.813750	0.596080
H	H3	0.679066	0.745941	0.681443
H	H4	0.593225	0.673758	0.616658
H	H5	0.566988	0.781053	0.460390
H	H6	0.511932	0.776780	0.559803
H	H7	0.540010	0.659719	0.418314
H	H8	0.468898	0.710402	0.419472
H	H9	0.485565	0.657465	0.521096
C	C10	0.649582	0.761870	0.618464
C	C11	0.598864	0.723835	0.585937
C	C12	0.546371	0.746567	0.515471

C	C13	0.508215	0.690042	0.465486
O	014	0.517004	0.033874	0.216796
O	015	0.025570	0.534138	0.713066
O	016	0.518771	0.442523	0.210941
O	017	0.010980	0.931100	0.705558
O	018	0.514083	0.946676	0.789073
O	019	0.011820	0.457664	0.289623
O	020	0.517983	0.535419	0.789466
O	021	0.020577	0.042386	0.293202
O	022	0.400264	0.056757	0.292411
O	023	0.147549	0.562661	0.761920
O	024	0.392701	0.430481	0.253486
O	025	0.127691	0.941911	0.786640
O	026	0.629617	0.939068	0.706456
O	027	0.890901	0.431108	0.233241
O	028	0.643279	0.546929	0.750435
O	029	0.901178	0.037393	0.222970
O	030	0.437094	0.121717	0.130608
O	031	0.095263	0.614935	0.599302
O	032	0.445084	0.365993	0.099847
O	033	0.110007	0.860347	0.634451
O	034	0.601793	0.858921	0.855776
O	035	0.941067	0.370814	0.391009
O	036	0.590067	0.615853	0.897961
O	037	0.929599	0.120580	0.371513
O	038	0.409542	0.993032	0.121675
O	039	0.124466	0.485645	0.606491
O	040	0.431620	0.497567	0.091544
O	041	0.105911	0.990908	0.604960
O	042	0.620615	0.987812	0.888483
O	043	0.910064	0.499657	0.397674
O	044	0.603127	0.483833	0.914867
O	045	0.927575	0.990084	0.404683
O	046	0.338074	0.038085	0.460451
O	047	0.199448	0.547688	0.939354
O	048	0.337891	0.445418	0.430849
O	049	0.195123	0.949616	0.952620
O	050	0.695928	0.935630	0.543367
O	051	0.833565	0.426479	0.060294
O	052	0.701120	0.534807	0.578295
O	053	0.835891	0.036355	0.053222
O	054	0.337666	0.943090	0.319840
O	055	0.195503	0.445382	0.812951
O	056	0.334001	0.543770	0.297628

0	057	0.208281	0.043975	0.812869
0	058	0.705695	0.042649	0.662442
0	059	0.845428	0.543292	0.150378
0	060	0.711707	0.436908	0.711179
0	061	0.823633	0.934697	0.180013
0	062	0.269136	0.053967	0.296396
0	063	0.276514	0.547032	0.782517
0	064	0.262755	0.435204	0.273086
0	065	0.257157	0.924016	0.783319
0	066	0.760485	0.928505	0.712203
0	067	0.762252	0.452445	0.218782
0	068	0.772699	0.552189	0.738861
0	069	0.772182	0.052518	0.222324
0	070	0.311064	0.118049	0.611410
0	071	0.227789	0.622982	0.093392
0	072	0.319690	0.364690	0.582181
0	073	0.218013	0.870486	0.105723
0	074	0.714167	0.873834	0.375028
0	075	0.809974	0.352849	0.903288
0	076	0.714634	0.630257	0.444975
0	077	0.809825	0.113415	0.898143
0	078	0.218717	0.037544	0.536968
0	079	0.315333	0.535404	0.027991
0	080	0.217552	0.426795	0.500852
0	081	0.316512	0.934888	0.015647
0	082	0.813050	0.942280	0.457677
0	083	0.719936	0.439418	0.965562
0	084	0.819009	0.560024	0.504132
0	085	0.713342	0.049468	0.992015
0	086	0.319103	0.987684	0.637789
0	087	0.207235	0.492853	0.116315
0	088	0.303212	0.495087	0.605847
0	089	0.230763	0.000657	0.125982
0	090	0.711080	0.005616	0.381683
0	091	0.830106	0.482093	0.882197
0	092	0.726789	0.503861	0.391846
0	093	0.797590	0.982855	0.882399
0	094	0.129093	0.121728	0.604749
0	095	0.403390	0.627269	0.081626
0	096	0.123798	0.353866	0.584183
0	097	0.410366	0.861631	0.096107
0	098	0.905110	0.859661	0.391337
0	099	0.626308	0.353259	0.913437
0	0100	0.912773	0.631689	0.415126

0	0101	0.620909	0.120003	0.902219
0	0102	0.107881	0.058728	0.437212
0	0103	0.420856	0.558348	0.917391
0	0104	0.095630	0.431263	0.432898
0	0105	0.439129	0.941126	0.947667
0	0106	0.919433	0.916046	0.566345
0	0107	0.616841	0.417979	0.083590
0	0108	0.940603	0.556693	0.569848
0	0109	0.590977	0.046376	0.058048
0	0110	0.143536	0.056574	0.247211
0	0111	0.399130	0.538258	0.723462
0	0112	0.134253	0.426689	0.244414
0	0113	0.387728	0.919976	0.769585
0	0114	0.887484	0.943978	0.753532
0	0115	0.638688	0.448055	0.274091
0	0116	0.901931	0.554138	0.759246
0	0117	0.642639	0.062592	0.237675
0	0118	0.107069	0.945626	0.336811
0	0119	0.434520	0.438271	0.840993
0	0120	0.108718	0.543021	0.330238
0	0121	0.424795	0.041487	0.821198
0	0122	0.942900	0.035201	0.638333
0	0123	0.596255	0.540511	0.145742
0	0124	0.935925	0.442302	0.666184
0	0125	0.608299	0.941960	0.177165
0	0126	0.226460	0.131465	0.150420
0	0127	0.320854	0.624035	0.636408
0	0128	0.215343	0.359889	0.130590
0	0129	0.315270	0.854483	0.642817
0	0130	0.816786	0.854949	0.849466
0	0131	0.725654	0.372595	0.365142
0	0132	0.827365	0.614986	0.889389
0	0133	0.718389	0.135679	0.351655
0	0134	0.518393	0.848089	0.208092
0	0135	0.026206	0.351421	0.716031
0	0136	0.507008	0.629488	0.201699
0	0137	0.018416	0.131385	0.711060
0	0138	0.517119	0.131862	0.782077
0	0139	0.013900	0.630148	0.289858
0	0140	0.525211	0.349688	0.787350
0	0141	0.016949	0.855808	0.287790
0	0142	0.402303	0.829410	0.286507
0	0143	0.148057	0.326054	0.773330
0	0144	0.389324	0.660498	0.272039

0	0145	0.132850	0.152323	0.795944
0	0146	0.634920	0.149522	0.711003
0	0147	0.895916	0.654445	0.221905
0	0148	0.644816	0.324689	0.721781
0	0149	0.903978	0.829836	0.200940
0	0150	0.448145	0.742925	0.150579
0	0151	0.086331	0.239026	0.661491
0	0152	0.586399	0.238097	0.839925
0	0153	0.954506	0.744360	0.334461
0	0154	0.334876	0.844691	0.450034
0	0155	0.212221	0.344829	0.937842
0	0156	0.330680	0.635061	0.441931
0	0157	0.205308	0.134848	0.956252
0	0158	0.702534	0.149323	0.546542
0	0159	0.816638	0.661106	0.072521
0	0160	0.708787	0.352752	0.556870
0	0161	0.828634	0.838092	0.043644
0	0162	0.271858	0.833276	0.278003
0	0163	0.277691	0.347896	0.768293
0	0164	0.258396	0.651014	0.281752
0	0165	0.263047	0.161563	0.784649
0	0166	0.765101	0.152319	0.720021
0	0167	0.768384	0.628416	0.248595
0	0168	0.776205	0.322497	0.717338
0	0169	0.774552	0.816233	0.220142
0	0170	0.299147	0.739467	0.554516
0	0171	0.243002	0.243045	0.054190
0	0172	0.738100	0.251766	0.434906
0	0173	0.790978	0.738835	0.921299
0	0174	0.213813	0.837736	0.519573
0	0175	0.326840	0.342897	0.029596
0	0176	0.213486	0.640375	0.527207
0	0177	0.326652	0.142017	0.025776
0	0178	0.821603	0.151604	0.471005
0	0179	0.709082	0.639918	0.964658
0	0180	0.827860	0.343548	0.479738
0	0181	0.710333	0.839665	0.963848
0	0182	0.131067	0.740004	0.568934
0	0183	0.408259	0.241454	0.069646
0	0184	0.909751	0.245371	0.426049
0	0185	0.626394	0.740603	0.927158
0	0186	0.094848	0.834890	0.441543
0	0187	0.431377	0.317617	0.916291
0	0188	0.108222	0.662094	0.416060

O	O189	0.441918	0.147314	0.938191
O	O190	0.935833	0.155675	0.563576
O	O191	0.604976	0.663820	0.081403
O	O192	0.939205	0.324947	0.576187
O	O193	0.593544	0.841313	0.049331
O	O194	0.142763	0.830876	0.257163
O	O195	0.403516	0.334807	0.725516
O	O196	0.134234	0.651565	0.224310
O	O197	0.391606	0.160116	0.755842
O	O198	0.891898	0.131369	0.747866
O	O199	0.627404	0.638279	0.272425
O	O200	0.902212	0.334172	0.765548
O	O201	0.644821	0.820478	0.227945
O	O202	0.216089	0.745095	0.158594
O	O203	0.317743	0.245055	0.658089
O	O204	0.832817	0.233563	0.834963
O	O205	0.709545	0.743823	0.353168
O	O206	0.804390	0.767072	0.547288
Al	Al207	0.703818	0.657621	0.318334
Si	Si208	0.441459	0.051427	0.189649
Si	Si209	0.098205	0.549242	0.669498
Si	Si210	0.446062	0.434506	0.164104
Si	Si211	0.088968	0.931262	0.682533
Si	Si212	0.591088	0.933433	0.811264
Si	Si213	0.938483	0.439958	0.328458
Si	Si214	0.589650	0.545210	0.839305
Si	Si215	0.943887	0.047607	0.323605
Si	Si216	0.336046	0.022660	0.342681
Si	Si217	0.204803	0.525340	0.824440
Si	Si218	0.332054	0.463581	0.313914
Si	Si219	0.197185	0.964838	0.834528
Si	Si220	0.698286	0.962400	0.656496
Si	Si221	0.833158	0.464269	0.166576
Si	Si222	0.707312	0.517001	0.694941
Si	Si223	0.833377	0.015010	0.169490
Si	Si224	0.296291	0.045857	0.562166
Si	Si225	0.237628	0.549876	0.044679
Si	Si226	0.294669	0.432912	0.530267
Si	Si227	0.240046	0.938682	0.050704
Si	Si228	0.734768	0.938810	0.438503
Si	Si229	0.798114	0.425358	0.953024
Si	Si230	0.741026	0.556761	0.479510
Si	Si231	0.789636	0.045842	0.956119
Si	Si232	0.140594	0.052080	0.546232

Si	Si233	0.392740	0.554732	0.029923
Si	Si234	0.140526	0.424664	0.531466
Si	Si235	0.393688	0.932819	0.045530
Si	Si236	0.891011	0.926323	0.454984
Si	Si237	0.641906	0.423363	0.969605
Si	Si238	0.895712	0.562233	0.470925
Si	Si239	0.636572	0.050981	0.959700
Si	Si240	0.094388	0.025432	0.329165
Si	Si241	0.442933	0.517481	0.818764
Si	Si242	0.087713	0.464751	0.323805
Si	Si243	0.441363	0.962527	0.831526
Si	Si244	0.940162	0.956460	0.665885
Si	Si245	0.592915	0.462615	0.178227
Si	Si246	0.950551	0.521696	0.677476
Si	Si247	0.589966	0.020980	0.172735
Si	Si248	0.217580	0.060024	0.204931
Si	Si249	0.324601	0.550718	0.686650
Si	Si250	0.205244	0.429076	0.190422
Si	Si251	0.319424	0.922162	0.708052
Si	Si252	0.815867	0.928155	0.798736
Si	Si253	0.713716	0.444300	0.312951
Si	Si254	0.832859	0.550450	0.818267
Si	Si255	0.711375	0.063609	0.298054
Si	Si256	0.444970	0.820144	0.185314
Si	Si257	0.095728	0.317754	0.683604
Si	Si258	0.437594	0.664586	0.175975
Si	Si259	0.091446	0.161406	0.693351
Si	Si260	0.589792	0.160198	0.808767
Si	Si261	0.943910	0.665340	0.315535
Si	Si262	0.595628	0.316647	0.816024
Si	Si263	0.945206	0.821759	0.303942
Si	Si264	0.336449	0.862825	0.333038
Si	Si265	0.208750	0.366098	0.822664
Si	Si266	0.327930	0.622452	0.323253
Si	Si267	0.202066	0.123103	0.837380
Si	Si268	0.702172	0.123344	0.660121
Si	Si269	0.829785	0.621411	0.175743
Si	Si270	0.710318	0.359192	0.676646
Si	Si271	0.832913	0.854988	0.160989
Si	Si272	0.290281	0.818937	0.542002
Si	Si273	0.249614	0.322369	0.038080
Si	Si274	0.290575	0.660205	0.539269
Si	Si275	0.250421	0.163268	0.046280
Si	Si276	0.745331	0.172242	0.450862

Si	Si277	0.786022	0.663093	0.962613
Si	Si278	0.750214	0.329695	0.459410
Si	Si279	0.786757	0.817621	0.945922
Si	Si280	0.137120	0.818367	0.540646
Si	Si281	0.402816	0.317292	0.028825
Si	Si282	0.136958	0.664215	0.527995
Si	Si283	0.403435	0.163104	0.040905
Si	Si284	0.899549	0.167825	0.457737
Si	Si285	0.632771	0.664767	0.968912
Si	Si286	0.904445	0.321229	0.467912
Si	Si287	0.633184	0.819730	0.949889
Si	Si288	0.090528	0.866641	0.330639
Si	Si289	0.448700	0.360232	0.817140
Si	Si290	0.090964	0.621507	0.315104
Si	Si291	0.443498	0.120189	0.824655
Si	Si292	0.946811	0.113762	0.665287
Si	Si293	0.584821	0.618298	0.177666
Si	Si294	0.950774	0.363380	0.680906
Si	Si295	0.591459	0.863057	0.165384
Si	Si296	0.212162	0.820832	0.200106
Si	Si297	0.329468	0.323079	0.684009
Si	Si298	0.209005	0.667390	0.189548
Si	Si299	0.320891	0.169977	0.702271
Si	Si300	0.824807	0.157045	0.799664
Si	Si301	0.830385	0.311468	0.804952
Si	Si302	0.711421	0.814576	0.293914
Zn	Zn303	0.728981	0.724539	0.506279

TS-C₄H₈-Dehydro-on-HydroxyO-ZnOH⁺ (Fig. 8/TS1 in Blue)

Total energy = -1929.10141252 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.790197	0.740192	0.649381
H	H2	0.636406	0.684909	0.673220
H	H3	0.698830	0.740428	0.622281
H	H4	0.613076	0.676655	0.551734
H	H5	0.499278	0.775545	0.779791
H	H6	0.431043	0.728628	0.721544
H	H7	0.493295	0.718463	0.568169
H	H8	0.597581	0.802658	0.678245
H	H9	0.584235	0.803191	0.549511
C	C10	0.633247	0.713816	0.604162
C	C11	0.479857	0.750024	0.714959
C	C12	0.514590	0.745074	0.631142
C	C13	0.583157	0.771165	0.615703
O	O14	0.511961	0.030371	0.210728
O	O15	0.021272	0.532090	0.708693
O	O16	0.524251	0.439715	0.199609
O	O17	0.013438	0.945402	0.704875
O	O18	0.522113	0.958775	0.786171
O	O19	0.018719	0.454337	0.282454
O	O20	0.513401	0.546854	0.790478
O	O21	0.021097	0.042923	0.290799
O	O22	0.393292	0.059045	0.275231
O	O23	0.137855	0.558746	0.782640
O	O24	0.404045	0.452828	0.266310
O	O25	0.137713	0.947207	0.755122
O	O26	0.640750	0.931730	0.720844
O	O27	0.901285	0.427759	0.209138
O	O28	0.634865	0.543140	0.725337
O	O29	0.896558	0.039875	0.240488
O	O30	0.438180	0.116101	0.111186
O	O31	0.099479	0.618301	0.617884
O	O32	0.430939	0.366223	0.122024
O	O33	0.095570	0.866736	0.610783
O	O34	0.596262	0.870698	0.880943
O	O35	0.940688	0.367163	0.372115
O	O36	0.602519	0.623665	0.874069
O	O37	0.938138	0.120531	0.385306
O	O38	0.405669	0.987125	0.113456
O	O39	0.130172	0.488818	0.617754
O	O40	0.434776	0.496956	0.085332
O	O41	0.099653	0.997753	0.581158
O	O42	0.628202	0.999726	0.886157

0	043	0.910674	0.496117	0.375787
0	044	0.604827	0.492290	0.902763
0	045	0.935782	0.989537	0.414231
0	046	0.331167	0.061521	0.444593
0	047	0.201665	0.562255	0.950519
0	048	0.336289	0.448617	0.431712
0	049	0.200590	0.946298	0.924396
0	050	0.702263	0.929688	0.551803
0	051	0.839338	0.430422	0.038944
0	052	0.700587	0.532589	0.558260
0	053	0.833908	0.042839	0.070269
0	054	0.344527	0.946056	0.349309
0	055	0.191326	0.447566	0.852961
0	056	0.322496	0.552007	0.311399
0	057	0.214183	0.049727	0.803860
0	058	0.691117	0.044371	0.647905
0	059	0.853653	0.542094	0.143028
0	060	0.710361	0.436990	0.693921
0	061	0.818250	0.938921	0.190900
0	062	0.263749	0.038654	0.280939
0	063	0.268260	0.544025	0.784423
0	064	0.275365	0.434726	0.258626
0	065	0.267062	0.933661	0.756428
0	066	0.770722	0.950433	0.715023
0	067	0.771368	0.446883	0.202880
0	068	0.764720	0.554948	0.724484
0	069	0.767296	0.056064	0.237199
0	070	0.304087	0.132219	0.604123
0	071	0.233555	0.627777	0.112946
0	072	0.326408	0.375202	0.589668
0	073	0.210150	0.869530	0.079161
0	074	0.727112	0.866082	0.387398
0	075	0.807496	0.364360	0.878091
0	076	0.724271	0.624073	0.423328
0	077	0.821199	0.120785	0.915544
0	078	0.219319	0.040247	0.541010
0	079	0.315190	0.536341	0.038622
0	080	0.217776	0.426430	0.505127
0	081	0.318377	0.924743	0.000698
0	082	0.815425	0.951421	0.456743
0	083	0.723085	0.451443	0.954266
0	084	0.823006	0.551447	0.495833
0	085	0.715143	0.064015	0.996462
0	086	0.332343	0.003488	0.620522

0	087	0.204249	0.498561	0.122144
0	088	0.299278	0.504361	0.602002
0	089	0.233517	0.999081	0.098066
0	090	0.703051	0.995914	0.383479
0	091	0.831821	0.494927	0.868975
0	092	0.735169	0.497254	0.375418
0	093	0.800294	0.990961	0.896840
0	094	0.126859	0.127760	0.589247
0	095	0.402042	0.626557	0.094369
0	096	0.116985	0.359553	0.579396
0	097	0.419258	0.857926	0.075909
0	098	0.905340	0.860597	0.407310
0	099	0.635037	0.363199	0.891860
0	0100	0.912654	0.626702	0.405257
0	0101	0.615557	0.130069	0.915007
0	0102	0.120365	0.065448	0.416319
0	0103	0.416635	0.566583	0.921130
0	0104	0.096278	0.446747	0.438354
0	0105	0.439604	0.944896	0.934184
0	0106	0.914087	0.922673	0.580042
0	0107	0.619081	0.420793	0.065853
0	0108	0.946645	0.544925	0.551258
0	0109	0.593264	0.047254	0.061690
0	0110	0.140486	0.037970	0.224206
0	0111	0.392556	0.538192	0.730415
0	0112	0.144771	0.425965	0.257646
0	0113	0.397673	0.929091	0.748342
0	0114	0.894065	0.951907	0.771773
0	0115	0.646071	0.447189	0.254965
0	0116	0.895171	0.563389	0.731396
0	0117	0.636521	0.061252	0.246630
0	0118	0.100418	0.943877	0.348591
0	0119	0.437788	0.445893	0.852241
0	0120	0.110204	0.547327	0.313889
0	0121	0.427759	0.048982	0.815082
0	0122	0.934838	0.044480	0.645551
0	0123	0.597400	0.541196	0.135670
0	0124	0.927814	0.442092	0.673082
0	0125	0.606645	0.941443	0.177654
0	0126	0.222164	0.125113	0.145218
0	0127	0.316165	0.629477	0.651427
0	0128	0.214524	0.365660	0.120646
0	0129	0.327610	0.870648	0.610623
0	0130	0.813261	0.864735	0.851624

0	0131	0.728298	0.366835	0.345559
0	0132	0.821587	0.628384	0.859007
0	0133	0.707680	0.128423	0.374139
0	0134	0.513677	0.850442	0.212904
0	0135	0.020311	0.351579	0.712911
0	0136	0.511124	0.630288	0.201296
0	0137	0.021585	0.134828	0.706301
0	0138	0.519841	0.140311	0.780089
0	0139	0.017644	0.639016	0.287266
0	0140	0.523624	0.356470	0.787160
0	0141	0.012049	0.854271	0.291354
0	0142	0.390348	0.835424	0.265209
0	0143	0.142386	0.337705	0.769672
0	0144	0.397836	0.658404	0.286774
0	0145	0.138770	0.156002	0.782585
0	0146	0.642703	0.155055	0.725604
0	0147	0.901417	0.655809	0.211803
0	0148	0.637063	0.328297	0.701596
0	0149	0.895199	0.833244	0.214424
0	0150	0.447885	0.742327	0.155128
0	0151	0.087869	0.243929	0.657201
0	0152	0.587642	0.246827	0.839019
0	0153	0.946048	0.744838	0.340818
0	0154	0.320183	0.826793	0.425500
0	0155	0.209046	0.328437	0.932090
0	0156	0.334540	0.643432	0.456665
0	0157	0.203598	0.140027	0.951072
0	0158	0.712289	0.162223	0.564639
0	0159	0.832640	0.655417	0.049646
0	0160	0.705722	0.353788	0.538175
0	0161	0.830348	0.847632	0.046035
0	0162	0.262499	0.864163	0.258065
0	0163	0.270866	0.362228	0.765360
0	0164	0.266583	0.669109	0.295041
0	0165	0.269867	0.167271	0.788800
0	0166	0.771159	0.130349	0.734393
0	0167	0.773327	0.632124	0.222202
0	0168	0.768462	0.319889	0.700858
0	0169	0.764467	0.820070	0.209396
0	0170	0.296839	0.745452	0.573052
0	0171	0.240110	0.241846	0.069461
0	0172	0.741929	0.249649	0.426263
0	0173	0.793722	0.747944	0.924498
0	0174	0.211561	0.842470	0.531333

O	O175	0.324177	0.338182	0.019666
O	O176	0.214168	0.645637	0.530814
O	O177	0.324028	0.144031	0.024371
O	O178	0.822541	0.147652	0.463523
O	O179	0.713527	0.648088	0.968606
O	O180	0.827623	0.346339	0.469251
O	O181	0.710571	0.846496	0.971080
O	O182	0.128802	0.742378	0.572649
O	O183	0.407750	0.241402	0.072578
O	O184	0.907399	0.245593	0.422472
O	O185	0.629984	0.747013	0.922943
O	O186	0.103602	0.823005	0.423891
O	O187	0.440465	0.326926	0.932528
O	O188	0.103393	0.654489	0.430334
O	O189	0.435217	0.158486	0.925429
O	O190	0.930318	0.165394	0.572251
O	O191	0.599746	0.662265	0.064682
O	O192	0.941463	0.333678	0.560983
O	O193	0.598433	0.831404	0.067690
O	O194	0.135139	0.841051	0.234566
O	O195	0.398463	0.340935	0.746192
O	O196	0.140992	0.665185	0.242021
O	O197	0.395747	0.165138	0.737291
O	O198	0.898747	0.145665	0.761769
O	O199	0.634458	0.641113	0.254234
O	O200	0.895526	0.324091	0.745034
O	O201	0.637622	0.825405	0.255651
O	O202	0.221542	0.753707	0.163540
O	O203	0.315073	0.256097	0.663810
O	O204	0.816984	0.237358	0.832326
O	O205	0.715564	0.740150	0.347850
O	O206	0.756585	0.761313	0.609022
Al	Al207	0.711512	0.655991	0.300011
Si	Si208	0.437618	0.048259	0.176631
Si	Si209	0.096835	0.549426	0.680591
Si	Si210	0.447729	0.439043	0.167851
Si	Si211	0.087603	0.939244	0.662797
Si	Si212	0.596324	0.940378	0.819682
Si	Si213	0.943330	0.436440	0.310333
Si	Si214	0.589523	0.551476	0.823879
Si	Si215	0.946854	0.048316	0.332737
Si	Si216	0.333135	0.025939	0.336842
Si	Si217	0.200044	0.527755	0.841878
Si	Si218	0.334506	0.471998	0.316972

Si	Si219	0.204940	0.969331	0.809722
Si	Si220	0.701346	0.964420	0.660080
Si	Si221	0.841174	0.462622	0.149237
Si	Si222	0.702496	0.516642	0.676083
Si	Si223	0.829131	0.019300	0.184899
Si	Si224	0.296587	0.059584	0.552759
Si	Si225	0.238712	0.556689	0.056633
Si	Si226	0.294739	0.438541	0.532769
Si	Si227	0.240883	0.934886	0.026229
Si	Si228	0.737478	0.936007	0.444791
Si	Si229	0.800248	0.435059	0.934649
Si	Si230	0.745979	0.550480	0.463238
Si	Si231	0.792535	0.054747	0.969267
Si	Si232	0.141713	0.058103	0.531948
Si	Si233	0.392404	0.556796	0.035107
Si	Si234	0.140658	0.430737	0.535044
Si	Si235	0.395359	0.928936	0.030960
Si	Si236	0.892418	0.930641	0.464724
Si	Si237	0.645694	0.431827	0.953662
Si	Si238	0.898550	0.554837	0.456321
Si	Si239	0.638334	0.060213	0.964743
Si	Si240	0.095494	0.022613	0.320559
Si	Si241	0.440359	0.524589	0.824036
Si	Si242	0.092482	0.468555	0.322418
Si	Si243	0.446657	0.970359	0.820350
Si	Si244	0.939181	0.965998	0.675157
Si	Si245	0.596688	0.462734	0.163860
Si	Si246	0.947583	0.520614	0.666714
Si	Si247	0.587241	0.020150	0.174832
Si	Si248	0.215180	0.049761	0.187247
Si	Si249	0.318795	0.553489	0.692700
Si	Si250	0.210182	0.431584	0.189431
Si	Si251	0.330697	0.934492	0.683712
Si	Si252	0.819391	0.939845	0.808584
Si	Si253	0.720464	0.439489	0.294276
Si	Si254	0.828343	0.559673	0.796990
Si	Si255	0.704062	0.060150	0.310263
Si	Si256	0.442751	0.821272	0.177532
Si	Si257	0.091847	0.322944	0.680009
Si	Si258	0.440189	0.664415	0.184520
Si	Si259	0.093819	0.165589	0.683851
Si	Si260	0.591301	0.167950	0.814871
Si	Si261	0.944398	0.666512	0.310958
Si	Si262	0.595573	0.323710	0.804957

Si	Si263	0.939884	0.823132	0.313425
Si	Si264	0.329326	0.868464	0.323853
Si	Si265	0.203618	0.369353	0.829254
Si	Si266	0.331029	0.630574	0.337709
Si	Si267	0.206067	0.128044	0.831964
Si	Si268	0.704694	0.122778	0.668598
Si	Si269	0.838424	0.621149	0.158430
Si	Si270	0.704864	0.359652	0.658258
Si	Si271	0.827712	0.860314	0.164841
Si	Si272	0.288934	0.821642	0.535691
Si	Si273	0.247207	0.318953	0.036396
Si	Si274	0.290418	0.666355	0.551750
Si	Si275	0.247445	0.163116	0.046376
Si	Si276	0.746192	0.171854	0.456922
Si	Si277	0.790075	0.669415	0.951181
Si	Si278	0.750887	0.328678	0.445483
Si	Si279	0.786975	0.826299	0.949411
Si	Si280	0.134946	0.818935	0.534600
Si	Si281	0.401049	0.318514	0.036715
Si	Si282	0.136682	0.665203	0.537988
Si	Si283	0.401142	0.165006	0.033597
Si	Si284	0.899700	0.169366	0.461039
Si	Si285	0.636359	0.669642	0.958645
Si	Si286	0.904048	0.323213	0.456112
Si	Si287	0.633963	0.823756	0.960714
Si	Si288	0.087881	0.865666	0.324226
Si	Si289	0.449708	0.367565	0.829142
Si	Si290	0.093152	0.626338	0.318846
Si	Si291	0.444493	0.128110	0.814783
Si	Si292	0.946288	0.122580	0.671733
Si	Si293	0.586923	0.619227	0.166055
Si	Si294	0.946090	0.363133	0.672811
Si	Si295	0.588934	0.862420	0.177819
Si	Si296	0.207239	0.831705	0.185160
Si	Si297	0.327708	0.333427	0.692350
Si	Si298	0.215366	0.677804	0.203094
Si	Si299	0.321574	0.179145	0.698337
Si	Si300	0.826929	0.158746	0.809884
Si	Si301	0.822428	0.312455	0.789407
Si	Si302	0.711087	0.814562	0.298868
Zn	Zn303	0.712270	0.714320	0.494671

M-C₄H₇Zn-OH₂-ZnOH⁺ (Fig. 8/M2 in Blue) Total energy = -1930.52334323 eV

```

data_
_audit_creation_method      'Materials Studio'
_cell_length_a              20.357621
_cell_length_b              20.050598
_cell_length_c              13.476578
_cell_angle_alpha           90.000000
_cell_angle_beta            90.000000
_cell_angle_gamma           90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1              0.838719          0.701444          0.542165
  H      H2              0.642179          0.690403          0.663193
  H      H3              0.833021          0.768273          0.485945
  H      H4              0.601469          0.667008          0.553662
  H      H5              0.507578          0.780382          0.778188
  H      H6              0.434362          0.735265          0.731781
  H      H7              0.486271          0.718683          0.571712
  H      H8              0.599911          0.803193          0.657214
  H      H9              0.577261          0.796879          0.531586
  C      C10             0.627324          0.708538          0.589861
  C      C11             0.483399          0.754376          0.717609
  C      C12             0.512514          0.745918          0.629626
  C      C13             0.580525          0.768764          0.601399
  O      O14             0.511534          0.030473          0.210389
  O      O15             0.020763          0.532412          0.708804
  O      O16             0.524271          0.440016          0.199347
  O      O17             0.013736          0.945298          0.704664
  O      O18             0.522526          0.958716          0.786867
  O      O19             0.018189          0.454425          0.281950
  O      O20             0.513585          0.547427          0.790228
  O      O21             0.021276          0.042935          0.290013
  O      O22             0.393149          0.059569          0.275186
  O      O23             0.137753          0.559178          0.781605
  O      O24             0.403797          0.452701          0.265922
  O      O25             0.137888          0.948106          0.755688
  O      O26             0.641274          0.930917          0.722148
  O      O27             0.901165          0.426914          0.207682
  O      O28             0.634442          0.540190          0.723432
  O      O29             0.895972          0.040773          0.242820

```

0	030	0.437912	0.116214	0.110729
0	031	0.098873	0.617954	0.616429
0	032	0.431017	0.366449	0.121399
0	033	0.096440	0.866358	0.612496
0	034	0.596352	0.871709	0.884372
0	035	0.940517	0.366525	0.370965
0	036	0.604809	0.624101	0.869646
0	037	0.939484	0.119187	0.389083
0	038	0.404987	0.987302	0.113647
0	039	0.129302	0.488485	0.617519
0	040	0.434619	0.497151	0.085201
0	041	0.099987	0.997118	0.580549
0	042	0.628712	0.000582	0.885757
0	043	0.909714	0.495458	0.374333
0	044	0.604785	0.493256	0.903270
0	045	0.937385	0.987332	0.412930
0	046	0.331548	0.061395	0.444988
0	047	0.201251	0.561976	0.949859
0	048	0.336037	0.448851	0.431446
0	049	0.200927	0.946795	0.924866
0	050	0.703963	0.928455	0.553491
0	051	0.839488	0.429604	0.037241
0	052	0.701212	0.529427	0.556984
0	053	0.834008	0.043146	0.072264
0	054	0.344106	0.946387	0.348287
0	055	0.191225	0.447790	0.850806
0	056	0.322151	0.552026	0.310723
0	057	0.215345	0.049918	0.803829
0	058	0.691381	0.043695	0.648016
0	059	0.851737	0.540797	0.143116
0	060	0.712479	0.435672	0.694099
0	061	0.818425	0.939308	0.192635
0	062	0.263621	0.039844	0.281398
0	063	0.268208	0.544854	0.783952
0	064	0.274990	0.434751	0.258581
0	065	0.267222	0.933360	0.756771
0	066	0.771070	0.950108	0.716942
0	067	0.770935	0.443597	0.201110
0	068	0.763965	0.554946	0.724389
0	069	0.766662	0.055939	0.238830
0	070	0.303977	0.132038	0.604461
0	071	0.233877	0.628110	0.111465
0	072	0.325760	0.375156	0.589116
0	073	0.209168	0.870568	0.080420

0	074	0.730457	0.864703	0.389900
0	075	0.806732	0.363903	0.876334
0	076	0.722278	0.621269	0.421607
0	077	0.821644	0.120895	0.917777
0	078	0.219513	0.040028	0.540725
0	079	0.315062	0.536162	0.037408
0	080	0.217401	0.426907	0.504626
0	081	0.318429	0.923633	0.001233
0	082	0.815898	0.952821	0.457231
0	083	0.723165	0.451665	0.953457
0	084	0.822823	0.552303	0.495665
0	085	0.715422	0.063729	0.997689
0	086	0.332371	0.003328	0.620869
0	087	0.204236	0.499001	0.121997
0	088	0.299046	0.504375	0.602006
0	089	0.234947	0.999678	0.098195
0	090	0.702170	0.994184	0.383646
0	091	0.832045	0.494195	0.867337
0	092	0.738288	0.493657	0.375565
0	093	0.801202	0.991027	0.898573
0	094	0.126562	0.127243	0.588378
0	095	0.401479	0.626598	0.094042
0	096	0.116929	0.359298	0.578600
0	097	0.420208	0.858172	0.075901
0	098	0.903171	0.858766	0.410128
0	099	0.634678	0.363988	0.891576
0	0100	0.913870	0.625992	0.407417
0	0101	0.616326	0.130622	0.916148
0	0102	0.120674	0.064779	0.415619
0	0103	0.416752	0.566638	0.920790
0	0104	0.095810	0.446684	0.437872
0	0105	0.439587	0.945342	0.934614
0	0106	0.913885	0.922513	0.580742
0	0107	0.619326	0.421248	0.065927
0	0108	0.946391	0.542642	0.550789
0	0109	0.593317	0.047590	0.061939
0	0110	0.140709	0.036800	0.223535
0	0111	0.392617	0.537237	0.730460
0	0112	0.144322	0.426602	0.257130
0	0113	0.397950	0.929317	0.748813
0	0114	0.894563	0.952587	0.772386
0	0115	0.646112	0.447290	0.255509
0	0116	0.894390	0.563650	0.729906
0	0117	0.635917	0.060701	0.247609

0	0118	0.099594	0.943382	0.348301
0	0119	0.438843	0.445889	0.852696
0	0120	0.109131	0.547716	0.314139
0	0121	0.428328	0.049164	0.815291
0	0122	0.935322	0.044475	0.644839
0	0123	0.598068	0.541476	0.136439
0	0124	0.927610	0.441550	0.675376
0	0125	0.605972	0.941443	0.176556
0	0126	0.221124	0.125470	0.144958
0	0127	0.317508	0.629400	0.650922
0	0128	0.214008	0.365975	0.120511
0	0129	0.328096	0.870455	0.611267
0	0130	0.814665	0.864769	0.852744
0	0131	0.726865	0.364298	0.343976
0	0132	0.821498	0.627574	0.860035
0	0133	0.706782	0.126695	0.377153
0	0134	0.514048	0.849672	0.213425
0	0135	0.020179	0.350737	0.711969
0	0136	0.511074	0.630123	0.199985
0	0137	0.021785	0.134820	0.706411
0	0138	0.520272	0.140695	0.781457
0	0139	0.018158	0.641206	0.287808
0	0140	0.523517	0.355644	0.786804
0	0141	0.011323	0.852806	0.294673
0	0142	0.390096	0.835753	0.264535
0	0143	0.142290	0.337442	0.768991
0	0144	0.398145	0.658048	0.286498
0	0145	0.139374	0.155686	0.781467
0	0146	0.643076	0.154271	0.726430
0	0147	0.901514	0.653192	0.212800
0	0148	0.637245	0.328284	0.701403
0	0149	0.894764	0.833805	0.215878
0	0150	0.447484	0.742255	0.154852
0	0151	0.088248	0.243560	0.656169
0	0152	0.588761	0.246979	0.839403
0	0153	0.942499	0.744068	0.342709
0	0154	0.320813	0.827278	0.425789
0	0155	0.208556	0.329195	0.931998
0	0156	0.334410	0.643447	0.455870
0	0157	0.203393	0.140265	0.950641
0	0158	0.713833	0.161868	0.566703
0	0159	0.832805	0.654654	0.050616
0	0160	0.705648	0.352726	0.537535
0	0161	0.830766	0.848277	0.046994

0	0162	0.261865	0.863756	0.259027
0	0163	0.270816	0.361617	0.765216
0	0164	0.266980	0.669443	0.293708
0	0165	0.270443	0.167743	0.789058
0	0166	0.771442	0.128596	0.736711
0	0167	0.773090	0.632099	0.223523
0	0168	0.768544	0.317715	0.699514
0	0169	0.763865	0.820864	0.209445
0	0170	0.297283	0.745366	0.572722
0	0171	0.239421	0.242190	0.068974
0	0172	0.741921	0.248231	0.426367
0	0173	0.795283	0.747759	0.925949
0	0174	0.212142	0.842460	0.531641
0	0175	0.323773	0.338443	0.019860
0	0176	0.214641	0.645198	0.532159
0	0177	0.323497	0.144241	0.025000
0	0178	0.822879	0.146586	0.462654
0	0179	0.713647	0.648932	0.969595
0	0180	0.827187	0.345597	0.467126
0	0181	0.711405	0.846256	0.970601
0	0182	0.129500	0.742165	0.573641
0	0183	0.407245	0.241637	0.072748
0	0184	0.907783	0.244931	0.422741
0	0185	0.630094	0.747389	0.922216
0	0186	0.103754	0.822954	0.425453
0	0187	0.439776	0.326644	0.931940
0	0188	0.104790	0.655488	0.429663
0	0189	0.434431	0.158945	0.925265
0	0190	0.929272	0.166050	0.574304
0	0191	0.597832	0.661073	0.060674
0	0192	0.940762	0.334386	0.560221
0	0193	0.600647	0.829859	0.070365
0	0194	0.134418	0.840121	0.235466
0	0195	0.398453	0.341751	0.745443
0	0196	0.141409	0.664828	0.240843
0	0197	0.396287	0.164941	0.736599
0	0198	0.899097	0.144353	0.763649
0	0199	0.634702	0.644074	0.250512
0	0200	0.895501	0.322871	0.744484
0	0201	0.637862	0.827734	0.259993
0	0202	0.221239	0.753966	0.162490
0	0203	0.315773	0.256039	0.663238
0	0204	0.817141	0.236653	0.832641
0	0205	0.716485	0.740093	0.348294

O	O206	0.809731	0.739168	0.531596
Al	Al207	0.710985	0.656410	0.301743
Si	Si208	0.437223	0.048480	0.176387
Si	Si209	0.096331	0.549382	0.680048
Si	Si210	0.447772	0.439228	0.167573
Si	Si211	0.088104	0.939238	0.663199
Si	Si212	0.596660	0.940439	0.820939
Si	Si213	0.942844	0.435801	0.309066
Si	Si214	0.590065	0.551427	0.822207
Si	Si215	0.947453	0.047933	0.333634
Si	Si216	0.333073	0.026362	0.336805
Si	Si217	0.199938	0.528030	0.840824
Si	Si218	0.334310	0.472029	0.316585
Si	Si219	0.205450	0.969623	0.810091
Si	Si220	0.701780	0.963938	0.661510
Si	Si221	0.840481	0.461142	0.148039
Si	Si222	0.702833	0.515154	0.674945
Si	Si223	0.828851	0.019674	0.186784
Si	Si224	0.296761	0.059425	0.552998
Si	Si225	0.238707	0.556744	0.055714
Si	Si226	0.294416	0.438733	0.532414
Si	Si227	0.241127	0.935101	0.026795
Si	Si228	0.738049	0.935593	0.445542
Si	Si229	0.800096	0.434619	0.933207
Si	Si230	0.745553	0.549183	0.461463
Si	Si231	0.792871	0.054782	0.971019
Si	Si232	0.141896	0.057642	0.531351
Si	Si233	0.392294	0.556849	0.034622
Si	Si234	0.140267	0.430689	0.534494
Si	Si235	0.395451	0.928879	0.031259
Si	Si236	0.892509	0.930682	0.465325
Si	Si237	0.645603	0.432529	0.953586
Si	Si238	0.898202	0.553334	0.456087
Si	Si239	0.638689	0.060506	0.965362
Si	Si240	0.095578	0.022106	0.319890
Si	Si241	0.440816	0.524555	0.823973
Si	Si242	0.091878	0.468792	0.322093
Si	Si243	0.447015	0.970513	0.820759
Si	Si244	0.939518	0.966196	0.675531
Si	Si245	0.596911	0.463070	0.164161
Si	Si246	0.947127	0.519989	0.667062
Si	Si247	0.586807	0.020073	0.174778
Si	Si248	0.215339	0.050059	0.187152
Si	Si249	0.319158	0.553446	0.692505

Si	Si250	0.209892	0.431956	0.189217
Si	Si251	0.330995	0.934375	0.684195
Si	Si252	0.820157	0.940011	0.810258
Si	Si253	0.720601	0.437538	0.293607
Si	Si254	0.827777	0.559490	0.796494
Si	Si255	0.703229	0.059226	0.311579
Si	Si256	0.442994	0.821132	0.177576
Si	Si257	0.091898	0.322586	0.679179
Si	Si258	0.440190	0.664233	0.183926
Si	Si259	0.094069	0.165312	0.683181
Si	Si260	0.591903	0.168096	0.815783
Si	Si261	0.944052	0.665631	0.311541
Si	Si262	0.595830	0.323882	0.804824
Si	Si263	0.938784	0.822530	0.314862
Si	Si264	0.329225	0.868601	0.323661
Si	Si265	0.203444	0.369394	0.828514
Si	Si266	0.331126	0.630557	0.336938
Si	Si267	0.206617	0.128245	0.831614
Si	Si268	0.705242	0.122013	0.670020
Si	Si269	0.837504	0.619979	0.159304
Si	Si270	0.705372	0.358688	0.657639
Si	Si271	0.827252	0.860782	0.165667
Si	Si272	0.289588	0.821651	0.535889
Si	Si273	0.246745	0.319368	0.036207
Si	Si274	0.291039	0.666213	0.551698
Si	Si275	0.246875	0.163446	0.046296
Si	Si276	0.746427	0.170772	0.457973
Si	Si277	0.790414	0.669124	0.952073
Si	Si278	0.750359	0.327476	0.444442
Si	Si279	0.787898	0.826052	0.950171
Si	Si280	0.135672	0.818756	0.535805
Si	Si281	0.400700	0.318723	0.036507
Si	Si282	0.137263	0.665100	0.538117
Si	Si283	0.400629	0.165299	0.033635
Si	Si284	0.899870	0.168949	0.462220
Si	Si285	0.636452	0.669687	0.956598
Si	Si286	0.903753	0.322856	0.455225
Si	Si287	0.634667	0.823551	0.962006
Si	Si288	0.087590	0.864965	0.325471
Si	Si289	0.449775	0.367529	0.828895
Si	Si290	0.093581	0.626974	0.318605
Si	Si291	0.444736	0.128339	0.815002
Si	Si292	0.946360	0.122519	0.672642
Si	Si293	0.586988	0.619862	0.164294

Si	Si294	0.945818	0.362602	0.672712
Si	Si295	0.589447	0.862174	0.179379
Si	Si296	0.206669	0.831714	0.185633
Si	Si297	0.327749	0.333494	0.691841
Si	Si298	0.215700	0.677915	0.201833
Si	Si299	0.322032	0.179203	0.698212
Si	Si300	0.827235	0.157991	0.811437
Si	Si301	0.822261	0.311510	0.788606
Si	Si302	0.711531	0.813961	0.300527
Zn	Zn303	0.705347	0.716845	0.504454

TS-C₄H₇ZnOH₂-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 8/TS2 in Blue)

Total energy = -1928.47936754 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.721891	0.764584	0.610240
H	H2	0.633374	0.750686	0.652390
H	H3	0.529003	0.670740	0.480908
H	H4	0.542468	0.753024	0.429560
H	H5	0.523847	0.804084	0.587068
H	H6	0.591625	0.760193	0.658559
H	H7	0.439021	0.796865	0.717610
H	H8	0.412213	0.713864	0.762395
H	H9	0.493371	0.659320	0.655553
C	C10	0.550241	0.720110	0.493193
C	C11	0.530137	0.750067	0.586121
C	C12	0.444779	0.742996	0.715664
C	C13	0.488996	0.713407	0.656269
O	O14	0.486790	0.025652	0.209547
O	O15	0.997023	0.529329	0.708476

0	016	0.502128	0.435151	0.205817
0	017	0.985791	0.938783	0.704666
0	018	0.491720	0.953707	0.789878
0	019	0.995581	0.453138	0.292713
0	020	0.490111	0.540210	0.789419
0	021	0.995887	0.040112	0.289751
0	022	0.370296	0.057053	0.281497
0	023	0.112719	0.555596	0.788207
0	024	0.381842	0.454437	0.272273
0	025	0.106794	0.956779	0.767141
0	026	0.607624	0.933416	0.710332
0	027	0.881746	0.432896	0.205709
0	028	0.610600	0.531457	0.723219
0	029	0.871568	0.033907	0.237261
0	030	0.411178	0.110908	0.112167
0	031	0.077591	0.614758	0.620836
0	032	0.405958	0.360145	0.138037
0	033	0.080265	0.863765	0.632051
0	034	0.573319	0.867240	0.872179
0	035	0.912562	0.362634	0.364308
0	036	0.580606	0.620537	0.860743
0	037	0.910256	0.116102	0.382089
0	038	0.376975	0.982481	0.121775
0	039	0.108025	0.485425	0.623643
0	040	0.412500	0.487953	0.086598
0	041	0.073325	0.992431	0.583504
0	042	0.600709	0.997055	0.881021
0	043	0.884010	0.490795	0.382425
0	044	0.581791	0.490704	0.906873
0	045	0.910843	0.984787	0.411131
0	046	0.305255	0.061638	0.449526
0	047	0.180687	0.560769	0.953904
0	048	0.313412	0.442614	0.435867
0	049	0.174351	0.940770	0.930701
0	050	0.678524	0.921928	0.549952
0	051	0.813774	0.419248	0.041012
0	052	0.682291	0.530200	0.563438
0	053	0.806599	0.040327	0.069756
0	054	0.320704	0.945428	0.359116
0	055	0.165921	0.444845	0.861249
0	056	0.296355	0.549243	0.322430
0	057	0.194144	0.048719	0.820872
0	058	0.668473	0.040437	0.636075
0	059	0.823645	0.538252	0.123797

0	060	0.694151	0.431747	0.692569
0	061	0.790093	0.935122	0.186513
0	062	0.240698	0.036366	0.283420
0	063	0.242945	0.538539	0.785490
0	064	0.253149	0.432288	0.261807
0	065	0.234926	0.931907	0.756510
0	066	0.738463	0.944095	0.719167
0	067	0.750895	0.443329	0.207593
0	068	0.739605	0.551249	0.737795
0	069	0.742559	0.052249	0.239481
0	070	0.273199	0.129720	0.609701
0	071	0.217032	0.628696	0.112809
0	072	0.309028	0.374980	0.599784
0	073	0.178450	0.871975	0.094044
0	074	0.701973	0.861882	0.382724
0	075	0.781327	0.356660	0.876734
0	076	0.686273	0.617225	0.420888
0	077	0.794845	0.115120	0.912834
0	078	0.192547	0.035723	0.541606
0	079	0.295048	0.534191	0.040440
0	080	0.196860	0.420408	0.516333
0	081	0.290454	0.917323	0.010924
0	082	0.790226	0.946644	0.452632
0	083	0.698982	0.444862	0.954368
0	084	0.798774	0.561840	0.488231
0	085	0.688142	0.059340	0.993222
0	086	0.305035	0.001944	0.625175
0	087	0.183783	0.501059	0.128813
0	088	0.278805	0.503648	0.602739
0	089	0.209106	0.000612	0.098901
0	090	0.676472	0.991770	0.383955
0	091	0.810171	0.485827	0.871952
0	092	0.715455	0.490917	0.382802
0	093	0.774431	0.985006	0.897956
0	094	0.101031	0.122671	0.594679
0	095	0.385969	0.618105	0.104776
0	096	0.094361	0.355811	0.588146
0	097	0.394207	0.853779	0.081760
0	098	0.880254	0.855718	0.402186
0	099	0.606757	0.360425	0.893169
0	0100	0.899714	0.621501	0.398294
0	0101	0.588903	0.126843	0.912620
0	0102	0.092308	0.062488	0.420159
0	0103	0.398438	0.563086	0.927011

0	0104	0.076600	0.441572	0.444146
0	0105	0.410698	0.942514	0.941394
0	0106	0.888232	0.917121	0.575884
0	0107	0.595294	0.417687	0.068699
0	0108	0.919776	0.545293	0.554037
0	0109	0.566614	0.043172	0.058720
0	0110	0.116794	0.035622	0.228890
0	0111	0.368284	0.538810	0.736864
0	0112	0.121821	0.427419	0.260673
0	0113	0.366250	0.927638	0.757587
0	0114	0.864490	0.952174	0.763919
0	0115	0.625010	0.451881	0.254738
0	0116	0.870846	0.558342	0.736934
0	0117	0.611602	0.056187	0.243647
0	0118	0.074800	0.941260	0.350286
0	0119	0.411080	0.442197	0.853368
0	0120	0.086110	0.546267	0.326389
0	0121	0.400998	0.046997	0.822684
0	0122	0.913328	0.039491	0.636307
0	0123	0.567644	0.538431	0.132122
0	0124	0.904227	0.439258	0.669728
0	0125	0.581279	0.936950	0.173153
0	0126	0.196830	0.125117	0.152307
0	0127	0.290481	0.627994	0.657671
0	0128	0.190041	0.368143	0.120937
0	0129	0.300537	0.869140	0.616187
0	0130	0.790985	0.859847	0.847478
0	0131	0.700264	0.363384	0.344040
0	0132	0.802011	0.618840	0.876001
0	0133	0.680422	0.124001	0.374181
0	0134	0.492947	0.841949	0.210768
0	0135	0.992314	0.344928	0.711595
0	0136	0.496431	0.636465	0.208781
0	0137	0.994105	0.132733	0.706803
0	0138	0.490943	0.139638	0.781640
0	0139	0.002910	0.644867	0.281047
0	0140	0.494900	0.350281	0.789759
0	0141	0.989894	0.848272	0.292689
0	0142	0.372185	0.837619	0.274861
0	0143	0.111661	0.336225	0.781602
0	0144	0.383402	0.646923	0.298711
0	0145	0.110120	0.147613	0.789370
0	0146	0.612382	0.145451	0.720257
0	0147	0.888706	0.641091	0.200892

0	0148	0.608476	0.331827	0.700036
0	0149	0.875141	0.836000	0.206500
0	0150	0.417009	0.737938	0.164151
0	0151	0.066096	0.239698	0.664504
0	0152	0.565937	0.243271	0.832899
0	0153	0.916975	0.740450	0.327446
0	0154	0.299243	0.824695	0.431163
0	0155	0.187625	0.324827	0.935142
0	0156	0.312931	0.642349	0.463327
0	0157	0.175858	0.143650	0.958584
0	0158	0.685538	0.161468	0.563493
0	0159	0.799867	0.660384	0.063298
0	0160	0.679802	0.348592	0.537446
0	0161	0.805836	0.843948	0.041825
0	0162	0.243763	0.862465	0.261188
0	0163	0.239549	0.359871	0.761592
0	0164	0.254895	0.671440	0.293012
0	0165	0.240058	0.169165	0.792951
0	0166	0.741438	0.126761	0.734755
0	0167	0.764608	0.623624	0.246540
0	0168	0.738027	0.309413	0.702453
0	0169	0.745552	0.813173	0.209272
0	0170	0.273125	0.743875	0.578598
0	0171	0.215856	0.242490	0.079426
0	0172	0.715280	0.245956	0.421695
0	0173	0.770590	0.742930	0.920575
0	0174	0.187266	0.838608	0.527550
0	0175	0.301367	0.336614	0.026917
0	0176	0.191215	0.644423	0.532033
0	0177	0.297072	0.143270	0.028436
0	0178	0.795687	0.144456	0.462679
0	0179	0.687690	0.645233	0.965607
0	0180	0.801093	0.342052	0.466409
0	0181	0.686856	0.841837	0.964254
0	0182	0.106134	0.740067	0.581688
0	0183	0.382821	0.237733	0.080045
0	0184	0.881201	0.241721	0.419531
0	0185	0.605066	0.743781	0.914207
0	0186	0.070496	0.825807	0.442619
0	0187	0.419683	0.327254	0.946561
0	0188	0.080136	0.656643	0.434700
0	0189	0.407857	0.158167	0.928711
0	0190	0.904757	0.161589	0.568891
0	0191	0.569458	0.656681	0.049925

O	O192	0.916561	0.332178	0.554594
O	O193	0.574064	0.828656	0.059409
O	O194	0.116539	0.832142	0.258035
O	O195	0.367343	0.332374	0.765749
O	O196	0.128523	0.659407	0.250853
O	O197	0.366013	0.161092	0.741356
O	O198	0.870182	0.135381	0.755789
O	O199	0.625163	0.639170	0.227072
O	O200	0.866237	0.321398	0.735719
O	O201	0.617669	0.820763	0.245547
O	O202	0.200838	0.753223	0.166187
O	O203	0.288282	0.253917	0.664561
O	O204	0.795398	0.231193	0.829863
O	O205	0.691690	0.735301	0.345292
O	O206	0.693821	0.725559	0.611288
Al	Al207	0.693213	0.651971	0.298893
Si	Si208	0.411728	0.044274	0.180277
Si	Si209	0.073209	0.546248	0.684340
Si	Si210	0.425199	0.434499	0.175712
Si	Si211	0.062230	0.937878	0.671558
Si	Si212	0.568065	0.937978	0.814801
Si	Si213	0.918940	0.435231	0.311883
Si	Si214	0.566666	0.545609	0.821290
Si	Si215	0.921088	0.044044	0.330079
Si	Si216	0.309163	0.024922	0.342497
Si	Si217	0.175541	0.524712	0.846486
Si	Si218	0.311217	0.469520	0.322883
Si	Si219	0.177478	0.969487	0.818755
Si	Si220	0.673239	0.960738	0.655303
Si	Si221	0.817548	0.459078	0.145826
Si	Si222	0.682167	0.511533	0.679603
Si	Si223	0.802883	0.015231	0.183613
Si	Si224	0.268966	0.057522	0.556452
Si	Si225	0.219124	0.556454	0.059183
Si	Si226	0.274001	0.435161	0.539334
Si	Si227	0.213368	0.932540	0.034465
Si	Si228	0.712178	0.930959	0.441505
Si	Si229	0.775974	0.426632	0.935662
Si	Si230	0.721311	0.550185	0.463416
Si	Si231	0.765794	0.049981	0.967923
Si	Si232	0.114746	0.053702	0.535071
Si	Si233	0.373176	0.551209	0.040261
Si	Si234	0.119249	0.426256	0.542789
Si	Si235	0.367684	0.924350	0.038791

Si	Si236	0.867273	0.925589	0.460118
Si	Si237	0.620978	0.428147	0.955732
Si	Si238	0.875168	0.554970	0.455046
Si	Si239	0.611373	0.056559	0.961448
Si	Si240	0.069751	0.019897	0.322733
Si	Si241	0.417182	0.520887	0.827459
Si	Si242	0.069872	0.467111	0.330264
Si	Si243	0.417408	0.967975	0.827597
Si	Si244	0.913046	0.961666	0.670047
Si	Si245	0.572822	0.461165	0.165409
Si	Si246	0.922728	0.518230	0.667739
Si	Si247	0.561802	0.015548	0.171900
Si	Si248	0.191057	0.048914	0.191381
Si	Si249	0.294671	0.551479	0.696504
Si	Si250	0.187494	0.432571	0.193058
Si	Si251	0.300987	0.933268	0.688861
Si	Si252	0.792165	0.935821	0.806829
Si	Si253	0.698049	0.437813	0.296597
Si	Si254	0.805539	0.553452	0.805894
Si	Si255	0.678064	0.055797	0.309997
Si	Si256	0.419174	0.817358	0.182848
Si	Si257	0.066026	0.318964	0.686579
Si	Si258	0.421282	0.659769	0.193762
Si	Si259	0.067828	0.160867	0.688856
Si	Si260	0.564447	0.164030	0.811848
Si	Si261	0.926356	0.661982	0.301828
Si	Si262	0.568901	0.321507	0.804082
Si	Si263	0.915895	0.819711	0.307480
Si	Si264	0.308687	0.867730	0.330740
Si	Si265	0.176323	0.366744	0.834298
Si	Si266	0.312375	0.627255	0.344842
Si	Si267	0.179363	0.127275	0.840699
Si	Si268	0.677305	0.118659	0.664324
Si	Si269	0.817647	0.615619	0.160160
Si	Si270	0.679505	0.355564	0.657385
Si	Si271	0.804548	0.857151	0.160470
Si	Si272	0.264632	0.819428	0.538948
Si	Si273	0.223881	0.318596	0.041535
Si	Si274	0.267027	0.664793	0.556608
Si	Si275	0.221267	0.163922	0.053616
Si	Si276	0.719347	0.168767	0.455094
Si	Si277	0.765023	0.665924	0.956089
Si	Si278	0.724131	0.324861	0.443053
Si	Si279	0.763559	0.821351	0.944862

Si	Si280	0.110899	0.817169	0.545737
Si	Si281	0.377550	0.315625	0.047704
Si	Si282	0.113750	0.663730	0.542772
Si	Si283	0.374611	0.162365	0.037780
Si	Si284	0.873008	0.165638	0.458247
Si	Si285	0.611078	0.666244	0.948569
Si	Si286	0.877621	0.319795	0.451270
Si	Si287	0.610048	0.820136	0.952772
Si	Si288	0.063064	0.862003	0.335317
Si	Si289	0.423084	0.363013	0.838420
Si	Si290	0.074547	0.626255	0.323540
Si	Si291	0.416345	0.126415	0.818781
Si	Si292	0.920518	0.117430	0.667108
Si	Si293	0.566509	0.618024	0.156603
Si	Si294	0.919620	0.359832	0.667711
Si	Si295	0.566652	0.857251	0.171441
Si	Si296	0.184688	0.829634	0.196062
Si	Si297	0.301164	0.330184	0.699069
Si	Si298	0.199915	0.676942	0.205653
Si	Si299	0.292347	0.177408	0.702274
Si	Si300	0.800300	0.152462	0.806863
Si	Si301	0.795683	0.306155	0.786193
Si	Si302	0.689307	0.808444	0.294938
Zn	Zn303	0.649590	0.704326	0.487918

C₄H₆-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 8/M3 in Blue)

Total energy = -1929.89021364 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.818532	0.766046	0.611708
---	----	----------	----------	----------

H	H2	0.550148	0.546073	0.438128
H	H3	0.547468	0.531149	0.488143
H	H4	0.679399	0.713566	0.682434
H	H5	0.660985	0.798039	0.634251
H	H6	0.594859	0.665091	0.575685
H	H7	0.568756	0.811093	0.507320
H	H8	0.497363	0.677535	0.469271
H	H9	0.473524	0.761063	0.423201
C	C10	0.654055	0.744465	0.628275
C	C11	0.603745	0.718670	0.573052
C	C12	0.559631	0.757644	0.512112
C	C13	0.507566	0.730664	0.465354
O	O14	0.515743	0.032681	0.215957
O	O15	0.027044	0.533232	0.713029
O	O16	0.518551	0.442698	0.210058
O	O17	0.010653	0.930471	0.702835
O	O18	0.514248	0.945880	0.788484
O	O19	0.011469	0.457004	0.288129
O	O20	0.519103	0.536702	0.789335
O	O21	0.020438	0.043190	0.293050
O	O22	0.399133	0.058269	0.290943
O	O23	0.149641	0.562349	0.758269
O	O24	0.391747	0.430873	0.248245
O	O25	0.127329	0.944381	0.783621
O	O26	0.630161	0.936528	0.706525
O	O27	0.889772	0.430440	0.235179
O	O28	0.645052	0.549354	0.753368
O	O29	0.900007	0.037803	0.226205
O	O30	0.437488	0.121431	0.128644
O	O31	0.095501	0.613999	0.596980
O	O32	0.446310	0.365981	0.096962
O	O33	0.110759	0.860359	0.633921
O	O34	0.601616	0.858261	0.856994
O	O35	0.941546	0.370483	0.391901
O	O36	0.589991	0.615676	0.902326
O	O37	0.930303	0.120963	0.373917
O	O38	0.407310	0.993101	0.121508
O	O39	0.124934	0.484696	0.604237
O	O40	0.433130	0.497567	0.087509
O	O41	0.104466	0.990482	0.600459
O	O42	0.620873	0.987560	0.887128
O	O43	0.911269	0.499425	0.398545
O	O44	0.603297	0.483724	0.914762
O	O45	0.929309	0.990472	0.407150

0	046	0.337863	0.040967	0.460032
0	047	0.201483	0.552079	0.936066
0	048	0.337889	0.443792	0.426133
0	049	0.194697	0.949138	0.950135
0	050	0.697137	0.933417	0.544182
0	051	0.833037	0.426387	0.061944
0	052	0.701191	0.536581	0.579643
0	053	0.834939	0.038196	0.056391
0	054	0.340179	0.943454	0.323705
0	055	0.193650	0.445242	0.818882
0	056	0.336033	0.544836	0.297807
0	057	0.208902	0.045288	0.813856
0	058	0.702148	0.042408	0.659577
0	059	0.845911	0.543194	0.152150
0	060	0.709459	0.437501	0.711086
0	061	0.823879	0.934733	0.180013
0	062	0.267984	0.051528	0.296096
0	063	0.278116	0.542625	0.779730
0	064	0.262043	0.438535	0.268697
0	065	0.256612	0.925377	0.780123
0	066	0.761422	0.931504	0.713576
0	067	0.761445	0.453368	0.219825
0	068	0.774569	0.550680	0.738459
0	069	0.770759	0.051114	0.225643
0	070	0.309173	0.119425	0.611827
0	071	0.229123	0.624625	0.092990
0	072	0.321213	0.363998	0.578403
0	073	0.216889	0.870334	0.103485
0	074	0.714491	0.874401	0.373569
0	075	0.810987	0.352983	0.904204
0	076	0.717412	0.631069	0.445592
0	077	0.808997	0.113395	0.899392
0	078	0.218859	0.036360	0.537923
0	079	0.315997	0.536084	0.028132
0	080	0.218146	0.425745	0.499058
0	081	0.316167	0.933703	0.013036
0	082	0.812523	0.945564	0.453349
0	083	0.720301	0.439460	0.964857
0	084	0.819833	0.558743	0.505346
0	085	0.712667	0.049025	0.992835
0	086	0.321093	0.989065	0.636960
0	087	0.205782	0.494679	0.111418
0	088	0.305293	0.494562	0.600903
0	089	0.231378	0.000354	0.123196

0	090	0.706965	0.005943	0.383897
0	091	0.831212	0.482301	0.884083
0	092	0.726268	0.504248	0.393468
0	093	0.798689	0.982402	0.886323
0	094	0.129473	0.121055	0.604561
0	095	0.404624	0.627268	0.081161
0	096	0.123183	0.353181	0.580731
0	097	0.410753	0.861900	0.093946
0	098	0.904369	0.860779	0.391957
0	099	0.626148	0.353340	0.914829
0	0100	0.913748	0.631252	0.417490
0	0101	0.620062	0.119518	0.903232
0	0102	0.109740	0.060252	0.434670
0	0103	0.420298	0.559428	0.914768
0	0104	0.096651	0.430957	0.429654
0	0105	0.439240	0.942822	0.947215
0	0106	0.915843	0.916764	0.568043
0	0107	0.617764	0.418918	0.084414
0	0108	0.941186	0.555557	0.571536
0	0109	0.590098	0.044659	0.057643
0	0110	0.143014	0.054691	0.243825
0	0111	0.400676	0.536999	0.720608
0	0112	0.133800	0.428104	0.240317
0	0113	0.387395	0.920047	0.769857
0	0114	0.888311	0.943975	0.756787
0	0115	0.638015	0.448430	0.275611
0	0116	0.903595	0.554298	0.761563
0	0117	0.641176	0.063411	0.237354
0	0118	0.105843	0.945746	0.338453
0	0119	0.436447	0.438814	0.841075
0	0120	0.107649	0.543429	0.328886
0	0121	0.425546	0.041619	0.818213
0	0122	0.941939	0.035497	0.640162
0	0123	0.596233	0.541188	0.147534
0	0124	0.936040	0.441748	0.669903
0	0125	0.608536	0.941825	0.179407
0	0126	0.227191	0.130645	0.150838
0	0127	0.320889	0.622883	0.636246
0	0128	0.215364	0.362109	0.126265
0	0129	0.315647	0.855835	0.640883
0	0130	0.815640	0.854793	0.849009
0	0131	0.725285	0.373111	0.366001
0	0132	0.827063	0.615257	0.888984
0	0133	0.716834	0.135883	0.352437

0	0134	0.517722	0.848763	0.208437
0	0135	0.027112	0.350947	0.715553
0	0136	0.507058	0.630172	0.203712
0	0137	0.018906	0.131134	0.710621
0	0138	0.517568	0.132471	0.780780
0	0139	0.013778	0.631793	0.289594
0	0140	0.526175	0.349637	0.786380
0	0141	0.016170	0.855603	0.288606
0	0142	0.401162	0.828930	0.283942
0	0143	0.149730	0.326063	0.769158
0	0144	0.389299	0.662312	0.271359
0	0145	0.133265	0.153168	0.795305
0	0146	0.636176	0.150980	0.713067
0	0147	0.894763	0.654677	0.224967
0	0148	0.646334	0.323458	0.723875
0	0149	0.903274	0.829384	0.201978
0	0150	0.448791	0.743275	0.148635
0	0151	0.086601	0.238654	0.659554
0	0152	0.586220	0.238172	0.842192
0	0153	0.953183	0.744808	0.337232
0	0154	0.335128	0.842067	0.448508
0	0155	0.213803	0.340212	0.934190
0	0156	0.331721	0.636529	0.441924
0	0157	0.204821	0.136732	0.956972
0	0158	0.702129	0.150678	0.547204
0	0159	0.818290	0.660746	0.072463
0	0160	0.708644	0.352599	0.557598
0	0161	0.829270	0.838515	0.043151
0	0162	0.270725	0.836828	0.277097
0	0163	0.278545	0.352326	0.764619
0	0164	0.258440	0.650804	0.282297
0	0165	0.263690	0.162912	0.786492
0	0166	0.766545	0.149101	0.718778
0	0167	0.766839	0.628321	0.246638
0	0168	0.777653	0.325053	0.717258
0	0169	0.773572	0.816434	0.218136
0	0170	0.299187	0.739197	0.557701
0	0171	0.244083	0.243263	0.058730
0	0172	0.738459	0.252191	0.434595
0	0173	0.790782	0.738865	0.922211
0	0174	0.214114	0.836936	0.518551
0	0175	0.327566	0.342882	0.028423
0	0176	0.214012	0.640293	0.526226
0	0177	0.326711	0.142228	0.024894

O	O178	0.820913	0.151139	0.470215
O	O179	0.709455	0.639840	0.967099
O	O180	0.827766	0.344370	0.480068
O	O181	0.710257	0.839754	0.965427
O	O182	0.131189	0.739547	0.568898
O	O183	0.409017	0.241375	0.067721
O	O184	0.909027	0.245470	0.427633
O	O185	0.626581	0.740415	0.929809
O	O186	0.095003	0.834161	0.441156
O	O187	0.431409	0.317409	0.913835
O	O188	0.109029	0.662519	0.414783
O	O189	0.441772	0.146945	0.936425
O	O190	0.934059	0.156146	0.566072
O	O191	0.606180	0.664580	0.085268
O	O192	0.938868	0.325268	0.577222
O	O193	0.593302	0.841912	0.050368
O	O194	0.141819	0.831901	0.255921
O	O195	0.404387	0.336509	0.723494
O	O196	0.134469	0.651589	0.223088
O	O197	0.392001	0.160352	0.753933
O	O198	0.893197	0.132029	0.751906
O	O199	0.626737	0.637816	0.276865
O	O200	0.903528	0.332197	0.767306
O	O201	0.643966	0.819786	0.228999
O	O202	0.216627	0.745857	0.160372
O	O203	0.317559	0.246296	0.659504
O	O204	0.830262	0.233489	0.834651
O	O205	0.710662	0.744129	0.353308
O	O206	0.805397	0.773375	0.543631
Al	Al207	0.703887	0.657871	0.319477
Si	Si208	0.440475	0.051412	0.188496
Si	Si209	0.099191	0.548457	0.667433
Si	Si210	0.446496	0.434642	0.160875
Si	Si211	0.088658	0.931602	0.679944
Si	Si212	0.591177	0.932428	0.811157
Si	Si213	0.938580	0.439443	0.328911
Si	Si214	0.590349	0.546118	0.840880
Si	Si215	0.944081	0.048069	0.325462
Si	Si216	0.336004	0.023277	0.342978
Si	Si217	0.205760	0.525165	0.823214
Si	Si218	0.332088	0.464402	0.310227
Si	Si219	0.196957	0.965968	0.832497
Si	Si220	0.698110	0.961891	0.656400
Si	Si221	0.832645	0.464300	0.168116

Si	Si222	0.707653	0.517764	0.695986
Si	Si223	0.832548	0.015247	0.172001
Si	Si224	0.296304	0.046980	0.562213
Si	Si225	0.238306	0.552012	0.042484
Si	Si226	0.295582	0.431954	0.526482
Si	Si227	0.239695	0.938142	0.048112
Si	Si228	0.733982	0.939245	0.438016
Si	Si229	0.798576	0.425401	0.953992
Si	Si230	0.741796	0.557116	0.480680
Si	Si231	0.789278	0.046075	0.958372
Si	Si232	0.140779	0.051941	0.544599
Si	Si233	0.393492	0.555240	0.028085
Si	Si234	0.140953	0.423947	0.528676
Si	Si235	0.393176	0.933109	0.044095
Si	Si236	0.890124	0.927534	0.455305
Si	Si237	0.642230	0.423637	0.970093
Si	Si238	0.896600	0.561469	0.472432
Si	Si239	0.636027	0.050233	0.959747
Si	Si240	0.094337	0.025585	0.328084
Si	Si241	0.443930	0.517960	0.817374
Si	Si242	0.087527	0.465005	0.321225
Si	Si243	0.441586	0.962721	0.830468
Si	Si244	0.939270	0.956591	0.666764
Si	Si245	0.592938	0.463109	0.178974
Si	Si246	0.951561	0.521083	0.679427
Si	Si247	0.589117	0.020533	0.172935
Si	Si248	0.217506	0.058725	0.203469
Si	Si249	0.325935	0.548912	0.683966
Si	Si250	0.204676	0.431164	0.186047
Si	Si251	0.319774	0.923192	0.706621
Si	Si252	0.816198	0.928788	0.800739
Si	Si253	0.713117	0.444887	0.314209
Si	Si254	0.833955	0.550248	0.819199
Si	Si255	0.709272	0.063596	0.299589
Si	Si256	0.444747	0.820428	0.183536
Si	Si257	0.096313	0.317398	0.681136
Si	Si258	0.438007	0.665195	0.175610
Si	Si259	0.091844	0.161250	0.692573
Si	Si260	0.589958	0.160509	0.809799
Si	Si261	0.943573	0.665748	0.317518
Si	Si262	0.596163	0.316457	0.817179
Si	Si263	0.944300	0.822029	0.305299
Si	Si264	0.336379	0.863109	0.332651
Si	Si265	0.209361	0.366114	0.821239

Si	Si266	0.328597	0.623424	0.323293
Si	Si267	0.202301	0.124413	0.838134
Si	Si268	0.701910	0.123130	0.659939
Si	Si269	0.829576	0.621352	0.176454
Si	Si270	0.710471	0.359642	0.677310
Si	Si271	0.832731	0.855066	0.160728
Si	Si272	0.290548	0.818425	0.541748
Si	Si273	0.250426	0.322011	0.036923
Si	Si274	0.291016	0.660144	0.539759
Si	Si275	0.250720	0.163584	0.047267
Si	Si276	0.744756	0.172600	0.450919
Si	Si277	0.786361	0.663083	0.963413
Si	Si278	0.750155	0.330063	0.459888
Si	Si279	0.786563	0.817711	0.946347
Si	Si280	0.137428	0.817895	0.540215
Si	Si281	0.403509	0.317171	0.026769
Si	Si282	0.137424	0.663984	0.526949
Si	Si283	0.403639	0.163010	0.039274
Si	Si284	0.898898	0.167928	0.459276
Si	Si285	0.633179	0.664817	0.972265
Si	Si286	0.904249	0.321462	0.468913
Si	Si287	0.633137	0.819653	0.951473
Si	Si288	0.089855	0.866724	0.330871
Si	Si289	0.449636	0.360773	0.815778
Si	Si290	0.090878	0.622125	0.314039
Si	Si291	0.443849	0.120354	0.822699
Si	Si292	0.946590	0.113995	0.667169
Si	Si293	0.585003	0.618758	0.180798
Si	Si294	0.951277	0.362722	0.682443
Si	Si295	0.591132	0.863105	0.166609
Si	Si296	0.211442	0.822021	0.199502
Si	Si297	0.330289	0.324545	0.682257
Si	Si298	0.209454	0.667963	0.189825
Si	Si299	0.320670	0.171015	0.702700
Si	Si300	0.824626	0.156482	0.800609
Si	Si301	0.830753	0.311552	0.805595
Si	Si302	0.711256	0.814638	0.293494
Zn	Zn303	0.732056	0.726059	0.505965

C₄H₈-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 8/M1 in Black) Total energy = -1920.57392658 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b		20.050598		
_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.509773	0.810156	0.436646
H	H2	0.522350	0.724250	0.388723
H	H3	0.499870	0.677141	0.550472
H	H4	0.469281	0.819074	0.621130
H	H5	0.545547	0.784813	0.651703
H	H6	0.413228	0.723256	0.714329
H	H7	0.469591	0.766314	0.791110
H	H8	0.491616	0.688512	0.739195
C	C9	0.505191	0.756622	0.448256
C	C10	0.498243	0.731291	0.541658
C	C11	0.494078	0.771438	0.635005
C	C12	0.465124	0.735058	0.724940
O	O13	0.515188	0.028532	0.209180
O	O14	0.022580	0.537413	0.713994
O	O15	0.524168	0.438742	0.206999
O	O16	0.015702	0.939359	0.699786
O	O17	0.524252	0.950439	0.786978
O	O18	0.015168	0.455582	0.286202
O	O19	0.514898	0.545658	0.799848
O	O20	0.024274	0.041528	0.288959
O	O21	0.396627	0.058755	0.274318
O	O22	0.142458	0.559660	0.777057
O	O23	0.399447	0.430174	0.259832
O	O24	0.138913	0.942299	0.756292
O	O25	0.641863	0.927599	0.715484
O	O26	0.896735	0.427869	0.219345
O	O27	0.636468	0.537634	0.739386
O	O28	0.899386	0.045352	0.239296
O	O29	0.442329	0.115998	0.111151
O	O30	0.101110	0.619758	0.614268
O	O31	0.443990	0.363633	0.103219
O	O32	0.101507	0.864496	0.606032

0	033	0.602563	0.864544	0.876076
0	034	0.939570	0.370681	0.383654
0	035	0.603269	0.618864	0.887770
0	036	0.944924	0.121113	0.386764
0	037	0.409002	0.988193	0.109488
0	038	0.125124	0.489638	0.613594
0	039	0.435475	0.495271	0.093915
0	040	0.103173	0.995471	0.582284
0	041	0.630945	0.994728	0.883252
0	042	0.907946	0.500107	0.380536
0	043	0.602354	0.487387	0.915945
0	044	0.936488	0.989693	0.410386
0	045	0.336134	0.059868	0.445669
0	046	0.205473	0.547747	0.944222
0	047	0.338918	0.432664	0.432741
0	048	0.202131	0.946664	0.926176
0	049	0.704924	0.925058	0.548028
0	050	0.833883	0.426337	0.051038
0	051	0.700445	0.542553	0.571529
0	052	0.838436	0.037918	0.067458
0	053	0.350297	0.944822	0.349467
0	054	0.191808	0.442111	0.825507
0	055	0.342138	0.541737	0.321559
0	056	0.213519	0.047146	0.798972
0	057	0.694250	0.039743	0.646130
0	058	0.848714	0.541401	0.146373
0	059	0.715736	0.437547	0.689356
0	060	0.832406	0.936070	0.192146
0	061	0.267683	0.037924	0.283014
0	062	0.271710	0.540588	0.776958
0	063	0.269621	0.437058	0.269203
0	064	0.268410	0.931438	0.758292
0	065	0.772203	0.944089	0.712963
0	066	0.767263	0.450249	0.215875
0	067	0.765199	0.554333	0.742045
0	068	0.769516	0.048456	0.232666
0	069	0.305294	0.129248	0.604341
0	070	0.223289	0.620884	0.101626
0	071	0.310446	0.366819	0.594250
0	072	0.214803	0.864731	0.075327
0	073	0.731330	0.858620	0.385817
0	074	0.809686	0.356614	0.889923
0	075	0.719209	0.619145	0.417492
0	076	0.823429	0.116207	0.914674

0	077	0.222992	0.036078	0.538321
0	078	0.315880	0.534727	0.047247
0	079	0.216438	0.433670	0.501476
0	080	0.320900	0.924944	0.997972
0	081	0.816526	0.949318	0.451798
0	082	0.722087	0.445598	0.954485
0	083	0.820741	0.555249	0.501837
0	084	0.718765	0.056455	0.995858
0	085	0.335259	0.001755	0.623222
0	086	0.203817	0.488877	0.117762
0	087	0.309457	0.498879	0.597490
0	088	0.236472	0.994708	0.102174
0	089	0.703012	0.988382	0.376679
0	090	0.833984	0.486361	0.876222
0	091	0.733053	0.488507	0.398074
0	092	0.804055	0.986191	0.893544
0	093	0.131625	0.124499	0.589005
0	094	0.406110	0.623772	0.100926
0	095	0.124254	0.358926	0.587154
0	096	0.413435	0.857015	0.091756
0	097	0.906729	0.859985	0.401981
0	098	0.630355	0.357429	0.906844
0	099	0.915649	0.629028	0.424782
0	0100	0.621860	0.125386	0.913495
0	0101	0.122512	0.062569	0.416596
0	0102	0.416105	0.562661	0.927320
0	0103	0.093097	0.438622	0.439235
0	0104	0.444554	0.932065	0.938628
0	0105	0.915418	0.921269	0.574810
0	0106	0.623542	0.418925	0.079910
0	0107	0.943762	0.538784	0.560522
0	0108	0.596278	0.042426	0.059137
0	0109	0.144236	0.038945	0.224351
0	0110	0.396915	0.534408	0.734235
0	0111	0.139903	0.422357	0.256468
0	0112	0.399232	0.926919	0.753044
0	0113	0.896447	0.947578	0.766910
0	0114	0.643814	0.443435	0.272183
0	0115	0.895845	0.559242	0.742251
0	0116	0.639715	0.061224	0.244255
0	0117	0.103633	0.942067	0.343856
0	0118	0.441842	0.442378	0.858934
0	0119	0.110692	0.543138	0.321004
0	0120	0.434705	0.042400	0.831874

0	0121	0.939306	0.041401	0.644609
0	0122	0.602842	0.539174	0.151556
0	0123	0.934902	0.439338	0.688310
0	0124	0.611838	0.940343	0.181382
0	0125	0.227763	0.122556	0.143564
0	0126	0.324473	0.624311	0.645903
0	0127	0.217267	0.356367	0.137329
0	0128	0.331338	0.869159	0.614938
0	0129	0.816865	0.859687	0.848547
0	0130	0.730413	0.361657	0.351410
0	0131	0.829288	0.619339	0.882125
0	0132	0.714966	0.121218	0.374225
0	0133	0.518194	0.850370	0.211748
0	0134	0.026277	0.347101	0.718523
0	0135	0.515864	0.629608	0.211279
0	0136	0.026277	0.130867	0.707229
0	0137	0.524729	0.133138	0.781129
0	0138	0.014691	0.631251	0.296033
0	0139	0.525451	0.351787	0.789134
0	0140	0.014287	0.852952	0.289982
0	0141	0.402175	0.816930	0.280342
0	0142	0.148820	0.323424	0.773679
0	0143	0.402113	0.669122	0.287616
0	0144	0.143250	0.156732	0.780882
0	0145	0.647047	0.151309	0.724215
0	0146	0.894157	0.651317	0.233829
0	0147	0.643015	0.329411	0.714009
0	0148	0.898501	0.823809	0.212215
0	0149	0.460039	0.740106	0.146018
0	0150	0.089541	0.240421	0.651117
0	0151	0.590248	0.241757	0.838644
0	0152	0.951578	0.742981	0.345906
0	0153	0.332416	0.813144	0.438272
0	0154	0.207273	0.338354	0.945333
0	0155	0.339274	0.662264	0.455983
0	0156	0.206455	0.134653	0.949854
0	0157	0.717061	0.156924	0.563559
0	0158	0.828819	0.660809	0.069514
0	0159	0.706532	0.345698	0.544473
0	0160	0.836310	0.846638	0.042704
0	0161	0.263218	0.849681	0.257141
0	0162	0.278069	0.347049	0.782857
0	0163	0.259476	0.656952	0.283947
0	0164	0.274656	0.162750	0.790412

O	O165	0.775465	0.124581	0.732784
O	O166	0.765878	0.624465	0.233594
O	O167	0.774478	0.321646	0.706311
O	O168	0.766986	0.822932	0.202470
O	O169	0.293934	0.744453	0.593931
O	O170	0.243613	0.238586	0.060810
O	O171	0.744651	0.244413	0.426279
O	O172	0.798964	0.743561	0.926774
O	O173	0.217589	0.842689	0.523709
O	O174	0.325505	0.339751	0.029200
O	O175	0.218945	0.641730	0.532048
O	O176	0.327959	0.140129	0.020238
O	O177	0.828615	0.145737	0.463638
O	O178	0.716731	0.644884	0.973848
O	O179	0.828409	0.341257	0.478593
O	O180	0.715574	0.841842	0.970610
O	O181	0.136659	0.741736	0.567007
O	O182	0.408094	0.239682	0.070417
O	O183	0.912869	0.245818	0.427831
O	O184	0.632263	0.742733	0.929451
O	O185	0.108910	0.821689	0.418009
O	O186	0.431607	0.318371	0.918305
O	O187	0.109296	0.654418	0.425978
O	O188	0.440355	0.157865	0.925003
O	O189	0.934984	0.163438	0.574761
O	O190	0.606580	0.660229	0.076631
O	O191	0.942723	0.332734	0.570658
O	O192	0.602392	0.833124	0.065898
O	O193	0.134974	0.839301	0.225587
O	O194	0.402785	0.349288	0.730758
O	O195	0.133423	0.658994	0.232227
O	O196	0.400095	0.151742	0.736694
O	O197	0.902894	0.141246	0.763060
O	O198	0.638708	0.641720	0.266340
O	O199	0.900929	0.321611	0.756944
O	O200	0.640997	0.821538	0.253884
O	O201	0.214924	0.746283	0.153408
O	O202	0.327005	0.249928	0.668627
O	O203	0.819168	0.232367	0.830818
O	O204	0.723111	0.733705	0.329268
Al	Al205	0.332751	0.862576	0.326081
Al	Al206	0.330609	0.625603	0.334370
Si	Si207	0.712037	0.654861	0.310242
Si	Si208	0.440739	0.047843	0.176076

Si	Si209	0.097437	0.551582	0.678735
Si	Si210	0.449351	0.432090	0.166808
Si	Si211	0.090851	0.935521	0.661107
Si	Si212	0.599741	0.934938	0.816915
Si	Si213	0.940520	0.438543	0.318593
Si	Si214	0.590462	0.546956	0.836356
Si	Si215	0.950490	0.049405	0.331359
Si	Si216	0.337787	0.023289	0.337667
Si	Si217	0.203027	0.522079	0.831393
Si	Si218	0.337539	0.462200	0.320029
Si	Si219	0.205570	0.966920	0.810494
Si	Si220	0.703707	0.959718	0.656493
Si	Si221	0.836600	0.461684	0.158882
Si	Si222	0.704828	0.517698	0.685722
Si	Si223	0.835015	0.016896	0.183209
Si	Si224	0.299877	0.056738	0.552011
Si	Si225	0.237071	0.548678	0.054153
Si	Si226	0.293947	0.433049	0.531289
Si	Si227	0.243249	0.932279	0.026940
Si	Si228	0.739346	0.930286	0.439911
Si	Si229	0.799842	0.428459	0.942606
Si	Si230	0.743589	0.551273	0.471437
Si	Si231	0.796159	0.049277	0.967364
Si	Si232	0.145499	0.054883	0.531235
Si	Si233	0.392892	0.553937	0.042327
Si	Si234	0.140059	0.430156	0.535412
Si	Si235	0.396556	0.926238	0.034722
Si	Si236	0.893945	0.929835	0.459516
Si	Si237	0.644778	0.426929	0.964513
Si	Si238	0.897076	0.555599	0.466836
Si	Si239	0.642198	0.054691	0.962898
Si	Si240	0.098750	0.021159	0.318874
Si	Si241	0.441939	0.521137	0.830985
Si	Si242	0.090043	0.464970	0.325101
Si	Si243	0.450325	0.963272	0.827568
Si	Si244	0.942041	0.962370	0.671000
Si	Si245	0.598125	0.459864	0.177086
Si	Si246	0.949283	0.518563	0.676969
Si	Si247	0.590525	0.018550	0.174043
Si	Si248	0.219671	0.047944	0.188756
Si	Si249	0.324817	0.548649	0.688793
Si	Si250	0.208380	0.426745	0.195056
Si	Si251	0.332680	0.933535	0.687571
Si	Si252	0.822376	0.934885	0.805252

Si	Si253	0.719022	0.436262	0.309099
Si	Si254	0.830756	0.554355	0.810899
Si	Si255	0.707387	0.054687	0.307284
Si	Si256	0.448147	0.816702	0.181504
Si	Si257	0.097108	0.317900	0.682660
Si	Si258	0.445765	0.664889	0.185487
Si	Si259	0.097752	0.162893	0.682104
Si	Si260	0.595729	0.163022	0.814178
Si	Si261	0.944554	0.663920	0.324773
Si	Si262	0.597217	0.320057	0.811966
Si	Si263	0.943270	0.820028	0.312369
Si	Si264	0.206663	0.362920	0.831400
Si	Si265	0.208936	0.125166	0.830354
Si	Si266	0.708715	0.117971	0.667472
Si	Si267	0.834498	0.619073	0.171774
Si	Si268	0.709376	0.358653	0.663431
Si	Si269	0.834242	0.857701	0.162081
Si	Si270	0.292523	0.818061	0.543591
Si	Si271	0.248728	0.318017	0.043385
Si	Si272	0.293381	0.667345	0.555782
Si	Si273	0.251414	0.159390	0.043101
Si	Si274	0.751503	0.166738	0.456386
Si	Si275	0.793510	0.666822	0.962363
Si	Si276	0.752474	0.322859	0.451239
Si	Si277	0.792189	0.822571	0.948365
Si	Si278	0.140731	0.818094	0.528000
Si	Si279	0.402032	0.315809	0.030546
Si	Si280	0.141435	0.664033	0.534321
Si	Si281	0.404378	0.163039	0.032125
Si	Si282	0.905466	0.168733	0.463081
Si	Si283	0.639790	0.666285	0.967357
Si	Si284	0.905885	0.322535	0.465243
Si	Si285	0.638699	0.820598	0.960788
Si	Si286	0.091159	0.863938	0.318264
Si	Si287	0.450348	0.365227	0.824225
Si	Si288	0.092461	0.622056	0.318634
Si	Si289	0.449771	0.121423	0.818705
Si	Si290	0.950871	0.119165	0.672765
Si	Si291	0.591331	0.617281	0.176278
Si	Si292	0.951161	0.360230	0.683200
Si	Si293	0.593688	0.861702	0.177465
Si	Si294	0.208305	0.824855	0.180472
Si	Si295	0.329469	0.328237	0.694925
Si	Si296	0.209084	0.670598	0.194813

Si	Si297	0.326954	0.172507	0.700172
Si	Si298	0.830375	0.153943	0.809053
Si	Si299	0.826556	0.309120	0.796068
Si	Si300	0.715756	0.810150	0.292862
Zn	Zn301	0.401271	0.742445	0.398372

TS-C₄H₈-dehydro-Zn²⁺ (Fig. 8/TS1 in Black) Total energy = -1918.38880744 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.432190	0.716183	0.587595
H	H2	0.393026	0.684019	0.483216
H	H3	0.467482	0.777606	0.521569
H	H4	0.588966	0.673868	0.684078
H	H5	0.645475	0.744327	0.659771
H	H6	0.595021	0.762557	0.498197
H	H7	0.514189	0.636475	0.547741
H	H8	0.529320	0.668983	0.428889
C	C9	0.455109	0.723924	0.514675
C	C10	0.605362	0.713024	0.634236
C	C11	0.577284	0.722287	0.545778
C	C12	0.519745	0.683119	0.506149
O	O13	0.511689	0.024491	0.207621
O	O14	0.026558	0.532527	0.718057
O	O15	0.525972	0.438359	0.210428
O	O16	0.013921	0.940042	0.699154
O	O17	0.521624	0.949849	0.786950
O	O18	0.017847	0.452306	0.292551
O	O19	0.517421	0.541474	0.798939
O	O20	0.020619	0.040179	0.285910
O	O21	0.393014	0.060682	0.268958

0	022	0.145729	0.561338	0.781109
0	023	0.403230	0.436561	0.270573
0	024	0.137167	0.948561	0.752383
0	025	0.639704	0.924726	0.717267
0	026	0.899044	0.429123	0.224306
0	027	0.641284	0.541088	0.748314
0	028	0.895017	0.045882	0.239049
0	029	0.442811	0.111154	0.102594
0	030	0.101168	0.618634	0.617871
0	031	0.441181	0.358346	0.123645
0	032	0.100519	0.863769	0.609998
0	033	0.598714	0.862019	0.877159
0	034	0.939592	0.369895	0.388855
0	035	0.599531	0.615330	0.899878
0	036	0.942692	0.120032	0.386410
0	037	0.404087	0.984831	0.110140
0	038	0.131615	0.489813	0.618647
0	039	0.435321	0.489268	0.093745
0	040	0.099613	0.993924	0.575371
0	041	0.628041	0.991462	0.885138
0	042	0.911738	0.499800	0.387098
0	043	0.602914	0.483429	0.918021
0	044	0.933593	0.988522	0.408403
0	045	0.332276	0.062161	0.441095
0	046	0.202608	0.548839	0.954471
0	047	0.342154	0.443141	0.440999
0	048	0.200278	0.944856	0.920846
0	049	0.701924	0.925020	0.548756
0	050	0.834334	0.424125	0.057543
0	051	0.703268	0.543031	0.577756
0	052	0.835103	0.035604	0.066201
0	053	0.349533	0.946528	0.347318
0	054	0.189958	0.442747	0.834608
0	055	0.335016	0.544827	0.315913
0	056	0.218710	0.047362	0.800055
0	057	0.692171	0.037745	0.653042
0	058	0.848119	0.540759	0.148672
0	059	0.714587	0.437439	0.694947
0	060	0.831281	0.934758	0.193064
0	061	0.264314	0.035820	0.279213
0	062	0.274558	0.538464	0.792725
0	063	0.272970	0.431207	0.276871
0	064	0.265952	0.929962	0.751361
0	065	0.770217	0.939812	0.712752

0	066	0.769322	0.449066	0.223250
0	067	0.770515	0.551730	0.745522
0	068	0.764931	0.045889	0.229694
0	069	0.300894	0.130156	0.601209
0	070	0.230747	0.619912	0.113739
0	071	0.325308	0.374532	0.601850
0	072	0.205540	0.864273	0.071211
0	073	0.728881	0.858442	0.386776
0	074	0.810619	0.354756	0.895878
0	075	0.721907	0.619316	0.423125
0	076	0.821752	0.113980	0.913261
0	077	0.219664	0.036184	0.534211
0	078	0.317637	0.533115	0.043172
0	079	0.221278	0.428463	0.510756
0	080	0.316274	0.920046	0.999357
0	081	0.814217	0.948252	0.453084
0	082	0.723515	0.444549	0.958177
0	083	0.823515	0.555552	0.506327
0	084	0.715870	0.056410	0.993088
0	085	0.332283	0.002803	0.618114
0	086	0.208987	0.488753	0.126996
0	087	0.305663	0.504937	0.606277
0	088	0.232009	0.993755	0.097542
0	089	0.701075	0.988834	0.378568
0	090	0.836773	0.484253	0.882892
0	091	0.735142	0.488247	0.404860
0	092	0.800587	0.984130	0.892400
0	093	0.127985	0.123333	0.586380
0	094	0.407438	0.618953	0.106152
0	095	0.124347	0.358825	0.590952
0	096	0.413879	0.854944	0.083791
0	097	0.904545	0.858697	0.402204
0	098	0.632405	0.354227	0.913961
0	099	0.918997	0.628834	0.428141
0	0100	0.616369	0.122262	0.911664
0	0101	0.119164	0.063122	0.412377
0	0102	0.421492	0.561127	0.930806
0	0103	0.098634	0.440444	0.443897
0	0104	0.438205	0.935409	0.934235
0	0105	0.914069	0.920834	0.574162
0	0106	0.625947	0.418823	0.085101
0	0107	0.946243	0.540848	0.566951
0	0108	0.594408	0.041143	0.060245
0	0109	0.140671	0.038384	0.220538

0	0110	0.397744	0.541746	0.736751
0	0111	0.142865	0.420727	0.260876
0	0112	0.396712	0.927781	0.746790
0	0113	0.894415	0.948307	0.766013
0	0114	0.645172	0.447833	0.276524
0	0115	0.900949	0.557106	0.751431
0	0116	0.635405	0.059950	0.246560
0	0117	0.101593	0.941873	0.341363
0	0118	0.437270	0.441952	0.851767
0	0119	0.111487	0.542426	0.320037
0	0120	0.432065	0.043893	0.823091
0	0121	0.937478	0.041371	0.642951
0	0122	0.601642	0.539951	0.151772
0	0123	0.935650	0.437809	0.687878
0	0124	0.610991	0.938865	0.181960
0	0125	0.225520	0.121353	0.141412
0	0126	0.315332	0.628974	0.661612
0	0127	0.220096	0.355957	0.139052
0	0128	0.329162	0.870421	0.605863
0	0129	0.818724	0.857757	0.848838
0	0130	0.727250	0.361684	0.356672
0	0131	0.831614	0.617280	0.888162
0	0132	0.713624	0.121828	0.370454
0	0133	0.517299	0.848719	0.207393
0	0134	0.026108	0.345295	0.720471
0	0135	0.516550	0.631143	0.214889
0	0136	0.024148	0.131296	0.706480
0	0137	0.521803	0.135453	0.775767
0	0138	0.014902	0.630667	0.293415
0	0139	0.527880	0.354000	0.794718
0	0140	0.011377	0.853609	0.287840
0	0141	0.401303	0.820235	0.274874
0	0142	0.148523	0.323887	0.777608
0	0143	0.401630	0.670374	0.289916
0	0144	0.141639	0.152285	0.779488
0	0145	0.645602	0.151588	0.724636
0	0146	0.892992	0.650032	0.237881
0	0147	0.644767	0.327804	0.720396
0	0148	0.895466	0.821378	0.213127
0	0149	0.457153	0.738438	0.144517
0	0150	0.091035	0.239778	0.653286
0	0151	0.588658	0.240758	0.841668
0	0152	0.952185	0.742442	0.346019
0	0153	0.326513	0.813993	0.428670

0	0154	0.210005	0.336815	0.946858
0	0155	0.342062	0.652607	0.469630
0	0156	0.205702	0.136466	0.948288
0	0157	0.713686	0.152057	0.561526
0	0158	0.826820	0.660804	0.073978
0	0159	0.706230	0.345309	0.549928
0	0160	0.833883	0.845496	0.043555
0	0161	0.262437	0.854809	0.246168
0	0162	0.277005	0.350804	0.780488
0	0163	0.259807	0.665933	0.295236
0	0164	0.272643	0.165711	0.787916
0	0165	0.774016	0.125663	0.731254
0	0166	0.764965	0.622832	0.237568
0	0167	0.776164	0.322983	0.710202
0	0168	0.764094	0.822552	0.203163
0	0169	0.291911	0.745684	0.587677
0	0170	0.245013	0.237853	0.063577
0	0171	0.742028	0.243891	0.430507
0	0172	0.798733	0.741747	0.927982
0	0173	0.213840	0.842306	0.519792
0	0174	0.328111	0.337745	0.030002
0	0175	0.216949	0.641632	0.530426
0	0176	0.326954	0.138318	0.019750
0	0177	0.826326	0.144906	0.463288
0	0178	0.716661	0.642506	0.972946
0	0179	0.827103	0.340372	0.480134
0	0180	0.714665	0.840821	0.964776
0	0181	0.134030	0.741083	0.567020
0	0182	0.408776	0.236280	0.072175
0	0183	0.910770	0.244950	0.427414
0	0184	0.631941	0.740339	0.930209
0	0185	0.102483	0.822505	0.420901
0	0186	0.441390	0.323083	0.934110
0	0187	0.105998	0.652219	0.428222
0	0188	0.436629	0.158812	0.919206
0	0189	0.932743	0.163179	0.574126
0	0190	0.610592	0.662586	0.084623
0	0191	0.940509	0.329006	0.574597
0	0192	0.604411	0.831251	0.066557
0	0193	0.133377	0.836196	0.229706
0	0194	0.404159	0.335265	0.746277
0	0195	0.135289	0.658766	0.235564
0	0196	0.397167	0.154760	0.730611
0	0197	0.901301	0.140679	0.762730

O	O198	0.638520	0.638373	0.274417
O	O199	0.901770	0.321151	0.762626
O	O200	0.638777	0.819814	0.256174
O	O201	0.214767	0.746571	0.153272
O	O202	0.320686	0.252068	0.662462
O	O203	0.818551	0.231432	0.833161
O	O204	0.722427	0.732990	0.331399
Al	Al205	0.329699	0.865470	0.320074
Al	Al206	0.330427	0.628290	0.337687
Si	Si207	0.712137	0.653702	0.315579
Si	Si208	0.437984	0.045414	0.172558
Si	Si209	0.100666	0.550507	0.683125
Si	Si210	0.450345	0.430902	0.174872
Si	Si211	0.088737	0.936618	0.659089
Si	Si212	0.596537	0.932343	0.817611
Si	Si213	0.942539	0.437833	0.324226
Si	Si214	0.591577	0.545014	0.841732
Si	Si215	0.947203	0.048598	0.329886
Si	Si216	0.335039	0.024600	0.333812
Si	Si217	0.203139	0.522451	0.841402
Si	Si218	0.337959	0.465395	0.325162
Si	Si219	0.205469	0.967611	0.806507
Si	Si220	0.701267	0.957445	0.658697
Si	Si221	0.837706	0.461001	0.164252
Si	Si222	0.707600	0.518028	0.691762
Si	Si223	0.831651	0.015540	0.182312
Si	Si224	0.296354	0.057843	0.547814
Si	Si225	0.239912	0.548493	0.060936
Si	Si226	0.298294	0.437508	0.540034
Si	Si227	0.238372	0.930351	0.023980
Si	Si228	0.736831	0.930036	0.441108
Si	Si229	0.801294	0.426722	0.948395
Si	Si230	0.746049	0.551555	0.477347
Si	Si231	0.793235	0.047543	0.965807
Si	Si232	0.142014	0.054413	0.526923
Si	Si233	0.395178	0.550471	0.043776
Si	Si234	0.144156	0.429437	0.540918
Si	Si235	0.392572	0.924839	0.031487
Si	Si236	0.891660	0.928830	0.459163
Si	Si237	0.646473	0.424844	0.969083
Si	Si238	0.899960	0.556007	0.472111
Si	Si239	0.638923	0.052715	0.962345
Si	Si240	0.095444	0.020794	0.315434
Si	Si241	0.443327	0.521339	0.830647

Si	Si242	0.092914	0.463874	0.328731
Si	Si243	0.446919	0.964422	0.822385
Si	Si244	0.940131	0.962491	0.670116
Si	Si245	0.599427	0.460979	0.180410
Si	Si246	0.952247	0.516899	0.681735
Si	Si247	0.587839	0.016605	0.174597
Si	Si248	0.216267	0.046588	0.185151
Si	Si249	0.322896	0.552205	0.699940
Si	Si250	0.211921	0.424771	0.200783
Si	Si251	0.330437	0.933725	0.680692
Si	Si252	0.820904	0.932982	0.804811
Si	Si253	0.719577	0.437040	0.315160
Si	Si254	0.834541	0.552189	0.817252
Si	Si255	0.704317	0.054014	0.306790
Si	Si256	0.447621	0.816143	0.175116
Si	Si257	0.097455	0.317121	0.685847
Si	Si258	0.445518	0.663605	0.187967
Si	Si259	0.096270	0.161506	0.681334
Si	Si260	0.592984	0.162498	0.813178
Si	Si261	0.945215	0.663209	0.326091
Si	Si262	0.598349	0.319126	0.817653
Si	Si263	0.941239	0.819134	0.312264
Si	Si264	0.206685	0.363688	0.834310
Si	Si265	0.209034	0.125266	0.829251
Si	Si266	0.706580	0.116543	0.668298
Si	Si267	0.833365	0.618187	0.175352
Si	Si268	0.709950	0.358594	0.668660
Si	Si269	0.831794	0.856386	0.162836
Si	Si270	0.289586	0.819041	0.535810
Si	Si271	0.251149	0.317055	0.045264
Si	Si272	0.289292	0.666801	0.563530
Si	Si273	0.250772	0.158879	0.042586
Si	Si274	0.749074	0.165459	0.456018
Si	Si275	0.793450	0.665299	0.965144
Si	Si276	0.750710	0.322279	0.455283
Si	Si277	0.791632	0.820992	0.947555
Si	Si278	0.137287	0.817814	0.528723
Si	Si279	0.404547	0.314159	0.040076
Si	Si280	0.138904	0.663239	0.535506
Si	Si281	0.403612	0.160955	0.028734
Si	Si282	0.903181	0.167829	0.462473
Si	Si283	0.639768	0.664888	0.972169
Si	Si284	0.904463	0.321014	0.468003
Si	Si285	0.637844	0.818648	0.959406

Si	Si286	0.087941	0.863570	0.318835
Si	Si287	0.452555	0.363682	0.831601
Si	Si288	0.092245	0.621054	0.318928
Si	Si289	0.446668	0.123155	0.812162
Si	Si290	0.948908	0.118990	0.671963
Si	Si291	0.592178	0.617722	0.181275
Si	Si292	0.950928	0.358364	0.685770
Si	Si293	0.593547	0.860085	0.177197
Si	Si294	0.205106	0.825322	0.177569
Si	Si295	0.331352	0.328094	0.698812
Si	Si296	0.211198	0.672474	0.201278
Si	Si297	0.323398	0.174621	0.695403
Si	Si298	0.828871	0.153193	0.808955
Si	Si299	0.827184	0.308465	0.800596
Si	Si300	0.713785	0.809178	0.294622
Zn	Zn301	0.409894	0.755582	0.386634

M-C₄H₇Zn-OH-Zn²⁺ (Fig. 8/M2 in Black) Total energy = -1918.98460350 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.505909	0.819456	0.521504
H	H2	0.378891	0.623491	0.493865
H	H3	0.548611	0.790470	0.416519
H	H4	0.565116	0.730952	0.728928
H	H5	0.653425	0.746855	0.707741
H	H6	0.639167	0.732541	0.529823
H	H7	0.495304	0.701471	0.585385
H	H8	0.536820	0.671912	0.478369
C	C9	0.510653	0.776964	0.470660
C	C10	0.605580	0.735212	0.676678

C	C11	0.597070	0.727141	0.579191
C	C12	0.532125	0.714602	0.529090
O	O13	0.510789	0.025093	0.208635
O	O14	0.024402	0.532113	0.717536
O	O15	0.524395	0.439649	0.210634
O	O16	0.013549	0.937892	0.695061
O	O17	0.520860	0.950503	0.783686
O	O18	0.016643	0.452634	0.292484
O	O19	0.515489	0.541761	0.799606
O	O20	0.019550	0.040809	0.285742
O	O21	0.391432	0.059300	0.268801
O	O22	0.142380	0.562265	0.783971
O	O23	0.401781	0.434659	0.272134
O	O24	0.136132	0.949352	0.751092
O	O25	0.640029	0.925780	0.718160
O	O26	0.898028	0.430078	0.222728
O	O27	0.639093	0.540688	0.746814
O	O28	0.893600	0.046275	0.240283
O	O29	0.440320	0.108901	0.101507
O	O30	0.098347	0.621595	0.622755
O	O31	0.441640	0.357805	0.123440
O	O32	0.103912	0.866988	0.603690
O	O33	0.597138	0.863173	0.877090
O	O34	0.937964	0.369601	0.386565
O	O35	0.597973	0.617258	0.897523
O	O36	0.941921	0.119339	0.388544
O	O37	0.404198	0.981465	0.112627
O	O38	0.131115	0.493451	0.617758
O	O39	0.431498	0.488723	0.095832
O	O40	0.097895	0.997631	0.575808
O	O41	0.625616	0.992825	0.885011
O	O42	0.910262	0.499615	0.386676
O	O43	0.602002	0.485809	0.918634
O	O44	0.933268	0.987560	0.407913
O	O45	0.330578	0.062611	0.439994
O	O46	0.198792	0.549918	0.958063
O	O47	0.340151	0.451320	0.441574
O	O48	0.199997	0.945469	0.919322
O	O49	0.702129	0.925163	0.549645
O	O50	0.833856	0.425278	0.055579
O	O51	0.701241	0.542821	0.576303
O	O52	0.833932	0.036812	0.067234
O	O53	0.345226	0.945954	0.347450
O	O54	0.187520	0.444171	0.836829

0	055	0.334438	0.546015	0.305116
0	056	0.218175	0.047779	0.798153
0	057	0.692747	0.038303	0.652714
0	058	0.847155	0.541756	0.147283
0	059	0.714732	0.438173	0.694793
0	060	0.830514	0.935048	0.192361
0	061	0.262413	0.037093	0.278248
0	062	0.271268	0.541257	0.797219
0	063	0.271651	0.430659	0.278351
0	064	0.264714	0.929807	0.749178
0	065	0.770589	0.940583	0.713446
0	066	0.768181	0.449966	0.221073
0	067	0.768171	0.553666	0.744512
0	068	0.763561	0.045558	0.230773
0	069	0.302176	0.129986	0.601676
0	070	0.228613	0.620484	0.117167
0	071	0.325069	0.374489	0.596175
0	072	0.206208	0.864650	0.069587
0	073	0.727151	0.859570	0.386063
0	074	0.808918	0.355296	0.894795
0	075	0.721319	0.620644	0.423585
0	076	0.820354	0.114453	0.913478
0	077	0.218444	0.038100	0.535340
0	078	0.315389	0.535277	0.042684
0	079	0.219642	0.430051	0.510161
0	080	0.316299	0.920879	0.997095
0	081	0.812880	0.949499	0.450803
0	082	0.722180	0.445260	0.958824
0	083	0.821822	0.554575	0.506469
0	084	0.714854	0.055899	0.992834
0	085	0.331164	0.001451	0.615262
0	086	0.208059	0.489239	0.129372
0	087	0.302551	0.503896	0.612201
0	088	0.231979	0.994081	0.096312
0	089	0.698866	0.989972	0.380150
0	090	0.834596	0.484714	0.880266
0	091	0.733231	0.489717	0.402088
0	092	0.801034	0.984350	0.893380
0	093	0.126759	0.126794	0.582343
0	094	0.406103	0.619260	0.109275
0	095	0.123340	0.361882	0.594363
0	096	0.415846	0.853016	0.072049
0	097	0.902196	0.858135	0.403477
0	098	0.630802	0.356430	0.911275

0	099	0.915070	0.629111	0.425547
0	0100	0.615807	0.123543	0.913166
0	0101	0.119291	0.063852	0.410249
0	0102	0.420832	0.561483	0.933739
0	0103	0.096680	0.441348	0.445013
0	0104	0.437751	0.941024	0.931953
0	0105	0.911306	0.921592	0.574367
0	0106	0.623474	0.418746	0.083800
0	0107	0.945306	0.542655	0.565226
0	0108	0.593430	0.041873	0.061003
0	0109	0.139124	0.037453	0.218326
0	0110	0.395130	0.540271	0.740980
0	0111	0.141676	0.420487	0.262369
0	0112	0.395598	0.927558	0.745584
0	0113	0.895000	0.949488	0.766449
0	0114	0.644077	0.445890	0.275255
0	0115	0.898729	0.557742	0.749043
0	0116	0.634236	0.061181	0.247048
0	0117	0.099996	0.942266	0.341569
0	0118	0.436669	0.441787	0.855903
0	0119	0.110609	0.542517	0.320047
0	0120	0.431020	0.045561	0.813506
0	0121	0.938757	0.041614	0.642696
0	0122	0.602032	0.539855	0.152070
0	0123	0.933146	0.438630	0.684275
0	0124	0.610274	0.939790	0.183340
0	0125	0.223106	0.121548	0.139548
0	0126	0.315318	0.627958	0.662939
0	0127	0.218406	0.356453	0.138656
0	0128	0.328646	0.868542	0.606036
0	0129	0.819981	0.858304	0.848689
0	0130	0.728563	0.362509	0.355851
0	0131	0.830926	0.617793	0.887166
0	0132	0.712728	0.122731	0.370589
0	0133	0.515347	0.850216	0.202982
0	0134	0.023984	0.347034	0.721484
0	0135	0.516677	0.630826	0.214060
0	0136	0.024233	0.132631	0.705695
0	0137	0.522089	0.137309	0.775880
0	0138	0.013333	0.630071	0.295099
0	0139	0.525196	0.353192	0.794018
0	0140	0.008827	0.854678	0.289357
0	0141	0.397439	0.823335	0.264161
0	0142	0.145786	0.325229	0.780548

0	0143	0.403410	0.671016	0.292659
0	0144	0.142456	0.153605	0.775886
0	0145	0.646306	0.151715	0.726256
0	0146	0.893211	0.651320	0.234142
0	0147	0.641664	0.330244	0.717395
0	0148	0.893123	0.821115	0.214156
0	0149	0.457383	0.738281	0.142981
0	0150	0.089699	0.242083	0.653358
0	0151	0.589557	0.241969	0.841427
0	0152	0.951235	0.742569	0.346076
0	0153	0.331279	0.813660	0.426459
0	0154	0.211735	0.337766	0.945570
0	0155	0.336872	0.639784	0.469762
0	0156	0.204436	0.136995	0.946293
0	0157	0.712765	0.153111	0.561804
0	0158	0.824762	0.661693	0.072695
0	0159	0.705469	0.346899	0.548726
0	0160	0.832672	0.845127	0.043598
0	0161	0.256763	0.854662	0.249996
0	0162	0.273663	0.354432	0.774239
0	0163	0.258687	0.668885	0.296218
0	0164	0.273398	0.165673	0.787828
0	0165	0.774844	0.126274	0.729957
0	0166	0.765344	0.624026	0.238626
0	0167	0.772841	0.321715	0.710715
0	0168	0.761708	0.823685	0.202354
0	0169	0.294990	0.743363	0.581288
0	0170	0.242754	0.238163	0.063035
0	0171	0.741166	0.244696	0.430515
0	0172	0.797483	0.742322	0.926168
0	0173	0.216194	0.839207	0.513331
0	0174	0.327755	0.337094	0.033718
0	0175	0.213926	0.641589	0.534524
0	0176	0.325250	0.139091	0.018911
0	0177	0.825306	0.145460	0.463517
0	0178	0.715481	0.642738	0.969874
0	0179	0.826846	0.340096	0.481658
0	0180	0.714251	0.842427	0.961145
0	0181	0.132792	0.742678	0.566072
0	0182	0.408836	0.235116	0.072556
0	0183	0.910384	0.244713	0.427175
0	0184	0.631265	0.741655	0.930893
0	0185	0.103729	0.821798	0.416212
0	0186	0.438969	0.321632	0.933404

O	O187	0.103419	0.650737	0.431488
O	O188	0.435731	0.157260	0.919094
O	O189	0.931149	0.163752	0.575490
O	O190	0.610530	0.662283	0.083676
O	O191	0.941278	0.329404	0.572783
O	O192	0.605344	0.833097	0.066361
O	O193	0.128694	0.838589	0.223110
O	O194	0.401076	0.337775	0.746029
O	O195	0.133665	0.660250	0.239678
O	O196	0.398084	0.159619	0.729840
O	O197	0.901723	0.139843	0.764499
O	O198	0.638597	0.638614	0.273640
O	O199	0.899210	0.322371	0.759669
O	O200	0.636496	0.820297	0.256438
O	O201	0.211152	0.747408	0.152674
O	O202	0.318275	0.253316	0.661419
O	O203	0.818919	0.231646	0.833148
O	O204	0.721146	0.734076	0.331392
Al	Al205	0.327524	0.864609	0.316568
Al	Al206	0.330707	0.629892	0.327716
Si	Si207	0.711737	0.654673	0.315526
Si	Si208	0.436712	0.043800	0.172971
Si	Si209	0.098350	0.551993	0.684786
Si	Si210	0.448856	0.430405	0.175691
Si	Si211	0.088760	0.938034	0.656293
Si	Si212	0.595435	0.933302	0.816888
Si	Si213	0.941126	0.438019	0.323125
Si	Si214	0.590063	0.546478	0.840730
Si	Si215	0.946243	0.048436	0.330519
Si	Si216	0.332732	0.024180	0.333300
Si	Si217	0.199725	0.523861	0.844922
Si	Si218	0.336647	0.466997	0.322988
Si	Si219	0.204756	0.968031	0.804791
Si	Si220	0.701572	0.957962	0.659263
Si	Si221	0.836740	0.461973	0.162471
Si	Si222	0.705859	0.518681	0.690746
Si	Si223	0.830419	0.015891	0.183010
Si	Si224	0.295699	0.058097	0.547345
Si	Si225	0.237862	0.549466	0.063241
Si	Si226	0.296523	0.439163	0.539720
Si	Si227	0.238492	0.930949	0.022204
Si	Si228	0.735376	0.930861	0.441045
Si	Si229	0.799794	0.427413	0.947062
Si	Si230	0.744416	0.551937	0.476449

Si	Si231	0.792391	0.047858	0.966290
Si	Si232	0.141085	0.056848	0.525516
Si	Si233	0.393310	0.551357	0.046326
Si	Si234	0.142705	0.431678	0.541843
Si	Si235	0.392933	0.924938	0.028197
Si	Si236	0.889911	0.928986	0.458907
Si	Si237	0.644879	0.426268	0.968317
Si	Si238	0.897950	0.556215	0.470898
Si	Si239	0.637702	0.053378	0.962865
Si	Si240	0.094451	0.021085	0.314362
Si	Si241	0.442214	0.521113	0.834095
Si	Si242	0.091526	0.464049	0.329361
Si	Si243	0.446210	0.966255	0.818277
Si	Si244	0.939853	0.962591	0.669264
Si	Si245	0.598186	0.460897	0.179885
Si	Si246	0.950147	0.517623	0.679675
Si	Si247	0.586868	0.017369	0.175397
Si	Si248	0.214789	0.046746	0.183614
Si	Si249	0.320481	0.551367	0.705059
Si	Si250	0.210590	0.424674	0.201901
Si	Si251	0.329506	0.932879	0.678991
Si	Si252	0.821492	0.933683	0.805193
Si	Si253	0.718858	0.437363	0.313422
Si	Si254	0.832561	0.553038	0.815516
Si	Si255	0.702923	0.054705	0.307596
Si	Si256	0.446196	0.816632	0.168816
Si	Si257	0.095555	0.319093	0.687611
Si	Si258	0.445699	0.664436	0.190022
Si	Si259	0.095865	0.163509	0.679262
Si	Si260	0.593347	0.163541	0.813988
Si	Si261	0.943526	0.663563	0.324997
Si	Si262	0.596720	0.320365	0.816002
Si	Si263	0.939077	0.819273	0.313074
Si	Si264	0.205117	0.365295	0.833924
Si	Si265	0.208940	0.125754	0.827325
Si	Si266	0.706837	0.117067	0.668399
Si	Si267	0.832623	0.619242	0.173892
Si	Si268	0.708227	0.359526	0.667717
Si	Si269	0.830030	0.856583	0.162714
Si	Si270	0.292283	0.817784	0.531465
Si	Si271	0.250458	0.317280	0.045753
Si	Si272	0.286381	0.664785	0.566607
Si	Si273	0.248955	0.159266	0.041292
Si	Si274	0.748126	0.166266	0.456208

Si	Si275	0.792127	0.665904	0.963345
Si	Si276	0.750462	0.323011	0.455135
Si	Si277	0.791146	0.821585	0.946321
Si	Si278	0.138751	0.818530	0.524007
Si	Si279	0.404170	0.313122	0.041097
Si	Si280	0.135830	0.664310	0.538171
Si	Si281	0.402364	0.159952	0.028313
Si	Si282	0.902249	0.167844	0.463357
Si	Si283	0.638751	0.665762	0.970833
Si	Si284	0.904051	0.320894	0.467159
Si	Si285	0.637370	0.820133	0.958639
Si	Si286	0.086002	0.864361	0.316437
Si	Si287	0.450325	0.363614	0.832172
Si	Si288	0.090503	0.620894	0.321085
Si	Si289	0.446590	0.124838	0.809993
Si	Si290	0.948876	0.119285	0.672508
Si	Si291	0.592130	0.617794	0.180692
Si	Si292	0.949206	0.359342	0.684072
Si	Si293	0.592136	0.861150	0.176739
Si	Si294	0.201877	0.826403	0.176218
Si	Si295	0.329240	0.329719	0.695670
Si	Si296	0.208900	0.674142	0.202943
Si	Si297	0.323494	0.175969	0.694808
Si	Si298	0.828945	0.153318	0.809180
Si	Si299	0.825285	0.308705	0.799713
Si	Si300	0.711682	0.810171	0.294250
Zn	Zn301	0.428825	0.776412	0.393807

TS-C₄H₇Zn-HTransfer-Concerted-Zn²⁺ (Fig. 8/TS2 in Black)

Total energy = -1917.72399419 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.514447	0.797869	0.484508
H	H2	0.404285	0.646597	0.512068
H	H3	0.537739	0.724321	0.417047
H	H4	0.442014	0.656927	0.538995
H	H5	0.510484	0.679305	0.753696
H	H6	0.466889	0.753478	0.802163
H	H7	0.438681	0.787890	0.633360
H	H8	0.525754	0.667306	0.572401
C	C9	0.500818	0.746496	0.465761
C	C10	0.482273	0.724033	0.738650
C	C11	0.467453	0.742985	0.645767
C	C12	0.491479	0.708037	0.557538
O	O13	0.513553	0.026546	0.207428
O	O14	0.022198	0.535490	0.715455
O	O15	0.524220	0.439364	0.207351
O	O16	0.015385	0.938032	0.694570
O	O17	0.523122	0.952320	0.780939
O	O18	0.015876	0.454376	0.287348
O	O19	0.514368	0.544788	0.798701
O	O20	0.022532	0.042283	0.286472
O	O21	0.394626	0.058152	0.270411
O	O22	0.141438	0.560872	0.781487
O	O23	0.400529	0.431011	0.264697
O	O24	0.138478	0.943875	0.750366
O	O25	0.642528	0.926761	0.717054
O	O26	0.897691	0.430033	0.217688
O	O27	0.636090	0.538387	0.738946
O	O28	0.897007	0.046370	0.238752
O	O29	0.441515	0.112545	0.105864
O	O30	0.098797	0.622542	0.621403
O	O31	0.443622	0.360996	0.110037
O	O32	0.103333	0.867164	0.597969
O	O33	0.598183	0.865985	0.877012
O	O34	0.937839	0.370221	0.381377
O	O35	0.601525	0.619005	0.887495
O	O36	0.943614	0.120795	0.386753
O	O37	0.407394	0.984494	0.109198
O	O38	0.127118	0.493057	0.615221
O	O39	0.432927	0.492604	0.094690
O	O40	0.100903	0.998491	0.578662
O	O41	0.627764	0.995844	0.882067
O	O42	0.908724	0.500020	0.381436

0	043	0.602081	0.487571	0.915630
0	044	0.935507	0.989096	0.407855
0	045	0.332970	0.063026	0.440378
0	046	0.200397	0.552435	0.952955
0	047	0.339503	0.446103	0.435728
0	048	0.201594	0.945183	0.919679
0	049	0.704528	0.925722	0.548333
0	050	0.833430	0.426132	0.050601
0	051	0.700551	0.543714	0.571183
0	052	0.836253	0.038857	0.066789
0	053	0.348120	0.945636	0.350745
0	054	0.185513	0.443335	0.840056
0	055	0.340398	0.545384	0.305366
0	056	0.214058	0.047392	0.796781
0	057	0.692707	0.039863	0.647937
0	058	0.847411	0.542129	0.143283
0	059	0.715010	0.438137	0.688087
0	060	0.831557	0.936430	0.190475
0	061	0.265693	0.036136	0.278049
0	062	0.270551	0.536527	0.790766
0	063	0.270816	0.434360	0.271812
0	064	0.267772	0.931536	0.750855
0	065	0.772604	0.944730	0.712108
0	066	0.767957	0.450343	0.216428
0	067	0.764883	0.554480	0.741938
0	068	0.766966	0.047772	0.231509
0	069	0.305988	0.130008	0.602459
0	070	0.227337	0.620825	0.114303
0	071	0.316473	0.370547	0.589352
0	072	0.212491	0.863497	0.069070
0	073	0.729685	0.858654	0.386068
0	074	0.809230	0.356237	0.889598
0	075	0.718934	0.619646	0.416651
0	076	0.822539	0.116229	0.913045
0	077	0.221317	0.038647	0.536882
0	078	0.314888	0.535038	0.043012
0	079	0.217267	0.435143	0.503414
0	080	0.319363	0.923837	0.993870
0	081	0.815249	0.949585	0.448992
0	082	0.721678	0.445278	0.953904
0	083	0.821033	0.556394	0.501057
0	084	0.717128	0.057072	0.992291
0	085	0.334237	0.001022	0.614885
0	086	0.205047	0.489350	0.122571

0	087	0.305706	0.501487	0.606887
0	088	0.234074	0.993575	0.096533
0	089	0.701021	0.988556	0.376827
0	090	0.833578	0.485992	0.875539
0	091	0.733561	0.488832	0.398433
0	092	0.803735	0.986006	0.893096
0	093	0.129477	0.127435	0.582985
0	094	0.404303	0.622136	0.105889
0	095	0.124402	0.362030	0.589606
0	096	0.416812	0.855225	0.073756
0	097	0.905539	0.859447	0.401323
0	098	0.629141	0.357719	0.906706
0	099	0.916150	0.629308	0.422608
0	0100	0.619136	0.126444	0.912967
0	0101	0.122215	0.063282	0.411665
0	0102	0.418941	0.563451	0.931353
0	0103	0.093852	0.441471	0.441315
0	0104	0.441369	0.939975	0.930263
0	0105	0.913258	0.922149	0.573310
0	0106	0.623268	0.419506	0.079880
0	0107	0.944113	0.541043	0.560813
0	0108	0.595330	0.043423	0.058877
0	0109	0.142094	0.036937	0.219769
0	0110	0.394639	0.540736	0.738619
0	0111	0.140992	0.421175	0.259346
0	0112	0.398426	0.925769	0.743954
0	0113	0.896941	0.949817	0.765546
0	0114	0.644072	0.445961	0.271411
0	0115	0.895581	0.559609	0.742525
0	0116	0.637294	0.061308	0.244777
0	0117	0.100790	0.942110	0.342070
0	0118	0.438136	0.443330	0.856024
0	0119	0.110593	0.543185	0.317479
0	0120	0.430898	0.044839	0.812016
0	0121	0.940815	0.042065	0.642019
0	0122	0.601358	0.540200	0.149343
0	0123	0.932596	0.439864	0.685058
0	0124	0.611968	0.940460	0.179288
0	0125	0.225699	0.120963	0.139999
0	0126	0.312174	0.626660	0.660581
0	0127	0.217186	0.356915	0.135508
0	0128	0.329195	0.867881	0.606294
0	0129	0.819515	0.860074	0.846531
0	0130	0.728711	0.362120	0.350955

0	0131	0.828647	0.619000	0.882521
0	0132	0.713533	0.121424	0.372978
0	0133	0.516964	0.851118	0.203382
0	0134	0.024463	0.348467	0.716943
0	0135	0.515227	0.630837	0.211213
0	0136	0.026094	0.133103	0.705139
0	0137	0.524182	0.134723	0.776701
0	0138	0.013916	0.630967	0.290966
0	0139	0.524060	0.353983	0.788682
0	0140	0.011283	0.853931	0.285165
0	0141	0.399457	0.823037	0.265699
0	0142	0.145942	0.325583	0.776299
0	0143	0.402480	0.673243	0.290587
0	0144	0.144244	0.157051	0.775743
0	0145	0.647651	0.152852	0.725104
0	0146	0.893188	0.651455	0.231919
0	0147	0.641243	0.330913	0.713300
0	0148	0.894535	0.822723	0.211934
0	0149	0.458264	0.739736	0.142194
0	0150	0.089577	0.242752	0.650010
0	0151	0.588201	0.242978	0.837215
0	0152	0.951444	0.743015	0.343168
0	0153	0.332958	0.811619	0.428051
0	0154	0.210602	0.334242	0.942743
0	0155	0.338890	0.644959	0.468680
0	0156	0.205613	0.136147	0.946740
0	0157	0.715424	0.156320	0.562405
0	0158	0.827008	0.662259	0.068704
0	0159	0.705181	0.345861	0.543981
0	0160	0.833575	0.846626	0.041538
0	0161	0.259495	0.855267	0.252047
0	0162	0.273692	0.356093	0.774113
0	0163	0.260475	0.664771	0.294831
0	0164	0.275619	0.162376	0.789082
0	0165	0.775788	0.124642	0.730250
0	0166	0.765123	0.624447	0.232807
0	0167	0.772572	0.321704	0.706428
0	0168	0.763067	0.825069	0.200697
0	0169	0.292990	0.742901	0.584109
0	0170	0.243907	0.237744	0.063599
0	0171	0.742811	0.244529	0.425694
0	0172	0.798456	0.743834	0.923840
0	0173	0.217252	0.840058	0.511642
0	0174	0.326674	0.338188	0.031405

O	O175	0.214041	0.641068	0.530182
O	O176	0.326921	0.139324	0.018153
O	O177	0.827056	0.145892	0.462684
O	O178	0.715495	0.645895	0.971652
O	O179	0.826923	0.341148	0.477532
O	O180	0.714785	0.842967	0.960754
O	O181	0.133772	0.742819	0.563496
O	O182	0.409345	0.237234	0.068142
O	O183	0.911256	0.245706	0.426140
O	O184	0.630544	0.743215	0.926306
O	O185	0.106162	0.820530	0.411764
O	O186	0.433913	0.320230	0.922237
O	O187	0.101846	0.650714	0.430621
O	O188	0.438781	0.154974	0.920764
O	O189	0.933309	0.164281	0.574067
O	O190	0.605839	0.661513	0.075767
O	O191	0.941525	0.332850	0.568602
O	O192	0.605899	0.832188	0.065584
O	O193	0.131831	0.841064	0.219691
O	O194	0.400337	0.345625	0.734995
O	O195	0.134882	0.661603	0.239673
O	O196	0.400535	0.160784	0.731968
O	O197	0.902944	0.140569	0.762527
O	O198	0.638177	0.641674	0.265421
O	O199	0.899409	0.322111	0.754707
O	O200	0.638083	0.821944	0.256035
O	O201	0.214645	0.747450	0.155381
O	O202	0.318853	0.253010	0.665995
O	O203	0.818952	0.232198	0.829181
O	O204	0.722344	0.734105	0.327487
Al	Al205	0.329861	0.864567	0.319819
Al	Al206	0.332090	0.628150	0.336327
Si	Si207	0.711379	0.655168	0.309264
Si	Si208	0.439255	0.045535	0.173220
Si	Si209	0.096916	0.552831	0.682545
Si	Si210	0.448973	0.431132	0.169776
Si	Si211	0.090509	0.936893	0.655257
Si	Si212	0.597605	0.935658	0.815378
Si	Si213	0.940659	0.438754	0.318118
Si	Si214	0.589887	0.546853	0.835955
Si	Si215	0.948907	0.049571	0.329899
Si	Si216	0.335525	0.023716	0.334540
Si	Si217	0.199414	0.523017	0.841679
Si	Si218	0.337552	0.466093	0.318563

Si	Si219	0.205511	0.967049	0.804723
Si	Si220	0.703420	0.959847	0.657136
Si	Si221	0.836575	0.462368	0.157801
Si	Si222	0.704484	0.518314	0.685157
Si	Si223	0.833017	0.017293	0.182274
Si	Si224	0.298655	0.058282	0.548072
Si	Si225	0.236955	0.550218	0.059848
Si	Si226	0.294660	0.438223	0.533522
Si	Si227	0.241531	0.931131	0.021455
Si	Si228	0.737906	0.930535	0.439532
Si	Si229	0.799459	0.428153	0.942111
Si	Si230	0.743799	0.552096	0.471013
Si	Si231	0.794775	0.049561	0.965815
Si	Si232	0.143927	0.057187	0.527093
Si	Si233	0.392243	0.553224	0.044530
Si	Si234	0.140861	0.432909	0.537449
Si	Si235	0.395610	0.926865	0.026785
Si	Si236	0.892527	0.929788	0.457609
Si	Si237	0.644328	0.427021	0.964367
Si	Si238	0.897493	0.556407	0.466378
Si	Si239	0.640145	0.055598	0.961480
Si	Si240	0.096988	0.021093	0.315493
Si	Si241	0.441038	0.522614	0.832365
Si	Si242	0.090666	0.464940	0.325754
Si	Si243	0.448183	0.965985	0.816538
Si	Si244	0.941891	0.962992	0.668383
Si	Si245	0.597797	0.461075	0.176490
Si	Si246	0.948701	0.518929	0.676612
Si	Si247	0.589289	0.018348	0.173087
Si	Si248	0.217514	0.046175	0.184133
Si	Si249	0.320073	0.550328	0.699611
Si	Si250	0.209291	0.425915	0.197231
Si	Si251	0.331493	0.932518	0.678672
Si	Si252	0.823114	0.935646	0.804025
Si	Si253	0.718960	0.437097	0.308959
Si	Si254	0.830385	0.554285	0.810874
Si	Si255	0.705317	0.054602	0.306907
Si	Si256	0.447602	0.818001	0.169341
Si	Si257	0.095943	0.319986	0.683200
Si	Si258	0.444642	0.665576	0.187154
Si	Si259	0.097496	0.164781	0.678600
Si	Si260	0.594632	0.164281	0.812856
Si	Si261	0.944215	0.663980	0.321935
Si	Si262	0.595548	0.321327	0.811271

Si	Si263	0.941080	0.819946	0.310270
Si	Si264	0.204387	0.364979	0.832775
Si	Si265	0.209165	0.125500	0.827447
Si	Si266	0.708096	0.118166	0.667149
Si	Si267	0.833321	0.619630	0.170042
Si	Si268	0.707994	0.359200	0.662806
Si	Si269	0.831347	0.858012	0.160774
Si	Si270	0.292418	0.816181	0.532667
Si	Si271	0.249741	0.316873	0.043878
Si	Si272	0.287929	0.663771	0.560342
Si	Si273	0.250486	0.158939	0.041277
Si	Si274	0.749908	0.166772	0.455433
Si	Si275	0.792442	0.667468	0.960924
Si	Si276	0.750872	0.322982	0.450502
Si	Si277	0.791819	0.822990	0.944565
Si	Si278	0.139896	0.818194	0.520653
Si	Si279	0.403223	0.314495	0.033381
Si	Si280	0.136809	0.664230	0.535909
Si	Si281	0.403783	0.160951	0.028477
Si	Si282	0.903921	0.168789	0.462229
Si	Si283	0.638494	0.667130	0.965987
Si	Si284	0.904343	0.322412	0.463497
Si	Si285	0.637885	0.821220	0.957195
Si	Si286	0.088249	0.864390	0.313514
Si	Si287	0.448909	0.365676	0.825308
Si	Si288	0.090891	0.621736	0.319407
Si	Si289	0.448391	0.123883	0.810750
Si	Si290	0.950807	0.119859	0.671328
Si	Si291	0.590407	0.618297	0.175298
Si	Si292	0.949439	0.360836	0.680927
Si	Si293	0.593598	0.861848	0.175489
Si	Si294	0.205692	0.826587	0.176583
Si	Si295	0.327114	0.331084	0.692334
Si	Si296	0.210659	0.673321	0.203123
Si	Si297	0.325577	0.175581	0.696913
Si	Si298	0.830215	0.153773	0.807470
Si	Si299	0.825454	0.309105	0.795042
Si	Si300	0.713422	0.810739	0.292740
Zn	Zn301	0.420149	0.760376	0.382956

C₄H₆-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 8/M3 in Black)

Total energy = -1919.54376110 eV

data_

```

_audit_creation_method    'Materials Studio'
_cell_length_a           20.357621
_cell_length_b           20.050598
_cell_length_c           13.476578
_cell_angle_alpha        90.000000
_cell_angle_beta         90.000000
_cell_angle_gamma        90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1          0.502188          0.816481          0.442811
  H      H2          0.476951          0.557901          0.489871
  H      H3          0.523462          0.732709          0.394306
  H      H4          0.475482          0.555195          0.544537
  H      H5          0.493884          0.691488          0.734769
  H      H6          0.478696          0.773685          0.793117
  H      H7          0.473482          0.826612          0.628603
  H      H8          0.501337          0.682170          0.555098
  C      C9          0.501256          0.762626          0.452812
  C      C10         0.484668          0.744540          0.725872
  C      C11         0.482254          0.773306          0.635467
  C      C12         0.494827          0.735793          0.546261
  O      O13         0.514807          0.029262          0.209267
  O      O14         0.021250          0.539057          0.714841
  O      O15         0.523182          0.439611          0.208274
  O      O16         0.016917          0.941380          0.702165
  O      O17         0.525533          0.950239          0.788369
  O      O18         0.014609          0.455647          0.285794
  O      O19         0.514657          0.548743          0.801558
  O      O20         0.023710          0.040722          0.288438
  O      O21         0.395683          0.059455          0.271544
  O      O22         0.141957          0.558268          0.775834
  O      O23         0.398225          0.429514          0.260216
  O      O24         0.140860          0.942724          0.755191
  O      O25         0.644041          0.927265          0.720183
  O      O26         0.895831          0.427042          0.220123
  O      O27         0.635249          0.535611          0.738899
  O      O28         0.898281          0.046275          0.242883
  O      O29         0.442839          0.116755          0.109433
  O      O30         0.100451          0.620418          0.614504

```

0	031	0.443918	0.364900	0.102461
0	032	0.100383	0.864496	0.607153
0	033	0.602610	0.865629	0.881463
0	034	0.939729	0.371062	0.384837
0	035	0.606084	0.619602	0.885892
0	036	0.946740	0.121286	0.388898
0	037	0.410018	0.988898	0.106545
0	038	0.121664	0.490062	0.611354
0	039	0.434351	0.496452	0.095714
0	040	0.103828	0.995187	0.581370
0	041	0.631095	0.995766	0.886210
0	042	0.907393	0.500315	0.379978
0	043	0.601382	0.488393	0.917297
0	044	0.937066	0.989944	0.412762
0	045	0.336744	0.059692	0.444463
0	046	0.205550	0.543639	0.941919
0	047	0.337996	0.430695	0.434089
0	048	0.202378	0.947794	0.926445
0	049	0.705464	0.925033	0.551004
0	050	0.832908	0.427093	0.051776
0	051	0.699892	0.543116	0.572007
0	052	0.838629	0.037744	0.070077
0	053	0.349088	0.945528	0.345710
0	054	0.196571	0.441497	0.815213
0	055	0.344583	0.541566	0.326995
0	056	0.215244	0.047739	0.798026
0	057	0.694792	0.039730	0.648756
0	058	0.848911	0.541444	0.148829
0	059	0.717148	0.437802	0.688828
0	060	0.832801	0.936266	0.195513
0	061	0.266727	0.040245	0.282810
0	062	0.271768	0.545125	0.774642
0	063	0.268571	0.440162	0.271238
0	064	0.270498	0.932032	0.760566
0	065	0.774071	0.944755	0.714489
0	066	0.766462	0.450727	0.216760
0	067	0.763567	0.555393	0.743637
0	068	0.768474	0.048199	0.233939
0	069	0.305423	0.130065	0.601973
0	070	0.219777	0.621278	0.095721
0	071	0.307304	0.366680	0.597232
0	072	0.213405	0.865323	0.075581
0	073	0.733173	0.858318	0.389253
0	074	0.809168	0.357416	0.890384

0	075	0.718799	0.618885	0.417070
0	076	0.825434	0.116817	0.917822
0	077	0.223052	0.036897	0.536328
0	078	0.315115	0.536280	0.048316
0	079	0.215562	0.435153	0.502855
0	080	0.320498	0.924357	0.999435
0	081	0.817190	0.949964	0.455453
0	082	0.721009	0.445829	0.955304
0	083	0.820040	0.554743	0.501590
0	084	0.719584	0.058024	0.997027
0	085	0.334822	0.002720	0.622817
0	086	0.203274	0.489264	0.117860
0	087	0.310204	0.498750	0.597958
0	088	0.236545	0.995333	0.102679
0	089	0.703480	0.987643	0.379026
0	090	0.832747	0.487244	0.877176
0	091	0.731472	0.488050	0.399011
0	092	0.804692	0.987104	0.895352
0	093	0.131000	0.124513	0.587925
0	094	0.406020	0.625132	0.100638
0	095	0.124638	0.359127	0.589147
0	096	0.413714	0.857216	0.092565
0	097	0.906973	0.860205	0.405196
0	098	0.629026	0.358261	0.906865
0	099	0.915719	0.628768	0.427053
0	0100	0.622478	0.126620	0.914460
0	0101	0.121932	0.062559	0.415667
0	0102	0.415246	0.563275	0.928021
0	0103	0.092590	0.436163	0.438366
0	0104	0.443779	0.929369	0.937174
0	0105	0.916610	0.921651	0.577596
0	0106	0.622141	0.418851	0.080378
0	0107	0.942768	0.536893	0.560905
0	0108	0.597379	0.044890	0.061646
0	0109	0.143532	0.040261	0.223111
0	0110	0.397303	0.534451	0.734825
0	0111	0.139295	0.422436	0.255613
0	0112	0.401164	0.928487	0.750221
0	0113	0.897848	0.947639	0.770070
0	0114	0.643076	0.441457	0.272893
0	0115	0.894258	0.559281	0.741735
0	0116	0.638931	0.060906	0.248348
0	0117	0.104470	0.942118	0.341798
0	0118	0.443879	0.443592	0.860111

0	0119	0.110217	0.542585	0.323577
0	0120	0.436626	0.042059	0.836890
0	0121	0.938610	0.042060	0.647132
0	0122	0.603548	0.538824	0.153862
0	0123	0.935066	0.439243	0.691614
0	0124	0.611439	0.941019	0.180766
0	0125	0.226956	0.123831	0.141776
0	0126	0.328189	0.624915	0.642232
0	0127	0.219239	0.357064	0.139548
0	0128	0.331376	0.870214	0.614784
0	0129	0.817478	0.860465	0.851398
0	0130	0.731065	0.361169	0.351832
0	0131	0.829161	0.620203	0.882311
0	0132	0.715090	0.120492	0.377319
0	0133	0.517960	0.851236	0.213738
0	0134	0.026266	0.346720	0.719998
0	0135	0.515751	0.629111	0.211247
0	0136	0.026525	0.130995	0.708069
0	0137	0.525321	0.133044	0.781893
0	0138	0.014959	0.631481	0.298665
0	0139	0.525194	0.352014	0.787136
0	0140	0.013752	0.853212	0.291784
0	0141	0.401157	0.817187	0.280179
0	0142	0.148366	0.322749	0.775832
0	0143	0.402302	0.669400	0.287563
0	0144	0.143934	0.156640	0.779547
0	0145	0.647564	0.151792	0.724881
0	0146	0.894425	0.651415	0.236251
0	0147	0.643296	0.330329	0.714290
0	0148	0.897599	0.823331	0.215853
0	0149	0.461117	0.740671	0.147212
0	0150	0.089587	0.240496	0.651077
0	0151	0.590066	0.242378	0.838154
0	0152	0.951650	0.743002	0.348977
0	0153	0.331024	0.814619	0.438028
0	0154	0.206688	0.343322	0.947180
0	0155	0.337390	0.664797	0.453253
0	0156	0.207341	0.135568	0.947903
0	0157	0.719574	0.156752	0.566276
0	0158	0.830821	0.660548	0.070323
0	0159	0.706833	0.345580	0.544852
0	0160	0.836768	0.847192	0.045634
0	0161	0.262028	0.849002	0.256727
0	0162	0.278398	0.340392	0.785618

0	0163	0.260062	0.653596	0.277832
0	0164	0.275253	0.164085	0.787801
0	0165	0.775693	0.124072	0.737063
0	0166	0.765961	0.625659	0.233503
0	0167	0.774607	0.321374	0.707018
0	0168	0.766098	0.823788	0.204260
0	0169	0.293781	0.745487	0.594175
0	0170	0.242865	0.240160	0.057888
0	0171	0.744898	0.243973	0.427467
0	0172	0.799893	0.744230	0.929182
0	0173	0.216943	0.843933	0.525902
0	0174	0.325750	0.340675	0.027876
0	0175	0.219285	0.641818	0.535519
0	0176	0.328029	0.141642	0.020544
0	0177	0.829727	0.145738	0.462938
0	0178	0.717733	0.645774	0.977324
0	0179	0.828721	0.340853	0.479519
0	0180	0.716231	0.842209	0.973367
0	0181	0.136734	0.742144	0.567567
0	0182	0.408613	0.240836	0.069963
0	0183	0.913990	0.246102	0.428974
0	0184	0.632991	0.743159	0.931153
0	0185	0.108923	0.822377	0.418852
0	0186	0.431875	0.319390	0.917459
0	0187	0.111197	0.654817	0.426046
0	0188	0.439685	0.159650	0.923497
0	0189	0.934963	0.163973	0.576394
0	0190	0.605781	0.659016	0.075751
0	0191	0.942773	0.333417	0.572042
0	0192	0.603699	0.831404	0.070350
0	0193	0.133814	0.837900	0.225584
0	0194	0.402124	0.352784	0.730718
0	0195	0.133212	0.657744	0.231878
0	0196	0.400510	0.147928	0.735101
0	0197	0.903292	0.142676	0.764808
0	0198	0.638696	0.642776	0.265783
0	0199	0.900871	0.321244	0.758316
0	0200	0.640671	0.823791	0.259285
0	0201	0.214126	0.745831	0.152361
0	0202	0.332529	0.249468	0.666991
0	0203	0.818743	0.232807	0.833247
0	0204	0.722791	0.734089	0.330746
Al	Al205	0.331535	0.862953	0.325219
Al	Al206	0.330827	0.625531	0.333353

Si	Si207	0.711914	0.655396	0.310395
Si	Si208	0.440716	0.048520	0.174290
Si	Si209	0.096052	0.551946	0.678205
Si	Si210	0.448476	0.432773	0.167572
Si	Si211	0.091526	0.936053	0.661546
Si	Si212	0.600804	0.935287	0.820334
Si	Si213	0.940074	0.438474	0.318770
Si	Si214	0.590621	0.547574	0.836658
Si	Si215	0.950665	0.049501	0.333272
Si	Si216	0.337140	0.024147	0.335670
Si	Si217	0.204048	0.521642	0.827509
Si	Si218	0.337449	0.462267	0.322383
Si	Si219	0.206965	0.967596	0.810659
Si	Si220	0.704907	0.959738	0.659445
Si	Si221	0.835971	0.461803	0.160054
Si	Si222	0.704396	0.517712	0.685884
Si	Si223	0.834622	0.017054	0.185900
Si	Si224	0.299948	0.057286	0.550425
Si	Si225	0.235941	0.548358	0.052281
Si	Si226	0.293027	0.432876	0.532752
Si	Si227	0.242839	0.932666	0.027668
Si	Si228	0.740192	0.930189	0.443100
Si	Si229	0.798871	0.429103	0.943355
Si	Si230	0.742801	0.551122	0.471541
Si	Si231	0.797030	0.049994	0.969598
Si	Si232	0.145398	0.055027	0.530056
Si	Si233	0.392176	0.555045	0.043187
Si	Si234	0.139019	0.430016	0.535521
Si	Si235	0.396499	0.925834	0.034350
Si	Si236	0.894604	0.930215	0.462505
Si	Si237	0.643616	0.427445	0.965212
Si	Si238	0.896498	0.555045	0.467328
Si	Si239	0.642888	0.056224	0.964779
Si	Si240	0.098538	0.021242	0.317685
Si	Si241	0.442153	0.522249	0.832019
Si	Si242	0.089480	0.464377	0.325227
Si	Si243	0.451376	0.962973	0.828033
Si	Si244	0.942821	0.963112	0.673700
Si	Si245	0.597481	0.459489	0.178320
Si	Si246	0.948362	0.518479	0.677979
Si	Si247	0.590433	0.019383	0.175565
Si	Si248	0.219065	0.049389	0.187900
Si	Si249	0.325957	0.549904	0.687380
Si	Si250	0.208371	0.427697	0.195945

Si	Si251	0.333482	0.934536	0.687245
Si	Si252	0.823492	0.935486	0.807686
Si	Si253	0.718405	0.435661	0.309872
Si	Si254	0.829645	0.555060	0.811443
Si	Si255	0.707094	0.054170	0.310033
Si	Si256	0.448240	0.817149	0.182599
Si	Si257	0.097117	0.317724	0.684003
Si	Si258	0.446105	0.665379	0.185818
Si	Si259	0.097838	0.162887	0.681574
Si	Si260	0.596123	0.163546	0.814685
Si	Si261	0.944745	0.663969	0.327334
Si	Si262	0.596919	0.320659	0.811448
Si	Si263	0.943015	0.820022	0.315356
Si	Si264	0.207523	0.362177	0.830706
Si	Si265	0.210055	0.125860	0.828553
Si	Si266	0.709681	0.117890	0.669935
Si	Si267	0.835112	0.619349	0.173253
Si	Si268	0.709903	0.358861	0.663665
Si	Si269	0.833985	0.857954	0.165044
Si	Si270	0.292064	0.819169	0.543981
Si	Si271	0.248868	0.319839	0.043231
Si	Si272	0.293884	0.668577	0.555418
Si	Si273	0.251313	0.160808	0.041775
Si	Si274	0.752479	0.166415	0.458005
Si	Si275	0.794489	0.667379	0.964082
Si	Si276	0.752853	0.322471	0.451874
Si	Si277	0.792860	0.823171	0.951060
Si	Si278	0.140325	0.818635	0.529111
Si	Si279	0.402273	0.316862	0.029711
Si	Si280	0.141832	0.664402	0.535403
Si	Si281	0.404556	0.164273	0.031374
Si	Si282	0.906461	0.169019	0.464099
Si	Si283	0.640784	0.666503	0.968065
Si	Si284	0.906318	0.322754	0.466424
Si	Si285	0.639421	0.820716	0.964324
Si	Si286	0.090939	0.863841	0.318485
Si	Si287	0.450652	0.366588	0.823788
Si	Si288	0.092851	0.621722	0.319767
Si	Si289	0.450382	0.120927	0.819287
Si	Si290	0.950876	0.119837	0.674466
Si	Si291	0.591297	0.617064	0.176586
Si	Si292	0.951156	0.360173	0.684983
Si	Si293	0.593733	0.862248	0.180383
Si	Si294	0.207176	0.824332	0.179943

Si	Si295	0.329976	0.327416	0.695630
Si	Si296	0.208212	0.669571	0.191577
Si	Si297	0.328469	0.172073	0.698310
Si	Si298	0.830939	0.154449	0.811912
Si	Si299	0.826367	0.309308	0.797339
Si	Si300	0.715745	0.810869	0.295881
Zn	Zn301	0.400463	0.743506	0.397930

C₆H₁₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M1 in Black) Total energy = -1951.88807087 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.433838	0.775923	0.655729
H	H2	0.509410	0.817863	0.662741
H	H3	0.464873	0.729566	0.491596
H	H4	0.470155	0.820622	0.490032
H	H5	0.590480	0.811908	0.506972
H	H6	0.565191	0.765194	0.403090
H	H7	0.647119	0.702879	0.508124
H	H8	0.571999	0.660047	0.499259
H	H9	0.618166	0.746280	0.673933
H	H10	0.611768	0.658839	0.672123
H	H11	0.515289	0.712140	0.758481
H	H12	0.490509	0.665966	0.654064
C	C13	0.485443	0.772905	0.633522
C	C14	0.492088	0.774893	0.519973
C	C15	0.563231	0.767108	0.484374
C	C16	0.595465	0.705134	0.529720
C	C17	0.589684	0.704508	0.643154
C	C18	0.518056	0.710553	0.677273
O	O19	0.513070	0.028092	0.212389

0	020	0.019741	0.539141	0.717301
0	021	0.524671	0.438114	0.214866
0	022	0.010019	0.936002	0.698948
0	023	0.516460	0.933571	0.793162
0	024	0.017532	0.455198	0.291734
0	025	0.516190	0.548445	0.803992
0	026	0.019609	0.038310	0.286355
0	027	0.394607	0.061842	0.277427
0	028	0.139014	0.552106	0.785266
0	029	0.400995	0.424601	0.273564
0	030	0.129487	0.954252	0.768914
0	031	0.630644	0.942375	0.707592
0	032	0.899728	0.427897	0.219386
0	033	0.634257	0.529540	0.733981
0	034	0.893957	0.054476	0.238794
0	035	0.440854	0.114160	0.110763
0	036	0.102938	0.620179	0.624989
0	037	0.445000	0.361624	0.113222
0	038	0.107286	0.863826	0.628549
0	039	0.615326	0.858871	0.856509
0	040	0.940291	0.369743	0.384509
0	041	0.613733	0.616217	0.880940
0	042	0.945511	0.118716	0.392563
0	043	0.405545	0.986772	0.117041
0	044	0.120657	0.489535	0.615191
0	045	0.431148	0.492764	0.108095
0	046	0.099622	0.992724	0.584748
0	047	0.617559	0.989293	0.890759
0	048	0.908653	0.499172	0.381621
0	049	0.603221	0.486128	0.915529
0	050	0.928803	0.987481	0.402291
0	051	0.332484	0.061583	0.448983
0	052	0.204503	0.536188	0.949343
0	053	0.340283	0.428453	0.447633
0	054	0.197850	0.943395	0.932566
0	055	0.702301	0.921104	0.550925
0	056	0.835813	0.427420	0.051234
0	057	0.699600	0.548937	0.568583
0	058	0.832933	0.046323	0.065547
0	059	0.350942	0.947381	0.352931
0	060	0.205948	0.439750	0.812806
0	061	0.349340	0.537943	0.338279
0	062	0.217810	0.047503	0.812879
0	063	0.703492	0.040607	0.635373

0	064	0.855650	0.542265	0.144090
0	065	0.720727	0.438560	0.674211
0	066	0.850930	0.938004	0.175434
0	067	0.265878	0.037707	0.285266
0	068	0.269033	0.552434	0.780475
0	069	0.271241	0.437962	0.284295
0	070	0.257727	0.929434	0.757520
0	071	0.761374	0.939121	0.723435
0	072	0.770897	0.455471	0.216777
0	073	0.761504	0.554867	0.742126
0	074	0.765315	0.030392	0.230196
0	075	0.298562	0.130011	0.607250
0	076	0.218705	0.621458	0.095422
0	077	0.306087	0.361342	0.606529
0	078	0.207357	0.866049	0.088031
0	079	0.718246	0.859888	0.382309
0	080	0.808501	0.355627	0.892603
0	081	0.725690	0.623765	0.412636
0	082	0.808777	0.115442	0.905027
0	083	0.216850	0.038329	0.534691
0	084	0.316424	0.538459	0.048644
0	085	0.216970	0.433760	0.512159
0	086	0.314910	0.923777	0.010396
0	087	0.811026	0.943500	0.446647
0	088	0.721356	0.443320	0.961304
0	089	0.820898	0.553673	0.501928
0	090	0.711648	0.050034	0.993571
0	091	0.326116	0.001830	0.625354
0	092	0.208625	0.490874	0.131061
0	093	0.310547	0.493589	0.613843
0	094	0.228603	0.997240	0.105825
0	095	0.697176	0.991752	0.386063
0	096	0.830598	0.484410	0.873616
0	097	0.729671	0.492312	0.396347
0	098	0.803126	0.983557	0.898103
0	099	0.125445	0.123025	0.595925
0	0100	0.408369	0.622422	0.111310
0	0101	0.127130	0.357738	0.599427
0	0102	0.406760	0.855069	0.103702
0	0103	0.904406	0.856775	0.400755
0	0104	0.630692	0.356115	0.905090
0	0105	0.912558	0.629254	0.420144
0	0106	0.620188	0.121573	0.901759
0	0107	0.111772	0.064154	0.422048

0	0108	0.422561	0.561455	0.939738
0	0109	0.094395	0.431445	0.444965
0	0110	0.438011	0.926312	0.947676
0	0111	0.911025	0.921775	0.570356
0	0112	0.618648	0.415956	0.078941
0	0113	0.944868	0.542973	0.559218
0	0114	0.590152	0.049877	0.059950
0	0115	0.141538	0.047495	0.231072
0	0116	0.395518	0.534346	0.749084
0	0117	0.142093	0.421640	0.262683
0	0118	0.388483	0.935641	0.765672
0	0119	0.889085	0.950975	0.759638
0	0120	0.646909	0.439164	0.268738
0	0121	0.892127	0.557187	0.738717
0	0122	0.638312	0.060948	0.243918
0	0123	0.106141	0.944398	0.341797
0	0124	0.448448	0.442750	0.866938
0	0125	0.113683	0.540463	0.336203
0	0126	0.448330	0.039338	0.850994
0	0127	0.940561	0.041129	0.639065
0	0128	0.603227	0.536495	0.152906
0	0129	0.935437	0.439886	0.679945
0	0130	0.610948	0.942647	0.172479
0	0131	0.228755	0.125800	0.148833
0	0132	0.331382	0.622038	0.642926
0	0133	0.223761	0.358191	0.147449
0	0134	0.330306	0.869733	0.623502
0	0135	0.819120	0.858235	0.849464
0	0136	0.737819	0.365007	0.351211
0	0137	0.828461	0.616710	0.881172
0	0138	0.723083	0.121475	0.358592
0	0139	0.519711	0.851866	0.205347
0	0140	0.025313	0.348304	0.723814
0	0141	0.520448	0.629936	0.216343
0	0142	0.021587	0.132037	0.715643
0	0143	0.519715	0.139035	0.776831
0	0144	0.018728	0.628206	0.305027
0	0145	0.525002	0.348381	0.788804
0	0146	0.015606	0.854956	0.296331
0	0147	0.407075	0.818178	0.291747
0	0148	0.145243	0.324388	0.788593
0	0149	0.406639	0.666843	0.296482
0	0150	0.139009	0.151564	0.788727
0	0151	0.640262	0.145266	0.709922

0	0152	0.903299	0.652453	0.227500
0	0153	0.642078	0.335427	0.709947
0	0154	0.903233	0.820580	0.211148
0	0155	0.460484	0.739726	0.154116
0	0156	0.089288	0.240089	0.662890
0	0157	0.596855	0.240627	0.829792
0	0158	0.956941	0.742078	0.347395
0	0159	0.332334	0.816030	0.444441
0	0160	0.208094	0.347305	0.955471
0	0161	0.336449	0.664316	0.455710
0	0162	0.204421	0.138647	0.956031
0	0163	0.710078	0.157188	0.547910
0	0164	0.836296	0.661576	0.065573
0	0165	0.707737	0.340496	0.541282
0	0166	0.840821	0.840022	0.041597
0	0167	0.268413	0.847513	0.259415
0	0168	0.276458	0.329748	0.792635
0	0169	0.266178	0.648629	0.275282
0	0170	0.269447	0.166894	0.791814
0	0171	0.770883	0.137825	0.719204
0	0172	0.774494	0.626783	0.231088
0	0173	0.772610	0.320996	0.708654
0	0174	0.772678	0.834841	0.206643
0	0175	0.296348	0.744405	0.598760
0	0176	0.244194	0.242013	0.063530
0	0177	0.747900	0.244708	0.415464
0	0178	0.800250	0.741162	0.921519
0	0179	0.217651	0.841837	0.529701
0	0180	0.328211	0.341122	0.031584
0	0181	0.220163	0.641841	0.543164
0	0182	0.326698	0.141733	0.021947
0	0183	0.828681	0.146483	0.467127
0	0184	0.720007	0.644883	0.983916
0	0185	0.830897	0.338378	0.483106
0	0186	0.718524	0.838393	0.974990
0	0187	0.136636	0.742110	0.575407
0	0188	0.408351	0.239052	0.074997
0	0189	0.915218	0.244418	0.427293
0	0190	0.635019	0.740366	0.929855
0	0191	0.102922	0.829781	0.437191
0	0192	0.435966	0.318988	0.925975
0	0193	0.112225	0.654347	0.434847
0	0194	0.438195	0.159800	0.925561
0	0195	0.933902	0.164943	0.578642

O	O196	0.604143	0.655428	0.071115
O	O197	0.946213	0.329926	0.571412
O	O198	0.597764	0.840034	0.048876
O	O199	0.138710	0.832188	0.247296
O	O200	0.400076	0.353581	0.741821
O	O201	0.137857	0.654696	0.241556
O	O202	0.392170	0.132938	0.743601
O	O203	0.897043	0.134445	0.763500
O	O204	0.646197	0.640266	0.257996
O	O205	0.899420	0.325263	0.756437
O	O206	0.644529	0.820600	0.230538
O	O207	0.216273	0.744609	0.159958
O	O208	0.340510	0.244955	0.676856
O	O209	0.822523	0.233275	0.832152
O	O210	0.726288	0.736781	0.317015
Al	Al211	0.335235	0.864872	0.331936
Al	Al212	0.334255	0.621396	0.338129
Si	Si213	0.718247	0.657012	0.303415
Si	Si214	0.438547	0.047757	0.179503
Si	Si215	0.095582	0.550289	0.684726
Si	Si216	0.449194	0.429464	0.178379
Si	Si217	0.087294	0.936866	0.670225
Si	Si218	0.594823	0.931581	0.813546
Si	Si219	0.942196	0.437923	0.320261
Si	Si220	0.592906	0.544900	0.834200
Si	Si221	0.946325	0.049664	0.329668
Si	Si222	0.336146	0.025485	0.340741
Si	Si223	0.204753	0.519719	0.832766
Si	Si224	0.340619	0.458682	0.335198
Si	Si225	0.200579	0.968431	0.818904
Si	Si226	0.699751	0.961137	0.655215
Si	Si227	0.840415	0.463300	0.158668
Si	Si228	0.704194	0.517675	0.679543
Si	Si229	0.835739	0.017427	0.177762
Si	Si230	0.293518	0.057861	0.553268
Si	Si231	0.237187	0.547535	0.057180
Si	Si232	0.293842	0.429400	0.544932
Si	Si233	0.236943	0.932088	0.036064
Si	Si234	0.732664	0.928991	0.440434
Si	Si235	0.799007	0.427613	0.944772
Si	Si236	0.744035	0.554727	0.468923
Si	Si237	0.789267	0.048911	0.965240
Si	Si238	0.138744	0.054815	0.534378
Si	Si239	0.394249	0.553249	0.051814

Si	Si240	0.140181	0.428007	0.543262
Si	Si241	0.390960	0.923902	0.044758
Si	Si242	0.888947	0.927303	0.454950
Si	Si243	0.643715	0.424915	0.965439
Si	Si244	0.896893	0.556075	0.465571
Si	Si245	0.635035	0.052827	0.960785
Si	Si246	0.094640	0.023312	0.320655
Si	Si247	0.445130	0.521654	0.840277
Si	Si248	0.092027	0.462401	0.333360
Si	Si249	0.447019	0.959106	0.838328
Si	Si250	0.937959	0.962281	0.666676
Si	Si251	0.597936	0.457279	0.178397
Si	Si252	0.948043	0.519571	0.674603
Si	Si253	0.587851	0.020616	0.172587
Si	Si254	0.216885	0.051426	0.193146
Si	Si255	0.326011	0.549655	0.696639
Si	Si256	0.212177	0.427698	0.206134
Si	Si257	0.325131	0.935371	0.693512
Si	Si258	0.818326	0.933628	0.806725
Si	Si259	0.721834	0.438354	0.307969
Si	Si260	0.827926	0.552595	0.808862
Si	Si261	0.706458	0.051283	0.304898
Si	Si262	0.448885	0.816588	0.187662
Si	Si263	0.096664	0.317752	0.693611
Si	Si264	0.449616	0.663972	0.193257
Si	Si265	0.093972	0.161705	0.690576
Si	Si266	0.594076	0.161834	0.804652
Si	Si267	0.948497	0.663319	0.324847
Si	Si268	0.598480	0.319966	0.808395
Si	Si269	0.945526	0.818700	0.313732
Si	Si270	0.208792	0.360563	0.837157
Si	Si271	0.207264	0.126071	0.837351
Si	Si272	0.706145	0.120268	0.654325
Si	Si273	0.842394	0.620326	0.168150
Si	Si274	0.710324	0.358897	0.658679
Si	Si275	0.842022	0.858488	0.158687
Si	Si276	0.292879	0.818671	0.550427
Si	Si277	0.251240	0.321615	0.049397
Si	Si278	0.295244	0.667433	0.560233
Si	Si279	0.250998	0.162561	0.047551
Si	Si280	0.752417	0.167049	0.447025
Si	Si281	0.796157	0.665617	0.962289
Si	Si282	0.755833	0.321879	0.448611
Si	Si283	0.794742	0.819519	0.948059

Si	Si284	0.140565	0.819591	0.541826
Si	Si285	0.404179	0.315636	0.036663
Si	Si286	0.142698	0.664270	0.544318
Si	Si287	0.403490	0.163165	0.033902
Si	Si288	0.905872	0.168252	0.465844
Si	Si289	0.643133	0.663872	0.966644
Si	Si290	0.908339	0.320776	0.466498
Si	Si291	0.641933	0.819330	0.953275
Si	Si292	0.091618	0.865239	0.329782
Si	Si293	0.452265	0.365630	0.830710
Si	Si294	0.096293	0.619482	0.328846
Si	Si295	0.449219	0.118028	0.823917
Si	Si296	0.948090	0.118124	0.674593
Si	Si297	0.594134	0.615280	0.174846
Si	Si298	0.951444	0.360824	0.682559
Si	Si299	0.593644	0.863911	0.163947
Si	Si300	0.209075	0.822620	0.190675
Si	Si301	0.330633	0.322663	0.704707
Si	Si302	0.211053	0.667323	0.194992
Si	Si303	0.325207	0.168279	0.705125
Si	Si304	0.824904	0.155202	0.803884
Si	Si305	0.826024	0.310052	0.797012
Si	Si306	0.715753	0.813608	0.284026
Zn	Zn307	0.393581	0.742553	0.395167

TS-C₆H₁₂-Dehydro-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS1 in Black) Total energy = -1949.71316019 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.428146	0.747380	0.644639
H	H2	0.513604	0.758615	0.640570

H	H3	0.401618	0.690659	0.482149
H	H4	0.479520	0.792566	0.489196
H	H5	0.578413	0.729961	0.479323
H	H6	0.536030	0.710877	0.369786
H	H7	0.581461	0.607628	0.442210
H	H8	0.495428	0.603780	0.451313
H	H9	0.589835	0.647523	0.616214
H	H10	0.547540	0.570999	0.611692
H	H11	0.490446	0.653982	0.722918
H	H12	0.441761	0.625464	0.624485
C	C13	0.473202	0.727951	0.610967
C	C14	0.473419	0.737615	0.497092
C	C15	0.534434	0.704416	0.450371
C	C16	0.539089	0.630593	0.478281
C	C17	0.544179	0.623624	0.591066
C	C18	0.484827	0.655549	0.642207
O	O19	0.509299	0.024127	0.211068
O	O20	0.025683	0.538182	0.717514
O	O21	0.524637	0.438497	0.218782
O	O22	0.008903	0.935534	0.695270
O	O23	0.514931	0.942777	0.788631
O	O24	0.016188	0.457041	0.300872
O	O25	0.515876	0.534504	0.804583
O	O26	0.018435	0.039862	0.287312
O	O27	0.391504	0.064241	0.274205
O	O28	0.143010	0.559991	0.789331
O	O29	0.399124	0.432444	0.269068
O	O30	0.129346	0.955597	0.759132
O	O31	0.630980	0.943303	0.707922
O	O32	0.897160	0.433267	0.232770
O	O33	0.640987	0.528643	0.756603
O	O34	0.893318	0.050690	0.234225
O	O35	0.440144	0.107999	0.102309
O	O36	0.108802	0.619520	0.623182
O	O37	0.444686	0.356481	0.125530
O	O38	0.105295	0.865841	0.617421
O	O39	0.607123	0.859342	0.854606
O	O40	0.939750	0.372273	0.395437
O	O41	0.598542	0.614921	0.893383
O	O42	0.940609	0.121217	0.385916
O	O43	0.398826	0.983005	0.122170
O	O44	0.130872	0.489104	0.624790
O	O45	0.436958	0.487644	0.096607
O	O46	0.095176	0.995544	0.578380

0	047	0.618305	0.988457	0.891256
0	048	0.909356	0.501521	0.397699
0	049	0.599977	0.484551	0.932418
0	050	0.927486	0.989809	0.403321
0	051	0.327181	0.065399	0.443528
0	052	0.207406	0.555873	0.956756
0	053	0.341085	0.438458	0.441999
0	054	0.196912	0.939977	0.921892
0	055	0.699857	0.928457	0.548130
0	056	0.830006	0.425654	0.068152
0	057	0.702731	0.551366	0.589250
0	058	0.831268	0.038994	0.061676
0	059	0.351754	0.949397	0.354732
0	060	0.189934	0.444125	0.850969
0	061	0.344297	0.545585	0.327667
0	062	0.217401	0.047629	0.812760
0	063	0.711595	0.041006	0.654302
0	064	0.847216	0.544054	0.151304
0	065	0.727920	0.440151	0.689245
0	066	0.835607	0.936920	0.187299
0	067	0.263734	0.032395	0.279184
0	068	0.271557	0.537219	0.788821
0	069	0.269116	0.441830	0.280126
0	070	0.257040	0.931348	0.745607
0	071	0.761636	0.928671	0.719020
0	072	0.768000	0.457161	0.235094
0	073	0.768786	0.555801	0.758581
0	074	0.762733	0.042974	0.226826
0	075	0.295578	0.133077	0.603639
0	076	0.234542	0.620884	0.121527
0	077	0.325290	0.378148	0.609938
0	078	0.205371	0.862298	0.075170
0	079	0.714484	0.864238	0.380860
0	080	0.809097	0.354624	0.906646
0	081	0.714760	0.624222	0.429690
0	082	0.810352	0.114443	0.905602
0	083	0.215450	0.037694	0.537996
0	084	0.317928	0.530146	0.053586
0	085	0.220778	0.428712	0.515077
0	086	0.313408	0.922698	0.001543
0	087	0.809687	0.944987	0.444633
0	088	0.720987	0.444526	0.964073
0	089	0.820417	0.563532	0.509229
0	090	0.710027	0.053123	0.992109

0	091	0.328834	0.006667	0.621849
0	092	0.203898	0.490593	0.125678
0	093	0.306295	0.508482	0.601444
0	094	0.225399	0.993461	0.097615
0	095	0.697814	0.996204	0.382365
0	096	0.835395	0.483021	0.890347
0	097	0.730260	0.492808	0.417319
0	098	0.796498	0.983503	0.890271
0	099	0.124424	0.125144	0.591331
0	0100	0.409210	0.617522	0.107358
0	0101	0.125634	0.358301	0.597310
0	0102	0.412632	0.855910	0.078650
0	0103	0.903471	0.858825	0.398569
0	0104	0.628273	0.354883	0.922902
0	0105	0.914063	0.632871	0.421483
0	0106	0.613174	0.120672	0.904874
0	0107	0.114840	0.066051	0.416584
0	0108	0.418285	0.557680	0.933036
0	0109	0.098147	0.439017	0.449281
0	0110	0.435013	0.946497	0.940945
0	0111	0.908624	0.921899	0.569318
0	0112	0.626097	0.417582	0.095888
0	0113	0.943162	0.554775	0.571145
0	0114	0.588359	0.046512	0.060603
0	0115	0.139017	0.040743	0.225439
0	0116	0.395668	0.534594	0.740409
0	0117	0.140252	0.422406	0.263414
0	0118	0.387520	0.932082	0.757943
0	0119	0.888037	0.951868	0.758851
0	0120	0.643199	0.452844	0.285425
0	0121	0.899864	0.554696	0.757772
0	0122	0.633433	0.061856	0.243954
0	0123	0.102687	0.944132	0.346825
0	0124	0.435132	0.436989	0.859241
0	0125	0.113650	0.542983	0.330065
0	0126	0.436373	0.047651	0.815542
0	0127	0.939604	0.040874	0.636863
0	0128	0.598919	0.539831	0.153323
0	0129	0.938853	0.442596	0.672136
0	0130	0.609480	0.941000	0.176313
0	0131	0.225356	0.120769	0.146061
0	0132	0.319072	0.629755	0.666169
0	0133	0.221575	0.358931	0.145935
0	0134	0.330073	0.874886	0.607115

0	0135	0.822981	0.857210	0.851862
0	0136	0.726139	0.367078	0.364421
0	0137	0.835974	0.615382	0.900150
0	0138	0.714777	0.127382	0.359195
0	0139	0.517747	0.848535	0.198889
0	0140	0.025250	0.349372	0.723638
0	0141	0.518741	0.635770	0.213223
0	0142	0.020204	0.133420	0.709952
0	0143	0.517761	0.147253	0.773789
0	0144	0.018145	0.631089	0.301468
0	0145	0.525842	0.349251	0.799037
0	0146	0.013795	0.856624	0.291598
0	0147	0.401767	0.823928	0.271566
0	0148	0.146265	0.327385	0.786691
0	0149	0.403210	0.672406	0.289066
0	0150	0.137341	0.149869	0.785917
0	0151	0.639750	0.144323	0.715308
0	0152	0.900912	0.652866	0.227911
0	0153	0.644458	0.341939	0.727044
0	0154	0.900979	0.823924	0.208686
0	0155	0.454303	0.739519	0.140313
0	0156	0.089711	0.241350	0.663667
0	0157	0.599944	0.241641	0.836203
0	0158	0.955491	0.744417	0.343606
0	0159	0.328728	0.816609	0.429847
0	0160	0.210704	0.334657	0.954183
0	0161	0.350460	0.657696	0.475285
0	0162	0.202494	0.141168	0.954498
0	0163	0.707921	0.152582	0.551845
0	0164	0.818328	0.664286	0.081340
0	0165	0.707243	0.342574	0.556927
0	0166	0.833804	0.843759	0.044652
0	0167	0.264159	0.860233	0.248599
0	0168	0.275073	0.353690	0.786556
0	0169	0.262843	0.663637	0.304520
0	0170	0.267915	0.166889	0.791338
0	0171	0.770017	0.148649	0.724236
0	0172	0.773774	0.627120	0.256736
0	0173	0.774023	0.319996	0.721909
0	0174	0.770208	0.824456	0.211429
0	0175	0.297921	0.749095	0.592793
0	0176	0.244773	0.238743	0.075640
0	0177	0.742020	0.247122	0.427400
0	0178	0.800617	0.740566	0.926753

O	O179	0.216372	0.842645	0.521142
O	O180	0.329024	0.336997	0.038097
O	O181	0.223372	0.646252	0.533045
O	O182	0.324510	0.139224	0.021377
O	O183	0.824233	0.146884	0.462638
O	O184	0.715857	0.642379	0.964954
O	O185	0.827047	0.341782	0.484213
O	O186	0.715545	0.838348	0.963181
O	O187	0.137211	0.742893	0.573266
O	O188	0.408262	0.233978	0.079055
O	O189	0.909940	0.246321	0.428204
O	O190	0.630271	0.740285	0.925804
O	O191	0.102701	0.825014	0.428302
O	O192	0.440247	0.317553	0.938196
O	O193	0.110473	0.654166	0.434578
O	O194	0.433855	0.158982	0.921254
O	O195	0.930094	0.163620	0.574583
O	O196	0.610626	0.661066	0.078539
O	O197	0.939340	0.326142	0.579813
O	O198	0.598817	0.840352	0.047801
O	O199	0.135966	0.836923	0.237787
O	O200	0.401681	0.331533	0.751750
O	O201	0.138500	0.658437	0.242174
O	O202	0.392036	0.158297	0.733064
O	O203	0.896640	0.133702	0.761423
O	O204	0.643644	0.638769	0.265988
O	O205	0.900237	0.334811	0.768171
O	O206	0.641496	0.818322	0.231974
O	O207	0.219230	0.747329	0.165216
O	O208	0.313688	0.254609	0.665878
O	O209	0.831565	0.234478	0.841681
O	O210	0.718064	0.737209	0.333818
Al	Al211	0.331846	0.869259	0.322027
Al	Al212	0.335730	0.629179	0.344603
Si	Si213	0.712632	0.657292	0.319791
Si	Si214	0.435237	0.045231	0.177778
Si	Si215	0.101546	0.551591	0.687500
Si	Si216	0.450269	0.429052	0.178035
Si	Si217	0.085460	0.938060	0.662353
Si	Si218	0.592370	0.933691	0.811779
Si	Si219	0.941088	0.441123	0.332603
Si	Si220	0.589974	0.540719	0.846900
Si	Si221	0.944227	0.050404	0.327338
Si	Si222	0.333724	0.026427	0.337746

Si	Si223	0.202995	0.523865	0.847114
Si	Si224	0.338190	0.466108	0.328632
Si	Si225	0.200228	0.968492	0.810197
Si	Si226	0.701026	0.960959	0.657771
Si	Si227	0.835672	0.465036	0.172716
Si	Si228	0.709977	0.518838	0.698911
Si	Si229	0.830881	0.017560	0.177712
Si	Si230	0.291911	0.060594	0.550695
Si	Si231	0.240644	0.550148	0.065789
Si	Si232	0.298040	0.438103	0.542188
Si	Si233	0.235104	0.929360	0.026038
Si	Si234	0.731037	0.933122	0.438171
Si	Si235	0.798982	0.426974	0.957549
Si	Si236	0.742371	0.558100	0.485440
Si	Si237	0.787265	0.047483	0.962224
Si	Si238	0.137818	0.056363	0.530988
Si	Si239	0.395327	0.548260	0.047974
Si	Si240	0.143940	0.429051	0.546385
Si	Si241	0.389323	0.927869	0.035230
Si	Si242	0.887451	0.928845	0.453754
Si	Si243	0.644195	0.424742	0.979020
Si	Si244	0.896699	0.562627	0.474567
Si	Si245	0.632880	0.052401	0.961583
Si	Si246	0.093390	0.022578	0.319431
Si	Si247	0.441141	0.515924	0.835167
Si	Si248	0.092154	0.465060	0.335268
Si	Si249	0.443185	0.967622	0.825248
Si	Si250	0.936545	0.962263	0.665082
Si	Si251	0.597822	0.461982	0.187961
Si	Si252	0.951681	0.522234	0.680658
Si	Si253	0.584854	0.018573	0.173567
Si	Si254	0.214269	0.045822	0.187584
Si	Si255	0.322719	0.551497	0.700126
Si	Si256	0.209423	0.428766	0.203630
Si	Si257	0.325291	0.937200	0.683453
Si	Si258	0.817586	0.931167	0.804422
Si	Si259	0.717409	0.442750	0.325259
Si	Si260	0.834777	0.551653	0.826312
Si	Si261	0.702755	0.057017	0.303080
Si	Si262	0.446579	0.817523	0.170436
Si	Si263	0.096669	0.319124	0.693289
Si	Si264	0.446269	0.665032	0.186655
Si	Si265	0.093101	0.162398	0.687500
Si	Si266	0.592513	0.163664	0.807622

Si	Si267	0.947662	0.665434	0.323420
Si	Si268	0.599324	0.321583	0.821500
Si	Si269	0.943726	0.820996	0.310598
Si	Si270	0.205698	0.365058	0.843763
Si	Si271	0.205672	0.126151	0.836333
Si	Si272	0.707270	0.121448	0.662276
Si	Si273	0.835111	0.621712	0.179859
Si	Si274	0.713103	0.361178	0.673807
Si	Si275	0.835322	0.857729	0.162776
Si	Si276	0.292603	0.821466	0.537796
Si	Si277	0.251754	0.317540	0.053789
Si	Si278	0.295905	0.670178	0.568371
Si	Si279	0.249146	0.160435	0.048553
Si	Si280	0.747411	0.168242	0.450190
Si	Si281	0.792692	0.665302	0.967702
Si	Si282	0.750624	0.324290	0.459118
Si	Si283	0.793003	0.819571	0.947732
Si	Si284	0.139841	0.819526	0.534396
Si	Si285	0.405080	0.311699	0.045770
Si	Si286	0.144741	0.665399	0.540830
Si	Si287	0.401615	0.159894	0.031194
Si	Si288	0.901357	0.169030	0.462405
Si	Si289	0.638927	0.664523	0.965835
Si	Si290	0.904191	0.321695	0.471922
Si	Si291	0.638346	0.819447	0.947994
Si	Si292	0.089821	0.865570	0.325211
Si	Si293	0.450813	0.359114	0.836655
Si	Si294	0.095451	0.621815	0.326666
Si	Si295	0.444479	0.127914	0.811266
Si	Si296	0.946551	0.118060	0.670952
Si	Si297	0.593240	0.618691	0.177854
Si	Si298	0.950826	0.363155	0.685699
Si	Si299	0.592586	0.862333	0.163168
Si	Si300	0.207158	0.826427	0.183979
Si	Si301	0.328491	0.329422	0.704532
Si	Si302	0.214807	0.672437	0.210303
Si	Si303	0.317955	0.177062	0.698348
Si	Si304	0.827017	0.157444	0.807472
Si	Si305	0.828917	0.311846	0.809067
Si	Si306	0.711299	0.811973	0.289779
Zn	Zn307	0.410206	0.758781	0.383664

M-C₆H₁₁Zn-OH-Zn²⁺ (Fig. 9a/M2 in Black) Total energy = -1950.81402538 eV

```

data_
_audit_creation_method      'Materials Studio'
_cell_length_a              20.357621
_cell_length_b              20.050598
_cell_length_c              13.476578
_cell_angle_alpha           90.000000
_cell_angle_beta            90.000000
_cell_angle_gamma           90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1              0.432045           0.792614           0.658208
  H      H2              0.512155           0.806139           0.700909
  H      H3              0.384260           0.640881           0.487710
  H      H4              0.498168           0.872865           0.553269
  H      H5              0.607039           0.827102           0.574090
  H      H6              0.589538           0.826076           0.446611
  H      H7              0.643474           0.720674           0.503763
  H      H8              0.564888           0.704334           0.454748
  H      H9              0.601500           0.714920           0.675050
  H      H10             0.580331           0.641339           0.611239
  H      H11             0.485658           0.686563           0.711320
  H      H12             0.467467           0.683604           0.583478
  C      C13             0.483592           0.783496           0.640103
  C      C14             0.504075           0.818620           0.543631
  C      C15             0.575880           0.803353           0.517555
  C      C16             0.590978           0.728470           0.516774
  C      C17             0.570860           0.695048           0.614591
  C      C18             0.498598           0.708612           0.639488
  O      O19             0.514536           0.026379           0.213700
  O      O20             0.026448           0.529696           0.715091
  O      O21             0.527012           0.443056           0.205966
  O      O22             0.012980           0.938020           0.702062
  O      O23             0.520056           0.950009           0.794560
  O      O24             0.018190           0.453838           0.288743
  O      O25             0.516905           0.543747           0.796100
  O      O26             0.023707           0.042518           0.293476
  O      O27             0.397962           0.060405           0.284443
  O      O28             0.145345           0.557170           0.781073
  O      O29             0.403533           0.443855           0.262545

```

0	030	0.133718	0.948010	0.769620
0	031	0.635750	0.935631	0.712500
0	032	0.899822	0.429929	0.219419
0	033	0.640963	0.543379	0.744449
0	034	0.898653	0.048490	0.242712
0	035	0.442153	0.116436	0.119653
0	036	0.101792	0.615143	0.617300
0	037	0.443382	0.364175	0.116039
0	038	0.105408	0.862780	0.623921
0	039	0.606009	0.864711	0.870333
0	040	0.940211	0.368840	0.381869
0	041	0.599327	0.618349	0.895728
0	042	0.944097	0.119405	0.394864
0	043	0.404866	0.989439	0.119501
0	044	0.132830	0.486107	0.618351
0	045	0.438608	0.495091	0.086811
0	046	0.103679	0.992905	0.588464
0	047	0.627782	0.995182	0.887088
0	048	0.911715	0.498763	0.384478
0	049	0.603268	0.486283	0.914263
0	050	0.935511	0.987391	0.409872
0	051	0.337672	0.060299	0.456270
0	052	0.206034	0.554813	0.952191
0	053	0.339858	0.442156	0.430665
0	054	0.199762	0.953769	0.937448
0	055	0.705882	0.922976	0.551898
0	056	0.833971	0.425840	0.053704
0	057	0.702918	0.546220	0.574325
0	058	0.836666	0.043191	0.071786
0	059	0.347818	0.946866	0.353995
0	060	0.188962	0.441299	0.852231
0	061	0.322672	0.544231	0.309111
0	062	0.212134	0.051212	0.806693
0	063	0.695407	0.041905	0.636815
0	064	0.851369	0.542431	0.143906
0	065	0.713179	0.439200	0.689076
0	066	0.836645	0.937727	0.189716
0	067	0.267952	0.043813	0.294216
0	068	0.273596	0.530962	0.788365
0	069	0.274758	0.425109	0.262534
0	070	0.263063	0.933523	0.768103
0	071	0.766553	0.947444	0.721281
0	072	0.770621	0.453251	0.220263
0	073	0.770450	0.552517	0.741973

0	074	0.768620	0.045779	0.238367
0	075	0.303641	0.127850	0.615272
0	076	0.231738	0.624632	0.113266
0	077	0.325715	0.367992	0.586964
0	078	0.206879	0.870474	0.083980
0	079	0.728946	0.858997	0.385772
0	080	0.811780	0.357020	0.891336
0	081	0.724914	0.621626	0.419780
0	082	0.818028	0.118296	0.916689
0	083	0.222058	0.036583	0.542298
0	084	0.319222	0.537591	0.045589
0	085	0.220155	0.425582	0.504557
0	086	0.317717	0.923965	0.008063
0	087	0.815089	0.948938	0.451142
0	088	0.723843	0.446491	0.952727
0	089	0.823785	0.554092	0.504381
0	090	0.716332	0.055389	0.999975
0	091	0.332075	0.999043	0.630296
0	092	0.208367	0.494647	0.126003
0	093	0.306416	0.498763	0.601549
0	094	0.238441	0.997528	0.114324
0	095	0.700124	0.988934	0.382661
0	096	0.837603	0.486721	0.879725
0	097	0.733380	0.490209	0.401709
0	098	0.804772	0.987006	0.900147
0	099	0.131000	0.122510	0.601425
0	0100	0.411638	0.625018	0.097879
0	0101	0.122441	0.356179	0.584626
0	0102	0.412138	0.858243	0.100143
0	0103	0.904364	0.858093	0.403856
0	0104	0.632605	0.356884	0.907647
0	0105	0.916613	0.628566	0.422377
0	0106	0.621206	0.125915	0.915022
0	0107	0.119038	0.064413	0.426219
0	0108	0.418455	0.564591	0.923557
0	0109	0.097310	0.440544	0.441390
0	0110	0.441094	0.936153	0.947864
0	0111	0.913328	0.921274	0.575774
0	0112	0.626249	0.420025	0.079836
0	0113	0.947384	0.542286	0.562602
0	0114	0.593711	0.044764	0.062553
0	0115	0.144633	0.040673	0.234673
0	0116	0.397480	0.535294	0.732158
0	0117	0.143542	0.423570	0.258328

0	0118	0.394036	0.926363	0.764124
0	0119	0.892961	0.951217	0.766023
0	0120	0.646203	0.446814	0.271556
0	0121	0.901077	0.559082	0.746227
0	0122	0.638878	0.061420	0.247380
0	0123	0.102955	0.943892	0.353029
0	0124	0.440845	0.442958	0.857215
0	0125	0.111605	0.543945	0.322132
0	0126	0.431009	0.043783	0.833315
0	0127	0.940366	0.041851	0.642928
0	0128	0.606983	0.541634	0.147553
0	0129	0.932536	0.439120	0.683539
0	0130	0.613399	0.941028	0.180907
0	0131	0.226636	0.125070	0.152593
0	0132	0.314401	0.622525	0.660018
0	0133	0.211118	0.362080	0.121042
0	0134	0.323944	0.865984	0.629876
0	0135	0.816674	0.861288	0.849066
0	0136	0.730805	0.363766	0.352226
0	0137	0.832677	0.619873	0.882213
0	0138	0.714201	0.121598	0.377010
0	0139	0.520741	0.850936	0.212151
0	0140	0.025344	0.348769	0.718093
0	0141	0.519786	0.631085	0.209454
0	0142	0.023586	0.131911	0.714130
0	0143	0.521950	0.134195	0.785755
0	0144	0.015005	0.631095	0.292356
0	0145	0.526032	0.352270	0.792941
0	0146	0.013567	0.855604	0.295463
0	0147	0.407857	0.825020	0.292073
0	0148	0.147407	0.327864	0.773039
0	0149	0.405019	0.659975	0.290235
0	0150	0.139570	0.159190	0.791914
0	0151	0.643100	0.148452	0.723712
0	0152	0.894839	0.653138	0.231445
0	0153	0.642636	0.329892	0.714001
0	0154	0.900544	0.824520	0.212022
0	0155	0.457537	0.741225	0.155492
0	0156	0.088241	0.240028	0.656624
0	0157	0.590906	0.241804	0.838729
0	0158	0.953087	0.742993	0.345479
0	0159	0.334020	0.820574	0.446333
0	0160	0.217017	0.324323	0.933579
0	0161	0.338352	0.643841	0.468362

0	0162	0.205759	0.138146	0.959158
0	0163	0.714697	0.162323	0.565086
0	0164	0.826984	0.661757	0.068975
0	0165	0.706911	0.346389	0.544899
0	0166	0.837998	0.846672	0.042257
0	0167	0.265834	0.849002	0.256472
0	0168	0.274421	0.360309	0.765748
0	0169	0.260209	0.671846	0.294482
0	0170	0.271237	0.167527	0.797976
0	0171	0.772123	0.125894	0.733539
0	0172	0.767611	0.623004	0.234214
0	0173	0.774107	0.324429	0.707776
0	0174	0.769573	0.825942	0.203372
0	0175	0.295280	0.741579	0.590568
0	0176	0.246460	0.240061	0.073845
0	0177	0.744866	0.245754	0.424370
0	0178	0.800708	0.744211	0.924911
0	0179	0.215378	0.837706	0.525862
0	0180	0.327323	0.341178	0.034936
0	0181	0.215666	0.641996	0.529195
0	0182	0.327813	0.140539	0.028859
0	0183	0.826974	0.146306	0.468155
0	0184	0.717568	0.644769	0.964935
0	0185	0.828841	0.341793	0.478549
0	0186	0.716473	0.841038	0.972348
0	0187	0.132439	0.739515	0.573880
0	0188	0.408852	0.240335	0.077229
0	0189	0.911943	0.244772	0.428530
0	0190	0.632477	0.743268	0.927659
0	0191	0.101356	0.824866	0.432804
0	0192	0.436009	0.321281	0.929023
0	0193	0.104350	0.654350	0.429206
0	0194	0.440145	0.157016	0.933139
0	0195	0.932832	0.165407	0.580237
0	0196	0.613840	0.664577	0.081033
0	0197	0.943403	0.331757	0.569352
0	0198	0.601187	0.836152	0.061088
0	0199	0.136126	0.838610	0.242446
0	0200	0.402385	0.343072	0.741088
0	0201	0.135559	0.659895	0.236963
0	0202	0.397083	0.157140	0.746582
0	0203	0.899593	0.137706	0.766426
0	0204	0.641469	0.640254	0.270604
0	0205	0.900685	0.321407	0.755579

O	O206	0.643580	0.820543	0.247274
O	O207	0.211050	0.749727	0.152230
O	O208	0.320945	0.251682	0.670904
O	O209	0.818358	0.233127	0.829553
O	O210	0.726432	0.734346	0.326209
Al	Al211	0.331678	0.864082	0.330955
Al	Al212	0.329601	0.628437	0.327673
Si	Si213	0.715044	0.655146	0.311401
Si	Si214	0.439963	0.048115	0.184304
Si	Si215	0.101082	0.546849	0.682183
Si	Si216	0.451772	0.436639	0.168207
Si	Si217	0.089749	0.935604	0.671008
Si	Si218	0.597001	0.936810	0.817550
Si	Si219	0.943009	0.437898	0.319718
Si	Si220	0.591358	0.547817	0.838018
Si	Si221	0.949593	0.049420	0.335110
Si	Si222	0.338020	0.025780	0.346650
Si	Si223	0.203243	0.520784	0.843845
Si	Si224	0.334850	0.465563	0.315165
Si	Si225	0.201982	0.971437	0.820894
Si	Si226	0.701202	0.962313	0.656655
Si	Si227	0.838847	0.463017	0.160005
Si	Si228	0.707113	0.519898	0.687847
Si	Si229	0.835034	0.018663	0.186052
Si	Si230	0.298823	0.056116	0.560502
Si	Si231	0.241399	0.553423	0.060360
Si	Si232	0.297809	0.433289	0.530865
Si	Si233	0.240656	0.935975	0.037082
Si	Si234	0.737705	0.929770	0.442127
Si	Si235	0.801701	0.428820	0.944079
Si	Si236	0.746384	0.552998	0.474191
Si	Si237	0.793892	0.050960	0.971477
Si	Si238	0.144274	0.054432	0.539507
Si	Si239	0.396638	0.556010	0.039306
Si	Si240	0.143463	0.427196	0.536985
Si	Si241	0.393610	0.927498	0.044069
Si	Si242	0.892168	0.928659	0.460086
Si	Si243	0.646708	0.427082	0.963925
Si	Si244	0.899852	0.555727	0.468310
Si	Si245	0.639930	0.055270	0.966061
Si	Si246	0.097621	0.022860	0.327301
Si	Si247	0.443485	0.521496	0.828530
Si	Si248	0.092891	0.465326	0.326698
Si	Si249	0.446359	0.964329	0.834918

Si	Si250	0.940217	0.962988	0.671235
Si	Si251	0.601211	0.462818	0.175593
Si	Si252	0.951781	0.517572	0.677351
Si	Si253	0.589869	0.018743	0.176721
Si	Si254	0.219921	0.051039	0.199606
Si	Si255	0.322356	0.545018	0.696620
Si	Si256	0.210188	0.427082	0.192319
Si	Si257	0.327724	0.932370	0.698064
Si	Si258	0.820150	0.937290	0.808593
Si	Si259	0.720644	0.438874	0.311143
Si	Si260	0.834917	0.554075	0.812757
Si	Si261	0.706063	0.054366	0.311583
Si	Si262	0.449402	0.818335	0.188123
Si	Si263	0.095735	0.318260	0.683191
Si	Si264	0.447622	0.663771	0.189740
Si	Si265	0.095673	0.163090	0.691107
Si	Si266	0.594039	0.162782	0.815692
Si	Si267	0.945181	0.664196	0.322734
Si	Si268	0.598019	0.320220	0.813195
Si	Si269	0.943173	0.820302	0.314113
Si	Si270	0.207197	0.363796	0.830652
Si	Si271	0.206582	0.128950	0.839553
Si	Si272	0.706424	0.119582	0.665862
Si	Si273	0.835313	0.619642	0.170340
Si	Si274	0.708709	0.360162	0.663713
Si	Si275	0.836812	0.859139	0.161333
Si	Si276	0.291436	0.817943	0.547548
Si	Si277	0.250776	0.317300	0.041680
Si	Si278	0.287497	0.663767	0.566422
Si	Si279	0.251641	0.161073	0.052484
Si	Si280	0.750260	0.168533	0.457908
Si	Si281	0.794414	0.667362	0.959784
Si	Si282	0.752694	0.324018	0.451234
Si	Si283	0.793134	0.822916	0.948497
Si	Si284	0.138129	0.816953	0.538584
Si	Si285	0.403826	0.317033	0.039438
Si	Si286	0.137304	0.662806	0.536887
Si	Si287	0.404403	0.163377	0.040249
Si	Si288	0.904009	0.168639	0.467781
Si	Si289	0.640758	0.667336	0.967614
Si	Si290	0.905945	0.321846	0.464435
Si	Si291	0.639430	0.821285	0.958057
Si	Si292	0.089354	0.865745	0.329802
Si	Si293	0.451232	0.364764	0.830119

Si	Si294	0.092078	0.622367	0.319674
Si	Si295	0.447266	0.122910	0.824728
Si	Si296	0.949024	0.119200	0.676264
Si	Si297	0.595316	0.619232	0.177244
Si	Si298	0.950318	0.360231	0.681419
Si	Si299	0.595373	0.862307	0.174434
Si	Si300	0.206283	0.827154	0.186227
Si	Si301	0.330697	0.330198	0.692573
Si	Si302	0.210642	0.676039	0.201216
Si	Si303	0.323727	0.175040	0.707579
Si	Si304	0.827208	0.154183	0.810199
Si	Si305	0.826509	0.309995	0.796201
Si	Si306	0.717255	0.810799	0.291033
Zn	Zn307	0.442765	0.806571	0.430828

TS-C₆H₁₁Zn-HTransfer-Concerted-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS2 in Black)

Total energy = -1949.28574573 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.446477	0.631215	0.520710
H	H2	0.461903	0.672761	0.639055
H	H3	0.406980	0.630895	0.502681
H	H4	0.429935	0.773748	0.574962
H	H5	0.528088	0.827236	0.598804
H	H6	0.520926	0.840291	0.470737
H	H7	0.633568	0.804831	0.528246
H	H8	0.601102	0.752503	0.435193
H	H9	0.596136	0.721639	0.658153
H	H10	0.651135	0.684756	0.572985

H	H11	0.555608	0.608668	0.592517
H	H12	0.557535	0.643157	0.471340
C	C13	0.484063	0.685567	0.567704
C	C14	0.468348	0.751814	0.528546
C	C15	0.528147	0.801428	0.526806
C	C16	0.595038	0.768217	0.512638
C	C17	0.602471	0.707338	0.579923
C	C18	0.550495	0.654763	0.550091
O	O19	0.516300	0.027624	0.208983
O	O20	0.026195	0.532410	0.715228
O	O21	0.527036	0.443405	0.206160
O	O22	0.014925	0.940218	0.698690
O	O23	0.521239	0.949246	0.786834
O	O24	0.018092	0.456201	0.286138
O	O25	0.517717	0.546842	0.795982
O	O26	0.025662	0.045454	0.288746
O	O27	0.399326	0.059794	0.279618
O	O28	0.146554	0.560281	0.774277
O	O29	0.402448	0.432202	0.257787
O	O30	0.136049	0.952697	0.761733
O	O31	0.638279	0.931515	0.709652
O	O32	0.899671	0.431020	0.218514
O	O33	0.640623	0.545828	0.740597
O	O34	0.901150	0.048221	0.234918
O	O35	0.443447	0.117771	0.116531
O	O36	0.098303	0.617661	0.612323
O	O37	0.449765	0.365194	0.102903
O	O38	0.106710	0.864500	0.620356
O	O39	0.605142	0.865753	0.870543
O	O40	0.941161	0.371351	0.381507
O	O41	0.601659	0.619849	0.894167
O	O42	0.943645	0.122280	0.386098
O	O43	0.407118	0.990614	0.112790
O	O44	0.129853	0.488542	0.613313
O	O45	0.437135	0.496618	0.091381
O	O46	0.103435	0.994070	0.580053
O	O47	0.628040	0.996733	0.879575
O	O48	0.911790	0.501125	0.382188
O	O49	0.604912	0.487684	0.911432
O	O50	0.936887	0.990470	0.405095
O	O51	0.336315	0.063615	0.449046
O	O52	0.205557	0.555892	0.946131
O	O53	0.341610	0.444605	0.428536
O	O54	0.202568	0.948904	0.927778

0	055	0.705318	0.925860	0.545322
0	056	0.834916	0.426810	0.051852
0	057	0.703775	0.546785	0.571681
0	058	0.837832	0.041492	0.064742
0	059	0.352185	0.946973	0.356888
0	060	0.188499	0.443250	0.843562
0	061	0.342096	0.546019	0.301850
0	062	0.218845	0.050984	0.806035
0	063	0.693482	0.041855	0.639911
0	064	0.850609	0.543324	0.142829
0	065	0.712534	0.440593	0.688535
0	066	0.835450	0.938370	0.187415
0	067	0.270126	0.038540	0.285225
0	068	0.274682	0.532362	0.784811
0	069	0.272780	0.435529	0.264347
0	070	0.264566	0.932628	0.755597
0	071	0.768987	0.946149	0.712966
0	072	0.770351	0.452979	0.217425
0	073	0.770066	0.554145	0.740385
0	074	0.771041	0.049392	0.231922
0	075	0.305350	0.128780	0.611809
0	076	0.230822	0.626727	0.104984
0	077	0.321808	0.367501	0.581192
0	078	0.208093	0.870074	0.079514
0	079	0.732466	0.860977	0.381816
0	080	0.813321	0.357230	0.890126
0	081	0.723634	0.622463	0.417556
0	082	0.820045	0.118324	0.911193
0	083	0.223201	0.037186	0.540365
0	084	0.318626	0.538701	0.040972
0	085	0.220776	0.432447	0.501250
0	086	0.319351	0.923680	0.004015
0	087	0.816960	0.951435	0.449381
0	088	0.724097	0.445272	0.951689
0	089	0.824550	0.557852	0.501391
0	090	0.717401	0.055867	0.993091
0	091	0.335182	0.999913	0.621991
0	092	0.207143	0.496222	0.119444
0	093	0.311734	0.498588	0.601557
0	094	0.237180	0.998965	0.102648
0	095	0.703148	0.990919	0.375466
0	096	0.836749	0.487328	0.877657
0	097	0.735596	0.491242	0.399230
0	098	0.804785	0.987423	0.892152

0	099	0.131679	0.123393	0.595180
0	0100	0.408281	0.625540	0.104799
0	0101	0.126676	0.358068	0.583511
0	0102	0.416160	0.859811	0.092426
0	0103	0.906075	0.861095	0.398021
0	0104	0.630699	0.357573	0.907564
0	0105	0.920529	0.630376	0.423143
0	0106	0.621656	0.127184	0.911462
0	0107	0.122637	0.065889	0.419277
0	0108	0.421855	0.566487	0.927971
0	0109	0.097874	0.439679	0.437116
0	0110	0.441574	0.937450	0.939639
0	0111	0.916491	0.922966	0.570510
0	0112	0.625935	0.422387	0.078705
0	0113	0.947059	0.541802	0.562050
0	0114	0.595171	0.043957	0.056963
0	0115	0.146384	0.042189	0.227673
0	0116	0.398666	0.541356	0.734658
0	0117	0.142769	0.425727	0.252762
0	0118	0.395460	0.925103	0.755146
0	0119	0.894602	0.950421	0.761227
0	0120	0.646395	0.449386	0.270798
0	0121	0.900493	0.559907	0.745148
0	0122	0.640955	0.063381	0.240929
0	0123	0.103786	0.945628	0.346164
0	0124	0.441804	0.445399	0.854893
0	0125	0.111847	0.545530	0.321088
0	0126	0.431987	0.043336	0.822580
0	0127	0.940988	0.043223	0.640528
0	0128	0.605147	0.543448	0.147806
0	0129	0.934186	0.439664	0.684905
0	0130	0.615216	0.942227	0.178921
0	0131	0.231137	0.125590	0.148853
0	0132	0.314492	0.624127	0.655567
0	0133	0.216657	0.363556	0.124000
0	0134	0.327569	0.866723	0.615532
0	0135	0.817482	0.861199	0.844485
0	0136	0.729661	0.364701	0.350997
0	0137	0.831582	0.620423	0.881901
0	0138	0.715803	0.123825	0.370850
0	0139	0.521835	0.852469	0.210160
0	0140	0.027658	0.348986	0.713751
0	0141	0.518440	0.632677	0.212331
0	0142	0.025136	0.133592	0.709545

0	0143	0.523939	0.133640	0.779336
0	0144	0.016112	0.633413	0.287823
0	0145	0.527094	0.355434	0.786950
0	0146	0.015251	0.856298	0.288839
0	0147	0.407161	0.822063	0.282921
0	0148	0.149369	0.327337	0.772223
0	0149	0.405633	0.673006	0.293236
0	0150	0.141871	0.156454	0.786864
0	0151	0.645627	0.152462	0.721643
0	0152	0.893978	0.652986	0.233649
0	0153	0.645238	0.329724	0.714687
0	0154	0.901441	0.825797	0.207459
0	0155	0.461020	0.742598	0.147985
0	0156	0.091903	0.240808	0.653489
0	0157	0.588513	0.243105	0.836099
0	0158	0.953466	0.744852	0.342264
0	0159	0.330822	0.813358	0.434880
0	0160	0.218265	0.330065	0.934490
0	0161	0.337652	0.645957	0.464417
0	0162	0.207641	0.139705	0.955520
0	0163	0.714614	0.159994	0.560202
0	0164	0.829266	0.663308	0.068446
0	0165	0.707528	0.347954	0.544114
0	0166	0.838598	0.848591	0.038313
0	0167	0.268632	0.855801	0.250991
0	0168	0.276370	0.360406	0.764936
0	0169	0.262236	0.665223	0.289091
0	0170	0.272998	0.169307	0.794150
0	0171	0.774027	0.126312	0.728163
0	0172	0.766470	0.624430	0.231154
0	0173	0.776994	0.327595	0.705079
0	0174	0.770377	0.825208	0.199129
0	0175	0.292698	0.741697	0.587110
0	0176	0.248238	0.241684	0.069727
0	0177	0.745158	0.247069	0.424224
0	0178	0.800623	0.745035	0.923818
0	0179	0.215716	0.839757	0.520128
0	0180	0.330515	0.342020	0.032806
0	0181	0.214234	0.641063	0.529409
0	0182	0.330181	0.142891	0.022558
0	0183	0.827873	0.147733	0.465068
0	0184	0.718062	0.646260	0.970124
0	0185	0.828982	0.344068	0.475386
0	0186	0.717292	0.843271	0.968272

O	O187	0.132665	0.741434	0.569756
O	O188	0.413299	0.241164	0.068873
O	O189	0.911946	0.247005	0.425497
O	O190	0.633868	0.744425	0.927080
O	O191	0.100859	0.827462	0.429422
O	O192	0.434881	0.321337	0.917831
O	O193	0.105065	0.657370	0.424802
O	O194	0.443492	0.154155	0.928488
O	O195	0.935390	0.165710	0.573737
O	O196	0.611070	0.665927	0.080076
O	O197	0.942847	0.332947	0.568309
O	O198	0.603320	0.836521	0.061000
O	O199	0.138941	0.839121	0.240187
O	O200	0.403729	0.349245	0.730904
O	O201	0.137109	0.660680	0.232647
O	O202	0.399033	0.158616	0.742588
O	O203	0.901144	0.140993	0.760787
O	O204	0.640546	0.642959	0.269643
O	O205	0.903142	0.321557	0.755533
O	O206	0.644536	0.822183	0.247559
O	O207	0.216509	0.750897	0.154779
O	O208	0.323806	0.253027	0.667955
O	O209	0.818155	0.233930	0.825627
O	O210	0.726986	0.735667	0.325539
Al	Al211	0.334946	0.865317	0.327663
Al	Al212	0.332790	0.628568	0.333316
Si	Si213	0.714783	0.656711	0.309390
Si	Si214	0.441564	0.048815	0.179524
Si	Si215	0.100006	0.549806	0.677904
Si	Si216	0.452656	0.434430	0.165200
Si	Si217	0.091226	0.937853	0.665051
Si	Si218	0.597750	0.936420	0.813060
Si	Si219	0.943296	0.439948	0.318232
Si	Si220	0.592535	0.549601	0.836338
Si	Si221	0.951095	0.051563	0.328628
Si	Si222	0.339641	0.025185	0.342392
Si	Si223	0.203518	0.522715	0.837291
Si	Si224	0.339413	0.466576	0.312335
Si	Si225	0.205614	0.971153	0.813097
Si	Si226	0.701867	0.961882	0.652918
Si	Si227	0.838919	0.463737	0.158370
Si	Si228	0.707195	0.521198	0.685724
Si	Si229	0.836411	0.019311	0.180085
Si	Si230	0.300115	0.057553	0.555330

Si	Si231	0.240597	0.554983	0.054168
Si	Si232	0.298691	0.435755	0.527933
Si	Si233	0.241721	0.934884	0.030171
Si	Si234	0.739819	0.932304	0.437235
Si	Si235	0.802160	0.428938	0.942571
Si	Si236	0.747331	0.554290	0.471591
Si	Si237	0.794967	0.050841	0.964774
Si	Si238	0.145616	0.055388	0.533515
Si	Si239	0.395970	0.557082	0.041896
Si	Si240	0.144112	0.429618	0.533666
Si	Si241	0.395516	0.928729	0.037258
Si	Si242	0.894285	0.931230	0.455501
Si	Si243	0.646610	0.427754	0.962698
Si	Si244	0.901114	0.557642	0.467045
Si	Si245	0.640768	0.055839	0.960155
Si	Si246	0.099680	0.024647	0.320835
Si	Si247	0.444372	0.524647	0.829928
Si	Si248	0.093071	0.466847	0.323598
Si	Si249	0.447216	0.963942	0.825892
Si	Si250	0.942080	0.964170	0.667241
Si	Si251	0.600794	0.464339	0.175103
Si	Si252	0.951987	0.518442	0.677340
Si	Si253	0.591570	0.019814	0.172046
Si	Si254	0.221866	0.050567	0.191928
Si	Si255	0.324015	0.548044	0.694249
Si	Si256	0.210705	0.430747	0.190091
Si	Si257	0.330009	0.931849	0.686761
Si	Si258	0.821414	0.936821	0.802229
Si	Si259	0.720925	0.439814	0.309298
Si	Si260	0.834411	0.555031	0.811644
Si	Si261	0.708248	0.056741	0.305011
Si	Si262	0.451256	0.819812	0.181728
Si	Si263	0.098733	0.319054	0.680560
Si	Si264	0.447745	0.667515	0.189070
Si	Si265	0.097830	0.163404	0.686573
Si	Si266	0.594676	0.164267	0.812068
Si	Si267	0.946607	0.665692	0.321557
Si	Si268	0.597805	0.321435	0.811158
Si	Si269	0.944595	0.821997	0.309221
Si	Si270	0.208556	0.365572	0.828342
Si	Si271	0.209530	0.128872	0.836102
Si	Si272	0.707057	0.119959	0.663397
Si	Si273	0.835377	0.620596	0.169747
Si	Si274	0.710087	0.361441	0.662951

Si	Si275	0.837228	0.859959	0.157646
Si	Si276	0.291173	0.816253	0.539468
Si	Si277	0.253595	0.319555	0.040793
Si	Si278	0.288508	0.663352	0.558020
Si	Si279	0.254111	0.162649	0.048276
Si	Si280	0.751043	0.169277	0.454399
Si	Si281	0.794909	0.668517	0.960408
Si	Si282	0.752802	0.325439	0.449898
Si	Si283	0.793780	0.824162	0.944938
Si	Si284	0.138709	0.818634	0.534315
Si	Si285	0.406894	0.317620	0.030903
Si	Si286	0.137212	0.664412	0.533720
Si	Si287	0.407164	0.163811	0.034522
Si	Si288	0.904867	0.170256	0.462494
Si	Si289	0.641240	0.668768	0.968330
Si	Si290	0.906151	0.323821	0.462668
Si	Si291	0.640330	0.822635	0.956853
Si	Si292	0.090716	0.867118	0.325088
Si	Si293	0.451757	0.367826	0.822541
Si	Si294	0.093219	0.624308	0.316167
Si	Si295	0.449207	0.122331	0.818386
Si	Si296	0.950675	0.120825	0.671470
Si	Si297	0.593891	0.620994	0.177216
Si	Si298	0.952047	0.360807	0.680370
Si	Si299	0.596736	0.863672	0.173660
Si	Si300	0.209406	0.828995	0.184072
Si	Si301	0.331187	0.331981	0.687752
Si	Si302	0.212725	0.675573	0.197611
Si	Si303	0.325606	0.176270	0.703819
Si	Si304	0.828547	0.155222	0.805252
Si	Si305	0.828348	0.310952	0.794228
Si	Si306	0.718833	0.812026	0.288654
Zn	Zn307	0.419126	0.754448	0.397522

C₆H₁₀-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M3 in Black)

Total energy = -1951.28220396 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000

```

_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1      0.472386      0.479283      0.479001
  H      H2      0.435250      0.782081      0.594571
  H      H3      0.497843      0.467137      0.444304
  H      H4      0.497084      0.810356      0.446268
  H      H5      0.597275      0.728953      0.452945
  H      H6      0.547901      0.716428      0.348877
  H      H7      0.576392      0.608055      0.437381
  H      H8      0.491319      0.620753      0.430605
  H      H9      0.579148      0.653727      0.608538
  H      H10     0.525240      0.585504      0.601690
  H      H11     0.484884      0.694398      0.694777
  H      H12     0.429885      0.652937      0.618699
  C      C13     0.466408      0.744358      0.560416
  C      C14     0.499068      0.759418      0.474633
  C      C15     0.548193      0.712086      0.429560
  C      C16     0.536730      0.640100      0.463805
  C      C17     0.532274      0.636908      0.577005
  C      C18     0.476144      0.680652      0.616889
  O      O19     0.512470      0.027106      0.213247
  O      O20     0.018816      0.537722      0.714879
  O      O21     0.519253      0.438863      0.207419
  O      O22     0.012064      0.937663      0.706011
  O      O23     0.519866      0.947592      0.794965
  O      O24     0.011286      0.454844      0.285503
  O      O25     0.512664      0.543871      0.800514
  O      O26     0.022403      0.038895      0.294304
  O      O27     0.395407      0.057914      0.284049
  O      O28     0.143644      0.552900      0.760454
  O      O29     0.390649      0.425393      0.241673
  O      O30     0.134098      0.945712      0.766935
  O      O31     0.637008      0.931806      0.718531
  O      O32     0.891988      0.423613      0.222782
  O      O33     0.633357      0.529333      0.739654
  O      O34     0.897369      0.045211      0.244746
  O      O35     0.439426      0.118958      0.123645
  O      O36     0.094978      0.613368      0.601763

```

0	037	0.447004	0.366302	0.087701
0	038	0.100944	0.858959	0.625601
0	039	0.603675	0.865478	0.879917
0	040	0.939187	0.368541	0.385899
0	041	0.604489	0.617902	0.880094
0	042	0.944472	0.118682	0.393607
0	043	0.403783	0.991988	0.114473
0	044	0.109693	0.481813	0.602175
0	045	0.435430	0.497924	0.088557
0	046	0.101270	0.988107	0.585378
0	047	0.625923	0.996381	0.888380
0	048	0.904274	0.497321	0.381879
0	049	0.598907	0.487456	0.920610
0	050	0.933820	0.987192	0.414513
0	051	0.334186	0.056952	0.454357
0	052	0.217116	0.554237	0.919503
0	053	0.326276	0.418510	0.410243
0	054	0.198302	0.944455	0.935510
0	055	0.702589	0.922324	0.553212
0	056	0.828804	0.424260	0.054473
0	057	0.698450	0.543658	0.573662
0	058	0.835034	0.037865	0.073667
0	059	0.349166	0.942991	0.355124
0	060	0.185528	0.437731	0.836490
0	061	0.348423	0.536981	0.327960
0	062	0.213026	0.046679	0.811974
0	063	0.693674	0.040097	0.642453
0	064	0.848145	0.538712	0.150421
0	065	0.717934	0.435713	0.684402
0	066	0.831420	0.935533	0.197493
0	067	0.266232	0.036202	0.290759
0	068	0.268766	0.516886	0.747891
0	069	0.262530	0.452975	0.248901
0	070	0.263373	0.929698	0.766211
0	071	0.767637	0.944788	0.719359
0	072	0.763064	0.450405	0.219251
0	073	0.761198	0.553103	0.745760
0	074	0.767313	0.047038	0.239862
0	075	0.303385	0.122753	0.616172
0	076	0.217757	0.623408	0.083521
0	077	0.310499	0.358995	0.580735
0	078	0.208947	0.864258	0.086756
0	079	0.729599	0.854500	0.391922
0	080	0.807821	0.356080	0.890671

0	081	0.712147	0.616304	0.414814
0	082	0.820716	0.116090	0.921070
0	083	0.220868	0.031175	0.544789
0	084	0.314390	0.536801	0.048159
0	085	0.214755	0.435180	0.511019
0	086	0.316558	0.922883	0.008810
0	087	0.813980	0.946479	0.456324
0	088	0.717766	0.442217	0.955342
0	089	0.817305	0.557591	0.497412
0	090	0.715518	0.056404	0.000401
0	091	0.332668	0.994310	0.627994
0	092	0.196636	0.491140	0.089251
0	093	0.325416	0.490581	0.574919
0	094	0.232288	0.994265	0.110296
0	095	0.700121	0.983733	0.379922
0	096	0.829674	0.486431	0.881638
0	097	0.728588	0.485454	0.402725
0	098	0.801571	0.986048	0.899570
0	099	0.129728	0.117419	0.599999
0	0100	0.405303	0.626220	0.094489
0	0101	0.122363	0.351978	0.580427
0	0102	0.410896	0.860189	0.104489
0	0103	0.904627	0.857405	0.406609
0	0104	0.623854	0.356497	0.907846
0	0105	0.918241	0.625981	0.425944
0	0106	0.620286	0.127282	0.916148
0	0107	0.119538	0.059672	0.424584
0	0108	0.410987	0.561937	0.920901
0	0109	0.098175	0.426614	0.424385
0	0110	0.439996	0.932696	0.947350
0	0111	0.912866	0.919023	0.579407
0	0112	0.619702	0.416131	0.082283
0	0113	0.938150	0.534552	0.562819
0	0114	0.593121	0.046180	0.064090
0	0115	0.142836	0.044174	0.231838
0	0116	0.396276	0.534295	0.727286
0	0117	0.134154	0.429826	0.234938
0	0118	0.394375	0.921875	0.763015
0	0119	0.892385	0.946692	0.770923
0	0120	0.639173	0.442488	0.274645
0	0121	0.891961	0.556540	0.744574
0	0122	0.637178	0.058635	0.249982
0	0123	0.105585	0.941162	0.341680
0	0124	0.437031	0.440628	0.852767

0	0125	0.105479	0.542108	0.330083
0	0126	0.429701	0.039793	0.832085
0	0127	0.936250	0.039580	0.647871
0	0128	0.600336	0.536946	0.150516
0	0129	0.933580	0.436907	0.693952
0	0130	0.609014	0.939832	0.178148
0	0131	0.230900	0.122570	0.151242
0	0132	0.316681	0.615063	0.635761
0	0133	0.215822	0.361543	0.125409
0	0134	0.325647	0.861452	0.628145
0	0135	0.812310	0.859626	0.853427
0	0136	0.725579	0.359510	0.351670
0	0137	0.826955	0.619503	0.882297
0	0138	0.711427	0.116644	0.383588
0	0139	0.517421	0.849371	0.218863
0	0140	0.025407	0.343953	0.715435
0	0141	0.513302	0.628201	0.207022
0	0142	0.022796	0.128150	0.713695
0	0143	0.522263	0.129231	0.784170
0	0144	0.012312	0.630733	0.288321
0	0145	0.523134	0.352238	0.782397
0	0146	0.012707	0.853285	0.295463
0	0147	0.401711	0.814486	0.289886
0	0148	0.148070	0.320563	0.768069
0	0149	0.400085	0.667157	0.285361
0	0150	0.139327	0.154250	0.789737
0	0151	0.643460	0.149149	0.725151
0	0152	0.890155	0.650852	0.237419
0	0153	0.643143	0.329291	0.716329
0	0154	0.898365	0.823534	0.215395
0	0155	0.458081	0.741345	0.148626
0	0156	0.087493	0.235160	0.652459
0	0157	0.585224	0.241189	0.835162
0	0158	0.950792	0.741396	0.347861
0	0159	0.329013	0.812041	0.446082
0	0160	0.210674	0.326777	0.936215
0	0161	0.332809	0.660384	0.449530
0	0162	0.204634	0.136878	0.959002
0	0163	0.717714	0.159904	0.569461
0	0164	0.827207	0.657372	0.070901
0	0165	0.705067	0.341049	0.545103
0	0166	0.835310	0.846923	0.046850
0	0167	0.263087	0.846129	0.263378
0	0168	0.275502	0.351941	0.770586

0	0169	0.258949	0.642650	0.269641
0	0170	0.270611	0.163732	0.797376
0	0171	0.771506	0.122704	0.740086
0	0172	0.763545	0.620928	0.234167
0	0173	0.774573	0.319647	0.706782
0	0174	0.767206	0.821968	0.207443
0	0175	0.288923	0.737898	0.594472
0	0176	0.245279	0.239367	0.071559
0	0177	0.743238	0.241612	0.423638
0	0178	0.798542	0.743198	0.931746
0	0179	0.213299	0.838654	0.531090
0	0180	0.326124	0.339496	0.025666
0	0181	0.212613	0.638874	0.523459
0	0182	0.328005	0.141580	0.022901
0	0183	0.827012	0.143584	0.465641
0	0184	0.714813	0.644940	0.975036
0	0185	0.825898	0.339751	0.474727
0	0186	0.713632	0.839058	0.979991
0	0187	0.131239	0.737750	0.570657
0	0188	0.410006	0.241056	0.067997
0	0189	0.911416	0.243640	0.431116
0	0190	0.630229	0.742210	0.928334
0	0191	0.100997	0.825919	0.432926
0	0192	0.428433	0.315144	0.908226
0	0193	0.105064	0.659863	0.417778
0	0194	0.443039	0.151506	0.933628
0	0195	0.931889	0.162304	0.580357
0	0196	0.601542	0.656620	0.069650
0	0197	0.938002	0.331750	0.573041
0	0198	0.598367	0.829915	0.068614
0	0199	0.134393	0.830373	0.240905
0	0200	0.400648	0.348032	0.721505
0	0201	0.132341	0.651592	0.224879
0	0202	0.396974	0.153154	0.747673
0	0203	0.899329	0.138621	0.767842
0	0204	0.636950	0.641632	0.258270
0	0205	0.900544	0.318844	0.761038
0	0206	0.640920	0.822564	0.255177
0	0207	0.215109	0.743457	0.158315
0	0208	0.322863	0.246674	0.670194
0	0209	0.816844	0.231302	0.834550
0	0210	0.720660	0.731245	0.328548
Al	Al211	0.331550	0.860573	0.333962
Al	Al212	0.330076	0.620370	0.329356

Si	Si213	0.708843	0.652764	0.307500
Si	Si214	0.437945	0.048840	0.183863
Si	Si215	0.092124	0.546466	0.669274
Si	Si216	0.446725	0.432240	0.157586
Si	Si217	0.087942	0.932698	0.671120
Si	Si218	0.596436	0.935781	0.821753
Si	Si219	0.937462	0.436070	0.319982
Si	Si220	0.588378	0.544346	0.836179
Si	Si221	0.948718	0.047407	0.336737
Si	Si222	0.336316	0.021523	0.345560
Si	Si223	0.203542	0.515471	0.816774
Si	Si224	0.332297	0.460202	0.306753
Si	Si225	0.202174	0.966609	0.820639
Si	Si226	0.700418	0.960183	0.659388
Si	Si227	0.832882	0.459433	0.162363
Si	Si228	0.703061	0.515189	0.686038
Si	Si229	0.832860	0.016399	0.189245
Si	Si230	0.297713	0.051501	0.560329
Si	Si231	0.236038	0.552038	0.036193
Si	Si232	0.293968	0.425822	0.518876
Si	Si233	0.238831	0.930812	0.037042
Si	Si234	0.736910	0.926742	0.444887
Si	Si235	0.795948	0.426930	0.945246
Si	Si236	0.739714	0.550597	0.471353
Si	Si237	0.793103	0.049127	0.973266
Si	Si238	0.143233	0.049386	0.538374
Si	Si239	0.391229	0.555743	0.037774
Si	Si240	0.136868	0.423825	0.529121
Si	Si241	0.392427	0.927520	0.043989
Si	Si242	0.891485	0.927310	0.463974
Si	Si243	0.640198	0.425128	0.966634
Si	Si244	0.894471	0.553809	0.467004
Si	Si245	0.638947	0.056473	0.967136
Si	Si246	0.097493	0.020743	0.323714
Si	Si247	0.438738	0.519747	0.826402
Si	Si248	0.087596	0.463498	0.318227
Si	Si249	0.445794	0.960637	0.834352
Si	Si250	0.938697	0.960686	0.675567
Si	Si251	0.594114	0.458217	0.178381
Si	Si252	0.945688	0.516254	0.679630
Si	Si253	0.587769	0.018262	0.177054
Si	Si254	0.218737	0.048649	0.196500
Si	Si255	0.325965	0.538482	0.671718
Si	Si256	0.203090	0.434054	0.174899

Si	Si257	0.328209	0.928013	0.696533
Si	Si258	0.818464	0.934848	0.810513
Si	Si259	0.714499	0.434771	0.311630
Si	Si260	0.827171	0.553284	0.813790
Si	Si261	0.704545	0.051432	0.313573
Si	Si262	0.446700	0.816758	0.189713
Si	Si263	0.095517	0.313471	0.678712
Si	Si264	0.443769	0.665033	0.183104
Si	Si265	0.095003	0.158667	0.689345
Si	Si266	0.592510	0.161944	0.815253
Si	Si267	0.943322	0.662547	0.324813
Si	Si268	0.593906	0.319617	0.810176
Si	Si269	0.942152	0.818862	0.316412
Si	Si270	0.205365	0.359493	0.827220
Si	Si271	0.206137	0.125183	0.839750
Si	Si272	0.706723	0.117725	0.670140
Si	Si273	0.832596	0.616447	0.173709
Si	Si274	0.709484	0.356377	0.663255
Si	Si275	0.833791	0.857396	0.166376
Si	Si276	0.288077	0.813498	0.550400
Si	Si277	0.249627	0.316893	0.039924
Si	Si278	0.287007	0.662512	0.549728
Si	Si279	0.251984	0.160327	0.050387
Si	Si280	0.749943	0.164992	0.459862
Si	Si281	0.791841	0.666030	0.964345
Si	Si282	0.749942	0.320093	0.449797
Si	Si283	0.790205	0.821932	0.954102
Si	Si284	0.136163	0.815736	0.539344
Si	Si285	0.402613	0.315640	0.022801
Si	Si286	0.135554	0.662140	0.528333
Si	Si287	0.404689	0.162910	0.037605
Si	Si288	0.903801	0.166841	0.467628
Si	Si289	0.637846	0.665138	0.963301
Si	Si290	0.903561	0.320748	0.466191
Si	Si291	0.636761	0.819272	0.964392
Si	Si292	0.089284	0.862655	0.326749
Si	Si293	0.447329	0.363899	0.816049
Si	Si294	0.089555	0.620930	0.314513
Si	Si295	0.447659	0.118478	0.824254
Si	Si296	0.947602	0.117160	0.677680
Si	Si297	0.588339	0.615373	0.171189
Si	Si298	0.949461	0.357886	0.685484
Si	Si299	0.591843	0.860885	0.179421
Si	Si300	0.206698	0.821098	0.189556

Si	Si301	0.327179	0.326080	0.686897
Si	Si302	0.207435	0.665235	0.186350
Si	Si303	0.323748	0.170451	0.707790
Si	Si304	0.827257	0.152579	0.814472
Si	Si305	0.825474	0.307587	0.798316
Si	Si306	0.714750	0.808598	0.295681
Zn	Zn307	0.397666	0.738695	0.403566

C₆H₁₀-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M1 in Blue) Total energy = -1943.93983722 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.439311	0.806044	0.586044
H	H2	0.499695	0.821953	0.432939
H	H3	0.604478	0.750208	0.453488
H	H4	0.554936	0.720354	0.357912
H	H5	0.594868	0.628877	0.474425
H	H6	0.508809	0.631905	0.466526
H	H7	0.592012	0.697019	0.629667
H	H8	0.546863	0.622768	0.643663
H	H9	0.492220	0.734138	0.706144
H	H10	0.443307	0.679000	0.639713
C	C11	0.472525	0.766971	0.560997
C	C12	0.504540	0.774705	0.472510
C	C13	0.556711	0.726574	0.438366
C	C14	0.552214	0.659515	0.492474
C	C15	0.547777	0.670459	0.604719
C	C16	0.486561	0.711263	0.632467
O	O17	0.514397	0.025691	0.212652
O	O18	0.024731	0.535190	0.718274
O	O19	0.527844	0.436010	0.210187
O	O20	0.013378	0.937340	0.702467

0	021	0.521285	0.944410	0.793954
0	022	0.018958	0.454212	0.291095
0	023	0.518145	0.544102	0.803966
0	024	0.023955	0.038565	0.291681
0	025	0.396831	0.058029	0.280655
0	026	0.145081	0.558517	0.779684
0	027	0.403784	0.429816	0.267360
0	028	0.134859	0.949130	0.765140
0	029	0.637161	0.934204	0.713005
0	030	0.901477	0.427518	0.219726
0	031	0.638783	0.534147	0.740790
0	032	0.898718	0.047794	0.242928
0	033	0.441723	0.113720	0.115598
0	034	0.102374	0.615900	0.614688
0	035	0.445277	0.361601	0.110467
0	036	0.104545	0.861170	0.623988
0	037	0.609069	0.861680	0.870009
0	038	0.941667	0.367959	0.383276
0	039	0.608785	0.615749	0.889953
0	040	0.947317	0.118033	0.394350
0	041	0.406176	0.986314	0.116596
0	042	0.126791	0.485828	0.619237
0	043	0.437933	0.493317	0.099606
0	044	0.102126	0.990501	0.583318
0	045	0.627336	0.992691	0.888327
0	046	0.910593	0.497512	0.383584
0	047	0.605233	0.483988	0.917799
0	048	0.934858	0.986467	0.410172
0	049	0.335202	0.058813	0.451721
0	050	0.206659	0.545259	0.948770
0	051	0.342325	0.432042	0.439043
0	052	0.200881	0.944808	0.931790
0	053	0.704923	0.920961	0.550793
0	054	0.836319	0.423675	0.053552
0	055	0.703539	0.544603	0.573682
0	056	0.836801	0.038294	0.071456
0	057	0.351458	0.943865	0.355978
0	058	0.193560	0.440500	0.827994
0	059	0.346101	0.541396	0.328664
0	060	0.218061	0.047023	0.809036
0	061	0.698035	0.039868	0.636935
0	062	0.853207	0.540103	0.144092
0	063	0.719354	0.436629	0.685449
0	064	0.837236	0.935682	0.194838

0	065	0.267989	0.035828	0.287935
0	066	0.274237	0.539124	0.783003
0	067	0.273820	0.437031	0.274655
0	068	0.263741	0.929137	0.760302
0	069	0.768079	0.943474	0.718719
0	070	0.772126	0.451098	0.219774
0	071	0.767264	0.552491	0.745378
0	072	0.768718	0.044691	0.237453
0	073	0.302221	0.128223	0.609978
0	074	0.229028	0.621236	0.102586
0	075	0.313476	0.365756	0.599726
0	076	0.208520	0.865901	0.084372
0	077	0.728075	0.855897	0.386404
0	078	0.813524	0.355891	0.890175
0	079	0.724456	0.618943	0.417651
0	080	0.820050	0.116362	0.919061
0	081	0.221700	0.033704	0.542373
0	082	0.319083	0.532872	0.047862
0	083	0.219710	0.432848	0.507225
0	084	0.318194	0.920830	0.007119
0	085	0.815097	0.945486	0.451253
0	086	0.724924	0.443023	0.956193
0	087	0.824421	0.554351	0.504570
0	088	0.716636	0.054166	0.999331
0	089	0.333480	0.001297	0.630126
0	090	0.207488	0.490133	0.124736
0	091	0.312952	0.497862	0.603965
0	092	0.235351	0.995542	0.105900
0	093	0.700803	0.985984	0.380650
0	094	0.836726	0.486082	0.880524
0	095	0.735724	0.487740	0.401973
0	096	0.803586	0.985943	0.897487
0	097	0.129886	0.119991	0.596441
0	098	0.407516	0.621479	0.110483
0	099	0.129024	0.355292	0.591691
0	0100	0.412092	0.854849	0.099575
0	0101	0.906325	0.856541	0.404609
0	0102	0.633699	0.354073	0.908618
0	0103	0.920033	0.626660	0.425950
0	0104	0.621898	0.123998	0.912546
0	0105	0.120761	0.061457	0.421549
0	0106	0.421596	0.562607	0.934439
0	0107	0.096310	0.434841	0.444296
0	0108	0.441648	0.929779	0.946220

0	0109	0.913604	0.919862	0.576158
0	0110	0.626702	0.415458	0.081917
0	0111	0.947259	0.536956	0.563056
0	0112	0.594159	0.044578	0.062342
0	0113	0.144477	0.040755	0.229398
0	0114	0.399521	0.536044	0.741011
0	0115	0.143985	0.422166	0.261801
0	0116	0.395003	0.925973	0.761663
0	0117	0.893625	0.948703	0.766929
0	0118	0.647896	0.444773	0.272707
0	0119	0.897895	0.557447	0.743885
0	0120	0.638940	0.059588	0.247588
0	0121	0.106388	0.941251	0.345689
0	0122	0.443579	0.441949	0.863325
0	0123	0.113774	0.541680	0.331027
0	0124	0.435997	0.040021	0.839473
0	0125	0.939810	0.040261	0.643657
0	0126	0.603651	0.536556	0.147776
0	0127	0.936878	0.437379	0.690649
0	0128	0.612397	0.939774	0.179382
0	0129	0.229934	0.122896	0.150256
0	0130	0.325381	0.623828	0.651672
0	0131	0.221437	0.357522	0.141605
0	0132	0.330129	0.868962	0.619007
0	0133	0.816542	0.859699	0.851106
0	0134	0.732983	0.361456	0.352048
0	0135	0.831934	0.619090	0.882822
0	0136	0.714445	0.118699	0.378378
0	0137	0.519740	0.849546	0.213159
0	0138	0.028558	0.345407	0.719347
0	0139	0.519684	0.627971	0.213858
0	0140	0.024157	0.130513	0.712425
0	0141	0.523072	0.132225	0.782831
0	0142	0.019325	0.630272	0.297499
0	0143	0.527974	0.352093	0.792599
0	0144	0.015257	0.853139	0.295092
0	0145	0.404961	0.815963	0.288292
0	0146	0.150028	0.321239	0.779589
0	0147	0.407969	0.668221	0.297435
0	0148	0.140991	0.152241	0.788363
0	0149	0.644307	0.146609	0.721238
0	0150	0.899211	0.648745	0.234555
0	0151	0.644946	0.329860	0.714611
0	0152	0.901364	0.822162	0.213658

0	0153	0.461558	0.738571	0.152097
0	0154	0.091797	0.237600	0.656535
0	0155	0.591753	0.240112	0.835523
0	0156	0.954500	0.741151	0.347444
0	0157	0.330900	0.812408	0.442575
0	0158	0.209084	0.338010	0.950311
0	0159	0.341259	0.662175	0.462305
0	0160	0.206098	0.136042	0.956720
0	0161	0.719114	0.160255	0.565770
0	0162	0.834037	0.660393	0.070269
0	0163	0.708546	0.342566	0.544538
0	0164	0.839115	0.846787	0.044470
0	0165	0.266465	0.849601	0.258323
0	0166	0.279463	0.344674	0.787205
0	0167	0.265212	0.656819	0.285686
0	0168	0.271913	0.165607	0.794687
0	0169	0.772964	0.124047	0.736801
0	0170	0.771139	0.622662	0.233701
0	0171	0.776405	0.320564	0.707387
0	0172	0.770316	0.823441	0.204523
0	0173	0.293975	0.744027	0.599271
0	0174	0.245343	0.238950	0.067630
0	0175	0.746556	0.243100	0.422706
0	0176	0.802436	0.743244	0.928729
0	0177	0.216303	0.841129	0.528395
0	0178	0.328188	0.338534	0.030868
0	0179	0.220528	0.640761	0.536529
0	0180	0.328326	0.139987	0.023583
0	0181	0.829275	0.144031	0.463130
0	0182	0.720627	0.644787	0.978320
0	0183	0.830522	0.339039	0.479223
0	0184	0.717384	0.839155	0.977003
0	0185	0.136771	0.739580	0.574441
0	0186	0.409865	0.238189	0.074895
0	0187	0.914947	0.243542	0.429655
0	0188	0.634722	0.740776	0.930510
0	0189	0.103400	0.824330	0.432873
0	0190	0.436230	0.317916	0.924418
0	0191	0.112553	0.656031	0.428175
0	0192	0.441052	0.156437	0.929424
0	0193	0.932524	0.163496	0.580310
0	0194	0.609199	0.658903	0.078004
0	0195	0.945264	0.331905	0.570769
0	0196	0.600119	0.834297	0.060993

O	O197	0.137461	0.832215	0.241703
O	O198	0.404702	0.347606	0.737380
O	O199	0.138935	0.654611	0.234949
O	O200	0.397237	0.147062	0.742972
O	O201	0.900749	0.136191	0.767446
O	O202	0.643702	0.635440	0.265492
O	O203	0.903181	0.318779	0.756438
O	O204	0.643293	0.819578	0.246277
O	O205	0.217491	0.745515	0.156870
O	O206	0.329889	0.248414	0.672531
O	O207	0.820308	0.231350	0.832188
O	O208	0.724121	0.731898	0.325125
Al	Al209	0.334311	0.861665	0.331033
Al	Al210	0.334899	0.625404	0.340523
Si	Si211	0.716284	0.652425	0.308806
Si	Si212	0.439759	0.045916	0.181377
Si	Si213	0.099508	0.548940	0.682071
Si	Si214	0.452312	0.430382	0.172681
Si	Si215	0.089608	0.934640	0.668714
Si	Si216	0.598445	0.933780	0.817881
Si	Si217	0.943889	0.436786	0.320610
Si	Si218	0.594001	0.544142	0.839036
Si	Si219	0.950430	0.047708	0.334637
Si	Si220	0.337962	0.022141	0.343706
Si	Si221	0.204918	0.520423	0.835387
Si	Si222	0.341491	0.461873	0.326593
Si	Si223	0.204240	0.967399	0.817179
Si	Si224	0.702331	0.960047	0.655941
Si	Si225	0.840714	0.460717	0.160051
Si	Si226	0.707563	0.516619	0.686532
Si	Si227	0.835387	0.016578	0.187004
Si	Si228	0.298174	0.055558	0.557559
Si	Si229	0.240565	0.548014	0.057179
Si	Si230	0.297191	0.432236	0.537356
Si	Si231	0.240563	0.931188	0.034022
Si	Si232	0.737652	0.927061	0.441550
Si	Si233	0.802893	0.426903	0.944728
Si	Si234	0.747351	0.551226	0.473658
Si	Si235	0.794240	0.048734	0.971434
Si	Si236	0.143982	0.051676	0.535705
Si	Si237	0.396097	0.552621	0.048229
Si	Si238	0.143326	0.427121	0.540579
Si	Si239	0.394060	0.923743	0.042604
Si	Si240	0.892623	0.926908	0.460382

Si	Si241	0.647818	0.423671	0.966403
Si	Si242	0.900720	0.553741	0.469125
Si	Si243	0.640213	0.053799	0.965367
Si	Si244	0.098843	0.020333	0.322519
Si	Si245	0.445074	0.520963	0.836712
Si	Si246	0.093548	0.463347	0.331322
Si	Si247	0.448140	0.960327	0.834992
Si	Si248	0.940391	0.961416	0.671781
Si	Si249	0.601127	0.457838	0.177717
Si	Si250	0.951710	0.516573	0.679630
Si	Si251	0.589737	0.017794	0.176062
Si	Si252	0.220133	0.048093	0.194033
Si	Si253	0.327207	0.548273	0.694923
Si	Si254	0.212441	0.427299	0.200601
Si	Si255	0.329815	0.932577	0.693247
Si	Si256	0.820458	0.935028	0.808118
Si	Si257	0.722622	0.436561	0.311205
Si	Si258	0.833179	0.553259	0.813380
Si	Si259	0.706314	0.052218	0.311248
Si	Si260	0.449225	0.815118	0.187514
Si	Si261	0.099693	0.315275	0.686785
Si	Si262	0.448995	0.663305	0.192648
Si	Si263	0.096815	0.159959	0.688517
Si	Si264	0.595032	0.160975	0.813031
Si	Si265	0.948813	0.662003	0.326170
Si	Si266	0.599492	0.318864	0.812599
Si	Si267	0.944845	0.818251	0.315118
Si	Si268	0.208243	0.361294	0.835752
Si	Si269	0.208664	0.125120	0.837489
Si	Si270	0.708697	0.117595	0.666145
Si	Si271	0.839569	0.617575	0.171522
Si	Si272	0.711695	0.357400	0.662988
Si	Si273	0.837705	0.857460	0.163955
Si	Si274	0.291443	0.817382	0.547919
Si	Si275	0.251344	0.318027	0.047724
Si	Si276	0.294592	0.666914	0.561302
Si	Si277	0.252292	0.159765	0.049140
Si	Si278	0.752366	0.166013	0.456852
Si	Si279	0.797271	0.666506	0.964236
Si	Si280	0.754624	0.321160	0.450730
Si	Si281	0.794074	0.821944	0.951542
Si	Si282	0.139719	0.816816	0.539092
Si	Si283	0.404617	0.314467	0.035329
Si	Si284	0.142936	0.662671	0.538238

Si	Si285	0.405003	0.161646	0.036477
Si	Si286	0.906120	0.166979	0.466586
Si	Si287	0.643401	0.664692	0.969365
Si	Si288	0.908077	0.320545	0.465880
Si	Si289	0.640673	0.819044	0.960005
Si	Si290	0.091535	0.862680	0.327842
Si	Si291	0.453030	0.364706	0.829403
Si	Si292	0.096702	0.620667	0.322504
Si	Si293	0.449073	0.119047	0.823550
Si	Si294	0.949354	0.117577	0.676322
Si	Si295	0.594321	0.614393	0.176198
Si	Si296	0.953477	0.358361	0.683867
Si	Si297	0.594251	0.861100	0.174177
Si	Si298	0.208882	0.823279	0.187680
Si	Si299	0.331719	0.326562	0.700151
Si	Si300	0.213975	0.669415	0.197289
Si	Si301	0.325483	0.171316	0.705261
Si	Si302	0.828674	0.152394	0.812471
Si	Si303	0.828806	0.307744	0.796535
Si	Si304	0.716724	0.808711	0.290498
Zn	Zn305	0.403873	0.742922	0.407863

TS-C₆H₁₀-Dehydro-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS1 in Blue) Total energy = -1941.42629799 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.471955	0.636864	0.714502
H	H2	0.513417	0.551144	0.604932
H	H3	0.493308	0.591807	0.420077
H	H4	0.575326	0.590608	0.458394
H	H5	0.541995	0.699969	0.374154

H	H6	0.578278	0.708334	0.491519
H	H7	0.403461	0.683831	0.478261
H	H8	0.485081	0.782550	0.484605
H	H9	0.424562	0.737254	0.638878
H	H10	0.508818	0.752130	0.642267
C	C11	0.483649	0.648827	0.638216
C	C12	0.507296	0.601726	0.577576
C	C13	0.528010	0.615006	0.472310
C	C14	0.534101	0.689989	0.452979
C	C15	0.474707	0.728484	0.494564
C	C16	0.471261	0.719803	0.608058
O	O17	0.516415	0.022617	0.210954
O	O18	0.021977	0.536813	0.712838
O	O19	0.525325	0.434493	0.211558
O	O20	0.017650	0.936116	0.704077
O	O21	0.526126	0.951135	0.791107
O	O22	0.015876	0.454053	0.289890
O	O23	0.514513	0.536784	0.806487
O	O24	0.025779	0.034935	0.292635
O	O25	0.399349	0.059268	0.278698
O	O26	0.139709	0.551699	0.787380
O	O27	0.398933	0.424968	0.257504
O	O28	0.141223	0.939877	0.758399
O	O29	0.644256	0.925314	0.722863
O	O30	0.897746	0.422768	0.223898
O	O31	0.635735	0.523834	0.742016
O	O32	0.900349	0.039350	0.245121
O	O33	0.445815	0.111331	0.112278
O	O34	0.109821	0.614609	0.621800
O	O35	0.447423	0.360499	0.102152
O	O36	0.102929	0.860037	0.610826
O	O37	0.601876	0.864618	0.885131
O	O38	0.942475	0.368847	0.390218
O	O39	0.606581	0.616530	0.876393
O	O40	0.948369	0.118435	0.386847
O	O41	0.406493	0.985078	0.117654
O	O42	0.125697	0.483466	0.621115
O	O43	0.438906	0.492925	0.096934
O	O44	0.104715	0.991218	0.584450
O	O45	0.632789	0.993805	0.888677
O	O46	0.906945	0.497278	0.382283
O	O47	0.603850	0.487947	0.926682
O	O48	0.938097	0.987916	0.418539
O	O49	0.336265	0.062027	0.448285

0	050	0.212605	0.555270	0.946271
0	051	0.337555	0.429685	0.428789
0	052	0.204483	0.942171	0.927178
0	053	0.707250	0.920406	0.554708
0	054	0.834148	0.422151	0.056181
0	055	0.701486	0.541432	0.576709
0	056	0.838400	0.035006	0.074532
0	057	0.355131	0.945696	0.357234
0	058	0.191110	0.438961	0.855405
0	059	0.348887	0.539575	0.321469
0	060	0.215511	0.044667	0.804970
0	061	0.696880	0.036543	0.648699
0	062	0.851552	0.537233	0.150460
0	063	0.723932	0.433710	0.685569
0	064	0.829831	0.932399	0.197349
0	065	0.270505	0.033691	0.284906
0	066	0.267951	0.528508	0.772886
0	067	0.269639	0.440715	0.264247
0	068	0.270632	0.929666	0.757885
0	069	0.774462	0.941806	0.719135
0	070	0.768740	0.448163	0.222417
0	071	0.763590	0.551113	0.749970
0	072	0.770220	0.045780	0.240380
0	073	0.305775	0.127308	0.610374
0	074	0.229736	0.619488	0.114107
0	075	0.316697	0.367382	0.594103
0	076	0.213085	0.860047	0.075657
0	077	0.735787	0.852569	0.393583
0	078	0.808948	0.353474	0.893719
0	079	0.710595	0.611113	0.415011
0	080	0.830913	0.112027	0.920172
0	081	0.224357	0.033845	0.541835
0	082	0.317468	0.529508	0.056712
0	083	0.217687	0.430536	0.506626
0	084	0.321674	0.919341	0.002847
0	085	0.818143	0.946339	0.457594
0	086	0.723180	0.443778	0.959479
0	087	0.819358	0.558159	0.498084
0	088	0.721209	0.058544	0.996232
0	089	0.337562	0.999589	0.622820
0	090	0.200454	0.488704	0.114042
0	091	0.312724	0.500004	0.591517
0	092	0.236742	0.989958	0.104424
0	093	0.703907	0.981137	0.380843

0	094	0.835370	0.482811	0.881159
0	095	0.734105	0.480972	0.407641
0	096	0.805540	0.982583	0.900731
0	097	0.132487	0.120758	0.593787
0	098	0.407022	0.621648	0.099740
0	099	0.122833	0.354713	0.584500
0	0100	0.421644	0.856443	0.084742
0	0101	0.909135	0.858067	0.406943
0	0102	0.630705	0.357677	0.909117
0	0103	0.919564	0.625912	0.426254
0	0104	0.620951	0.124170	0.916831
0	0105	0.123335	0.059452	0.420405
0	0106	0.414056	0.556837	0.929496
0	0107	0.095869	0.439384	0.440592
0	0108	0.443323	0.940899	0.939847
0	0109	0.916525	0.918237	0.581262
0	0110	0.625527	0.414773	0.085678
0	0111	0.940508	0.534848	0.562821
0	0112	0.600110	0.042461	0.065124
0	0113	0.146131	0.032946	0.229291
0	0114	0.395039	0.526179	0.739226
0	0115	0.140625	0.420218	0.255942
0	0116	0.401222	0.924680	0.753411
0	0117	0.898647	0.945883	0.773377
0	0118	0.644912	0.441348	0.277638
0	0119	0.894886	0.555488	0.745071
0	0120	0.640014	0.056054	0.252554
0	0121	0.106579	0.937441	0.351242
0	0122	0.439951	0.435118	0.864484
0	0123	0.112603	0.541402	0.317697
0	0124	0.434177	0.043904	0.818058
0	0125	0.941562	0.038641	0.649882
0	0126	0.603181	0.535203	0.154743
0	0127	0.936384	0.436173	0.691941
0	0128	0.614471	0.936622	0.179922
0	0129	0.228167	0.117537	0.148025
0	0130	0.321864	0.621741	0.659614
0	0131	0.218523	0.357050	0.132871
0	0132	0.333483	0.867081	0.613479
0	0133	0.819991	0.856599	0.853290
0	0134	0.730364	0.356128	0.352484
0	0135	0.830379	0.615734	0.886965
0	0136	0.715137	0.113986	0.385726
0	0137	0.521496	0.846460	0.214547

0	0138	0.027172	0.343542	0.720773
0	0139	0.516485	0.627336	0.208620
0	0140	0.027904	0.128937	0.712252
0	0141	0.525549	0.135813	0.781714
0	0142	0.018246	0.631712	0.297112
0	0143	0.526524	0.348623	0.790798
0	0144	0.016439	0.850052	0.294600
0	0145	0.402658	0.820366	0.274294
0	0146	0.150749	0.325993	0.772553
0	0147	0.403101	0.669236	0.285769
0	0148	0.145413	0.154020	0.785514
0	0149	0.648663	0.147671	0.727134
0	0150	0.897274	0.648088	0.234959
0	0151	0.644798	0.330618	0.716237
0	0152	0.900687	0.823078	0.216199
0	0153	0.460514	0.738738	0.145016
0	0154	0.092591	0.237578	0.655784
0	0155	0.595211	0.241018	0.840606
0	0156	0.952030	0.740819	0.349078
0	0157	0.330699	0.812769	0.433323
0	0158	0.212253	0.323446	0.942712
0	0159	0.350999	0.652114	0.469838
0	0160	0.208128	0.133603	0.955483
0	0161	0.724083	0.155014	0.571929
0	0162	0.827568	0.656419	0.074226
0	0163	0.708440	0.339120	0.546399
0	0164	0.836694	0.843350	0.047730
0	0165	0.264568	0.857524	0.254869
0	0166	0.278620	0.354719	0.780770
0	0167	0.263281	0.654814	0.299099
0	0168	0.277015	0.159833	0.797208
0	0169	0.776106	0.119298	0.743917
0	0170	0.769652	0.619205	0.241634
0	0171	0.775942	0.315706	0.709824
0	0172	0.769314	0.816870	0.208687
0	0173	0.299153	0.741936	0.591647
0	0174	0.247188	0.234701	0.074034
0	0175	0.746295	0.238777	0.427044
0	0176	0.801150	0.740177	0.931260
0	0177	0.218836	0.838845	0.527820
0	0178	0.328419	0.334945	0.031816
0	0179	0.224439	0.639701	0.529614
0	0180	0.329678	0.136002	0.026777
0	0181	0.832029	0.141906	0.463858

O	O182	0.716525	0.642681	0.974580
O	O183	0.829494	0.336819	0.477780
O	O184	0.716955	0.838349	0.971098
O	O185	0.139943	0.737008	0.571808
O	O186	0.410998	0.235175	0.074890
O	O187	0.915990	0.242820	0.429808
O	O188	0.632646	0.740279	0.927264
O	O189	0.109962	0.816321	0.423183
O	O190	0.434103	0.310689	0.920338
O	O191	0.110662	0.647887	0.433058
O	O192	0.440605	0.153289	0.927231
O	O193	0.938638	0.159470	0.575354
O	O194	0.602104	0.652799	0.066563
O	O195	0.941443	0.328362	0.576080
O	O196	0.606955	0.825392	0.072250
O	O197	0.137136	0.834765	0.231383
O	O198	0.403935	0.341755	0.733876
O	O199	0.138553	0.660072	0.241082
O	O200	0.401462	0.159122	0.738445
O	O201	0.904080	0.140819	0.763085
O	O202	0.641465	0.642657	0.254302
O	O203	0.901997	0.319195	0.763503
O	O204	0.643903	0.820121	0.261607
O	O205	0.223731	0.745146	0.166184
O	O206	0.318686	0.250130	0.671939
O	O207	0.820594	0.228895	0.837617
O	O208	0.724082	0.728493	0.335022
Al	Al209	0.333423	0.865899	0.325999
Al	Al210	0.337054	0.622886	0.339655
Si	Si211	0.711705	0.650545	0.310031
Si	Si212	0.442275	0.044641	0.180110
Si	Si213	0.098721	0.546616	0.684647
Si	Si214	0.451339	0.428262	0.167708
Si	Si215	0.092548	0.931830	0.664323
Si	Si216	0.600944	0.933974	0.822994
Si	Si217	0.941506	0.435687	0.322739
Si	Si218	0.590968	0.541418	0.838034
Si	Si219	0.952375	0.045175	0.335658
Si	Si220	0.340472	0.023596	0.341933
Si	Si221	0.202984	0.518382	0.840807
Si	Si222	0.338674	0.460424	0.317115
Si	Si223	0.208059	0.964158	0.812319
Si	Si224	0.705864	0.956482	0.662267
Si	Si225	0.837883	0.457755	0.163897

Si	Si226	0.706265	0.512654	0.688856
Si	Si227	0.834817	0.013121	0.189716
Si	Si228	0.300997	0.055707	0.555230
Si	Si229	0.239572	0.548958	0.059046
Si	Si230	0.296035	0.431930	0.530414
Si	Si231	0.243742	0.927529	0.029232
Si	Si232	0.741454	0.924966	0.446352
Si	Si233	0.800534	0.425212	0.947386
Si	Si234	0.741832	0.547962	0.473550
Si	Si235	0.798756	0.047055	0.972309
Si	Si236	0.146606	0.051602	0.534994
Si	Si237	0.393993	0.550067	0.045957
Si	Si238	0.140897	0.427022	0.537850
Si	Si239	0.397641	0.926437	0.035878
Si	Si240	0.895614	0.927299	0.465806
Si	Si241	0.645855	0.425524	0.970310
Si	Si242	0.896349	0.553713	0.467413
Si	Si243	0.644072	0.054545	0.966782
Si	Si244	0.100461	0.016206	0.323883
Si	Si245	0.440823	0.513646	0.835609
Si	Si246	0.091520	0.463496	0.325449
Si	Si247	0.451050	0.965120	0.825362
Si	Si248	0.943875	0.959686	0.676727
Si	Si249	0.599269	0.456290	0.181929
Si	Si250	0.948551	0.515642	0.679048
Si	Si251	0.592509	0.014845	0.177737
Si	Si252	0.221101	0.042697	0.192166
Si	Si253	0.324186	0.543196	0.691626
Si	Si254	0.208051	0.426816	0.191736
Si	Si255	0.334998	0.931172	0.686916
Si	Si256	0.824565	0.932250	0.811394
Si	Si257	0.719977	0.432025	0.314421
Si	Si258	0.830680	0.550767	0.815755
Si	Si259	0.707866	0.049120	0.315144
Si	Si260	0.451614	0.816179	0.177584
Si	Si261	0.098246	0.315750	0.683674
Si	Si262	0.446685	0.663212	0.183781
Si	Si263	0.099712	0.160041	0.686941
Si	Si264	0.597462	0.162136	0.816412
Si	Si265	0.947076	0.661842	0.326380
Si	Si266	0.599328	0.319407	0.813915
Si	Si267	0.944914	0.818140	0.316652
Si	Si268	0.208153	0.360967	0.836954
Si	Si269	0.210851	0.122731	0.836224

Si	Si270	0.711553	0.114341	0.673473
Si	Si271	0.836624	0.614846	0.175968
Si	Si272	0.712688	0.354747	0.664472
Si	Si273	0.834794	0.854242	0.167027
Si	Si274	0.294871	0.815971	0.541757
Si	Si275	0.251703	0.312871	0.045988
Si	Si276	0.297333	0.663429	0.564025
Si	Si277	0.253273	0.155940	0.049979
Si	Si278	0.754523	0.161987	0.461508
Si	Si279	0.793783	0.663451	0.966109
Si	Si280	0.753626	0.317340	0.451867
Si	Si281	0.793883	0.819219	0.952076
Si	Si282	0.142404	0.813616	0.532961
Si	Si283	0.404939	0.310814	0.032921
Si	Si284	0.145968	0.659505	0.538513
Si	Si285	0.406384	0.158728	0.035416
Si	Si286	0.908766	0.165445	0.463966
Si	Si287	0.639560	0.662885	0.961257
Si	Si288	0.907353	0.319118	0.468446
Si	Si289	0.639963	0.817189	0.963571
Si	Si290	0.093216	0.859679	0.323994
Si	Si291	0.451214	0.358848	0.827065
Si	Si292	0.095271	0.620415	0.322157
Si	Si293	0.450330	0.123107	0.816784
Si	Si294	0.953030	0.116783	0.675389
Si	Si295	0.591273	0.614101	0.170992
Si	Si296	0.951646	0.356854	0.687668
Si	Si297	0.597405	0.857665	0.181445
Si	Si298	0.210445	0.824066	0.184310
Si	Si299	0.329368	0.328121	0.696341
Si	Si300	0.215048	0.669520	0.206898
Si	Si301	0.326227	0.173036	0.704164
Si	Si302	0.832996	0.150724	0.814834
Si	Si303	0.827421	0.305409	0.801132
Si	Si304	0.718246	0.805403	0.299835
Zn	Zn305	0.410502	0.753584	0.383736

M-C₆H₉Zn-OH-Zn²⁺ (Fig. 9a/M2 in Blue) Total energy = -1942.56228246 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578


```

_cell_angle_alpha      90.000000
_cell_angle_beta      90.000000
_cell_angle_gamma     90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1          0.441949      0.669611      0.686537
  H      H2          0.480944      0.580723      0.580749
  H      H3          0.514593      0.627399      0.406698
  H      H4          0.580726      0.609637      0.484560
  H      H5          0.581123      0.725462      0.393243
  H      H6          0.604677      0.722032      0.518638
  H      H7          0.388377      0.639985      0.500743
  H      H8          0.530975      0.817129      0.491955
  H      H9          0.445995      0.785548      0.625792
  H      H10         0.527495      0.767690      0.655668
  C      C11         0.471106      0.681632      0.621373
  C      C12         0.492858      0.632227      0.562180
  C      C13         0.538499      0.643148      0.475756
  C      C14         0.562642      0.715660      0.467904
  C      C15         0.510004      0.766740      0.497164
  C      C16         0.487435      0.753892      0.604149
  O      O17         0.516691      0.022704      0.210849
  O      O18         0.021536      0.533529      0.716333
  O      O19         0.525386      0.436040      0.211330
  O      O20         0.019024      0.936333      0.703660
  O      O21         0.527123      0.950754      0.789269
  O      O22         0.016190      0.452268      0.288710
  O      O23         0.515035      0.543016      0.803151
  O      O24         0.026123      0.036256      0.292492
  O      O25         0.398982      0.055343      0.278366
  O      O26         0.140708      0.552399      0.786595
  O      O27         0.400157      0.427135      0.261977
  O      O28         0.142882      0.937892      0.756965
  O      O29         0.646223      0.923888      0.725176
  O      O30         0.898134      0.422828      0.221366
  O      O31         0.635006      0.526335      0.737289
  O      O32         0.900647      0.042160      0.244830
  O      O33         0.444618      0.112066      0.115133
  O      O34         0.103860      0.616977      0.626114

```

0	035	0.446358	0.360343	0.106405
0	036	0.103793	0.862163	0.605682
0	037	0.601627	0.865378	0.887656
0	038	0.941441	0.367041	0.386626
0	039	0.609858	0.617113	0.876329
0	040	0.948870	0.117272	0.390798
0	041	0.408529	0.984728	0.113775
0	042	0.125921	0.486636	0.618621
0	043	0.437065	0.492363	0.097348
0	044	0.105524	0.993492	0.585776
0	045	0.632391	0.994845	0.888288
0	046	0.908200	0.496058	0.381946
0	047	0.603157	0.487735	0.920928
0	048	0.938243	0.986084	0.415349
0	049	0.337362	0.060139	0.448069
0	050	0.206636	0.553964	0.952259
0	051	0.338993	0.436589	0.433292
0	052	0.203976	0.943231	0.928247
0	053	0.706813	0.921455	0.554846
0	054	0.834322	0.422874	0.053299
0	055	0.701368	0.540733	0.572462
0	056	0.839404	0.034703	0.073496
0	057	0.351475	0.942774	0.357109
0	058	0.187186	0.438060	0.857521
0	059	0.342416	0.541142	0.313294
0	060	0.213388	0.044845	0.803895
0	061	0.696089	0.036486	0.651964
0	062	0.851899	0.537179	0.149733
0	063	0.721554	0.433518	0.684279
0	064	0.833571	0.933057	0.198211
0	065	0.269678	0.034117	0.286155
0	066	0.269375	0.526034	0.785876
0	067	0.270444	0.433841	0.268513
0	068	0.272425	0.930910	0.761911
0	069	0.776167	0.941965	0.717318
0	070	0.769083	0.446759	0.219514
0	071	0.763109	0.551004	0.745827
0	072	0.770488	0.045245	0.238672
0	073	0.309236	0.126769	0.610075
0	074	0.229965	0.617774	0.119440
0	075	0.315306	0.365525	0.591107
0	076	0.215166	0.860262	0.075603
0	077	0.735928	0.852134	0.395200
0	078	0.808988	0.354260	0.891282

0	079	0.715286	0.611914	0.412482
0	080	0.829484	0.113167	0.920809
0	081	0.225096	0.035456	0.542676
0	082	0.317060	0.530838	0.050947
0	083	0.217541	0.432289	0.505789
0	084	0.322360	0.920172	0.000299
0	085	0.818647	0.945501	0.459076
0	086	0.722292	0.443390	0.957821
0	087	0.820733	0.555099	0.499019
0	088	0.721379	0.057253	0.997657
0	089	0.337534	0.997577	0.621845
0	090	0.203227	0.487145	0.119437
0	091	0.310601	0.497804	0.601824
0	092	0.238335	0.989575	0.105509
0	093	0.705102	0.980811	0.380029
0	094	0.833940	0.484118	0.879302
0	095	0.734724	0.481185	0.403494
0	096	0.806168	0.983735	0.898753
0	097	0.132796	0.122845	0.591398
0	098	0.405437	0.621142	0.107018
0	099	0.124380	0.356633	0.588199
0	0100	0.420125	0.854891	0.084886
0	0101	0.908992	0.856325	0.407862
0	0102	0.629579	0.357433	0.906859
0	0103	0.918937	0.625147	0.424832
0	0104	0.622875	0.125448	0.917600
0	0105	0.124632	0.059426	0.419450
0	0106	0.417556	0.560498	0.932807
0	0107	0.094833	0.437820	0.441504
0	0108	0.444535	0.937471	0.937741
0	0109	0.918280	0.918241	0.580550
0	0110	0.623450	0.415543	0.082114
0	0111	0.943084	0.535364	0.561829
0	0112	0.599728	0.043330	0.064825
0	0113	0.146045	0.033084	0.227825
0	0114	0.395245	0.533885	0.741378
0	0115	0.140887	0.418530	0.258087
0	0116	0.402694	0.923114	0.750887
0	0117	0.900044	0.946599	0.772676
0	0118	0.645391	0.439931	0.274398
0	0119	0.894281	0.555702	0.742365
0	0120	0.640376	0.055479	0.252110
0	0121	0.105709	0.937795	0.350053
0	0122	0.441578	0.439854	0.861452

0	0123	0.112215	0.539998	0.319302
0	0124	0.433972	0.042200	0.818593
0	0125	0.942933	0.038885	0.648618
0	0126	0.604627	0.535660	0.153597
0	0127	0.933759	0.435903	0.689278
0	0128	0.614617	0.936630	0.177940
0	0129	0.228892	0.117112	0.146828
0	0130	0.312815	0.620772	0.665729
0	0131	0.216895	0.355155	0.133197
0	0132	0.330531	0.864352	0.617797
0	0133	0.821654	0.857596	0.853135
0	0134	0.730642	0.355615	0.351377
0	0135	0.829253	0.617295	0.881620
0	0136	0.715604	0.113716	0.384203
0	0137	0.521407	0.846779	0.212000
0	0138	0.025965	0.344832	0.719613
0	0139	0.517568	0.626754	0.209237
0	0140	0.028655	0.129232	0.711698
0	0141	0.526889	0.132519	0.782640
0	0142	0.016684	0.628870	0.293659
0	0143	0.524986	0.349757	0.788854
0	0144	0.015159	0.850673	0.292846
0	0145	0.404111	0.820631	0.276217
0	0146	0.147912	0.324631	0.776177
0	0147	0.407009	0.667650	0.294410
0	0148	0.146403	0.155833	0.783325
0	0149	0.649758	0.149232	0.728159
0	0150	0.896236	0.649004	0.234315
0	0151	0.643022	0.329760	0.714243
0	0152	0.899092	0.820734	0.217416
0	0153	0.460189	0.737702	0.147401
0	0154	0.091313	0.238677	0.654358
0	0155	0.592036	0.241085	0.839259
0	0156	0.953896	0.739804	0.348601
0	0157	0.335226	0.811048	0.437422
0	0158	0.213034	0.322665	0.942508
0	0159	0.342695	0.640275	0.475123
0	0160	0.208163	0.133827	0.954263
0	0161	0.722897	0.153900	0.570882
0	0162	0.831657	0.655820	0.069663
0	0163	0.707601	0.338931	0.544973
0	0164	0.837163	0.844196	0.047888
0	0165	0.263299	0.851785	0.258127
0	0166	0.275139	0.355853	0.777172

0	0167	0.263387	0.661130	0.300592
0	0168	0.277941	0.158398	0.796365
0	0169	0.777290	0.119622	0.741981
0	0170	0.768868	0.620516	0.234505
0	0171	0.774175	0.315547	0.709038
0	0172	0.767716	0.820432	0.207710
0	0173	0.296773	0.739228	0.590685
0	0174	0.247801	0.234057	0.073727
0	0175	0.746460	0.238258	0.427057
0	0176	0.802012	0.741319	0.930425
0	0177	0.219086	0.836014	0.522824
0	0178	0.327990	0.335615	0.033767
0	0179	0.217359	0.638567	0.530703
0	0180	0.330118	0.136110	0.024518
0	0181	0.831680	0.140855	0.464993
0	0182	0.718125	0.643893	0.977242
0	0183	0.829149	0.336508	0.477789
0	0184	0.717899	0.839725	0.969388
0	0185	0.135829	0.737965	0.570113
0	0186	0.411405	0.235668	0.072051
0	0187	0.914966	0.241773	0.429397
0	0188	0.634244	0.740801	0.926938
0	0189	0.109640	0.816047	0.419026
0	0190	0.433549	0.315571	0.921200
0	0191	0.103851	0.646150	0.435275
0	0192	0.442660	0.151450	0.928485
0	0193	0.937405	0.160571	0.577744
0	0194	0.603103	0.653530	0.066901
0	0195	0.942130	0.328522	0.573228
0	0196	0.609457	0.824010	0.073709
0	0197	0.135477	0.836647	0.227117
0	0198	0.401335	0.346056	0.735162
0	0199	0.138075	0.659140	0.245218
0	0200	0.403000	0.158729	0.740404
0	0201	0.905062	0.139435	0.765650
0	0202	0.641766	0.642610	0.255498
0	0203	0.900860	0.318563	0.759867
0	0204	0.643167	0.821228	0.264123
0	0205	0.218679	0.744247	0.160973
0	0206	0.320282	0.249995	0.674439
0	0207	0.820681	0.229104	0.836288
0	0208	0.725614	0.729140	0.331899
Al	Al209	0.332955	0.861439	0.327432
Al	Al210	0.336434	0.625060	0.335037

Si	Si211	0.713124	0.651165	0.307389
Si	Si212	0.442329	0.043712	0.179580
Si	Si213	0.097382	0.547083	0.686113
Si	Si214	0.450909	0.429021	0.169835
Si	Si215	0.093747	0.932577	0.662998
Si	Si216	0.601555	0.933981	0.823664
Si	Si217	0.941571	0.434547	0.320774
Si	Si218	0.591653	0.543513	0.834915
Si	Si219	0.952664	0.045324	0.335752
Si	Si220	0.339617	0.021013	0.342013
Si	Si221	0.200675	0.517414	0.845987
Si	Si222	0.337868	0.461493	0.318241
Si	Si223	0.208191	0.964296	0.812993
Si	Si224	0.706520	0.956460	0.663195
Si	Si225	0.838172	0.457662	0.161544
Si	Si226	0.705471	0.512833	0.685168
Si	Si227	0.836060	0.013811	0.189133
Si	Si228	0.302335	0.055123	0.555195
Si	Si229	0.239136	0.548177	0.061975
Si	Si230	0.295435	0.432771	0.532810
Si	Si231	0.244768	0.927953	0.028868
Si	Si232	0.741832	0.924868	0.446986
Si	Si233	0.799859	0.425830	0.945123
Si	Si234	0.743430	0.547311	0.470844
Si	Si235	0.798878	0.047195	0.972161
Si	Si236	0.147460	0.053069	0.534425
Si	Si237	0.393976	0.551457	0.047710
Si	Si238	0.140922	0.428216	0.538328
Si	Si239	0.398424	0.925036	0.034135
Si	Si240	0.896154	0.926260	0.465438
Si	Si241	0.644704	0.425701	0.967065
Si	Si242	0.897581	0.552587	0.466887
Si	Si243	0.644357	0.055036	0.967106
Si	Si244	0.100720	0.016698	0.323007
Si	Si245	0.442322	0.519007	0.836057
Si	Si246	0.091286	0.461935	0.326263
Si	Si247	0.451881	0.963428	0.824043
Si	Si248	0.945310	0.959968	0.675914
Si	Si249	0.599265	0.456720	0.179888
Si	Si250	0.948234	0.515052	0.678195
Si	Si251	0.592589	0.014819	0.177068
Si	Si252	0.221391	0.042683	0.192126
Si	Si253	0.321411	0.542890	0.699818
Si	Si254	0.208686	0.424041	0.194811

Si	Si255	0.335048	0.929962	0.687753
Si	Si256	0.825888	0.933006	0.810289
Si	Si257	0.720347	0.431164	0.311681
Si	Si258	0.829759	0.551432	0.812421
Si	Si259	0.708445	0.048677	0.314007
Si	Si260	0.451115	0.815397	0.178206
Si	Si261	0.097210	0.316412	0.684612
Si	Si262	0.446962	0.662822	0.189967
Si	Si263	0.099965	0.161214	0.685397
Si	Si264	0.597722	0.162078	0.816877
Si	Si265	0.946715	0.661068	0.325082
Si	Si266	0.597372	0.319384	0.812040
Si	Si267	0.944597	0.817080	0.316662
Si	Si268	0.206084	0.360534	0.837604
Si	Si269	0.210814	0.122983	0.834955
Si	Si270	0.711663	0.114494	0.673845
Si	Si271	0.837237	0.615148	0.172683
Si	Si272	0.710986	0.354415	0.663166
Si	Si273	0.835004	0.854904	0.167242
Si	Si274	0.295016	0.813958	0.541466
Si	Si275	0.251597	0.312227	0.046435
Si	Si276	0.288961	0.660910	0.568963
Si	Si277	0.253725	0.155508	0.048680
Si	Si278	0.754307	0.161345	0.461212
Si	Si279	0.795098	0.664339	0.963978
Si	Si280	0.753371	0.316956	0.451185
Si	Si281	0.794841	0.820320	0.951544
Si	Si282	0.141807	0.813930	0.528900
Si	Si283	0.404692	0.312096	0.033832
Si	Si284	0.139163	0.659940	0.539898
Si	Si285	0.406796	0.158626	0.035322
Si	Si286	0.908258	0.164830	0.465732
Si	Si287	0.641205	0.663647	0.962185
Si	Si288	0.906839	0.318355	0.466693
Si	Si289	0.641094	0.817576	0.964043
Si	Si290	0.092176	0.860359	0.320988
Si	Si291	0.450330	0.362670	0.826587
Si	Si292	0.093192	0.618619	0.322930
Si	Si293	0.451429	0.121216	0.817854
Si	Si294	0.953497	0.116872	0.676286
Si	Si295	0.592075	0.614451	0.171131
Si	Si296	0.950564	0.356905	0.685123
Si	Si297	0.597591	0.857651	0.181385
Si	Si298	0.209265	0.823249	0.183003

Si	Si299	0.327907	0.328740	0.695844
Si	Si300	0.213740	0.670264	0.208335
Si	Si301	0.327997	0.172497	0.704776
Si	Si302	0.833286	0.150808	0.814764
Si	Si303	0.826583	0.305499	0.799149
Si	Si304	0.718060	0.806488	0.299854
Zn	Zn305	0.435565	0.773466	0.402855

TS-C₆H₉Zn-HTransfer-Concerted-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS2 in Blue)

Total energy = -1941.16198568 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.433911	0.700892	0.621597
H	H2	0.448247	0.639644	0.519072
H	H3	0.471376	0.798160	0.544609
H	H4	0.407057	0.634804	0.501160
H	H5	0.632273	0.670680	0.652338
H	H6	0.523532	0.620381	0.662398
H	H7	0.562012	0.805015	0.423045
H	H8	0.563684	0.717871	0.407806
H	H9	0.608113	0.795358	0.592158
H	H10	0.656344	0.746258	0.513620
C	C11	0.475535	0.696429	0.571074
C	C12	0.484980	0.753056	0.502543
C	C13	0.592513	0.691019	0.607772
C	C14	0.532351	0.663092	0.615073
C	C15	0.555433	0.757766	0.462173
C	C16	0.606777	0.750566	0.544694
O	O17	0.516308	0.024976	0.206624
O	O18	0.024070	0.534276	0.720672

0	019	0.525888	0.436710	0.211496
0	020	0.019299	0.939195	0.699716
0	021	0.527651	0.950265	0.785087
0	022	0.018190	0.452147	0.289852
0	023	0.517674	0.543243	0.804695
0	024	0.025013	0.038302	0.286536
0	025	0.397050	0.056028	0.268395
0	026	0.144205	0.559775	0.783698
0	027	0.402652	0.428591	0.270765
0	028	0.144304	0.937727	0.747073
0	029	0.646182	0.924382	0.719200
0	030	0.898964	0.425887	0.224598
0	031	0.638322	0.531491	0.742453
0	032	0.899220	0.045248	0.241800
0	033	0.444657	0.111137	0.104741
0	034	0.099616	0.621529	0.624875
0	035	0.444219	0.359424	0.114075
0	036	0.099791	0.864894	0.595436
0	037	0.603329	0.863254	0.879240
0	038	0.942011	0.369760	0.389782
0	039	0.609022	0.615358	0.888849
0	040	0.948999	0.119656	0.387343
0	041	0.410897	0.983311	0.106188
0	042	0.127716	0.492424	0.617296
0	043	0.433876	0.491002	0.100972
0	044	0.104429	0.996334	0.579375
0	045	0.632925	0.993142	0.885180
0	046	0.911907	0.499343	0.384466
0	047	0.603964	0.484160	0.921108
0	048	0.938074	0.988392	0.411105
0	049	0.336146	0.060814	0.438845
0	050	0.200800	0.544392	0.956219
0	051	0.341779	0.445694	0.441929
0	052	0.205146	0.944600	0.918620
0	053	0.707107	0.922880	0.550029
0	054	0.835154	0.423711	0.056827
0	055	0.703679	0.543834	0.576265
0	056	0.840253	0.033856	0.068674
0	057	0.349175	0.943678	0.347775
0	058	0.190975	0.441262	0.829563
0	059	0.340788	0.542611	0.306923
0	060	0.215499	0.044771	0.791940
0	061	0.697545	0.037177	0.650299
0	062	0.851540	0.539231	0.150344

0	063	0.721126	0.435562	0.687023
0	064	0.835867	0.933672	0.196211
0	065	0.267892	0.035874	0.277085
0	066	0.273899	0.539639	0.796011
0	067	0.272866	0.429775	0.278978
0	068	0.273717	0.929958	0.752698
0	069	0.776394	0.940656	0.713052
0	070	0.769682	0.449100	0.222284
0	071	0.766464	0.552150	0.748286
0	072	0.769335	0.044862	0.231639
0	073	0.309255	0.127800	0.600706
0	074	0.225959	0.616875	0.114137
0	075	0.317318	0.368422	0.594633
0	076	0.213243	0.860968	0.065573
0	077	0.734057	0.855318	0.388776
0	078	0.811268	0.353885	0.895345
0	079	0.720633	0.617484	0.418879
0	080	0.829009	0.112509	0.916044
0	081	0.224323	0.036911	0.535374
0	082	0.316724	0.533852	0.044844
0	083	0.219442	0.434586	0.508705
0	084	0.321942	0.920409	0.995631
0	085	0.818766	0.946794	0.453801
0	086	0.723596	0.442554	0.959299
0	087	0.823368	0.555302	0.502897
0	088	0.721755	0.055904	0.994369
0	089	0.337353	0.998787	0.613250
0	090	0.209440	0.484735	0.127447
0	091	0.308342	0.499026	0.614595
0	092	0.236375	0.990724	0.097006
0	093	0.705047	0.984879	0.377734
0	094	0.835498	0.483708	0.881834
0	095	0.734537	0.486116	0.404732
0	096	0.806121	0.983162	0.894067
0	097	0.131865	0.125442	0.581926
0	098	0.405474	0.620588	0.111133
0	099	0.126054	0.361237	0.593393
0	0100	0.418614	0.853041	0.080779
0	0101	0.909691	0.858183	0.403754
0	0102	0.631637	0.354259	0.911918
0	0103	0.920997	0.627796	0.430389
0	0104	0.624175	0.124304	0.912917
0	0105	0.124412	0.060822	0.411510
0	0106	0.422228	0.561590	0.937055

0	0107	0.096484	0.440044	0.443795
0	0108	0.443849	0.932366	0.930599
0	0109	0.918375	0.920303	0.576079
0	0110	0.625339	0.415926	0.085201
0	0111	0.945466	0.537000	0.566108
0	0112	0.599785	0.043020	0.060527
0	0113	0.144303	0.035270	0.219155
0	0114	0.398150	0.541272	0.743569
0	0115	0.143068	0.417816	0.262433
0	0116	0.403952	0.925267	0.741568
0	0117	0.900225	0.946004	0.768600
0	0118	0.645660	0.443469	0.276512
0	0119	0.897248	0.556450	0.747541
0	0120	0.639892	0.058304	0.247981
0	0121	0.105169	0.939503	0.341823
0	0122	0.440471	0.442099	0.858614
0	0123	0.113294	0.540772	0.317703
0	0124	0.435345	0.041613	0.821531
0	0125	0.941641	0.040524	0.646630
0	0126	0.603517	0.537060	0.152913
0	0127	0.936000	0.436832	0.691870
0	0128	0.614506	0.938571	0.178203
0	0129	0.227269	0.118999	0.137480
0	0130	0.316812	0.625657	0.660816
0	0131	0.220614	0.352096	0.141819
0	0132	0.333205	0.865551	0.606848
0	0133	0.821816	0.856925	0.849634
0	0134	0.730696	0.359665	0.355340
0	0135	0.831118	0.616781	0.887317
0	0136	0.717296	0.117705	0.375683
0	0137	0.520319	0.849024	0.207638
0	0138	0.027365	0.344903	0.722306
0	0139	0.517234	0.627536	0.214531
0	0140	0.029444	0.130606	0.706102
0	0141	0.527813	0.131201	0.779151
0	0142	0.016039	0.628415	0.294175
0	0143	0.527297	0.352592	0.792800
0	0144	0.015093	0.851501	0.287200
0	0145	0.403082	0.820136	0.272331
0	0146	0.149594	0.321698	0.778349
0	0147	0.405291	0.670869	0.295770
0	0148	0.148010	0.155733	0.774145
0	0149	0.650633	0.150423	0.724431
0	0150	0.894122	0.649484	0.241061

0	0151	0.644695	0.330614	0.717857
0	0152	0.898537	0.819567	0.215093
0	0153	0.461547	0.737489	0.147436
0	0154	0.092105	0.240822	0.649752
0	0155	0.591196	0.240423	0.837361
0	0156	0.955348	0.741127	0.348240
0	0157	0.329362	0.810514	0.427635
0	0158	0.210643	0.338495	0.948015
0	0159	0.339037	0.641784	0.468269
0	0160	0.208895	0.132101	0.944197
0	0161	0.721757	0.153332	0.564902
0	0162	0.832600	0.659114	0.073775
0	0163	0.708438	0.340494	0.548047
0	0164	0.837988	0.845714	0.044659
0	0165	0.263299	0.851903	0.246056
0	0166	0.278089	0.347855	0.780818
0	0167	0.262914	0.663221	0.291781
0	0168	0.279454	0.158994	0.787631
0	0169	0.778766	0.122403	0.735743
0	0170	0.766758	0.621277	0.234582
0	0171	0.775920	0.318626	0.711576
0	0172	0.767441	0.822064	0.202879
0	0173	0.294875	0.741015	0.584346
0	0174	0.244673	0.235663	0.057999
0	0175	0.746666	0.241245	0.426628
0	0176	0.802564	0.741456	0.930140
0	0177	0.217662	0.840347	0.521682
0	0178	0.328183	0.336340	0.032130
0	0179	0.215528	0.638707	0.534926
0	0180	0.329558	0.137744	0.018086
0	0181	0.831860	0.143194	0.461462
0	0182	0.719526	0.644251	0.981175
0	0183	0.829811	0.338406	0.480253
0	0184	0.718373	0.840056	0.967176
0	0185	0.134878	0.740876	0.564854
0	0186	0.411087	0.235816	0.070035
0	0187	0.915480	0.244292	0.428744
0	0188	0.635042	0.740150	0.929246
0	0189	0.111674	0.817518	0.410583
0	0190	0.436580	0.319466	0.925467
0	0191	0.104421	0.647170	0.433254
0	0192	0.441089	0.155746	0.920448
0	0193	0.937089	0.161915	0.575026
0	0194	0.606750	0.657949	0.077341

O	O195	0.942937	0.329374	0.575493
O	O196	0.607640	0.828778	0.067764
O	O197	0.134756	0.838656	0.218363
O	O198	0.404173	0.344382	0.737009
O	O199	0.136553	0.660243	0.242204
O	O200	0.404438	0.154189	0.730871
O	O201	0.906344	0.141451	0.763815
O	O202	0.640227	0.639483	0.267080
O	O203	0.902396	0.319558	0.762313
O	O204	0.642424	0.821352	0.257269
O	O205	0.215431	0.744337	0.151625
O	O206	0.325882	0.249669	0.666350
O	O207	0.821236	0.229708	0.835927
O	O208	0.724667	0.731538	0.328935
Al	Al209	0.331200	0.862155	0.319112
Al	Al210	0.333182	0.625820	0.336216
Si	Si211	0.713384	0.652551	0.310945
Si	Si212	0.442113	0.043858	0.171564
Si	Si213	0.098439	0.551801	0.685999
Si	Si214	0.450349	0.429067	0.174900
Si	Si215	0.093112	0.934624	0.655425
Si	Si216	0.602110	0.933229	0.818568
Si	Si217	0.943375	0.436858	0.323204
Si	Si218	0.593492	0.543161	0.840382
Si	Si219	0.952126	0.047825	0.331640
Si	Si220	0.337777	0.021979	0.332613
Si	Si221	0.202399	0.520915	0.842032
Si	Si222	0.339254	0.463554	0.323840
Si	Si223	0.209634	0.964291	0.802916
Si	Si224	0.707163	0.957026	0.658986
Si	Si225	0.838759	0.459680	0.164226
Si	Si226	0.707687	0.515217	0.688640
Si	Si227	0.836232	0.014437	0.184905
Si	Si228	0.301786	0.056033	0.546479
Si	Si229	0.238394	0.545839	0.062301
Si	Si230	0.296720	0.436801	0.539485
Si	Si231	0.243933	0.928819	0.020854
Si	Si232	0.741686	0.927482	0.441925
Si	Si233	0.801447	0.425682	0.948137
Si	Si234	0.745881	0.550520	0.474702
Si	Si235	0.799147	0.046419	0.967832
Si	Si236	0.146820	0.055046	0.526670
Si	Si237	0.394054	0.551683	0.049403
Si	Si238	0.142678	0.431956	0.540891

Si	Si239	0.398239	0.923096	0.028314
Si	Si240	0.896437	0.928142	0.460878
Si	Si241	0.646382	0.423656	0.969724
Si	Si242	0.900356	0.554563	0.470999
Si	Si243	0.644870	0.053922	0.963110
Si	Si244	0.099890	0.018422	0.315213
Si	Si245	0.444058	0.521627	0.837378
Si	Si246	0.093124	0.462636	0.327904
Si	Si247	0.452234	0.962520	0.819452
Si	Si248	0.945190	0.961421	0.672167
Si	Si249	0.599617	0.458121	0.181106
Si	Si250	0.950847	0.516035	0.682210
Si	Si251	0.592299	0.016644	0.173870
Si	Si252	0.219637	0.044476	0.182968
Si	Si253	0.323573	0.550261	0.704040
Si	Si254	0.212271	0.421559	0.202489
Si	Si255	0.336259	0.930681	0.678193
Si	Si256	0.826140	0.932203	0.806123
Si	Si257	0.720520	0.434829	0.314339
Si	Si258	0.832352	0.551709	0.816515
Si	Si259	0.708468	0.051386	0.308625
Si	Si260	0.450650	0.815614	0.175229
Si	Si261	0.098722	0.317481	0.685980
Si	Si262	0.447034	0.663458	0.191872
Si	Si263	0.100441	0.162776	0.677934
Si	Si264	0.598264	0.161709	0.813297
Si	Si265	0.947233	0.662016	0.328192
Si	Si266	0.598541	0.319255	0.814850
Si	Si267	0.945075	0.817741	0.313522
Si	Si268	0.207733	0.362333	0.833861
Si	Si269	0.212437	0.122572	0.824805
Si	Si270	0.712379	0.115625	0.669601
Si	Si271	0.836494	0.616779	0.175671
Si	Si272	0.711983	0.356250	0.666106
Si	Si273	0.835727	0.855626	0.164199
Si	Si274	0.293147	0.815091	0.535180
Si	Si275	0.251210	0.315407	0.045503
Si	Si276	0.289937	0.661809	0.561196
Si	Si277	0.252676	0.156609	0.038819
Si	Si278	0.754531	0.163566	0.456678
Si	Si279	0.796381	0.665154	0.967331
Si	Si280	0.753922	0.319515	0.453436
Si	Si281	0.795377	0.820720	0.949220
Si	Si282	0.140817	0.816354	0.522529

Si	Si283	0.404854	0.313183	0.035848
Si	Si284	0.138325	0.662102	0.538885
Si	Si285	0.406256	0.159907	0.028597
Si	Si286	0.908478	0.166941	0.462929
Si	Si287	0.642424	0.664197	0.969788
Si	Si288	0.907546	0.320330	0.468721
Si	Si289	0.641521	0.818152	0.960560
Si	Si290	0.092397	0.861792	0.313376
Si	Si291	0.451940	0.364500	0.828319
Si	Si292	0.093255	0.619259	0.321501
Si	Si293	0.451971	0.120658	0.813306
Si	Si294	0.953765	0.118402	0.673364
Si	Si295	0.592212	0.615271	0.177712
Si	Si296	0.952166	0.357685	0.687433
Si	Si297	0.596507	0.859861	0.177090
Si	Si298	0.207916	0.823663	0.172970
Si	Si299	0.331087	0.327521	0.695609
Si	Si300	0.211650	0.670899	0.201809
Si	Si301	0.330049	0.171848	0.696103
Si	Si302	0.833965	0.151835	0.811522
Si	Si303	0.828134	0.306531	0.801305
Si	Si304	0.717295	0.808429	0.294272
Zn	Zn305	0.418662	0.757832	0.392416

C₆H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M3 in Blue)

Total energy = -1943.00561272 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.528759	0.802166	0.390665
H	H2	0.520470	0.680011	0.393616

H	H3	0.564880	0.655554	0.567404
H	H4	0.484740	0.624738	0.555166
H	H5	0.510277	0.691563	0.716474
H	H6	0.437711	0.712926	0.655380
H	H7	0.514962	0.814178	0.707710
H	H8	0.488171	0.497373	0.512499
H	H9	0.536305	0.867324	0.546704
H	H10	0.474992	0.503683	0.462270
C	C11	0.520012	0.776474	0.460387
C	C12	0.510808	0.708336	0.461032
C	C13	0.513137	0.670940	0.558344
C	C14	0.491634	0.713543	0.647605
C	C15	0.512558	0.785107	0.639845
C	C16	0.524071	0.814739	0.551487
O	O17	0.521298	0.026465	0.209721
O	O18	0.025534	0.537678	0.711347
O	O19	0.524902	0.438495	0.207902
O	O20	0.021213	0.934738	0.701597
O	O21	0.528953	0.948548	0.789324
O	O22	0.016263	0.455075	0.284855
O	O23	0.519267	0.542528	0.798745
O	O24	0.030561	0.038680	0.291255
O	O25	0.404167	0.056400	0.281110
O	O26	0.148798	0.553875	0.764119
O	O27	0.396485	0.424690	0.241763
O	O28	0.143145	0.943091	0.762404
O	O29	0.646417	0.925935	0.717122
O	O30	0.896817	0.423066	0.224331
O	O31	0.640561	0.525720	0.741100
O	O32	0.906206	0.039925	0.238274
O	O33	0.447300	0.116904	0.119256
O	O34	0.104377	0.614034	0.602986
O	O35	0.453024	0.364581	0.089018
O	O36	0.111547	0.860092	0.615685
O	O37	0.607465	0.863494	0.879062
O	O38	0.945066	0.369823	0.388784
O	O39	0.610881	0.616700	0.877990
O	O40	0.949634	0.119874	0.382434
O	O41	0.412735	0.989566	0.112593
O	O42	0.120477	0.482712	0.604172
O	O43	0.441577	0.496218	0.087310
O	O44	0.108903	0.990280	0.583980
O	O45	0.635994	0.993590	0.884442
O	O46	0.909428	0.498394	0.381413

0	047	0.604367	0.487116	0.922574
0	048	0.941488	0.988955	0.413177
0	049	0.342054	0.056600	0.450626
0	050	0.219844	0.553601	0.925132
0	051	0.335687	0.420472	0.413670
0	052	0.206973	0.942121	0.931443
0	053	0.708969	0.922722	0.548606
0	054	0.834208	0.423003	0.055582
0	055	0.704367	0.542200	0.575311
0	056	0.843769	0.032788	0.067889
0	057	0.357710	0.941852	0.353468
0	058	0.193246	0.438632	0.834550
0	059	0.354387	0.537203	0.324445
0	060	0.220485	0.044984	0.808680
0	061	0.700367	0.037119	0.647344
0	062	0.851577	0.537828	0.151173
0	063	0.727446	0.434296	0.684375
0	064	0.835263	0.932374	0.194668
0	065	0.275030	0.034564	0.286442
0	066	0.275707	0.523776	0.754059
0	067	0.268041	0.449830	0.254018
0	068	0.272531	0.928857	0.762302
0	069	0.777082	0.939747	0.713280
0	070	0.767744	0.448614	0.220076
0	071	0.768225	0.552144	0.746813
0	072	0.776215	0.046660	0.234181
0	073	0.311517	0.123694	0.611635
0	074	0.226146	0.621724	0.089038
0	075	0.316473	0.360790	0.583194
0	076	0.221825	0.862064	0.082707
0	077	0.739409	0.854858	0.388726
0	078	0.812315	0.353027	0.893344
0	079	0.713182	0.614110	0.415642
0	080	0.832214	0.111251	0.915111
0	081	0.228923	0.031637	0.542077
0	082	0.320389	0.533971	0.047207
0	083	0.219907	0.431312	0.503783
0	084	0.326378	0.923443	0.001762
0	085	0.821856	0.947682	0.455847
0	086	0.723596	0.441692	0.955728
0	087	0.821580	0.559129	0.495451
0	088	0.724957	0.055091	0.995255
0	089	0.341087	0.995616	0.625603
0	090	0.202890	0.489617	0.094736

0	091	0.324353	0.492919	0.576987
0	092	0.241513	0.992742	0.105728
0	093	0.708919	0.983567	0.375088
0	094	0.836237	0.482551	0.880305
0	095	0.734384	0.483712	0.404194
0	096	0.808417	0.982018	0.893745
0	097	0.138157	0.119220	0.595173
0	098	0.411530	0.624501	0.090038
0	099	0.126980	0.352520	0.581094
0	0100	0.420102	0.858332	0.095954
0	0101	0.911546	0.859260	0.400858
0	0102	0.629184	0.356226	0.910279
0	0103	0.923839	0.626596	0.428499
0	0104	0.628342	0.124469	0.912958
0	0105	0.128015	0.059639	0.420946
0	0106	0.416588	0.559229	0.918508
0	0107	0.100422	0.428578	0.427243
0	0108	0.450236	0.934091	0.942912
0	0109	0.921820	0.917744	0.575478
0	0110	0.626110	0.416418	0.084277
0	0111	0.941632	0.533836	0.563453
0	0112	0.602327	0.042936	0.059791
0	0113	0.151151	0.038741	0.228909
0	0114	0.403298	0.528565	0.725229
0	0115	0.139770	0.426610	0.238664
0	0116	0.403520	0.922419	0.759111
0	0117	0.901453	0.943236	0.767635
0	0118	0.644351	0.440259	0.277176
0	0119	0.899177	0.555334	0.747390
0	0120	0.646032	0.057978	0.245036
0	0121	0.110522	0.939813	0.344598
0	0122	0.445839	0.438321	0.854069
0	0123	0.111970	0.541378	0.326418
0	0124	0.438207	0.040667	0.827100
0	0125	0.944783	0.037430	0.647056
0	0126	0.607248	0.536778	0.155625
0	0127	0.940698	0.436199	0.693787
0	0128	0.617181	0.938292	0.176776
0	0129	0.236273	0.120725	0.148630
0	0130	0.329665	0.616952	0.637867
0	0131	0.222121	0.359466	0.128226
0	0132	0.335511	0.862818	0.622852
0	0133	0.821997	0.855538	0.849348
0	0134	0.731679	0.357833	0.353244

0	0135	0.833341	0.615354	0.887594
0	0136	0.720790	0.116293	0.377699
0	0137	0.525226	0.847427	0.213982
0	0138	0.031431	0.342769	0.717770
0	0139	0.517896	0.627055	0.207461
0	0140	0.031557	0.126364	0.710501
0	0141	0.529893	0.130892	0.782086
0	0142	0.018818	0.631234	0.292998
0	0143	0.529537	0.348348	0.783017
0	0144	0.020649	0.850299	0.292751
0	0145	0.409517	0.814061	0.282773
0	0146	0.154926	0.321203	0.768311
0	0147	0.403660	0.667280	0.279045
0	0148	0.147803	0.153145	0.786395
0	0149	0.651328	0.148924	0.722747
0	0150	0.896017	0.648246	0.239372
0	0151	0.650058	0.330203	0.718465
0	0152	0.905873	0.822519	0.211271
0	0153	0.465149	0.739538	0.143054
0	0154	0.094510	0.235317	0.652781
0	0155	0.595459	0.240053	0.837355
0	0156	0.955095	0.741287	0.347574
0	0157	0.341636	0.810057	0.443092
0	0158	0.216123	0.328538	0.937914
0	0159	0.342994	0.659434	0.449737
0	0160	0.211914	0.135025	0.955973
0	0161	0.724042	0.154573	0.565539
0	0162	0.831385	0.657446	0.074453
0	0163	0.711548	0.338878	0.546799
0	0164	0.841080	0.844110	0.043922
0	0165	0.270346	0.845557	0.264052
0	0166	0.282678	0.351432	0.773219
0	0167	0.262432	0.643417	0.276696
0	0168	0.279106	0.161388	0.795136
0	0169	0.779408	0.122183	0.737169
0	0170	0.768214	0.620394	0.237962
0	0171	0.780954	0.316687	0.708462
0	0172	0.774362	0.816959	0.205526
0	0173	0.299916	0.738362	0.593616
0	0174	0.250813	0.237843	0.068924
0	0175	0.750242	0.240204	0.424709
0	0176	0.804299	0.739979	0.930013
0	0177	0.224654	0.837253	0.523797
0	0178	0.332086	0.338149	0.026989

O	O179	0.223483	0.637797	0.527252
O	O180	0.334496	0.139989	0.022391
O	O181	0.835043	0.142938	0.465284
O	O182	0.720159	0.642787	0.976521
O	O183	0.832226	0.338651	0.476308
O	O184	0.720636	0.838349	0.971220
O	O185	0.142270	0.737601	0.568527
O	O186	0.415992	0.239381	0.068436
O	O187	0.918528	0.243813	0.429795
O	O188	0.636494	0.740233	0.926942
O	O189	0.112583	0.821453	0.425280
O	O190	0.434220	0.313346	0.909253
O	O191	0.115906	0.657356	0.418528
O	O192	0.448614	0.151967	0.930352
O	O193	0.943623	0.158417	0.572439
O	O194	0.605734	0.654381	0.068221
O	O195	0.944001	0.329722	0.575126
O	O196	0.608510	0.827863	0.067800
O	O197	0.142009	0.834390	0.232636
O	O198	0.407346	0.346665	0.722297
O	O199	0.137249	0.652597	0.224268
O	O200	0.405044	0.154335	0.743176
O	O201	0.907396	0.139854	0.759821
O	O202	0.640802	0.645042	0.258444
O	O203	0.906570	0.319177	0.763673
O	O204	0.648262	0.821834	0.256022
O	O205	0.222278	0.742836	0.159231
O	O206	0.328065	0.247085	0.668988
O	O207	0.825054	0.228897	0.835909
O	O208	0.726561	0.730493	0.333040
Al	Al209	0.340593	0.859368	0.331116
Al	Al210	0.335847	0.620554	0.329428
Si	Si211	0.712614	0.652591	0.309893
Si	Si212	0.446474	0.047300	0.180721
Si	Si213	0.099801	0.547041	0.669960
Si	Si214	0.452632	0.431133	0.157698
Si	Si215	0.097098	0.932044	0.665885
Si	Si216	0.604672	0.933543	0.818941
Si	Si217	0.942645	0.436513	0.320903
Si	Si218	0.594740	0.542668	0.835894
Si	Si219	0.956264	0.046817	0.331329
Si	Si220	0.344753	0.020279	0.342475
Si	Si221	0.209388	0.517282	0.819801
Si	Si222	0.338841	0.459811	0.307893

Si	Si223	0.210753	0.964754	0.816663
Si	Si224	0.708634	0.956913	0.657539
Si	Si225	0.837534	0.458333	0.163468
Si	Si226	0.710511	0.513383	0.687162
Si	Si227	0.840506	0.012980	0.184053
Si	Si228	0.305834	0.052024	0.556882
Si	Si229	0.241891	0.550257	0.040321
Si	Si230	0.298958	0.426422	0.519291
Si	Si231	0.248803	0.929514	0.032111
Si	Si232	0.745219	0.927135	0.441642
Si	Si233	0.801543	0.424757	0.946173
Si	Si234	0.743925	0.549672	0.471678
Si	Si235	0.802240	0.045387	0.967469
Si	Si236	0.151422	0.050429	0.535159
Si	Si237	0.397082	0.553391	0.035512
Si	Si238	0.142476	0.423781	0.528863
Si	Si239	0.401951	0.926931	0.038491
Si	Si240	0.899416	0.928188	0.460959
Si	Si241	0.646003	0.424915	0.968429
Si	Si242	0.898994	0.554276	0.467308
Si	Si243	0.648198	0.053916	0.963151
Si	Si244	0.105095	0.019082	0.321901
Si	Si245	0.445748	0.516975	0.825066
Si	Si246	0.092493	0.463009	0.318664
Si	Si247	0.454909	0.961742	0.829644
Si	Si248	0.947765	0.958313	0.672571
Si	Si249	0.600055	0.457715	0.180836
Si	Si250	0.951935	0.515651	0.679627
Si	Si251	0.596438	0.016791	0.173519
Si	Si252	0.226675	0.046080	0.192973
Si	Si253	0.332346	0.539810	0.673869
Si	Si254	0.208933	0.431575	0.179047
Si	Si255	0.337326	0.928523	0.692512
Si	Si256	0.827284	0.930684	0.805666
Si	Si257	0.719863	0.432975	0.313290
Si	Si258	0.833949	0.550830	0.815622
Si	Si259	0.713568	0.050989	0.308203
Si	Si260	0.454469	0.815335	0.182978
Si	Si261	0.101744	0.313545	0.679819
Si	Si262	0.448902	0.663868	0.178941
Si	Si263	0.103188	0.158382	0.686500
Si	Si264	0.600956	0.161245	0.813727
Si	Si265	0.948886	0.662117	0.326665
Si	Si266	0.601176	0.318621	0.812060

Si	Si267	0.948964	0.818339	0.313102
Si	Si268	0.212023	0.360148	0.828026
Si	Si269	0.214120	0.123419	0.836799
Si	Si270	0.714070	0.115462	0.668930
Si	Si271	0.837002	0.615516	0.176533
Si	Si272	0.716857	0.355031	0.664597
Si	Si273	0.839840	0.854283	0.163453
Si	Si274	0.299475	0.812985	0.546524
Si	Si275	0.255401	0.316032	0.040782
Si	Si276	0.298206	0.662477	0.550800
Si	Si277	0.258219	0.158763	0.048343
Si	Si278	0.757763	0.163112	0.457668
Si	Si279	0.797326	0.663582	0.966468
Si	Si280	0.756425	0.318575	0.451226
Si	Si281	0.797326	0.819146	0.949774
Si	Si282	0.147430	0.814684	0.532693
Si	Si283	0.408526	0.314142	0.023859
Si	Si284	0.146338	0.661272	0.528981
Si	Si285	0.411176	0.161673	0.035500
Si	Si286	0.911847	0.166124	0.462495
Si	Si287	0.643400	0.663237	0.962878
Si	Si288	0.910019	0.320347	0.467469
Si	Si289	0.643719	0.817532	0.961229
Si	Si290	0.097226	0.861388	0.322777
Si	Si291	0.454159	0.361529	0.817014
Si	Si292	0.096464	0.620580	0.315200
Si	Si293	0.455111	0.119665	0.820748
Si	Si294	0.956733	0.115476	0.672685
Si	Si295	0.593331	0.615337	0.172136
Si	Si296	0.955669	0.356984	0.687081
Si	Si297	0.600282	0.859344	0.177709
Si	Si298	0.215445	0.821192	0.187136
Si	Si299	0.333464	0.326216	0.687887
Si	Si300	0.213361	0.665161	0.189566
Si	Si301	0.331191	0.170513	0.704634
Si	Si302	0.836160	0.150890	0.810690
Si	Si303	0.831798	0.305603	0.800441
Si	Si304	0.722265	0.807025	0.295650
Zn	Zn305	0.409051	0.737356	0.398494

C₆H₈-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M1 in Green) Total energy = -1935.71273093 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a		20.357621		
_cell_length_b		20.050598		
_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.525194	0.630125	0.453197
H	H2	0.587368	0.679075	0.506339
H	H3	0.449021	0.652738	0.588473
H	H4	0.523895	0.634995	0.644970
H	H5	0.489648	0.738816	0.728740
H	H6	0.486136	0.843289	0.633231
H	H7	0.492732	0.841184	0.448740
H	H8	0.529611	0.741010	0.361535
C	C9	0.533724	0.675650	0.496087
C	C10	0.499474	0.671569	0.597458
C	C11	0.495072	0.737991	0.648456
C	C12	0.492955	0.795704	0.596587
C	C13	0.498015	0.794545	0.489322
C	C14	0.513735	0.736998	0.438444
O	O15	0.518234	0.025791	0.209536
O	O16	0.027761	0.535324	0.714122
O	O17	0.524079	0.439679	0.208544
O	O18	0.019746	0.936910	0.700865
O	O19	0.527142	0.947801	0.785982
O	O20	0.015041	0.454396	0.286517
O	O21	0.519481	0.540081	0.799236
O	O22	0.027186	0.040265	0.289491
O	O23	0.400088	0.057147	0.275851
O	O24	0.150664	0.556768	0.763390
O	O25	0.395767	0.426561	0.242030
O	O26	0.142481	0.943379	0.757232
O	O27	0.646064	0.922890	0.720082
O	O28	0.894454	0.424596	0.230201
O	O29	0.643213	0.532744	0.750488
O	O30	0.902239	0.042335	0.238847
O	O31	0.446287	0.114947	0.113487

0	032	0.102275	0.615293	0.603603
0	033	0.452503	0.363452	0.092364
0	034	0.107129	0.861574	0.610793
0	035	0.602955	0.862562	0.881436
0	036	0.944125	0.370379	0.393087
0	037	0.603099	0.616129	0.892158
0	038	0.946836	0.120137	0.384593
0	039	0.410893	0.987634	0.110263
0	040	0.123840	0.484836	0.604040
0	041	0.440963	0.495213	0.085114
0	042	0.106436	0.992091	0.580745
0	043	0.632417	0.992363	0.885161
0	044	0.910677	0.499284	0.387478
0	045	0.603186	0.485180	0.925556
0	046	0.939175	0.988876	0.411558
0	047	0.339439	0.058319	0.446621
0	048	0.216542	0.553332	0.928893
0	049	0.338131	0.425451	0.416090
0	050	0.205184	0.944386	0.927161
0	051	0.706200	0.926249	0.549639
0	052	0.832438	0.423742	0.061266
0	053	0.704561	0.543171	0.581492
0	054	0.841507	0.032624	0.066607
0	055	0.353921	0.942999	0.350573
0	056	0.192505	0.439886	0.831909
0	057	0.349491	0.539618	0.317861
0	058	0.219405	0.045925	0.802937
0	059	0.697749	0.036953	0.658885
0	060	0.849017	0.539112	0.155534
0	061	0.724258	0.435936	0.693405
0	062	0.834307	0.933074	0.195450
0	063	0.270970	0.035530	0.284059
0	064	0.277611	0.526266	0.761174
0	065	0.266689	0.445456	0.257407
0	066	0.271670	0.929419	0.759033
0	067	0.776525	0.937871	0.712511
0	068	0.765590	0.449857	0.225169
0	069	0.771873	0.552612	0.749440
0	070	0.772160	0.046394	0.230520
0	071	0.308862	0.125934	0.607254
0	072	0.226260	0.621756	0.092227
0	073	0.319488	0.363273	0.582755
0	074	0.216216	0.863195	0.077016
0	075	0.735405	0.857725	0.389906

0	076	0.813347	0.353256	0.899059
0	077	0.715268	0.617659	0.424501
0	078	0.828497	0.111185	0.913760
0	079	0.226485	0.033260	0.538581
0	080	0.319850	0.534246	0.045924
0	081	0.220761	0.430307	0.502405
0	082	0.323370	0.922494	0.000056
0	083	0.819584	0.948820	0.456721
0	084	0.723268	0.441722	0.957479
0	085	0.822017	0.558652	0.501286
0	086	0.722215	0.054052	0.994285
0	087	0.338755	0.998286	0.622496
0	088	0.203272	0.489768	0.098803
0	089	0.321455	0.495695	0.580504
0	090	0.239017	0.993182	0.102971
0	091	0.707180	0.987427	0.377228
0	092	0.837002	0.482780	0.885695
0	093	0.732501	0.486749	0.408393
0	094	0.806173	0.981799	0.892621
0	095	0.135803	0.121156	0.590862
0	096	0.411177	0.623832	0.091835
0	097	0.126363	0.354230	0.581187
0	098	0.419560	0.856890	0.087958
0	099	0.908517	0.859271	0.402176
0	0100	0.628945	0.354727	0.916971
0	0101	0.922337	0.628099	0.430397
0	0102	0.625009	0.123336	0.913321
0	0103	0.125733	0.061014	0.417169
0	0104	0.416782	0.560736	0.918620
0	0105	0.100387	0.430662	0.428236
0	0106	0.446262	0.935225	0.937340
0	0107	0.920008	0.919000	0.575466
0	0108	0.627396	0.417445	0.089201
0	0109	0.942673	0.538399	0.568568
0	0110	0.599988	0.041879	0.060540
0	0111	0.147483	0.039133	0.224900
0	0112	0.403520	0.532963	0.724387
0	0113	0.138175	0.425504	0.239156
0	0114	0.402323	0.923020	0.751697
0	0115	0.900372	0.943359	0.768172
0	0116	0.642324	0.442384	0.282404
0	0117	0.902564	0.555313	0.755155
0	0118	0.642433	0.059434	0.245959
0	0119	0.107078	0.941019	0.342301

0	0120	0.441416	0.439321	0.852542
0	0121	0.110710	0.541651	0.322874
0	0122	0.436835	0.041195	0.820782
0	0123	0.942182	0.038656	0.647743
0	0124	0.606663	0.538222	0.158401
0	0125	0.939810	0.436809	0.692084
0	0126	0.615505	0.938691	0.180698
0	0127	0.233062	0.121126	0.145158
0	0128	0.325870	0.619880	0.639903
0	0129	0.219825	0.358769	0.127219
0	0130	0.332655	0.865960	0.614359
0	0131	0.821668	0.855110	0.850541
0	0132	0.729388	0.360110	0.359702
0	0133	0.834816	0.615635	0.892863
0	0134	0.720031	0.120342	0.371895
0	0135	0.521646	0.848941	0.212929
0	0136	0.031449	0.344549	0.718809
0	0137	0.516970	0.627997	0.210055
0	0138	0.030603	0.127159	0.708757
0	0139	0.528689	0.131824	0.779224
0	0140	0.016228	0.630781	0.292469
0	0141	0.529714	0.351252	0.788327
0	0142	0.016245	0.852593	0.290607
0	0143	0.404465	0.816305	0.276153
0	0144	0.155384	0.321644	0.767113
0	0145	0.402000	0.668727	0.279649
0	0146	0.147350	0.154353	0.782348
0	0147	0.651512	0.152202	0.725628
0	0148	0.893192	0.650060	0.241900
0	0149	0.650047	0.329548	0.724921
0	0150	0.900910	0.820941	0.213567
0	0151	0.464073	0.739614	0.142940
0	0152	0.092839	0.236945	0.651414
0	0153	0.592146	0.240247	0.841294
0	0154	0.954824	0.742048	0.348563
0	0155	0.335826	0.810742	0.436205
0	0156	0.216916	0.330476	0.936221
0	0157	0.341432	0.659961	0.450551
0	0158	0.210629	0.134932	0.952099
0	0159	0.718894	0.149799	0.562683
0	0160	0.826601	0.658620	0.078596
0	0161	0.710761	0.341744	0.553204
0	0162	0.837697	0.844218	0.045550
0	0163	0.265326	0.848756	0.257798

0	0164	0.282968	0.353462	0.771312
0	0165	0.259977	0.649592	0.278922
0	0166	0.278774	0.161947	0.792528
0	0167	0.780014	0.126074	0.732747
0	0168	0.765547	0.621272	0.243182
0	0169	0.781279	0.319547	0.713422
0	0170	0.769318	0.819684	0.206549
0	0171	0.296662	0.740931	0.590667
0	0172	0.249000	0.237853	0.065380
0	0173	0.747310	0.242131	0.431674
0	0174	0.801639	0.740010	0.931794
0	0175	0.220474	0.838973	0.520322
0	0176	0.331506	0.338161	0.029975
0	0177	0.220982	0.639365	0.526331
0	0178	0.332609	0.139705	0.020762
0	0179	0.832159	0.144021	0.467210
0	0180	0.718537	0.640973	0.972685
0	0181	0.830931	0.339843	0.480186
0	0182	0.718254	0.839566	0.968807
0	0183	0.138725	0.738877	0.565640
0	0184	0.415138	0.238320	0.067326
0	0185	0.915878	0.244393	0.430796
0	0186	0.634787	0.740066	0.930840
0	0187	0.108995	0.821804	0.420921
0	0188	0.433445	0.314621	0.911300
0	0189	0.112939	0.656612	0.418030
0	0190	0.445450	0.152349	0.925524
0	0191	0.940655	0.159731	0.574207
0	0192	0.610419	0.658544	0.079741
0	0193	0.942693	0.328055	0.578448
0	0194	0.607802	0.828856	0.070427
0	0195	0.137052	0.836087	0.228092
0	0196	0.408357	0.344548	0.723127
0	0197	0.134799	0.653793	0.223638
0	0198	0.404071	0.155032	0.737303
0	0199	0.907452	0.140587	0.763056
0	0200	0.638305	0.643266	0.270872
0	0201	0.907039	0.320879	0.767954
0	0202	0.643706	0.821437	0.259849
0	0203	0.217729	0.744493	0.155247
0	0204	0.326256	0.248515	0.666444
0	0205	0.825261	0.229907	0.838294
0	0206	0.724519	0.732483	0.336200
Al	Al207	0.335586	0.861068	0.325215

Al	Al208	0.332989	0.622951	0.329269
Si	Si209	0.711375	0.653917	0.317159
Si	Si210	0.443917	0.046362	0.177310
Si	Si211	0.100968	0.548058	0.670482
Si	Si212	0.452025	0.431397	0.158082
Si	Si213	0.094926	0.933529	0.662255
Si	Si214	0.602004	0.931916	0.819374
Si	Si215	0.941769	0.437114	0.325315
Si	Si216	0.593401	0.543086	0.842610
Si	Si217	0.953150	0.047808	0.331112
Si	Si218	0.341166	0.021472	0.338805
Si	Si219	0.209251	0.518772	0.821736
Si	Si220	0.337649	0.461144	0.307564
Si	Si221	0.209595	0.965771	0.812039
Si	Si222	0.707010	0.956609	0.660915
Si	Si223	0.835375	0.459583	0.168720
Si	Si224	0.711254	0.515747	0.694086
Si	Si225	0.837765	0.013664	0.183137
Si	Si226	0.303290	0.054097	0.553005
Si	Si227	0.241207	0.550341	0.042825
Si	Si228	0.299694	0.428811	0.520432
Si	Si229	0.245685	0.930297	0.028520
Si	Si230	0.742512	0.929920	0.442823
Si	Si231	0.801444	0.425138	0.950799
Si	Si232	0.744123	0.551340	0.478001
Si	Si233	0.799522	0.045027	0.966444
Si	Si234	0.149000	0.052082	0.531489
Si	Si235	0.396699	0.553422	0.035297
Si	Si236	0.143352	0.425029	0.528787
Si	Si237	0.399471	0.926276	0.034016
Si	Si238	0.897008	0.928819	0.461106
Si	Si239	0.645983	0.424338	0.972647
Si	Si240	0.899312	0.555864	0.471948
Si	Si241	0.645231	0.052792	0.963249
Si	Si242	0.101874	0.020242	0.318858
Si	Si243	0.444734	0.518069	0.824642
Si	Si244	0.091479	0.463130	0.318606
Si	Si245	0.452838	0.962150	0.824133
Si	Si246	0.945918	0.959483	0.672627
Si	Si247	0.599518	0.459140	0.184168
Si	Si248	0.953273	0.516290	0.683120
Si	Si249	0.593781	0.016859	0.174730
Si	Si250	0.223223	0.046607	0.189737
Si	Si251	0.331177	0.542988	0.676605

Si	Si252	0.207781	0.430167	0.180692
Si	Si253	0.335352	0.930143	0.686969
Si	Si254	0.826231	0.930005	0.805752
Si	Si255	0.717816	0.435052	0.318786
Si	Si256	0.836238	0.551051	0.820909
Si	Si257	0.710985	0.053231	0.306811
Si	Si258	0.451833	0.816078	0.179043
Si	Si259	0.101340	0.314872	0.679576
Si	Si260	0.448024	0.664208	0.180144
Si	Si261	0.101806	0.159755	0.683545
Si	Si262	0.599095	0.161914	0.814743
Si	Si263	0.947183	0.662952	0.327945
Si	Si264	0.600230	0.318844	0.817656
Si	Si265	0.945728	0.818749	0.313758
Si	Si266	0.212236	0.361577	0.826178
Si	Si267	0.213338	0.124112	0.832824
Si	Si268	0.712394	0.116006	0.670676
Si	Si269	0.833877	0.616761	0.180468
Si	Si270	0.716018	0.356744	0.671312
Si	Si271	0.836149	0.854772	0.164913
Si	Si272	0.295495	0.814795	0.541202
Si	Si273	0.254498	0.316351	0.039950
Si	Si274	0.295582	0.664362	0.550501
Si	Si275	0.256232	0.158780	0.045184
Si	Si276	0.754887	0.163898	0.457930
Si	Si277	0.795454	0.663593	0.968440
Si	Si278	0.754677	0.320506	0.457090
Si	Si279	0.795000	0.819353	0.950318
Si	Si280	0.143466	0.815752	0.528797
Si	Si281	0.407845	0.313908	0.025786
Si	Si282	0.143647	0.662134	0.528090
Si	Si283	0.409479	0.161082	0.032063
Si	Si284	0.909039	0.166809	0.464100
Si	Si285	0.641847	0.663701	0.969282
Si	Si286	0.908462	0.320552	0.470615
Si	Si287	0.641358	0.817843	0.962917
Si	Si288	0.093178	0.862816	0.319453
Si	Si289	0.453305	0.362369	0.818719
Si	Si290	0.094121	0.620710	0.313868
Si	Si291	0.453468	0.120285	0.815907
Si	Si292	0.955185	0.116487	0.673677
Si	Si293	0.593296	0.616486	0.179412
Si	Si294	0.955300	0.357558	0.688933
Si	Si295	0.597493	0.859970	0.180078

Si	Si296	0.210344	0.822973	0.182025
Si	Si297	0.334078	0.327213	0.687060
Si	Si298	0.210937	0.667360	0.189715
Si	Si299	0.329837	0.171716	0.700786
Si	Si300	0.835311	0.152094	0.810852
Si	Si301	0.832307	0.306932	0.804718
Si	Si302	0.718437	0.808782	0.298069
Zn	Zn303	0.405760	0.740626	0.393033

TS-C₆H₈-Dehydro-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS1 in Green) Total energy = -1932.98416549 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.434832	0.752191	0.641892
H	H2	0.520962	0.751731	0.639972
H	H3	0.405519	0.690787	0.485187
H	H4	0.494132	0.781090	0.479407
H	H5	0.548684	0.694404	0.381181
H	H6	0.570775	0.586524	0.461430
H	H7	0.510353	0.555712	0.617093
H	H8	0.459174	0.643821	0.718178
C	C9	0.477110	0.725726	0.610890
C	C10	0.478355	0.729399	0.496729
C	C11	0.526281	0.681847	0.451725
C	C12	0.538207	0.622676	0.495642
C	C13	0.507560	0.606563	0.590209
C	C14	0.478936	0.654463	0.645456
O	O15	0.512241	0.027884	0.212380
O	O16	0.020707	0.549147	0.717644
O	O17	0.524662	0.437546	0.220738
O	O18	0.009449	0.933516	0.692863

0	019	0.515997	0.942606	0.788225
0	020	0.017484	0.457463	0.299889
0	021	0.512936	0.540334	0.809480
0	022	0.019644	0.041153	0.287636
0	023	0.393846	0.063199	0.278587
0	024	0.135800	0.558440	0.801549
0	025	0.401590	0.431418	0.282719
0	026	0.129156	0.954615	0.761893
0	027	0.631919	0.946442	0.706509
0	028	0.899969	0.432986	0.226242
0	029	0.633042	0.529118	0.739359
0	030	0.894728	0.054485	0.233967
0	031	0.438615	0.109746	0.106855
0	032	0.114533	0.625096	0.637281
0	033	0.440644	0.358680	0.129808
0	034	0.108436	0.867060	0.616486
0	035	0.610043	0.859651	0.850208
0	036	0.938900	0.373221	0.391722
0	037	0.605876	0.617565	0.880921
0	038	0.942594	0.122012	0.387695
0	039	0.403187	0.982683	0.124966
0	040	0.125354	0.493358	0.631098
0	041	0.432880	0.490348	0.109698
0	042	0.096108	0.996764	0.581409
0	043	0.618881	0.988186	0.891906
0	044	0.908536	0.502671	0.390176
0	045	0.603915	0.487624	0.922490
0	046	0.927473	0.990739	0.401447
0	047	0.327664	0.066535	0.446412
0	048	0.202252	0.552523	0.966217
0	049	0.339061	0.442392	0.453103
0	050	0.197940	0.941018	0.924522
0	051	0.703163	0.928893	0.549315
0	052	0.836758	0.428817	0.057734
0	053	0.699017	0.550686	0.575082
0	054	0.832895	0.049278	0.060788
0	055	0.352524	0.949735	0.360419
0	056	0.194213	0.445523	0.847024
0	057	0.344769	0.545861	0.330758
0	058	0.216348	0.048104	0.813060
0	059	0.712396	0.043461	0.650126
0	060	0.852272	0.545287	0.147035
0	061	0.721969	0.440394	0.679373
0	062	0.846056	0.940091	0.170653

0	063	0.265855	0.032394	0.281176
0	064	0.266351	0.549166	0.796398
0	065	0.271570	0.439756	0.287323
0	066	0.257299	0.931813	0.747902
0	067	0.762383	0.933437	0.722745
0	068	0.770699	0.456853	0.222803
0	069	0.760853	0.556263	0.749233
0	070	0.765020	0.036221	0.225887
0	071	0.296624	0.134074	0.607057
0	072	0.229290	0.620133	0.128382
0	073	0.316544	0.378561	0.617406
0	074	0.211248	0.862433	0.076462
0	075	0.711378	0.864116	0.381938
0	076	0.805824	0.355172	0.901862
0	077	0.718522	0.625796	0.417924
0	078	0.805093	0.118994	0.900427
0	079	0.215509	0.040224	0.540306
0	080	0.315235	0.532402	0.058767
0	081	0.216500	0.434711	0.519960
0	082	0.315755	0.927825	0.001970
0	083	0.810133	0.943269	0.438423
0	084	0.721720	0.445629	0.970800
0	085	0.819286	0.561107	0.504808
0	086	0.710780	0.052581	0.992621
0	087	0.328626	0.007497	0.624440
0	088	0.203969	0.488813	0.135625
0	089	0.301915	0.509457	0.614082
0	090	0.225498	0.994082	0.100720
0	091	0.697747	0.996756	0.382863
0	092	0.830126	0.483319	0.877919
0	093	0.730455	0.494737	0.402780
0	094	0.801510	0.986637	0.893537
0	095	0.123372	0.126365	0.595115
0	096	0.406036	0.620486	0.113068
0	097	0.122975	0.362596	0.603936
0	098	0.409943	0.854909	0.082640
0	099	0.906728	0.859293	0.399690
0	0100	0.632652	0.357780	0.911019
0	0101	0.909329	0.634299	0.416032
0	0102	0.617025	0.120686	0.899436
0	0103	0.114279	0.067958	0.419821
0	0104	0.418009	0.558108	0.942805
0	0105	0.093770	0.443368	0.455680
0	0106	0.438928	0.943137	0.944133

0	0107	0.907177	0.924417	0.568718
0	0108	0.618446	0.416543	0.085341
0	0109	0.943625	0.555886	0.562700
0	0110	0.588532	0.050100	0.058367
0	0111	0.140927	0.043719	0.229253
0	0112	0.391250	0.533944	0.752602
0	0113	0.142327	0.420322	0.274920
0	0114	0.387796	0.934790	0.762467
0	0115	0.889750	0.954614	0.758253
0	0116	0.646380	0.444991	0.274351
0	0117	0.892079	0.554696	0.743317
0	0118	0.637161	0.063415	0.240631
0	0119	0.103695	0.946168	0.348652
0	0120	0.439247	0.438488	0.868078
0	0121	0.115205	0.543186	0.329244
0	0122	0.439761	0.047816	0.825782
0	0123	0.944452	0.041728	0.635670
0	0124	0.599725	0.537962	0.153476
0	0125	0.945661	0.445456	0.666857
0	0126	0.610985	0.943764	0.172026
0	0127	0.228523	0.121615	0.148727
0	0128	0.322338	0.631959	0.669487
0	0129	0.222267	0.357133	0.154970
0	0130	0.332450	0.875702	0.611684
0	0131	0.824985	0.860122	0.852097
0	0132	0.734740	0.367535	0.357225
0	0133	0.830755	0.615747	0.887330
0	0134	0.721197	0.126578	0.353385
0	0135	0.518944	0.852215	0.195227
0	0136	0.022913	0.347468	0.729864
0	0137	0.518802	0.633366	0.213230
0	0138	0.019288	0.137133	0.714775
0	0139	0.518019	0.148106	0.775384
0	0140	0.018526	0.630250	0.307628
0	0141	0.524686	0.347989	0.800474
0	0142	0.016171	0.857363	0.291359
0	0143	0.405582	0.825449	0.276284
0	0144	0.144570	0.329179	0.792517
0	0145	0.405182	0.673652	0.293965
0	0146	0.136415	0.150907	0.789835
0	0147	0.638323	0.145812	0.708527
0	0148	0.904352	0.655133	0.223008
0	0149	0.639519	0.340488	0.714617
0	0150	0.902360	0.824719	0.209628

0	0151	0.457376	0.740387	0.145477
0	0152	0.091653	0.243206	0.666215
0	0153	0.601949	0.242153	0.833570
0	0154	0.957779	0.745083	0.342945
0	0155	0.333306	0.817117	0.434339
0	0156	0.206131	0.340431	0.962888
0	0157	0.352181	0.658328	0.477827
0	0158	0.201975	0.139647	0.957427
0	0159	0.706825	0.153708	0.544630
0	0160	0.828232	0.664652	0.069877
0	0161	0.706483	0.342006	0.547824
0	0162	0.836018	0.838380	0.043667
0	0163	0.267290	0.858728	0.252585
0	0164	0.274602	0.347358	0.797508
0	0165	0.265168	0.665011	0.307218
0	0166	0.266709	0.167792	0.793965
0	0167	0.768653	0.153025	0.717265
0	0168	0.775385	0.630246	0.242105
0	0169	0.769198	0.321107	0.717810
0	0170	0.771671	0.835721	0.212301
0	0171	0.300122	0.750118	0.595788
0	0172	0.242978	0.239413	0.074541
0	0173	0.745519	0.247207	0.420649
0	0174	0.799411	0.741271	0.918542
0	0175	0.219933	0.844386	0.521174
0	0176	0.326746	0.338041	0.038919
0	0177	0.225847	0.647029	0.535942
0	0178	0.324798	0.141389	0.019834
0	0179	0.826318	0.147822	0.465333
0	0180	0.716963	0.644718	0.974242
0	0181	0.828962	0.340745	0.487605
0	0182	0.717355	0.840219	0.962190
0	0183	0.140702	0.744735	0.571920
0	0184	0.406693	0.235786	0.082990
0	0185	0.912303	0.247053	0.427950
0	0186	0.632449	0.741653	0.926087
0	0187	0.106474	0.826450	0.426967
0	0188	0.438783	0.318388	0.941465
0	0189	0.109141	0.648649	0.445628
0	0190	0.436734	0.161033	0.926250
0	0191	0.932039	0.165212	0.575723
0	0192	0.604301	0.657217	0.070213
0	0193	0.943582	0.328437	0.576938
0	0194	0.599423	0.843366	0.043431

O	O195	0.138518	0.841254	0.236350
O	O196	0.400728	0.337714	0.754122
O	O197	0.138927	0.663311	0.254848
O	O198	0.391491	0.155755	0.740096
O	O199	0.893960	0.130728	0.758827
O	O200	0.645279	0.641220	0.256580
O	O201	0.895247	0.342206	0.760132
O	O202	0.642954	0.820799	0.226525
O	O203	0.219412	0.747689	0.167967
O	O204	0.317469	0.254419	0.670589
O	O205	0.833752	0.237020	0.832092
O	O206	0.721573	0.739248	0.322439
Al	Al207	0.334687	0.869549	0.325931
Al	Al208	0.337446	0.629675	0.348204
Si	Si209	0.715216	0.659348	0.308380
Si	Si210	0.437136	0.046194	0.180973
Si	Si211	0.098585	0.556288	0.695498
Si	Si212	0.448718	0.429639	0.186333
Si	Si213	0.086547	0.938029	0.663235
Si	Si214	0.593778	0.934431	0.810252
Si	Si215	0.941756	0.441643	0.328034
Si	Si216	0.589940	0.543736	0.838286
Si	Si217	0.945391	0.051985	0.327262
Si	Si218	0.335138	0.026662	0.341562
Si	Si219	0.199908	0.525936	0.853503
Si	Si220	0.339135	0.466405	0.337685
Si	Si221	0.200151	0.968732	0.812243
Si	Si222	0.702542	0.963488	0.657510
Si	Si223	0.839910	0.466043	0.164359
Si	Si224	0.703702	0.519179	0.685807
Si	Si225	0.834736	0.020148	0.173206
Si	Si226	0.292210	0.061911	0.553498
Si	Si227	0.237518	0.549297	0.073810
Si	Si228	0.293507	0.440913	0.550892
Si	Si229	0.237401	0.931078	0.027794
Si	Si230	0.731127	0.933009	0.437393
Si	Si231	0.798754	0.428161	0.952154
Si	Si232	0.742017	0.558371	0.474347
Si	Si233	0.787992	0.051866	0.961420
Si	Si234	0.137716	0.058164	0.534011
Si	Si235	0.392665	0.550075	0.056615
Si	Si236	0.139822	0.433668	0.552753
Si	Si237	0.391406	0.928028	0.037899
Si	Si238	0.888035	0.929499	0.452172

Si	Si239	0.644312	0.426392	0.972363
Si	Si240	0.895241	0.562979	0.468227
Si	Si241	0.634067	0.053167	0.959854
Si	Si242	0.094368	0.024668	0.321762
Si	Si243	0.440235	0.517491	0.844042
Si	Si244	0.092297	0.465826	0.339515
Si	Si245	0.445266	0.967485	0.829423
Si	Si246	0.937959	0.963283	0.663837
Si	Si247	0.596964	0.459241	0.183087
Si	Si248	0.950269	0.525880	0.674105
Si	Si249	0.586877	0.021483	0.171277
Si	Si250	0.216033	0.046953	0.190477
Si	Si251	0.320253	0.555017	0.709105
Si	Si252	0.210684	0.426952	0.213107
Si	Si253	0.325999	0.938479	0.687062
Si	Si254	0.819788	0.934502	0.806001
Si	Si255	0.721129	0.441387	0.313960
Si	Si256	0.828179	0.551931	0.814088
Si	Si257	0.705839	0.055702	0.300732
Si	Si258	0.448018	0.818631	0.172914
Si	Si259	0.095536	0.320755	0.698471
Si	Si260	0.447092	0.665822	0.190658
Si	Si261	0.092756	0.164340	0.691129
Si	Si262	0.593686	0.164327	0.804284
Si	Si263	0.948097	0.666424	0.322026
Si	Si264	0.599372	0.321770	0.815099
Si	Si265	0.946034	0.821797	0.310569
Si	Si266	0.204847	0.365681	0.849233
Si	Si267	0.204858	0.126356	0.838776
Si	Si268	0.706413	0.123858	0.656003
Si	Si269	0.839879	0.623477	0.171421
Si	Si270	0.709162	0.360992	0.664939
Si	Si271	0.839007	0.860023	0.159095
Si	Si272	0.295616	0.822496	0.541217
Si	Si273	0.249769	0.318787	0.058113
Si	Si274	0.298489	0.671120	0.571078
Si	Si275	0.249425	0.161036	0.049471
Si	Si276	0.749996	0.168608	0.446010
Si	Si277	0.793769	0.666260	0.961781
Si	Si278	0.753756	0.324164	0.454006
Si	Si279	0.794336	0.819820	0.945085
Si	Si280	0.143267	0.821181	0.533344
Si	Si281	0.402866	0.313370	0.048808
Si	Si282	0.147386	0.666107	0.546914

Si	Si283	0.401664	0.161799	0.034336
Si	Si284	0.903373	0.170131	0.463552
Si	Si285	0.639964	0.665141	0.962981
Si	Si286	0.906262	0.322592	0.470883
Si	Si287	0.640312	0.821010	0.945591
Si	Si288	0.092085	0.867667	0.324867
Si	Si289	0.450777	0.360571	0.840737
Si	Si290	0.095764	0.621733	0.333896
Si	Si291	0.445943	0.128081	0.817135
Si	Si292	0.947310	0.118818	0.671598
Si	Si293	0.592600	0.617217	0.173502
Si	Si294	0.951558	0.365775	0.683397
Si	Si295	0.593748	0.865279	0.158807
Si	Si296	0.210132	0.827242	0.185719
Si	Si297	0.326979	0.329698	0.710577
Si	Si298	0.214479	0.673776	0.216427
Si	Si299	0.318608	0.176902	0.703108
Si	Si300	0.825283	0.159665	0.801526
Si	Si301	0.826043	0.314578	0.802299
Si	Si302	0.712304	0.815547	0.285994
Zn	Zn303	0.412205	0.759129	0.387503

M-C₆H₇Zn-OH-Zn²⁺ (Fig. 9a/M2 in Green) Total energy = -1934.29964616 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.463054	0.802556	0.621977
H	H2	0.540592	0.766804	0.644744
H	H3	0.386569	0.647382	0.508740
H	H4	0.540436	0.809359	0.471639
H	H5	0.581327	0.706853	0.394392
H	H6	0.561939	0.598536	0.476407

H	H7	0.472754	0.589686	0.604656
H	H8	0.431450	0.690956	0.687369
C	C9	0.495113	0.761316	0.600117
C	C10	0.513185	0.763843	0.489823
C	C11	0.548802	0.703328	0.457879
C	C12	0.537524	0.643506	0.501805
C	C13	0.488567	0.638742	0.579898
C	C14	0.465368	0.694535	0.625383
O	O15	0.512114	0.026729	0.212373
O	O16	0.017170	0.542730	0.718189
O	O17	0.523921	0.438685	0.214733
O	O18	0.008833	0.934332	0.690709
O	O19	0.515691	0.944264	0.785667
O	O20	0.017896	0.453399	0.296436
O	O21	0.511165	0.545689	0.804109
O	O22	0.019740	0.042441	0.288910
O	O23	0.393305	0.058552	0.278573
O	O24	0.132965	0.557913	0.800749
O	O25	0.403742	0.433421	0.287357
O	O26	0.128402	0.948274	0.762489
O	O27	0.632041	0.941830	0.705735
O	O28	0.901012	0.432094	0.217736
O	O29	0.629826	0.533527	0.731563
O	O30	0.893759	0.054670	0.241031
O	O31	0.438185	0.110071	0.110030
O	O32	0.105007	0.626297	0.640517
O	O33	0.437240	0.358057	0.132965
O	O34	0.106071	0.868389	0.608374
O	O35	0.607721	0.862500	0.856466
O	O36	0.935667	0.370107	0.382829
O	O37	0.605621	0.619151	0.878596
O	O38	0.943249	0.119298	0.396068
O	O39	0.404321	0.982012	0.120815
O	O40	0.124254	0.495646	0.627328
O	O41	0.426856	0.488731	0.109507
O	O42	0.097233	0.999432	0.585669
O	O43	0.618348	0.993244	0.885854
O	O44	0.908651	0.500261	0.383653
O	O45	0.602445	0.488583	0.913509
O	O46	0.930379	0.987413	0.403175
O	O47	0.330362	0.062130	0.448096
O	O48	0.194623	0.548285	0.970709
O	O49	0.339216	0.447999	0.456183
O	O50	0.197342	0.942834	0.926929

0	051	0.707779	0.922784	0.552834
0	052	0.835011	0.426994	0.051148
0	053	0.698070	0.549285	0.568820
0	054	0.831834	0.051603	0.069129
0	055	0.348527	0.945135	0.358789
0	056	0.186074	0.442849	0.847697
0	057	0.338428	0.545490	0.323110
0	058	0.211174	0.046653	0.807022
0	059	0.699962	0.043274	0.633177
0	060	0.852947	0.543740	0.138640
0	061	0.714779	0.439367	0.676741
0	062	0.847784	0.940269	0.172433
0	063	0.264562	0.033149	0.284754
0	064	0.263427	0.543941	0.805918
0	065	0.273572	0.431787	0.290097
0	066	0.257032	0.929716	0.751855
0	067	0.762253	0.947153	0.727470
0	068	0.771622	0.456194	0.217864
0	069	0.758032	0.554583	0.744570
0	070	0.764688	0.033526	0.233895
0	071	0.301169	0.131211	0.607754
0	072	0.225419	0.618008	0.130437
0	073	0.313678	0.373735	0.610858
0	074	0.212946	0.860978	0.075426
0	075	0.714286	0.859981	0.383749
0	076	0.804550	0.355851	0.893161
0	077	0.720372	0.625730	0.414067
0	078	0.807706	0.117432	0.905474
0	079	0.216986	0.039924	0.540694
0	080	0.313318	0.537359	0.049185
0	081	0.215544	0.436436	0.518109
0	082	0.316481	0.926350	0.999763
0	083	0.810836	0.943355	0.435574
0	084	0.720308	0.446138	0.963409
0	085	0.818709	0.556297	0.499653
0	086	0.711727	0.050186	0.993667
0	087	0.328323	0.002979	0.625518
0	088	0.209038	0.486010	0.139242
0	089	0.300413	0.504463	0.624193
0	090	0.228297	0.991597	0.104255
0	091	0.695064	0.992100	0.386892
0	092	0.829668	0.484341	0.873335
0	093	0.727436	0.494672	0.395145
0	094	0.807183	0.984988	0.903596

0	095	0.126128	0.128511	0.591930
0	096	0.404015	0.619355	0.122236
0	097	0.124230	0.363856	0.607128
0	098	0.409256	0.852744	0.084220
0	099	0.906269	0.856689	0.402323
0	0100	0.631298	0.358811	0.902727
0	0101	0.909283	0.631170	0.414998
0	0102	0.619903	0.124865	0.907768
0	0103	0.115910	0.066112	0.419600
0	0104	0.422025	0.562057	0.947255
0	0105	0.092347	0.440627	0.455079
0	0106	0.440052	0.938097	0.942646
0	0107	0.904850	0.924044	0.570714
0	0108	0.615953	0.417714	0.076577
0	0109	0.942695	0.549229	0.559291
0	0110	0.589833	0.047484	0.059752
0	0111	0.140647	0.041496	0.228399
0	0112	0.388787	0.541694	0.757421
0	0113	0.143547	0.418678	0.275840
0	0114	0.387928	0.929653	0.761711
0	0115	0.890587	0.952237	0.761638
0	0116	0.646584	0.441538	0.265350
0	0117	0.888889	0.558521	0.738246
0	0118	0.636906	0.061179	0.243763
0	0119	0.100617	0.944746	0.348121
0	0120	0.438323	0.443298	0.866080
0	0121	0.113299	0.541140	0.329828
0	0122	0.433932	0.044684	0.827516
0	0123	0.940212	0.042184	0.639252
0	0124	0.600674	0.538282	0.150203
0	0125	0.934967	0.443248	0.674723
0	0126	0.610475	0.941760	0.175507
0	0127	0.228367	0.119612	0.147158
0	0128	0.310369	0.629357	0.674647
0	0129	0.221128	0.353769	0.154379
0	0130	0.328439	0.870304	0.615295
0	0131	0.818321	0.860208	0.847956
0	0132	0.735666	0.367044	0.352027
0	0133	0.826025	0.616868	0.882575
0	0134	0.718291	0.122599	0.362494
0	0135	0.517070	0.851259	0.199125
0	0136	0.020596	0.349412	0.726264
0	0137	0.519125	0.631396	0.216526
0	0138	0.022011	0.133615	0.712146

0	0139	0.521028	0.138149	0.779044
0	0140	0.015952	0.627138	0.301347
0	0141	0.521482	0.351547	0.796140
0	0142	0.013040	0.855794	0.288466
0	0143	0.403794	0.823542	0.277884
0	0144	0.139937	0.325347	0.794511
0	0145	0.408129	0.671159	0.304744
0	0146	0.139312	0.155282	0.785971
0	0147	0.642599	0.148639	0.716867
0	0148	0.901971	0.653469	0.221400
0	0149	0.635622	0.335989	0.707750
0	0150	0.897725	0.822263	0.211563
0	0151	0.456720	0.738293	0.150347
0	0152	0.087404	0.243716	0.662249
0	0153	0.593266	0.242885	0.833280
0	0154	0.956216	0.742643	0.341478
0	0155	0.334851	0.812887	0.437960
0	0156	0.204874	0.338194	0.961765
0	0157	0.340930	0.644969	0.483031
0	0158	0.202694	0.136171	0.955257
0	0159	0.708350	0.161343	0.551263
0	0160	0.828248	0.664060	0.066262
0	0161	0.704013	0.342420	0.541240
0	0162	0.835876	0.840716	0.041078
0	0163	0.263502	0.852694	0.256631
0	0164	0.269129	0.347958	0.791947
0	0165	0.264527	0.667931	0.305230
0	0166	0.270475	0.162621	0.794897
0	0167	0.773065	0.136094	0.717573
0	0168	0.774294	0.625123	0.236215
0	0169	0.766000	0.321199	0.710626
0	0170	0.767530	0.839239	0.206114
0	0171	0.293547	0.745395	0.594274
0	0172	0.242416	0.236943	0.071603
0	0173	0.744905	0.246444	0.415424
0	0174	0.797193	0.742402	0.918553
0	0175	0.217963	0.840672	0.516957
0	0176	0.325306	0.336711	0.036905
0	0177	0.215526	0.643505	0.536299
0	0178	0.325521	0.140026	0.019187
0	0179	0.825555	0.147554	0.466818
0	0180	0.714824	0.646241	0.976251
0	0181	0.827739	0.339122	0.485487
0	0182	0.715252	0.840702	0.966688

O	O183	0.134330	0.744302	0.569590
O	O184	0.407221	0.235889	0.079185
O	O185	0.912133	0.245230	0.428459
O	O186	0.630580	0.742832	0.925648
O	O187	0.105107	0.823784	0.420664
O	O188	0.438447	0.323054	0.941507
O	O189	0.099265	0.645796	0.447435
O	O190	0.438686	0.158376	0.927188
O	O191	0.930070	0.166354	0.580832
O	O192	0.601069	0.657842	0.068930
O	O193	0.944264	0.331807	0.570327
O	O194	0.597660	0.841115	0.048462
O	O195	0.134866	0.842674	0.229708
O	O196	0.396214	0.342395	0.755749
O	O197	0.137525	0.662201	0.260129
O	O198	0.395642	0.156043	0.740115
O	O199	0.898407	0.134751	0.766831
O	O200	0.645677	0.641654	0.253826
O	O201	0.893517	0.330791	0.752895
O	O202	0.640557	0.818923	0.232566
O	O203	0.213289	0.745835	0.164129
O	O204	0.318237	0.252392	0.674007
O	O205	0.822140	0.234332	0.828817
O	O206	0.726341	0.737561	0.314607
Al	Al207	0.332115	0.863549	0.327843
Al	Al208	0.335731	0.629744	0.343025
Si	Si209	0.716584	0.657795	0.303490
Si	Si210	0.436993	0.044530	0.180557
Si	Si211	0.094311	0.555109	0.695750
Si	Si212	0.446988	0.429857	0.186659
Si	Si213	0.085986	0.937746	0.661795
Si	Si214	0.593127	0.935734	0.809952
Si	Si215	0.941326	0.439075	0.321126
Si	Si216	0.588377	0.546740	0.832374
Si	Si217	0.946029	0.050867	0.331896
Si	Si218	0.334483	0.022838	0.342237
Si	Si219	0.194134	0.522866	0.857222
Si	Si220	0.338529	0.466251	0.338184
Si	Si221	0.198475	0.966768	0.812698
Si	Si222	0.700852	0.963940	0.655571
Si	Si223	0.840044	0.464676	0.157267
Si	Si224	0.700428	0.519034	0.680301
Si	Si225	0.834381	0.019940	0.179684
Si	Si226	0.294279	0.058995	0.554629

Si	Si227	0.235753	0.548163	0.074050
Si	Si228	0.292225	0.440099	0.551828
Si	Si229	0.238530	0.930161	0.028084
Si	Si230	0.732231	0.929464	0.439083
Si	Si231	0.797377	0.428204	0.945206
Si	Si232	0.741430	0.556733	0.468624
Si	Si233	0.789680	0.051098	0.967329
Si	Si234	0.139513	0.058719	0.534055
Si	Si235	0.391273	0.552005	0.057986
Si	Si236	0.139049	0.434093	0.552165
Si	Si237	0.392055	0.925413	0.036872
Si	Si238	0.888193	0.927771	0.453128
Si	Si239	0.642672	0.427466	0.964086
Si	Si240	0.894895	0.558888	0.464304
Si	Si241	0.635108	0.054061	0.961346
Si	Si242	0.094208	0.023643	0.321686
Si	Si243	0.439981	0.522839	0.845160
Si	Si244	0.091855	0.463183	0.338767
Si	Si245	0.444101	0.964588	0.828797
Si	Si246	0.936490	0.963109	0.665176
Si	Si247	0.596380	0.459123	0.176392
Si	Si248	0.945890	0.523190	0.673445
Si	Si249	0.587027	0.019590	0.173121
Si	Si250	0.216247	0.045580	0.191663
Si	Si251	0.315208	0.553029	0.716880
Si	Si252	0.212363	0.423128	0.214848
Si	Si253	0.324856	0.934265	0.688748
Si	Si254	0.819497	0.936676	0.809203
Si	Si255	0.720832	0.440231	0.307230
Si	Si256	0.825272	0.552965	0.809595
Si	Si257	0.704300	0.052434	0.306925
Si	Si258	0.446494	0.816734	0.175943
Si	Si259	0.092901	0.320634	0.697567
Si	Si260	0.446982	0.664511	0.198966
Si	Si261	0.093815	0.165080	0.687991
Si	Si262	0.594035	0.163829	0.809282
Si	Si263	0.946244	0.664045	0.319745
Si	Si264	0.595144	0.321973	0.809884
Si	Si265	0.943503	0.819598	0.310542
Si	Si266	0.200353	0.363485	0.848470
Si	Si267	0.205276	0.124941	0.836029
Si	Si268	0.705891	0.122300	0.656164
Si	Si269	0.839281	0.621193	0.166317
Si	Si270	0.704724	0.359836	0.659064

Si	Si271	0.837398	0.860781	0.157620
Si	Si272	0.293295	0.818547	0.540629
Si	Si273	0.248705	0.316404	0.056638
Si	Si274	0.286674	0.666739	0.575460
Si	Si275	0.249656	0.158484	0.047579
Si	Si276	0.749275	0.169010	0.448594
Si	Si277	0.791453	0.667026	0.960015
Si	Si278	0.752728	0.323506	0.449417
Si	Si279	0.791823	0.820934	0.944898
Si	Si280	0.140518	0.820108	0.528157
Si	Si281	0.401933	0.313895	0.047946
Si	Si282	0.137471	0.665167	0.547752
Si	Si283	0.402269	0.160857	0.034327
Si	Si284	0.902750	0.169191	0.467583
Si	Si285	0.637883	0.666320	0.962646
Si	Si286	0.905053	0.321734	0.466675
Si	Si287	0.638254	0.821691	0.949305
Si	Si288	0.089211	0.866716	0.320576
Si	Si289	0.448388	0.364939	0.839753
Si	Si290	0.092097	0.619215	0.333970
Si	Si291	0.446980	0.124210	0.818675
Si	Si292	0.947657	0.119110	0.675121
Si	Si293	0.592018	0.617215	0.172477
Si	Si294	0.948061	0.363741	0.680945
Si	Si295	0.592002	0.863474	0.163563
Si	Si296	0.207402	0.825494	0.184098
Si	Si297	0.324044	0.329086	0.709149
Si	Si298	0.211622	0.673203	0.216542
Si	Si299	0.321787	0.174505	0.704070
Si	Si300	0.825392	0.155784	0.803684
Si	Si301	0.821738	0.311607	0.795908
Si	Si302	0.712553	0.814435	0.284494
Zn	Zn303	0.432884	0.772927	0.403536

TS-C₆H₇Zn-HTransfer-Concerted-Zn²⁺ (Fig. 9a/TS2 in Green)

Total energy = -1933.10025253 eV

data_

_audit_creation_method	'Materials Studio'
_cell_length_a	20.357621
_cell_length_b	20.050598
_cell_length_c	13.476578
_cell_angle_alpha	90.000000
_cell_angle_beta	90.000000

```

_cell_angle_gamma      90.000000
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
  H      H1      0.438679      0.644756      0.521478
  H      H2      0.431858      0.693894      0.633405
  H      H3      0.394529      0.637838      0.499419
  H      H4      0.444633      0.798403      0.555738
  H      H5      0.539396      0.828156      0.444209
  H      H6      0.639571      0.763979      0.479923
  H      H7      0.634009      0.662804      0.585662
  H      H8      0.529414      0.620202      0.648739
  C      C9      0.468535      0.694682      0.574489
  C      C10     0.471180      0.758521      0.516956
  C      C11     0.536469      0.781007      0.483891
  C      C12     0.592043      0.745994      0.503834
  C      C13     0.588587      0.687176      0.564461
  C      C14     0.530637      0.663147      0.600096
  O      O15     0.511935      0.027799      0.208017
  O      O16     0.021296      0.535750      0.721618
  O      O17     0.523848      0.439371      0.209605
  O      O18     0.014795      0.942757      0.699576
  O      O19     0.523436      0.952466      0.785484
  O      O20     0.016720      0.453551      0.289418
  O      O21     0.514604      0.547151      0.803718
  O      O22     0.020791      0.041993      0.286925
  O      O23     0.392130      0.058763      0.267320
  O      O24     0.140890      0.562743      0.785272
  O      O25     0.402020      0.432753      0.274327
  O      O26     0.139922      0.940757      0.746760
  O      O27     0.642272      0.929120      0.719227
  O      O28     0.897700      0.430061      0.221671
  O      O29     0.635436      0.540160      0.740588
  O      O30     0.894652      0.050281      0.244398
  O      O31     0.441122      0.114075      0.104827
  O      O32     0.095596      0.624426      0.626544
  O      O33     0.439808      0.361821      0.117220
  O      O34     0.094653      0.867519      0.596120
  O      O35     0.600414      0.866201      0.878467
  O      O36     0.938253      0.371390      0.385837

```

0	037	0.604111	0.618533	0.893443
0	038	0.945611	0.121658	0.392160
0	039	0.407408	0.986289	0.105110
0	040	0.125747	0.495810	0.618290
0	041	0.429906	0.493249	0.101919
0	042	0.100263	0.998844	0.578595
0	043	0.628028	0.996363	0.886226
0	044	0.910834	0.501563	0.383764
0	045	0.602219	0.486633	0.915851
0	046	0.934820	0.990089	0.410717
0	047	0.331777	0.063369	0.438323
0	048	0.196897	0.545130	0.958110
0	049	0.339589	0.449178	0.444196
0	050	0.200884	0.947421	0.918180
0	051	0.704761	0.925259	0.551259
0	052	0.833388	0.426616	0.054605
0	053	0.701282	0.546921	0.573801
0	054	0.836232	0.040399	0.070465
0	055	0.345410	0.946190	0.347611
0	056	0.187918	0.443805	0.828151
0	057	0.336664	0.545122	0.307841
0	058	0.211445	0.047620	0.791420
0	059	0.693235	0.041051	0.646820
0	060	0.849135	0.542642	0.147009
0	061	0.713230	0.439443	0.687661
0	062	0.834448	0.938017	0.194287
0	063	0.263249	0.037633	0.277025
0	064	0.270436	0.542956	0.798092
0	065	0.272230	0.430243	0.280000
0	066	0.269422	0.932748	0.752394
0	067	0.772262	0.946818	0.715190
0	068	0.768185	0.452203	0.220158
0	069	0.764163	0.554493	0.745792
0	070	0.764867	0.047059	0.233196
0	071	0.305446	0.130606	0.600144
0	072	0.221673	0.619502	0.114400
0	073	0.314431	0.371208	0.596137
0	074	0.208586	0.863851	0.065194
0	075	0.729142	0.858257	0.388568
0	076	0.809617	0.357617	0.892736
0	077	0.722724	0.621645	0.418049
0	078	0.822143	0.117700	0.916748
0	079	0.220155	0.039779	0.535569
0	080	0.313776	0.538197	0.044040

0	081	0.217060	0.437822	0.509393
0	082	0.317555	0.923242	0.996141
0	083	0.815024	0.949238	0.451382
0	084	0.721597	0.445659	0.957606
0	085	0.821941	0.555204	0.503765
0	086	0.717007	0.058384	0.996291
0	087	0.333273	0.001544	0.612897
0	088	0.208590	0.487356	0.130488
0	089	0.305477	0.501689	0.617021
0	090	0.231502	0.993617	0.096548
0	091	0.700450	0.988231	0.379796
0	092	0.833362	0.487742	0.880726
0	093	0.731968	0.490082	0.401620
0	094	0.803408	0.987398	0.896914
0	095	0.127555	0.128020	0.582536
0	096	0.402708	0.622957	0.114015
0	097	0.123959	0.364398	0.594347
0	098	0.413460	0.855686	0.082964
0	099	0.906492	0.860076	0.405395
0	0100	0.630083	0.356930	0.909468
0	0101	0.917189	0.630170	0.428895
0	0102	0.619886	0.127431	0.914286
0	0103	0.120553	0.063982	0.411441
0	0104	0.420582	0.564968	0.938810
0	0105	0.093899	0.443548	0.445150
0	0106	0.439376	0.933177	0.930489
0	0107	0.913262	0.923794	0.576847
0	0108	0.622423	0.419892	0.081750
0	0109	0.944645	0.540160	0.565071
0	0110	0.595104	0.045893	0.061861
0	0111	0.139867	0.038908	0.218858
0	0112	0.394497	0.546376	0.745481
0	0113	0.142104	0.420462	0.265243
0	0114	0.399666	0.928090	0.741379
0	0115	0.896183	0.950545	0.769385
0	0116	0.643901	0.446391	0.273083
0	0117	0.894657	0.560101	0.745563
0	0118	0.635518	0.061618	0.249343
0	0119	0.100928	0.942796	0.341183
0	0120	0.437267	0.445985	0.857730
0	0121	0.110361	0.543567	0.317593
0	0122	0.431626	0.043688	0.823905
0	0123	0.937770	0.044246	0.645846
0	0124	0.600257	0.540605	0.151624

0	0125	0.932061	0.439850	0.690622
0	0126	0.610566	0.941792	0.180564
0	0127	0.223919	0.121851	0.137577
0	0128	0.311551	0.628617	0.661460
0	0129	0.217871	0.354454	0.142613
0	0130	0.328645	0.868400	0.606546
0	0131	0.817358	0.861440	0.849745
0	0132	0.728862	0.363333	0.353546
0	0133	0.827835	0.620848	0.884300
0	0134	0.713023	0.121189	0.376282
0	0135	0.516175	0.852487	0.208157
0	0136	0.024131	0.348498	0.721069
0	0137	0.514937	0.630977	0.216199
0	0138	0.025040	0.134475	0.706519
0	0139	0.524033	0.133310	0.779557
0	0140	0.012400	0.630570	0.293084
0	0141	0.524325	0.356200	0.793142
0	0142	0.010895	0.854559	0.286514
0	0143	0.399679	0.822451	0.274613
0	0144	0.145755	0.324168	0.779396
0	0145	0.402518	0.673350	0.298297
0	0146	0.143791	0.158532	0.774637
0	0147	0.646937	0.153123	0.725734
0	0148	0.890791	0.652533	0.239401
0	0149	0.640840	0.331562	0.715544
0	0150	0.893864	0.822532	0.216218
0	0151	0.457859	0.740352	0.149208
0	0152	0.088807	0.243921	0.649591
0	0153	0.586698	0.243218	0.837370
0	0154	0.952134	0.743596	0.347280
0	0155	0.323906	0.813070	0.427593
0	0156	0.206886	0.342060	0.948883
0	0157	0.334099	0.644399	0.468913
0	0158	0.205416	0.134507	0.944152
0	0159	0.717026	0.158393	0.565080
0	0160	0.830258	0.662593	0.071061
0	0161	0.704896	0.345424	0.546097
0	0162	0.835003	0.848805	0.044329
0	0163	0.259965	0.854503	0.244671
0	0164	0.274503	0.349353	0.781672
0	0165	0.259889	0.666642	0.290887
0	0166	0.275307	0.161867	0.786976
0	0167	0.775115	0.124955	0.734017
0	0168	0.763530	0.624140	0.230766

O	O169	0.772426	0.324238	0.709295
O	O170	0.762937	0.828420	0.201789
O	O171	0.289694	0.744022	0.584527
O	O172	0.241123	0.238401	0.057181
O	O173	0.743026	0.245084	0.426050
O	O174	0.798980	0.745333	0.928620
O	O175	0.212570	0.843496	0.522605
O	O176	0.324822	0.339067	0.031455
O	O177	0.210630	0.641544	0.534415
O	O178	0.326093	0.140511	0.018120
O	O179	0.827368	0.146391	0.461980
O	O180	0.716663	0.647427	0.979728
O	O181	0.826786	0.341616	0.480272
O	O182	0.714825	0.843521	0.968831
O	O183	0.129997	0.743655	0.564625
O	O184	0.407647	0.238724	0.069936
O	O185	0.911596	0.246776	0.428594
O	O186	0.631664	0.743570	0.931128
O	O187	0.106895	0.820878	0.410863
O	O188	0.434546	0.323929	0.927549
O	O189	0.099038	0.649239	0.434234
O	O190	0.437420	0.158751	0.920366
O	O191	0.931115	0.166511	0.578051
O	O192	0.605788	0.662564	0.081070
O	O193	0.941152	0.333529	0.572421
O	O194	0.603081	0.833472	0.067362
O	O195	0.131062	0.841592	0.219019
O	O196	0.400844	0.346735	0.739102
O	O197	0.133177	0.663520	0.243983
O	O198	0.400476	0.155413	0.731028
O	O199	0.902273	0.143265	0.766745
O	O200	0.637966	0.640510	0.270459
O	O201	0.899089	0.321550	0.758232
O	O202	0.638165	0.823490	0.256773
O	O203	0.211171	0.747150	0.151059
O	O204	0.323307	0.252119	0.666489
O	O205	0.816367	0.233473	0.832102
O	O206	0.723135	0.734799	0.324763
Al	Al207	0.327094	0.864691	0.319309
Al	Al208	0.329387	0.628368	0.335418
Si	Si209	0.711888	0.655538	0.309921
Si	Si210	0.438074	0.046692	0.171391
Si	Si211	0.095389	0.554465	0.687304
Si	Si212	0.447744	0.431921	0.176228

Si	Si213	0.088525	0.937627	0.655356
Si	Si214	0.598183	0.936373	0.818585
Si	Si215	0.941426	0.439256	0.321236
Si	Si216	0.590467	0.547881	0.839299
Si	Si217	0.948191	0.050913	0.333433
Si	Si218	0.333388	0.024415	0.332190
Si	Si219	0.198922	0.523299	0.843203
Si	Si220	0.337295	0.466053	0.325809
Si	Si221	0.205351	0.967176	0.802508
Si	Si222	0.703363	0.961086	0.658940
Si	Si223	0.837003	0.463076	0.161605
Si	Si224	0.703841	0.519698	0.687100
Si	Si225	0.832538	0.018883	0.185941
Si	Si226	0.297660	0.058791	0.546164
Si	Si227	0.235436	0.548395	0.063351
Si	Si228	0.294152	0.439747	0.541274
Si	Si229	0.239456	0.931680	0.020606
Si	Si230	0.737667	0.930217	0.442148
Si	Si231	0.799484	0.429146	0.946090
Si	Si232	0.744692	0.553310	0.473311
Si	Si233	0.794578	0.050979	0.969594
Si	Si234	0.142648	0.057873	0.526694
Si	Si235	0.391323	0.554723	0.050415
Si	Si236	0.140340	0.435199	0.541956
Si	Si237	0.393919	0.925448	0.028662
Si	Si238	0.892522	0.930509	0.460947
Si	Si239	0.644312	0.426796	0.966505
Si	Si240	0.898623	0.556567	0.470345
Si	Si241	0.640225	0.056858	0.964442
Si	Si242	0.095673	0.021831	0.315085
Si	Si243	0.441320	0.525693	0.837820
Si	Si244	0.091111	0.465223	0.328825
Si	Si245	0.448126	0.964474	0.820023
Si	Si246	0.940689	0.965212	0.672280
Si	Si247	0.597261	0.461433	0.178537
Si	Si248	0.948171	0.518862	0.681320
Si	Si249	0.588031	0.019729	0.175386
Si	Si250	0.215305	0.047336	0.182749
Si	Si251	0.319871	0.553594	0.705883
Si	Si252	0.210910	0.423600	0.204373
Si	Si253	0.332025	0.933544	0.678034
Si	Si254	0.822177	0.937020	0.807606
Si	Si255	0.718592	0.438267	0.311720
Si	Si256	0.829693	0.555309	0.814479

Si	Si257	0.704070	0.054461	0.310080
Si	Si258	0.446746	0.818515	0.176609
Si	Si259	0.095552	0.320510	0.686103
Si	Si260	0.444560	0.666224	0.193871
Si	Si261	0.096346	0.165838	0.678270
Si	Si262	0.594229	0.164393	0.814085
Si	Si263	0.943654	0.664562	0.326922
Si	Si264	0.595326	0.321814	0.813745
Si	Si265	0.941148	0.820377	0.313760
Si	Si266	0.204190	0.364801	0.834208
Si	Si267	0.208460	0.125357	0.824638
Si	Si268	0.708219	0.119127	0.668721
Si	Si269	0.833615	0.620026	0.172803
Si	Si270	0.707326	0.360146	0.664577
Si	Si271	0.832308	0.859793	0.163660
Si	Si272	0.288029	0.818183	0.535239
Si	Si273	0.247904	0.318170	0.045538
Si	Si274	0.284422	0.664934	0.562555
Si	Si275	0.249198	0.159275	0.038642
Si	Si276	0.750192	0.167447	0.456830
Si	Si277	0.793322	0.668832	0.965116
Si	Si278	0.750845	0.323396	0.452462
Si	Si279	0.791699	0.824445	0.949155
Si	Si280	0.135754	0.819332	0.522894
Si	Si281	0.401580	0.316296	0.036847
Si	Si282	0.133250	0.664817	0.539381
Si	Si283	0.402751	0.162820	0.028614
Si	Si284	0.904006	0.169944	0.464899
Si	Si285	0.639447	0.667776	0.971774
Si	Si286	0.904347	0.323225	0.466974
Si	Si287	0.637958	0.821741	0.961076
Si	Si288	0.088086	0.865017	0.313242
Si	Si289	0.449086	0.368121	0.829247
Si	Si290	0.089391	0.621778	0.321798
Si	Si291	0.448228	0.122671	0.813903
Si	Si292	0.949219	0.121907	0.674792
Si	Si293	0.590083	0.618540	0.179752
Si	Si294	0.949077	0.360868	0.685093
Si	Si295	0.592443	0.863135	0.177581
Si	Si296	0.203878	0.826519	0.172589
Si	Si297	0.328028	0.329821	0.696802
Si	Si298	0.207799	0.673890	0.201711
Si	Si299	0.326438	0.174182	0.695942
Si	Si300	0.829120	0.155188	0.811060

Si	Si301	0.824740	0.310241	0.798132
Si	Si302	0.713485	0.811936	0.292922
Zn	Zn303	0.414243	0.759531	0.392719

C₆H₆-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-Zn²⁺ (Fig. 9a/M3 in Green)

Total energy = -1935.71411533 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.497447	0.478756	0.560109
H	H2	0.460106	0.747755	0.708163
H	H3	0.469979	0.492693	0.530806
H	H4	0.467889	0.835558	0.578340
H	H5	0.522753	0.809901	0.417052
H	H6	0.562874	0.694638	0.382472
H	H7	0.555350	0.607652	0.513430
H	H8	0.503306	0.634437	0.674642
C	C9	0.481976	0.736290	0.636707
C	C10	0.485584	0.785474	0.563609
C	C11	0.513731	0.770167	0.470260
C	C12	0.539613	0.705771	0.452875
C	C13	0.535643	0.657148	0.526603
C	C14	0.506753	0.672492	0.617965
O	O15	0.517083	0.030993	0.214074
O	O16	0.016236	0.554592	0.709576
O	O17	0.522791	0.443964	0.218177
O	O18	0.012753	0.933150	0.698201
O	O19	0.517029	0.934114	0.791371
O	O20	0.018639	0.454427	0.290971
O	O21	0.514088	0.550155	0.798937
O	O22	0.022226	0.040155	0.286846

0	023	0.398268	0.062025	0.281131
0	024	0.131274	0.538197	0.789886
0	025	0.400222	0.424714	0.281276
0	026	0.130309	0.954440	0.774030
0	027	0.631850	0.947745	0.707361
0	028	0.900430	0.428880	0.217753
0	029	0.630415	0.528950	0.724058
0	030	0.897579	0.056130	0.233163
0	031	0.443052	0.115632	0.114019
0	032	0.118360	0.623751	0.641361
0	033	0.444775	0.363899	0.119006
0	034	0.114251	0.865645	0.629740
0	035	0.617815	0.862029	0.854451
0	036	0.939861	0.371092	0.384651
0	037	0.614164	0.621366	0.863551
0	038	0.945287	0.119880	0.389701
0	039	0.409826	0.987753	0.120200
0	040	0.110295	0.494098	0.606589
0	041	0.423894	0.494011	0.116336
0	042	0.102395	0.994817	0.590145
0	043	0.615715	0.992011	0.891002
0	044	0.909930	0.500423	0.379522
0	045	0.605025	0.493030	0.911120
0	046	0.929023	0.988654	0.397804
0	047	0.334669	0.061708	0.450997
0	048	0.202459	0.546512	0.948922
0	049	0.336407	0.427537	0.451975
0	050	0.200104	0.940228	0.936040
0	051	0.703823	0.925480	0.551637
0	052	0.835484	0.428815	0.049816
0	053	0.697160	0.551560	0.562662
0	054	0.833483	0.054414	0.062044
0	055	0.356827	0.946865	0.357568
0	056	0.215718	0.440803	0.828296
0	057	0.356276	0.540225	0.351930
0	058	0.219067	0.046850	0.821224
0	059	0.709587	0.043875	0.639887
0	060	0.857597	0.543566	0.141310
0	061	0.720392	0.440457	0.666772
0	062	0.855778	0.941774	0.159438
0	063	0.270115	0.034093	0.286730
0	064	0.259845	0.557586	0.772697
0	065	0.271329	0.449167	0.286864
0	066	0.258241	0.929890	0.759186

0	067	0.762311	0.939310	0.725622
0	068	0.771897	0.458754	0.216035
0	069	0.757549	0.556595	0.738620
0	070	0.769293	0.028817	0.227954
0	071	0.301421	0.131566	0.608416
0	072	0.217745	0.621530	0.106394
0	073	0.302397	0.361351	0.612649
0	074	0.215530	0.863319	0.091333
0	075	0.717370	0.861882	0.384479
0	076	0.802980	0.355576	0.894286
0	077	0.717183	0.626348	0.405472
0	078	0.806003	0.121215	0.899291
0	079	0.217956	0.042072	0.535322
0	080	0.316766	0.546666	0.039563
0	081	0.214983	0.438541	0.523173
0	082	0.318435	0.927585	0.012404
0	083	0.812827	0.943473	0.447037
0	084	0.717991	0.442967	0.969641
0	085	0.815995	0.555491	0.487257
0	086	0.712733	0.051352	0.988738
0	087	0.325884	0.002950	0.627489
0	088	0.213140	0.488689	0.121857
0	089	0.314105	0.493094	0.619566
0	090	0.227559	0.995549	0.109103
0	091	0.700301	0.994216	0.384981
0	092	0.823455	0.484230	0.871516
0	093	0.719852	0.494992	0.388794
0	094	0.808062	0.988690	0.895389
0	095	0.126398	0.125372	0.601124
0	096	0.409029	0.625086	0.115515
0	097	0.124063	0.362173	0.607288
0	098	0.409546	0.856166	0.104343
0	099	0.906444	0.857701	0.399215
0	0100	0.627231	0.361790	0.897075
0	0101	0.907238	0.631888	0.407001
0	0102	0.621796	0.124520	0.898387
0	0103	0.110819	0.066724	0.427207
0	0104	0.430930	0.562333	0.948246
0	0105	0.097114	0.426504	0.441278
0	0106	0.441627	0.928453	0.949843
0	0107	0.914778	0.923361	0.567511
0	0108	0.607794	0.418568	0.071375
0	0109	0.938416	0.553295	0.554677
0	0110	0.592128	0.054725	0.059113

0	0111	0.145307	0.050110	0.237758
0	0112	0.388581	0.536426	0.765316
0	0113	0.143804	0.424948	0.257676
0	0114	0.388547	0.940396	0.770877
0	0115	0.891093	0.951719	0.756069
0	0116	0.647649	0.430579	0.258059
0	0117	0.888041	0.552789	0.735734
0	0118	0.642862	0.062838	0.241021
0	0119	0.108266	0.946882	0.346769
0	0120	0.451795	0.443988	0.869675
0	0121	0.113600	0.539808	0.340931
0	0122	0.453575	0.041618	0.853993
0	0123	0.947777	0.041028	0.638637
0	0124	0.608733	0.536673	0.157711
0	0125	0.947610	0.445587	0.663740
0	0126	0.613410	0.945513	0.167754
0	0127	0.234374	0.123942	0.152422
0	0128	0.333894	0.622398	0.645471
0	0129	0.231424	0.359094	0.156343
0	0130	0.334899	0.871048	0.629005
0	0131	0.822004	0.861355	0.852262
0	0132	0.741836	0.367583	0.350360
0	0133	0.827317	0.616457	0.877073
0	0134	0.728952	0.122820	0.353060
0	0135	0.523069	0.854148	0.205339
0	0136	0.021624	0.345852	0.729372
0	0137	0.524332	0.630614	0.212474
0	0138	0.021963	0.136585	0.719561
0	0139	0.520243	0.143076	0.775816
0	0140	0.020885	0.629355	0.308690
0	0141	0.521205	0.347005	0.783003
0	0142	0.019419	0.856644	0.299503
0	0143	0.411660	0.818902	0.292687
0	0144	0.141099	0.333410	0.798661
0	0145	0.413472	0.669144	0.299799
0	0146	0.139251	0.150035	0.795425
0	0147	0.639848	0.146969	0.705432
0	0148	0.910036	0.654567	0.214665
0	0149	0.637835	0.340191	0.702417
0	0150	0.907689	0.825864	0.208516
0	0151	0.465198	0.741448	0.154166
0	0152	0.094817	0.242751	0.672231
0	0153	0.599568	0.243733	0.825415
0	0154	0.958513	0.743626	0.341756

0	0155	0.340847	0.816432	0.450368
0	0156	0.207837	0.345048	0.964574
0	0157	0.346717	0.668395	0.461352
0	0158	0.207012	0.140644	0.960907
0	0159	0.708687	0.156904	0.541607
0	0160	0.833519	0.662042	0.061586
0	0161	0.707526	0.340565	0.537848
0	0162	0.841385	0.835626	0.042333
0	0163	0.271801	0.848510	0.267825
0	0164	0.271700	0.324713	0.796846
0	0165	0.272425	0.647194	0.281953
0	0166	0.269332	0.166160	0.793053
0	0167	0.770457	0.149007	0.713836
0	0168	0.781385	0.629220	0.235510
0	0169	0.767226	0.321403	0.710520
0	0170	0.777164	0.843403	0.211744
0	0171	0.301185	0.745946	0.604596
0	0172	0.247158	0.241891	0.073462
0	0173	0.749549	0.245934	0.412280
0	0174	0.800091	0.741601	0.915666
0	0175	0.224231	0.842933	0.529771
0	0176	0.330194	0.340406	0.031052
0	0177	0.226922	0.645657	0.535461
0	0178	0.329963	0.143977	0.022748
0	0179	0.829988	0.148644	0.470338
0	0180	0.718193	0.645947	0.976563
0	0181	0.831697	0.338293	0.485207
0	0182	0.719738	0.838575	0.973774
0	0183	0.142860	0.743863	0.576241
0	0184	0.411913	0.240539	0.079044
0	0185	0.916691	0.245357	0.426811
0	0186	0.633950	0.742657	0.926858
0	0187	0.108548	0.831223	0.438625
0	0188	0.439903	0.320960	0.930941
0	0189	0.109490	0.649397	0.448739
0	0190	0.441901	0.161875	0.928705
0	0191	0.937496	0.164567	0.576721
0	0192	0.599899	0.649263	0.056174
0	0193	0.946808	0.329485	0.572045
0	0194	0.598979	0.841902	0.046778
0	0195	0.142264	0.836423	0.247956
0	0196	0.394456	0.357129	0.751027
0	0197	0.142960	0.656825	0.258255
0	0198	0.392452	0.133014	0.748842

O	O199	0.895804	0.131228	0.758583
O	O200	0.651647	0.649209	0.238164
O	O201	0.893068	0.343228	0.752618
O	O202	0.648525	0.824168	0.227079
O	O203	0.220311	0.744380	0.170932
O	O204	0.342063	0.245716	0.682179
O	O205	0.832492	0.237833	0.824769
O	O206	0.730831	0.740576	0.312785
Al	Al207	0.340650	0.864009	0.337183
Al	Al208	0.342160	0.624375	0.344970
Si	Si209	0.720493	0.661325	0.296624
Si	Si210	0.441934	0.049178	0.182611
Si	Si211	0.094300	0.552756	0.685912
Si	Si212	0.446999	0.431632	0.184664
Si	Si213	0.090557	0.937089	0.672871
Si	Si214	0.595534	0.934361	0.812218
Si	Si215	0.942871	0.438612	0.318970
Si	Si216	0.591812	0.548096	0.825355
Si	Si217	0.947975	0.051092	0.326534
Si	Si218	0.340175	0.024388	0.343820
Si	Si219	0.202507	0.520527	0.836098
Si	Si220	0.341225	0.462069	0.342499
Si	Si221	0.201745	0.967729	0.823584
Si	Si222	0.702102	0.964379	0.656756
Si	Si223	0.841319	0.464882	0.157106
Si	Si224	0.701878	0.519178	0.672772
Si	Si225	0.838989	0.020477	0.171075
Si	Si226	0.294973	0.059465	0.554650
Si	Si227	0.237658	0.551551	0.056200
Si	Si228	0.292202	0.430132	0.551568
Si	Si229	0.240235	0.931197	0.039180
Si	Si230	0.734162	0.931172	0.441049
Si	Si231	0.794989	0.427879	0.946369
Si	Si232	0.738323	0.557199	0.459892
Si	Si233	0.790399	0.053976	0.960894
Si	Si234	0.139717	0.057527	0.538564
Si	Si235	0.394617	0.556497	0.055231
Si	Si236	0.137107	0.430096	0.545206
Si	Si237	0.394444	0.925731	0.046843
Si	Si238	0.890976	0.928353	0.453037
Si	Si239	0.639703	0.428519	0.962100
Si	Si240	0.893066	0.559883	0.457071
Si	Si241	0.635741	0.055925	0.958485
Si	Si242	0.096593	0.025674	0.324889

Si	Si243	0.445456	0.522875	0.845436
Si	Si244	0.093267	0.461642	0.332447
Si	Si245	0.449356	0.961585	0.840496
Si	Si246	0.941777	0.962209	0.665171
Si	Si247	0.596074	0.457425	0.176151
Si	Si248	0.947389	0.526118	0.667166
Si	Si249	0.591005	0.023683	0.170739
Si	Si250	0.220064	0.050169	0.196929
Si	Si251	0.323474	0.551339	0.700976
Si	Si252	0.215581	0.431011	0.206088
Si	Si253	0.326197	0.937253	0.697008
Si	Si254	0.820985	0.935973	0.806561
Si	Si255	0.720830	0.438345	0.303080
Si	Si256	0.823952	0.551876	0.805668
Si	Si257	0.710841	0.052233	0.301804
Si	Si258	0.452270	0.818112	0.188219
Si	Si259	0.095466	0.320974	0.701688
Si	Si260	0.453265	0.666070	0.194474
Si	Si261	0.095644	0.163762	0.696713
Si	Si262	0.595227	0.164748	0.801468
Si	Si263	0.950024	0.665176	0.317756
Si	Si264	0.596219	0.322785	0.802111
Si	Si265	0.948624	0.821107	0.312017
Si	Si266	0.208653	0.361204	0.846894
Si	Si267	0.208375	0.125787	0.842699
Si	Si268	0.707060	0.124151	0.651293
Si	Si269	0.845569	0.622035	0.164013
Si	Si270	0.708070	0.360659	0.654607
Si	Si271	0.845460	0.861736	0.155796
Si	Si272	0.299186	0.819668	0.554013
Si	Si273	0.254046	0.321237	0.056325
Si	Si274	0.301487	0.669974	0.561808
Si	Si275	0.254450	0.163001	0.052231
Si	Si276	0.754280	0.168274	0.444267
Si	Si277	0.794798	0.666146	0.957097
Si	Si278	0.757288	0.322793	0.446988
Si	Si279	0.795867	0.819487	0.946710
Si	Si280	0.147039	0.821258	0.542708
Si	Si281	0.406573	0.316986	0.040522
Si	Si282	0.149252	0.665383	0.549685
Si	Si283	0.406696	0.164950	0.036752
Si	Si284	0.907465	0.169143	0.465296
Si	Si285	0.641618	0.664817	0.956043
Si	Si286	0.909153	0.321412	0.466749

Si	Si287	0.642897	0.821284	0.950919
Si	Si288	0.095441	0.867591	0.332348
Si	Si289	0.451430	0.366775	0.833317
Si	Si290	0.097481	0.619153	0.338404
Si	Si291	0.451466	0.120222	0.826540
Si	Si292	0.950635	0.118394	0.673687
Si	Si293	0.596708	0.616152	0.166040
Si	Si294	0.951850	0.365880	0.679538
Si	Si295	0.596349	0.866687	0.161464
Si	Si296	0.213926	0.823127	0.196840
Si	Si297	0.327492	0.322598	0.710699
Si	Si298	0.214973	0.667296	0.206537
Si	Si299	0.326207	0.168702	0.708327
Si	Si300	0.826174	0.159641	0.798383
Si	Si301	0.824110	0.315219	0.794936
Si	Si302	0.718836	0.817990	0.283632
Zn	Zn303	0.410615	0.744892	0.406742

C₆H₁₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M1 in Black)

Total energy = -1962.47011774 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.751618	0.752598	0.652184
H	H2	0.545935	0.640035	0.464854
H	H3	0.471852	0.684029	0.480174
H	H4	0.606987	0.746596	0.446133
H	H5	0.543669	0.742277	0.358275
H	H6	0.473943	0.815702	0.464161
H	H7	0.549591	0.854985	0.439654
H	H8	0.517629	0.865055	0.618774

H	H9	0.592291	0.821791	0.604301
H	H10	0.457110	0.759039	0.641644
H	H11	0.522849	0.762720	0.726650
H	H12	0.514311	0.650148	0.644861
H	H13	0.590240	0.688995	0.620891
C	C14	0.524943	0.686540	0.494048
C	C15	0.553067	0.746642	0.438031
C	C16	0.526890	0.812832	0.478875
C	C17	0.539132	0.818621	0.590846
C	C18	0.511027	0.758585	0.647453
C	C19	0.537087	0.692276	0.606131
O	O20	0.520099	0.035931	0.217609
O	O21	0.017426	0.546606	0.716105
O	O22	0.525015	0.440158	0.216200
O	O23	0.013042	0.935832	0.706824
O	O24	0.515077	0.947946	0.789444
O	O25	0.020908	0.455715	0.293543
O	O26	0.514176	0.540892	0.793885
O	O27	0.019864	0.036698	0.295135
O	O28	0.401835	0.059163	0.290324
O	O29	0.133683	0.554682	0.795720
O	O30	0.405187	0.433158	0.290648
O	O31	0.129668	0.938435	0.789378
O	O32	0.629570	0.953401	0.705620
O	O33	0.903692	0.436641	0.215933
O	O34	0.632617	0.532307	0.725659
O	O35	0.903581	0.049137	0.214494
O	O36	0.440323	0.120921	0.126138
O	O37	0.107232	0.625085	0.634568
O	O38	0.437834	0.362194	0.131156
O	O39	0.109484	0.865187	0.628394
O	O40	0.609083	0.865167	0.849192
O	O41	0.939149	0.371708	0.378788
O	O42	0.605607	0.619552	0.868456
O	O43	0.934447	0.120319	0.374985
O	O44	0.414856	0.991332	0.123468
O	O45	0.120145	0.493822	0.621910
O	O46	0.425923	0.493583	0.117703
O	O47	0.111006	0.996859	0.614159
O	O48	0.617237	0.993675	0.892529
O	O49	0.913651	0.501991	0.385374
O	O50	0.605987	0.489151	0.908761
O	O51	0.914950	0.989671	0.389703
O	O52	0.339558	0.038571	0.459054

0	053	0.197023	0.539124	0.962429
0	054	0.340547	0.452649	0.458369
0	055	0.196073	0.951104	0.955275
0	056	0.692997	0.940165	0.538012
0	057	0.838541	0.426381	0.048130
0	058	0.704106	0.541755	0.566134
0	059	0.839802	0.041947	0.043405
0	060	0.336576	0.946725	0.314845
0	061	0.206784	0.446789	0.819138
0	062	0.334983	0.543270	0.312516
0	063	0.207467	0.043225	0.812181
0	064	0.712782	0.047812	0.649478
0	065	0.853252	0.545161	0.129450
0	066	0.721328	0.438255	0.688292
0	067	0.833526	0.941239	0.171878
0	068	0.270469	0.058714	0.295947
0	069	0.263915	0.563570	0.796779
0	070	0.274427	0.427836	0.293654
0	071	0.259534	0.924583	0.786955
0	072	0.758840	0.932116	0.707643
0	073	0.774190	0.455780	0.212044
0	074	0.759530	0.558251	0.742468
0	075	0.773484	0.056013	0.209859
0	076	0.313544	0.120573	0.606941
0	077	0.226877	0.617570	0.113199
0	078	0.316800	0.373082	0.610007
0	079	0.222712	0.868938	0.103526
0	080	0.712954	0.873597	0.372487
0	081	0.806042	0.356263	0.890779
0	082	0.720994	0.632901	0.427129
0	083	0.809132	0.122699	0.895176
0	084	0.218944	0.044325	0.530978
0	085	0.316958	0.536842	0.033844
0	086	0.218617	0.438910	0.521958
0	087	0.317518	0.940755	0.018964
0	088	0.814301	0.926596	0.470407
0	089	0.721065	0.443066	0.965749
0	090	0.823201	0.562656	0.494425
0	091	0.716079	0.052625	0.985643
0	092	0.314981	0.990300	0.637203
0	093	0.218200	0.487122	0.139023
0	094	0.304782	0.503499	0.631972
0	095	0.227319	0.999105	0.132406
0	096	0.730061	0.004266	0.377253

0	097	0.827982	0.486229	0.873381
0	098	0.731741	0.505921	0.381542
0	099	0.801781	0.992273	0.869916
0	0100	0.129003	0.127864	0.602131
0	0101	0.403289	0.624143	0.102846
0	0102	0.127930	0.361992	0.603428
0	0103	0.409141	0.860619	0.093306
0	0104	0.909531	0.856379	0.388897
0	0105	0.629885	0.358281	0.901246
0	0106	0.912981	0.634643	0.399233
0	0107	0.622995	0.126307	0.901609
0	0108	0.103779	0.058228	0.441239
0	0109	0.431804	0.553546	0.944131
0	0110	0.097383	0.436481	0.449192
0	0111	0.438824	0.941430	0.946352
0	0112	0.931156	0.920147	0.555861
0	0113	0.613912	0.418242	0.073671
0	0114	0.945537	0.562732	0.555408
0	0115	0.596946	0.055411	0.062646
0	0116	0.143382	0.060606	0.253015
0	0117	0.390777	0.556680	0.756905
0	0118	0.145149	0.420543	0.267277
0	0119	0.389182	0.924831	0.765832
0	0120	0.886906	0.948916	0.737602
0	0121	0.648383	0.450047	0.258649
0	0122	0.889327	0.554208	0.733602
0	0123	0.645628	0.055121	0.246492
0	0124	0.112078	0.946320	0.337181
0	0125	0.430096	0.442957	0.836580
0	0126	0.117036	0.541511	0.332626
0	0127	0.428028	0.044387	0.824000
0	0128	0.949554	0.039630	0.629762
0	0129	0.594433	0.540201	0.137189
0	0130	0.942917	0.447695	0.647186
0	0131	0.607480	0.942335	0.164799
0	0132	0.225357	0.131457	0.148102
0	0133	0.316259	0.634535	0.651087
0	0134	0.225000	0.354257	0.150573
0	0135	0.316032	0.857317	0.642690
0	0136	0.820010	0.862925	0.844589
0	0137	0.733189	0.374903	0.354069
0	0138	0.829938	0.619583	0.876527
0	0139	0.721671	0.133921	0.348828
0	0140	0.519865	0.847088	0.199025

0	0141	0.021644	0.352593	0.718717
0	0142	0.516377	0.636174	0.201983
0	0143	0.019515	0.137745	0.711120
0	0144	0.519477	0.135500	0.781261
0	0145	0.022226	0.628557	0.290472
0	0146	0.522468	0.353808	0.787864
0	0147	0.020329	0.859455	0.283109
0	0148	0.405019	0.835654	0.286574
0	0149	0.138958	0.334539	0.795661
0	0150	0.404372	0.655058	0.294268
0	0151	0.135061	0.152932	0.795673
0	0152	0.637445	0.149301	0.707868
0	0153	0.911029	0.652536	0.202950
0	0154	0.638593	0.335761	0.707083
0	0155	0.907147	0.832474	0.196049
0	0156	0.443875	0.742639	0.158411
0	0157	0.091233	0.244811	0.669593
0	0158	0.590322	0.243147	0.828309
0	0159	0.961313	0.744782	0.321824
0	0160	0.336812	0.851124	0.449985
0	0161	0.208010	0.352718	0.957320
0	0162	0.336216	0.633540	0.456982
0	0163	0.207688	0.134544	0.954679
0	0164	0.704222	0.158164	0.542095
0	0165	0.827466	0.666067	0.060048
0	0166	0.707448	0.349334	0.543043
0	0167	0.834114	0.843126	0.036706
0	0168	0.274177	0.834425	0.279117
0	0169	0.269869	0.334522	0.786466
0	0170	0.273882	0.658409	0.288372
0	0171	0.265668	0.158882	0.782751
0	0172	0.767527	0.158064	0.714352
0	0173	0.784349	0.630906	0.238670
0	0174	0.768599	0.317438	0.710107
0	0175	0.776840	0.827021	0.211479
0	0176	0.299931	0.744175	0.549579
0	0177	0.244654	0.242991	0.052249
0	0178	0.743409	0.252735	0.418154
0	0179	0.797582	0.744577	0.911831
0	0180	0.215216	0.843255	0.517546
0	0181	0.328244	0.343321	0.029158
0	0182	0.215426	0.643678	0.526580
0	0183	0.328205	0.141602	0.027466
0	0184	0.824088	0.152792	0.467971

O	O185	0.715475	0.647075	0.964035
O	O186	0.829859	0.343825	0.478127
O	O187	0.714785	0.842166	0.960998
O	O188	0.134844	0.744304	0.569904
O	O189	0.408582	0.241832	0.072221
O	O190	0.911667	0.246529	0.419669
O	O191	0.631613	0.744057	0.914041
O	O192	0.096982	0.833901	0.436940
O	O193	0.443108	0.331379	0.938472
O	O194	0.099211	0.650552	0.441801
O	O195	0.442308	0.152839	0.935324
O	O196	0.936669	0.161927	0.564092
O	O197	0.600677	0.659792	0.057122
O	O198	0.944450	0.328322	0.565697
O	O199	0.596108	0.839733	0.041009
O	O200	0.145522	0.831812	0.253146
O	O201	0.397517	0.329268	0.752052
O	O202	0.146118	0.659103	0.257069
O	O203	0.393974	0.160968	0.751636
O	O204	0.892789	0.128868	0.745405
O	O205	0.642530	0.641276	0.242953
O	O206	0.893890	0.347142	0.747007
O	O207	0.646951	0.822220	0.220470
O	O208	0.221251	0.744121	0.161239
O	O209	0.317559	0.246598	0.658995
O	O210	0.840916	0.238703	0.822264
O	O211	0.720135	0.745397	0.337554
O	O212	0.741662	0.777216	0.592255
Al	Al213	0.715635	0.659513	0.298127
Si	Si214	0.444465	0.052086	0.188922
Si	Si215	0.094748	0.554937	0.691004
Si	Si216	0.448056	0.432383	0.188846
Si	Si217	0.091148	0.934171	0.684159
Si	Si218	0.592885	0.940012	0.810085
Si	Si219	0.944402	0.441624	0.318985
Si	Si220	0.590407	0.545696	0.825714
Si	Si221	0.943012	0.048979	0.319400
Si	Si222	0.337101	0.025769	0.340531
Si	Si223	0.200656	0.525813	0.844264
Si	Si224	0.338867	0.464188	0.339295
Si	Si225	0.198346	0.964323	0.836714
Si	Si226	0.698546	0.968132	0.650464
Si	Si227	0.842621	0.466590	0.152440
Si	Si228	0.704491	0.517253	0.680609

Si	Si229	0.837741	0.021880	0.159982
Si	Si230	0.296433	0.048566	0.559100
Si	Si231	0.240032	0.545460	0.063092
Si	Si232	0.295216	0.441842	0.556143
Si	Si233	0.240914	0.939973	0.053358
Si	Si234	0.737974	0.935844	0.439265
Si	Si235	0.798309	0.428099	0.944384
Si	Si236	0.745523	0.559593	0.467594
Si	Si237	0.792006	0.052403	0.948210
Si	Si238	0.141010	0.056719	0.547441
Si	Si239	0.394425	0.552000	0.050069
Si	Si240	0.141258	0.433013	0.549510
Si	Si241	0.394847	0.933511	0.045638
Si	Si242	0.892639	0.923642	0.450680
Si	Si243	0.642910	0.426963	0.962203
Si	Si244	0.899321	0.565194	0.457456
Si	Si245	0.638367	0.057188	0.959829
Si	Si246	0.094583	0.025401	0.331915
Si	Si247	0.441558	0.523043	0.833661
Si	Si248	0.095049	0.463446	0.335419
Si	Si249	0.442698	0.964918	0.831234
Si	Si250	0.944642	0.960973	0.658040
Si	Si251	0.595495	0.462709	0.171258
Si	Si252	0.948294	0.527535	0.664299
Si	Si253	0.592616	0.021925	0.172518
Si	Si254	0.216737	0.061670	0.206996
Si	Si255	0.318680	0.563783	0.709140
Si	Si256	0.215895	0.423023	0.212228
Si	Si257	0.319708	0.925030	0.707779
Si	Si258	0.816996	0.934471	0.789305
Si	Si259	0.722175	0.446444	0.301246
Si	Si260	0.826872	0.553810	0.807370
Si	Si261	0.717728	0.061769	0.295298
Si	Si262	0.444836	0.821334	0.184152
Si	Si263	0.094688	0.323272	0.696838
Si	Si264	0.442784	0.664559	0.189064
Si	Si265	0.093436	0.165948	0.694449
Si	Si266	0.592600	0.163936	0.804871
Si	Si267	0.951875	0.665529	0.303513
Si	Si268	0.595057	0.322408	0.806466
Si	Si269	0.949728	0.822868	0.297214
Si	Si270	0.338044	0.866944	0.332243
Si	Si271	0.205885	0.367171	0.839305
Si	Si272	0.337401	0.622400	0.337853

Si	Si273	0.203901	0.122431	0.836143
Si	Si274	0.705345	0.128074	0.653782
Si	Si275	0.842341	0.623185	0.159636
Si	Si276	0.708539	0.360039	0.662263
Si	Si277	0.838135	0.861362	0.153424
Si	Si278	0.291605	0.823748	0.540166
Si	Si279	0.251661	0.322922	0.047582
Si	Si280	0.291794	0.664398	0.545902
Si	Si281	0.251771	0.163170	0.045423
Si	Si282	0.748358	0.174234	0.444575
Si	Si283	0.792371	0.668799	0.953062
Si	Si284	0.753381	0.329977	0.448592
Si	Si285	0.791509	0.822978	0.939364
Si	Si286	0.138992	0.821901	0.537837
Si	Si287	0.404477	0.319929	0.042451
Si	Si288	0.139177	0.665829	0.543124
Si	Si289	0.404804	0.164166	0.040129
Si	Si290	0.901961	0.169821	0.456158
Si	Si291	0.638238	0.667352	0.951848
Si	Si292	0.906371	0.322735	0.460104
Si	Si293	0.637963	0.822544	0.941569
Si	Si294	0.094036	0.867759	0.327295
Si	Si295	0.448164	0.364413	0.828605
Si	Si296	0.096590	0.619850	0.330466
Si	Si297	0.445780	0.123268	0.823200
Si	Si298	0.949331	0.117373	0.662873
Si	Si299	0.589926	0.619768	0.161545
Si	Si300	0.950550	0.368748	0.669836
Si	Si301	0.592552	0.863010	0.156224
Si	Si302	0.215949	0.820675	0.199304
Si	Si303	0.325396	0.321866	0.701799
Si	Si304	0.217201	0.668803	0.204702
Si	Si305	0.322664	0.170675	0.699993
Si	Si306	0.827399	0.161616	0.793598
Si	Si307	0.827349	0.315453	0.792248
Si	Si308	0.714274	0.818767	0.284630
Zn	Zn309	0.728004	0.723743	0.486612

TS-C₆H₁₂-Dehydro-on-HydroxyO-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS1 in Black)

Total energy = -1960.78825166 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b		20.050598		
_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.774664	0.726638	0.647497
H	H2	0.619125	0.800832	0.698604
H	H3	0.543563	0.758147	0.698521
H	H4	0.682787	0.733961	0.615004
H	H5	0.626798	0.676009	0.664063
H	H6	0.526394	0.658554	0.580646
H	H7	0.587663	0.633475	0.497598
H	H8	0.499563	0.698117	0.413619
H	H9	0.574773	0.740217	0.402525
H	H10	0.464069	0.773098	0.548154
H	H11	0.489938	0.821795	0.446493
H	H12	0.534642	0.865806	0.607276
H	H13	0.598057	0.841570	0.526555
C	C14	0.584352	0.774689	0.650586
C	C15	0.616713	0.712207	0.604779
C	C16	0.566678	0.677576	0.533831
C	C17	0.536977	0.724873	0.456238
C	C18	0.507312	0.787416	0.504096
C	C19	0.557195	0.822301	0.571626
O	O20	0.513664	0.032757	0.210717
O	O21	0.020790	0.536415	0.706744
O	O22	0.525413	0.441214	0.199346
O	O23	0.016709	0.948094	0.705533
O	O24	0.526033	0.961672	0.787525
O	O25	0.019256	0.458745	0.281877
O	O26	0.514512	0.550209	0.790006
O	O27	0.023854	0.042751	0.292398
O	O28	0.394780	0.060661	0.274528
O	O29	0.137569	0.559546	0.783071
O	O30	0.404928	0.452680	0.266380
O	O31	0.141856	0.947494	0.752098
O	O32	0.645669	0.936860	0.725445

0	033	0.902986	0.428589	0.206887
0	034	0.634258	0.539321	0.720357
0	035	0.897866	0.040501	0.249069
0	036	0.439783	0.118729	0.111881
0	037	0.102120	0.620287	0.617848
0	038	0.432365	0.368706	0.118973
0	039	0.096468	0.868915	0.607865
0	040	0.599466	0.874133	0.883833
0	041	0.943392	0.368350	0.369389
0	042	0.608230	0.626197	0.863507
0	043	0.943981	0.121279	0.390680
0	044	0.408014	0.989554	0.111897
0	045	0.129197	0.490097	0.617749
0	046	0.435944	0.499823	0.086969
0	047	0.102009	0.000051	0.580353
0	048	0.630317	0.003030	0.891925
0	049	0.909247	0.496338	0.374592
0	050	0.606403	0.495571	0.902522
0	051	0.941091	0.990270	0.420367
0	052	0.332678	0.062887	0.443565
0	053	0.202052	0.562804	0.950746
0	054	0.337731	0.450608	0.432968
0	055	0.203432	0.947539	0.922591
0	056	0.709822	0.930364	0.558623
0	057	0.841464	0.432562	0.036037
0	058	0.701560	0.532430	0.555151
0	059	0.837047	0.048706	0.078083
0	060	0.346886	0.947395	0.348631
0	061	0.193452	0.449065	0.850393
0	062	0.325210	0.553371	0.311189
0	063	0.216617	0.051027	0.802062
0	064	0.695643	0.047837	0.645358
0	065	0.855731	0.543312	0.142636
0	066	0.715402	0.437232	0.690496
0	067	0.819552	0.941342	0.191355
0	068	0.265459	0.039290	0.279793
0	069	0.268436	0.547788	0.784192
0	070	0.275825	0.436516	0.261082
0	071	0.271448	0.935447	0.756299
0	072	0.775136	0.957907	0.722818
0	073	0.772988	0.447653	0.199636
0	074	0.763551	0.557563	0.723244
0	075	0.768484	0.057099	0.243385
0	076	0.308343	0.133570	0.603847

0	077	0.235096	0.628504	0.112509
0	078	0.323933	0.376002	0.589233
0	079	0.213240	0.870361	0.076942
0	080	0.729982	0.865875	0.393139
0	081	0.808448	0.367214	0.874778
0	082	0.718801	0.624384	0.419686
0	083	0.825223	0.124294	0.920913
0	084	0.221974	0.042441	0.543297
0	085	0.316511	0.537759	0.037308
0	086	0.217808	0.430570	0.503073
0	087	0.321244	0.926338	0.999301
0	088	0.819732	0.952220	0.455494
0	089	0.724220	0.453213	0.954458
0	090	0.822386	0.556605	0.490924
0	091	0.719026	0.066740	0.999642
0	092	0.335965	0.004749	0.619248
0	093	0.206074	0.499099	0.121994
0	094	0.299923	0.505586	0.603494
0	095	0.235761	0.000018	0.096668
0	096	0.704923	0.995225	0.388868
0	097	0.831777	0.497747	0.866978
0	098	0.736748	0.498218	0.372059
0	099	0.807348	0.993587	0.905823
0	0100	0.128450	0.130137	0.587252
0	0101	0.402596	0.629126	0.094092
0	0102	0.119304	0.360826	0.579120
0	0103	0.421151	0.859792	0.077996
0	0104	0.910709	0.861328	0.411294
0	0105	0.636600	0.366241	0.888369
0	0106	0.915184	0.627488	0.401150
0	0107	0.621220	0.134005	0.915044
0	0108	0.124672	0.066703	0.415015
0	0109	0.418499	0.568741	0.921734
0	0110	0.095820	0.447869	0.438045
0	0111	0.442860	0.944821	0.934179
0	0112	0.915274	0.923610	0.584804
0	0113	0.618992	0.421604	0.063442
0	0114	0.945766	0.546173	0.548773
0	0115	0.597038	0.055164	0.065694
0	0116	0.142455	0.039205	0.222399
0	0117	0.393199	0.538851	0.731945
0	0118	0.145129	0.427601	0.257509
0	0119	0.402210	0.930971	0.747116
0	0120	0.898611	0.953532	0.777158

0	0121	0.647791	0.446809	0.252444
0	0122	0.894189	0.565941	0.728270
0	0123	0.637656	0.060598	0.253054
0	0124	0.105064	0.944850	0.348327
0	0125	0.441216	0.448068	0.853951
0	0126	0.113013	0.549170	0.315163
0	0127	0.430446	0.050318	0.817890
0	0128	0.936006	0.045998	0.647947
0	0129	0.599632	0.541754	0.134602
0	0130	0.928912	0.444565	0.673213
0	0131	0.607420	0.944310	0.170600
0	0132	0.224558	0.126049	0.143710
0	0133	0.318902	0.630873	0.650540
0	0134	0.216427	0.366110	0.123414
0	0135	0.332101	0.871856	0.610553
0	0136	0.815176	0.867954	0.855234
0	0137	0.730968	0.367683	0.343145
0	0138	0.821362	0.630911	0.857140
0	0139	0.708173	0.127765	0.381460
0	0140	0.516389	0.852509	0.213887
0	0141	0.021902	0.354244	0.711993
0	0142	0.512948	0.630711	0.198732
0	0143	0.023936	0.135720	0.706329
0	0144	0.523431	0.140661	0.782502
0	0145	0.020878	0.640882	0.285856
0	0146	0.524939	0.358050	0.785305
0	0147	0.015980	0.855394	0.292648
0	0148	0.393593	0.836185	0.267557
0	0149	0.143536	0.338800	0.769796
0	0150	0.400809	0.659596	0.286746
0	0151	0.141767	0.157681	0.780442
0	0152	0.645163	0.157205	0.724255
0	0153	0.905546	0.657288	0.207747
0	0154	0.638365	0.330794	0.698570
0	0155	0.898433	0.837512	0.217184
0	0156	0.451016	0.743995	0.155879
0	0157	0.088520	0.245625	0.657089
0	0158	0.589848	0.249189	0.836968
0	0159	0.948651	0.746129	0.339019
0	0160	0.321025	0.828696	0.425341
0	0161	0.208419	0.331222	0.934252
0	0162	0.337104	0.645128	0.456066
0	0163	0.205789	0.141143	0.949484
0	0164	0.719804	0.167355	0.568935

0	0165	0.833795	0.655949	0.048688
0	0166	0.708502	0.353535	0.535746
0	0167	0.832749	0.848593	0.049036
0	0168	0.265898	0.865234	0.255609
0	0169	0.272417	0.360908	0.767943
0	0170	0.269722	0.670629	0.293725
0	0171	0.272966	0.168340	0.788070
0	0172	0.773237	0.131668	0.741135
0	0173	0.777983	0.634193	0.225159
0	0174	0.769512	0.318556	0.700000
0	0175	0.767998	0.821876	0.213793
0	0176	0.299874	0.747091	0.572856
0	0177	0.241589	0.242993	0.068278
0	0178	0.745046	0.250203	0.422641
0	0179	0.796275	0.750084	0.925413
0	0180	0.214451	0.844942	0.535880
0	0181	0.324857	0.340008	0.018535
0	0182	0.216722	0.647714	0.530323
0	0183	0.326130	0.145795	0.022746
0	0184	0.826147	0.148697	0.459821
0	0185	0.714583	0.651055	0.969596
0	0186	0.830411	0.346987	0.466561
0	0187	0.712813	0.847390	0.974384
0	0188	0.131535	0.744330	0.573280
0	0189	0.408843	0.243762	0.071997
0	0190	0.911815	0.246768	0.423246
0	0191	0.631470	0.749254	0.920703
0	0192	0.109376	0.823737	0.422355
0	0193	0.440578	0.327986	0.929737
0	0194	0.105642	0.656732	0.430529
0	0195	0.438264	0.160638	0.926231
0	0196	0.930580	0.167633	0.575801
0	0197	0.596507	0.660326	0.054594
0	0198	0.944143	0.337247	0.559102
0	0199	0.600702	0.830658	0.069271
0	0200	0.138357	0.842460	0.232542
0	0201	0.400065	0.346010	0.743042
0	0202	0.144017	0.667048	0.242601
0	0203	0.399375	0.166091	0.738017
0	0204	0.901560	0.147000	0.765408
0	0205	0.637762	0.646056	0.242393
0	0206	0.896827	0.326025	0.742323
0	0207	0.640860	0.831963	0.257379
0	0208	0.224498	0.754713	0.161727

O	O209	0.319284	0.257142	0.663949
O	O210	0.820418	0.239817	0.834463
O	O211	0.714389	0.741568	0.346877
O	O212	0.744027	0.753573	0.609535
Al	Al213	0.712858	0.658261	0.296306
Si	Si214	0.439423	0.050450	0.176203
Si	Si215	0.097046	0.551482	0.680280
Si	Si216	0.448868	0.440741	0.167555
Si	Si217	0.090233	0.941143	0.661389
Si	Si218	0.600077	0.943998	0.823268
Si	Si219	0.944271	0.438198	0.308696
Si	Si220	0.591430	0.552701	0.820166
Si	Si221	0.950599	0.048829	0.338012
Si	Si222	0.334834	0.027179	0.335976
Si	Si223	0.200592	0.529430	0.841321
Si	Si224	0.335957	0.473214	0.317795
Si	Si225	0.208325	0.970527	0.807932
Si	Si226	0.706577	0.968480	0.664210
Si	Si227	0.843055	0.463845	0.146978
Si	Si228	0.703745	0.516432	0.672775
Si	Si229	0.830976	0.021694	0.190845
Si	Si230	0.299533	0.061084	0.552672
Si	Si231	0.239936	0.557436	0.056215
Si	Si232	0.294716	0.440591	0.532732
Si	Si233	0.243637	0.936050	0.024512
Si	Si234	0.741588	0.936146	0.449160
Si	Si235	0.801269	0.437381	0.932659
Si	Si236	0.745274	0.552376	0.459257
Si	Si237	0.796933	0.058412	0.975457
Si	Si238	0.144471	0.060173	0.531391
Si	Si239	0.393537	0.559023	0.035352
Si	Si240	0.140824	0.432660	0.534423
Si	Si241	0.397994	0.930384	0.030897
Si	Si242	0.896452	0.931304	0.468240
Si	Si243	0.646735	0.434066	0.952178
Si	Si244	0.898356	0.556669	0.453134
Si	Si245	0.642214	0.064618	0.967952
Si	Si246	0.098869	0.023486	0.320152
Si	Si247	0.442019	0.526604	0.824785
Si	Si248	0.093300	0.470780	0.322408
Si	Si249	0.450274	0.971872	0.821225
Si	Si250	0.941729	0.967674	0.678432
Si	Si251	0.597898	0.463351	0.162387
Si	Si252	0.947338	0.523331	0.664765

Si	Si253	0.589212	0.023216	0.175742
Si	Si254	0.217269	0.050732	0.185691
Si	Si255	0.319863	0.555261	0.693245
Si	Si256	0.211262	0.432699	0.190694
Si	Si257	0.334839	0.936085	0.683181
Si	Si258	0.823849	0.943484	0.815146
Si	Si259	0.722391	0.440114	0.291433
Si	Si260	0.827787	0.562315	0.794811
Si	Si261	0.705236	0.059901	0.316483
Si	Si262	0.445557	0.822875	0.178883
Si	Si263	0.093198	0.324654	0.679636
Si	Si264	0.442329	0.665932	0.183734
Si	Si265	0.095733	0.167242	0.682827
Si	Si266	0.594722	0.170129	0.814789
Si	Si267	0.947355	0.667996	0.308147
Si	Si268	0.597231	0.325995	0.802241
Si	Si269	0.943556	0.824948	0.315048
Si	Si270	0.331718	0.869731	0.323544
Si	Si271	0.204641	0.370375	0.829736
Si	Si272	0.333766	0.631949	0.337191
Si	Si273	0.208735	0.129342	0.830332
Si	Si274	0.708848	0.125829	0.670406
Si	Si275	0.841349	0.622531	0.157723
Si	Si276	0.707351	0.359872	0.655754
Si	Si277	0.830319	0.862650	0.167477
Si	Si278	0.291667	0.823472	0.536607
Si	Si279	0.248086	0.320483	0.036978
Si	Si280	0.293077	0.668054	0.551251
Si	Si281	0.249446	0.164369	0.044924
Si	Si282	0.749811	0.173309	0.457983
Si	Si283	0.791247	0.671481	0.950823
Si	Si284	0.753730	0.329232	0.442661
Si	Si285	0.789325	0.828143	0.952034
Si	Si286	0.137960	0.820762	0.534802
Si	Si287	0.401878	0.320554	0.034789
Si	Si288	0.139209	0.667231	0.538037
Si	Si289	0.403035	0.167225	0.033491
Si	Si290	0.903194	0.170805	0.462567
Si	Si291	0.637601	0.671270	0.953167
Si	Si292	0.907175	0.324813	0.454382
Si	Si293	0.636203	0.825194	0.961824
Si	Si294	0.092114	0.866743	0.323607
Si	Si295	0.451279	0.369862	0.827738
Si	Si296	0.095975	0.628266	0.319075

Si	Si297	0.447792	0.129346	0.816304
Si	Si298	0.948057	0.124059	0.674049
Si	Si299	0.588087	0.620364	0.159643
Si	Si300	0.947715	0.365788	0.671506
Si	Si301	0.591311	0.865099	0.177245
Si	Si302	0.210389	0.832762	0.183097
Si	Si303	0.328852	0.334902	0.692145
Si	Si304	0.218075	0.679101	0.202351
Si	Si305	0.325345	0.180257	0.698474
Si	Si306	0.830053	0.160942	0.814166
Si	Si307	0.824155	0.314063	0.788117
Si	Si308	0.713347	0.816997	0.301464
Zn	Zn309	0.698628	0.714002	0.490930

M-C₆H₁₁Zn-OH₂-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M2 in Black) Total energy = -1962.17053776 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.777226	0.724559	0.531071
H	H2	0.747838	0.755586	0.627704
H	H3	0.542329	0.623960	0.598207
H	H4	0.466172	0.660183	0.568697
H	H5	0.541037	0.681758	0.431817
H	H6	0.463407	0.771252	0.465548
H	H7	0.537671	0.808025	0.427874
H	H8	0.489489	0.867325	0.574026
H	H9	0.566146	0.832169	0.604116
H	H10	0.431531	0.772072	0.653706
H	H11	0.485715	0.808788	0.739034
H	H12	0.493349	0.684465	0.743355
H	H13	0.568681	0.720664	0.708509

C	C14	0.517654	0.672017	0.587632
C	C15	0.547525	0.710746	0.500405
C	C16	0.514913	0.779358	0.488135
C	C17	0.515167	0.819731	0.584699
C	C18	0.483864	0.780227	0.669963
C	C19	0.517654	0.712518	0.684044
O	O20	0.488636	0.029199	0.220367
O	O21	0.998108	0.531678	0.716316
O	O22	0.502005	0.434986	0.209606
O	O23	0.984174	0.935578	0.709719
O	O24	0.491542	0.947677	0.796398
O	O25	0.996110	0.455394	0.294227
O	O26	0.492060	0.539978	0.796310
O	O27	0.993811	0.035676	0.297608
O	O28	0.370538	0.059407	0.288744
O	O29	0.115946	0.560103	0.785745
O	O30	0.381853	0.443128	0.280888
O	O31	0.103963	0.943981	0.781363
O	O32	0.605987	0.949800	0.711993
O	O33	0.880413	0.436226	0.212570
O	O34	0.613651	0.536875	0.735429
O	O35	0.872927	0.042079	0.230301
O	O36	0.413339	0.113965	0.121322
O	O37	0.073958	0.616606	0.619852
O	O38	0.409041	0.360602	0.132183
O	O39	0.078344	0.861804	0.631930
O	O40	0.584781	0.862200	0.854502
O	O41	0.914267	0.366109	0.370045
O	O42	0.579401	0.615991	0.885129
O	O43	0.910023	0.116881	0.384629
O	O44	0.381083	0.985424	0.128382
O	O45	0.104885	0.487553	0.622532
O	O46	0.409308	0.491240	0.100535
O	O47	0.076521	0.992434	0.601168
O	O48	0.596058	0.990307	0.898635
O	O49	0.886835	0.495463	0.387213
O	O50	0.581117	0.483532	0.909752
O	O51	0.897486	0.985640	0.405456
O	O52	0.311128	0.046450	0.461361
O	O53	0.174624	0.546529	0.959199
O	O54	0.316860	0.448367	0.449563
O	O55	0.170304	0.949069	0.947700
O	O56	0.669470	0.925395	0.547116
O	O57	0.814628	0.425249	0.047042

0	058	0.679111	0.531827	0.569024
0	059	0.808412	0.033050	0.060267
0	060	0.318742	0.943384	0.337381
0	061	0.170099	0.445180	0.830715
0	062	0.304437	0.546699	0.317900
0	063	0.185211	0.045316	0.812556
0	064	0.687416	0.041014	0.639923
0	065	0.823638	0.543334	0.133050
0	066	0.695531	0.435287	0.701802
0	067	0.800829	0.934630	0.191590
0	068	0.240022	0.045810	0.298417
0	069	0.246450	0.550273	0.797019
0	070	0.251774	0.429831	0.281652
0	071	0.233524	0.926022	0.778122
0	072	0.735737	0.929104	0.714229
0	073	0.749624	0.448394	0.212364
0	074	0.742060	0.556164	0.737315
0	075	0.743058	0.050365	0.228321
0	076	0.277854	0.123883	0.611573
0	077	0.210239	0.620185	0.112561
0	078	0.298375	0.371037	0.603981
0	079	0.188795	0.867614	0.097903
0	080	0.684202	0.869952	0.372684
0	081	0.788625	0.358208	0.885172
0	082	0.696018	0.625573	0.434833
0	083	0.789925	0.115862	0.911239
0	084	0.192568	0.035119	0.541386
0	085	0.293155	0.531270	0.038398
0	086	0.195488	0.427691	0.512266
0	087	0.290812	0.930375	0.013040
0	088	0.785694	0.930009	0.460335
0	089	0.699250	0.441545	0.958237
0	090	0.799069	0.556009	0.502892
0	091	0.687469	0.056521	0.998447
0	092	0.298263	0.995129	0.640408
0	093	0.187289	0.490415	0.134789
0	094	0.275291	0.500392	0.620038
0	095	0.206137	0.996932	0.123215
0	096	0.686845	0.001365	0.390372
0	097	0.808014	0.488285	0.875103
0	098	0.712240	0.498947	0.384796
0	099	0.766909	0.988077	0.884008
0	0100	0.103613	0.122569	0.604383
0	0101	0.379366	0.620940	0.103282

0	0102	0.103042	0.355743	0.597829
0	0103	0.382925	0.854919	0.093754
0	0104	0.883922	0.852913	0.403859
0	0105	0.608426	0.353587	0.902412
0	0106	0.889920	0.627485	0.410232
0	0107	0.591482	0.122798	0.909461
0	0108	0.085098	0.060517	0.434492
0	0109	0.399909	0.559242	0.933084
0	0110	0.071794	0.434648	0.449557
0	0111	0.414748	0.939104	0.952042
0	0112	0.891354	0.917180	0.573375
0	0113	0.596469	0.414955	0.075099
0	0114	0.922623	0.548831	0.559709
0	0115	0.566035	0.050113	0.067349
0	0116	0.115657	0.048476	0.243125
0	0117	0.370407	0.538639	0.742087
0	0118	0.121126	0.421987	0.268237
0	0119	0.364677	0.924402	0.771693
0	0120	0.860985	0.952519	0.758697
0	0121	0.623963	0.449827	0.261276
0	0122	0.872386	0.559798	0.741778
0	0123	0.613588	0.058016	0.250912
0	0124	0.081712	0.942432	0.348255
0	0125	0.413809	0.439842	0.853951
0	0126	0.091645	0.541531	0.338355
0	0127	0.403631	0.043159	0.832414
0	0128	0.916877	0.038770	0.636473
0	0129	0.569795	0.537032	0.135059
0	0130	0.906578	0.441385	0.671940
0	0131	0.582377	0.940545	0.175864
0	0132	0.200226	0.126630	0.154003
0	0133	0.295963	0.627659	0.655116
0	0134	0.196530	0.357109	0.144295
0	0135	0.296798	0.862083	0.637042
0	0136	0.793663	0.861024	0.854761
0	0137	0.705512	0.369184	0.353686
0	0138	0.803698	0.621236	0.878453
0	0139	0.690113	0.131254	0.362597
0	0140	0.491672	0.847687	0.204315
0	0141	0.997986	0.350689	0.715740
0	0142	0.490059	0.629471	0.208534
0	0143	0.994435	0.132089	0.713383
0	0144	0.491828	0.135754	0.782572
0	0145	0.997042	0.628161	0.296004

0	0146	0.499026	0.347684	0.793115
0	0147	0.992488	0.853383	0.292646
0	0148	0.376180	0.829312	0.286314
0	0149	0.115719	0.328209	0.789248
0	0150	0.376529	0.655361	0.294149
0	0151	0.109255	0.152332	0.796884
0	0152	0.611413	0.137097	0.715444
0	0153	0.884080	0.647214	0.213446
0	0154	0.613901	0.332193	0.707098
0	0155	0.878031	0.828529	0.209848
0	0156	0.423000	0.738788	0.159361
0	0157	0.063042	0.240064	0.665999
0	0158	0.569654	0.238549	0.828289
0	0159	0.930937	0.740267	0.335265
0	0160	0.305701	0.834844	0.446404
0	0161	0.182047	0.342568	0.952407
0	0162	0.310217	0.639729	0.460206
0	0163	0.178901	0.134025	0.959908
0	0164	0.681889	0.159506	0.556584
0	0165	0.804913	0.664424	0.065076
0	0166	0.684885	0.352656	0.546169
0	0167	0.807754	0.842241	0.047565
0	0168	0.246296	0.844076	0.271482
0	0169	0.245806	0.344461	0.780820
0	0170	0.245103	0.662104	0.294168
0	0171	0.239784	0.163650	0.792348
0	0172	0.740924	0.142807	0.731623
0	0173	0.756389	0.630979	0.242303
0	0174	0.743873	0.313739	0.711086
0	0175	0.747885	0.816423	0.217625
0	0176	0.271529	0.741929	0.573554
0	0177	0.216804	0.240042	0.064199
0	0178	0.717714	0.250636	0.427464
0	0179	0.770739	0.743954	0.920988
0	0180	0.188407	0.840660	0.530584
0	0181	0.301406	0.337798	0.027744
0	0182	0.190972	0.640000	0.539495
0	0183	0.300277	0.139787	0.028970
0	0184	0.797957	0.149256	0.470477
0	0185	0.690968	0.644912	0.973322
0	0186	0.805633	0.343446	0.475731
0	0187	0.688248	0.841214	0.971707
0	0188	0.108543	0.740267	0.580003
0	0189	0.381603	0.238067	0.080417

O	O190	0.885879	0.243679	0.424201
O	O191	0.606386	0.742018	0.925034
O	O192	0.073389	0.827014	0.441118
O	O193	0.417441	0.323244	0.941506
O	O194	0.083381	0.657503	0.433424
O	O195	0.413019	0.155555	0.934591
O	O196	0.908326	0.161821	0.572369
O	O197	0.578196	0.660606	0.071897
O	O198	0.922315	0.333398	0.559528
O	O199	0.567574	0.841406	0.045584
O	O200	0.117651	0.831499	0.255024
O	O201	0.373594	0.332557	0.754955
O	O202	0.119178	0.653815	0.244380
O	O203	0.366545	0.155833	0.749382
O	O204	0.869093	0.131581	0.756899
O	O205	0.615496	0.630644	0.257257
O	O206	0.872407	0.323849	0.741286
O	O207	0.617897	0.817806	0.222974
O	O208	0.195341	0.745542	0.163215
O	O209	0.292839	0.248122	0.665606
O	O210	0.804385	0.233666	0.836622
O	O211	0.684986	0.740160	0.345418
O	O212	0.739244	0.747662	0.557934
Al	Al213	0.688760	0.654790	0.309771
Si	Si214	0.413764	0.047152	0.189016
Si	Si215	0.073193	0.548781	0.685436
Si	Si216	0.424983	0.432797	0.180724
Si	Si217	0.061469	0.933565	0.680858
Si	Si218	0.569188	0.937584	0.816786
Si	Si219	0.919696	0.438429	0.316718
Si	Si220	0.567572	0.544274	0.832954
Si	Si221	0.917878	0.045256	0.329791
Si	Si222	0.309916	0.023448	0.346239
Si	Si223	0.177006	0.525222	0.843392
Si	Si224	0.313913	0.466876	0.332567
Si	Si225	0.173384	0.965958	0.830342
Si	Si226	0.674398	0.961900	0.654226
Si	Si227	0.816992	0.464030	0.152544
Si	Si228	0.682639	0.514682	0.686004
Si	Si229	0.806351	0.015039	0.177636
Si	Si230	0.269676	0.050272	0.563838
Si	Si231	0.216430	0.547340	0.061653
Si	Si232	0.271611	0.436582	0.546901
Si	Si233	0.214072	0.935795	0.046094

Si	Si234	0.707152	0.931417	0.441224
Si	Si235	0.777246	0.428343	0.941236
Si	Si236	0.721366	0.553262	0.472111
Si	Si237	0.763494	0.048514	0.963614
Si	Si238	0.114775	0.052827	0.545581
Si	Si239	0.370501	0.550917	0.044350
Si	Si240	0.118886	0.426811	0.545855
Si	Si241	0.367263	0.927635	0.046903
Si	Si242	0.864614	0.921859	0.459980
Si	Si243	0.621637	0.423120	0.961505
Si	Si244	0.874601	0.556533	0.464050
Si	Si245	0.610358	0.054937	0.967842
Si	Si246	0.068776	0.021669	0.331378
Si	Si247	0.419106	0.519257	0.832121
Si	Si248	0.070057	0.463353	0.336725
Si	Si249	0.418594	0.963799	0.837441
Si	Si250	0.913449	0.960926	0.669489
Si	Si251	0.573257	0.459709	0.170141
Si	Si252	0.924752	0.520307	0.672922
Si	Si253	0.562774	0.019243	0.178896
Si	Si254	0.190681	0.054049	0.204698
Si	Si255	0.296867	0.553798	0.703955
Si	Si256	0.189500	0.425514	0.206895
Si	Si257	0.297901	0.927556	0.706713
Si	Si258	0.789681	0.933548	0.802680
Si	Si259	0.697889	0.441992	0.302767
Si	Si260	0.806430	0.555620	0.808964
Si	Si261	0.683678	0.059767	0.307523
Si	Si262	0.418728	0.817264	0.186015
Si	Si263	0.069639	0.318539	0.692253
Si	Si264	0.418032	0.660940	0.191019
Si	Si265	0.067494	0.161910	0.694944
Si	Si266	0.566137	0.159167	0.808757
Si	Si267	0.925236	0.661004	0.313272
Si	Si268	0.572453	0.317956	0.808261
Si	Si269	0.921450	0.818471	0.309956
Si	Si270	0.311381	0.863134	0.334693
Si	Si271	0.178730	0.365210	0.837731
Si	Si272	0.309397	0.625826	0.341654
Si	Si273	0.178017	0.123788	0.840599
Si	Si274	0.680367	0.120270	0.661456
Si	Si275	0.815215	0.621151	0.165979
Si	Si276	0.684256	0.358486	0.666115
Si	Si277	0.808630	0.855651	0.166234

Si	Si278	0.265180	0.819994	0.546949
Si	Si279	0.224558	0.319229	0.047453
Si	Si280	0.267167	0.662588	0.555991
Si	Si281	0.224155	0.160571	0.051274
Si	Si282	0.721897	0.172360	0.454159
Si	Si283	0.767398	0.667584	0.960063
Si	Si284	0.728414	0.328825	0.451238
Si	Si285	0.764962	0.821841	0.950527
Si	Si286	0.112146	0.817660	0.545544
Si	Si287	0.377558	0.315395	0.045274
Si	Si288	0.114390	0.663413	0.543504
Si	Si289	0.377035	0.161676	0.041527
Si	Si290	0.875739	0.167574	0.462468
Si	Si291	0.613569	0.665532	0.964688
Si	Si292	0.881868	0.321561	0.457284
Si	Si293	0.611738	0.821019	0.949978
Si	Si294	0.066692	0.863556	0.333925
Si	Si295	0.425648	0.360928	0.835466
Si	Si296	0.072959	0.620017	0.328136
Si	Si297	0.418556	0.122419	0.825017
Si	Si298	0.921803	0.116424	0.670099
Si	Si299	0.564940	0.614896	0.170750
Si	Si300	0.924663	0.362500	0.671916
Si	Si301	0.564912	0.861888	0.162268
Si	Si302	0.187132	0.822495	0.197584
Si	Si303	0.302590	0.324518	0.701830
Si	Si304	0.192500	0.669525	0.203598
Si	Si305	0.294412	0.171874	0.704809
Si	Si306	0.801081	0.155624	0.808058
Si	Si307	0.802381	0.308674	0.793343
Si	Si308	0.684000	0.811357	0.289921
Zn	Zn309	0.645414	0.714632	0.500114

TS-C₆H₁₁ZnOH₂-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS2 in Black)

Total energy = -1960.04143314 eV

data_

```

_audit_creation_method    'Materials Studio'
_cell_length_a            20.357621
_cell_length_b            20.050598
_cell_length_c            13.476578
_cell_angle_alpha         90.000000
_cell_angle_beta          90.000000
_cell_angle_gamma         90.000000

```

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.747631	0.758543	0.609738
H	H2	0.659107	0.768752	0.653578
H	H3	0.538673	0.647622	0.433961
H	H4	0.475695	0.706881	0.434112
H	H5	0.565609	0.779551	0.442297
H	H6	0.556338	0.833473	0.592162
H	H7	0.620429	0.787446	0.656954
H	H8	0.497719	0.790532	0.729182
H	H9	0.545583	0.717914	0.727388
H	H10	0.422558	0.739479	0.601514
H	H11	0.431502	0.685875	0.704321
H	H12	0.445367	0.619934	0.548678
H	H13	0.521074	0.623790	0.611381
C	C14	0.515423	0.685985	0.479865
C	C15	0.563396	0.744016	0.503950
C	C16	0.555583	0.779222	0.596909
C	C17	0.515028	0.750171	0.681145
C	C18	0.457843	0.707838	0.641439
C	C19	0.484548	0.654058	0.571804
O	O20	0.487941	0.030668	0.212129
O	O21	0.994898	0.532238	0.708267
O	O22	0.499114	0.443504	0.205673
O	O23	0.986890	0.943425	0.707668
O	O24	0.493529	0.957980	0.791658
O	O25	0.991369	0.459387	0.290943
O	O26	0.486994	0.543781	0.792132
O	O27	0.996941	0.044848	0.293207
O	O28	0.370994	0.059977	0.284040
O	O29	0.110913	0.557966	0.785526
O	O30	0.377117	0.454568	0.267766
O	O31	0.108820	0.957821	0.767062
O	O32	0.610369	0.934009	0.716824
O	O33	0.876601	0.431275	0.210590
O	O34	0.608290	0.536597	0.729052
O	O35	0.873271	0.035318	0.239154
O	O36	0.411559	0.116072	0.116646
O	O37	0.074517	0.617980	0.619277

0	038	0.408928	0.365621	0.129008
0	039	0.078839	0.866742	0.630845
0	040	0.572617	0.872735	0.881629
0	041	0.913505	0.368981	0.373998
0	042	0.575534	0.625203	0.866057
0	043	0.908943	0.121077	0.380359
0	044	0.378577	0.987230	0.122722
0	045	0.104983	0.488693	0.620240
0	046	0.409633	0.495361	0.086058
0	047	0.073844	0.995947	0.584910
0	048	0.602167	0.002372	0.882683
0	049	0.879737	0.496919	0.380067
0	050	0.578095	0.495211	0.911557
0	051	0.912037	0.990467	0.416073
0	052	0.305671	0.062873	0.451151
0	053	0.177110	0.564636	0.951966
0	054	0.309484	0.447616	0.432668
0	055	0.176014	0.944675	0.931594
0	056	0.678977	0.926823	0.553238
0	057	0.810062	0.423764	0.044503
0	058	0.677639	0.535089	0.567560
0	059	0.808113	0.045999	0.072116
0	060	0.320794	0.947447	0.356913
0	061	0.165685	0.448091	0.860061
0	062	0.294607	0.552494	0.315408
0	063	0.194725	0.051366	0.818862
0	064	0.664782	0.044129	0.642096
0	065	0.826172	0.541404	0.130431
0	066	0.690517	0.436057	0.695923
0	067	0.790891	0.938902	0.184551
0	068	0.241174	0.039961	0.284676
0	069	0.241281	0.543033	0.784890
0	070	0.247964	0.435801	0.260035
0	071	0.237169	0.933855	0.758704
0	072	0.740840	0.950906	0.720890
0	073	0.746706	0.450539	0.210171
0	074	0.737578	0.554802	0.740162
0	075	0.744343	0.055280	0.242403
0	076	0.276442	0.130972	0.612485
0	077	0.211672	0.631033	0.112875
0	078	0.304324	0.375695	0.592232
0	079	0.179397	0.875475	0.093971
0	080	0.706012	0.865955	0.386759
0	081	0.778152	0.360325	0.880990

0	082	0.684338	0.622443	0.425677
0	083	0.797162	0.117298	0.912012
0	084	0.193536	0.038633	0.545772
0	085	0.290359	0.536882	0.040863
0	086	0.192642	0.423216	0.511334
0	087	0.291981	0.920995	0.013318
0	088	0.791022	0.953397	0.457869
0	089	0.696346	0.450511	0.955725
0	090	0.794896	0.563286	0.492920
0	091	0.689724	0.064253	0.995148
0	092	0.306463	0.002378	0.625270
0	093	0.178290	0.503122	0.125468
0	094	0.274052	0.504345	0.602554
0	095	0.210044	0.004033	0.100296
0	096	0.676983	0.995301	0.386114
0	097	0.808463	0.489091	0.874014
0	098	0.709435	0.495289	0.386678
0	099	0.775275	0.987143	0.903020
0	0100	0.101673	0.126185	0.595615
0	0101	0.379110	0.625086	0.098917
0	0102	0.090542	0.359063	0.586437
0	0103	0.397304	0.858916	0.082286
0	0104	0.879554	0.861707	0.405262
0	0105	0.605164	0.365309	0.894954
0	0106	0.893745	0.627238	0.405508
0	0107	0.589809	0.131759	0.916917
0	0108	0.094765	0.065739	0.421614
0	0109	0.391662	0.566688	0.923629
0	0110	0.072045	0.444183	0.441642
0	0111	0.411401	0.947984	0.941892
0	0112	0.889019	0.921549	0.579893
0	0113	0.593440	0.421119	0.071418
0	0114	0.916656	0.545597	0.554814
0	0115	0.568174	0.046508	0.061201
0	0116	0.117295	0.038564	0.229993
0	0117	0.366079	0.537495	0.733399
0	0118	0.116788	0.429863	0.257770
0	0119	0.368523	0.929161	0.757858
0	0120	0.866068	0.953425	0.769742
0	0121	0.621130	0.450606	0.259869
0	0122	0.868776	0.561049	0.737852
0	0123	0.613221	0.060175	0.245543
0	0124	0.074947	0.944892	0.352317
0	0125	0.409477	0.444876	0.856273

0	0126	0.084802	0.549550	0.325427
0	0127	0.400752	0.050074	0.818869
0	0128	0.911354	0.043553	0.643500
0	0129	0.573653	0.542710	0.137019
0	0130	0.902495	0.441190	0.674345
0	0131	0.581350	0.940800	0.176974
0	0132	0.196851	0.128484	0.153340
0	0133	0.290540	0.628956	0.654028
0	0134	0.186387	0.370210	0.119292
0	0135	0.301299	0.869418	0.618546
0	0136	0.788573	0.862588	0.848599
0	0137	0.701976	0.366998	0.346810
0	0138	0.800830	0.622074	0.877305
0	0139	0.682353	0.127723	0.375876
0	0140	0.492686	0.846243	0.216659
0	0141	0.992134	0.347944	0.716585
0	0142	0.489540	0.632715	0.204309
0	0143	0.995127	0.135224	0.709141
0	0144	0.492345	0.141917	0.784527
0	0145	0.996734	0.644622	0.285663
0	0146	0.494709	0.355266	0.789036
0	0147	0.988597	0.853408	0.295064
0	0148	0.370039	0.838152	0.272935
0	0149	0.113122	0.339475	0.778795
0	0150	0.376924	0.654047	0.292656
0	0151	0.111580	0.151525	0.789756
0	0152	0.614210	0.152442	0.725387
0	0153	0.880693	0.649517	0.209410
0	0154	0.608935	0.333091	0.703088
0	0155	0.873742	0.838347	0.210382
0	0156	0.420345	0.741874	0.160709
0	0157	0.065317	0.242860	0.664915
0	0158	0.563294	0.247745	0.837989
0	0159	0.917354	0.745473	0.335253
0	0160	0.299449	0.827702	0.432296
0	0161	0.188270	0.327834	0.933038
0	0162	0.310065	0.643741	0.459798
0	0163	0.176648	0.144835	0.959077
0	0164	0.684653	0.163731	0.565395
0	0165	0.796829	0.661806	0.064900
0	0166	0.679057	0.353261	0.539869
0	0167	0.807014	0.845968	0.042777
0	0168	0.241782	0.863824	0.263608
0	0169	0.240839	0.364121	0.760585

0	0170	0.246990	0.673001	0.294506
0	0171	0.241718	0.171547	0.794678
0	0172	0.742750	0.128789	0.734787
0	0173	0.755539	0.622902	0.243778
0	0174	0.739328	0.315393	0.703201
0	0175	0.743728	0.818565	0.208811
0	0176	0.271800	0.745100	0.576492
0	0177	0.215267	0.245263	0.077757
0	0178	0.715031	0.249834	0.426029
0	0179	0.769156	0.745654	0.922545
0	0180	0.187351	0.841840	0.529541
0	0181	0.300042	0.341008	0.029845
0	0182	0.189127	0.645755	0.532398
0	0183	0.297498	0.146032	0.030169
0	0184	0.796366	0.149327	0.467988
0	0185	0.685549	0.647867	0.964703
0	0186	0.800966	0.345767	0.471517
0	0187	0.686749	0.844886	0.969555
0	0188	0.105700	0.742962	0.581195
0	0189	0.382250	0.241746	0.079306
0	0190	0.881452	0.246266	0.421716
0	0191	0.603516	0.748016	0.918962
0	0192	0.071488	0.828419	0.441500
0	0193	0.415056	0.326767	0.939119
0	0194	0.078664	0.660319	0.433446
0	0195	0.408812	0.158729	0.931375
0	0196	0.908071	0.164058	0.568189
0	0197	0.569311	0.661180	0.055613
0	0198	0.915053	0.332828	0.562230
0	0199	0.575199	0.830723	0.067508
0	0200	0.114246	0.836608	0.255346
0	0201	0.368647	0.338595	0.755352
0	0202	0.121095	0.664171	0.246637
0	0203	0.367839	0.166795	0.744039
0	0204	0.870857	0.144855	0.755422
0	0205	0.615907	0.648242	0.239402
0	0206	0.866574	0.324026	0.745220
0	0207	0.617364	0.826242	0.255041
0	0208	0.197667	0.756045	0.165199
0	0209	0.287532	0.256290	0.664670
0	0210	0.790900	0.234747	0.833256
0	0211	0.695196	0.739715	0.347399
0	0212	0.711269	0.727622	0.615040
Al	Al213	0.688517	0.656345	0.302645

Si	Si214	0.412735	0.048638	0.182842
Si	Si215	0.070771	0.549179	0.682296
Si	Si216	0.423052	0.439838	0.171969
Si	Si217	0.062837	0.940881	0.672307
Si	Si218	0.569329	0.941885	0.819674
Si	Si219	0.915781	0.439308	0.314534
Si	Si220	0.563048	0.550017	0.825850
Si	Si221	0.921867	0.048196	0.332285
Si	Si222	0.309550	0.027265	0.343423
Si	Si223	0.173713	0.528125	0.844766
Si	Si224	0.307349	0.472488	0.318718
Si	Si225	0.179140	0.971887	0.818901
Si	Si226	0.673823	0.964599	0.659555
Si	Si227	0.814786	0.462486	0.150053
Si	Si228	0.679011	0.515876	0.683561
Si	Si229	0.804303	0.018796	0.184905
Si	Si230	0.270438	0.059067	0.558788
Si	Si231	0.214320	0.559268	0.058077
Si	Si232	0.269726	0.437559	0.535280
Si	Si233	0.214721	0.936182	0.035486
Si	Si234	0.713458	0.935612	0.445269
Si	Si235	0.773172	0.430912	0.938508
Si	Si236	0.717208	0.554023	0.467591
Si	Si237	0.767268	0.053728	0.969929
Si	Si238	0.115960	0.056945	0.537035
Si	Si239	0.367878	0.556310	0.037839
Si	Si240	0.115344	0.429166	0.539751
Si	Si241	0.369362	0.929057	0.039825
Si	Si242	0.867886	0.931369	0.464417
Si	Si243	0.618540	0.432766	0.958408
Si	Si244	0.870992	0.558305	0.457812
Si	Si245	0.612783	0.061182	0.964242
Si	Si246	0.070765	0.023546	0.324686
Si	Si247	0.413746	0.523247	0.826979
Si	Si248	0.066192	0.470760	0.328160
Si	Si249	0.418556	0.971393	0.827217
Si	Si250	0.913496	0.965406	0.675078
Si	Si251	0.571854	0.464888	0.168349
Si	Si252	0.920425	0.520196	0.669310
Si	Si253	0.562837	0.019579	0.174667
Si	Si254	0.191529	0.052265	0.192591
Si	Si255	0.292574	0.552773	0.694448
Si	Si256	0.182710	0.435048	0.190576
Si	Si257	0.302788	0.934177	0.690060

Si	Si258	0.792684	0.939049	0.810314
Si	Si259	0.695189	0.441345	0.300319
Si	Si260	0.803778	0.556565	0.807502
Si	Si261	0.679536	0.059363	0.312188
Si	Si262	0.420075	0.820922	0.183229
Si	Si263	0.065166	0.322150	0.686688
Si	Si264	0.417069	0.663432	0.188846
Si	Si265	0.068439	0.164163	0.689930
Si	Si266	0.564808	0.168587	0.816163
Si	Si267	0.921629	0.666664	0.308691
Si	Si268	0.567960	0.325397	0.806335
Si	Si269	0.914989	0.824334	0.311595
Si	Si270	0.307829	0.869581	0.330582
Si	Si271	0.177149	0.370222	0.832575
Si	Si272	0.307697	0.630552	0.340850
Si	Si273	0.180468	0.129752	0.840860
Si	Si274	0.676909	0.122340	0.667535
Si	Si275	0.813186	0.618564	0.163803
Si	Si276	0.678810	0.359606	0.659923
Si	Si277	0.804429	0.860519	0.161127
Si	Si278	0.264533	0.821423	0.539782
Si	Si279	0.222645	0.321626	0.040881
Si	Si280	0.265261	0.666115	0.554413
Si	Si281	0.221478	0.166495	0.054029
Si	Si282	0.719797	0.172479	0.458320
Si	Si283	0.763022	0.668549	0.957220
Si	Si284	0.724205	0.328748	0.446778
Si	Si285	0.762964	0.824083	0.947153
Si	Si286	0.110793	0.820146	0.545591
Si	Si287	0.376599	0.319078	0.044268
Si	Si288	0.111972	0.666555	0.541925
Si	Si289	0.374910	0.165624	0.039616
Si	Si290	0.873697	0.169886	0.459643
Si	Si291	0.608931	0.670169	0.952541
Si	Si292	0.877531	0.323641	0.457102
Si	Si293	0.609722	0.823925	0.959608
Si	Si294	0.062491	0.865929	0.335562
Si	Si295	0.421753	0.366397	0.834497
Si	Si296	0.070383	0.629199	0.323088
Si	Si297	0.417280	0.129320	0.820047
Si	Si298	0.921196	0.121968	0.669207
Si	Si299	0.563704	0.621699	0.161343
Si	Si300	0.918807	0.361936	0.674429
Si	Si301	0.566814	0.861100	0.178386

Si	Si302	0.183208	0.832707	0.195703
Si	Si303	0.300356	0.333450	0.694400
Si	Si304	0.193915	0.679861	0.204636
Si	Si305	0.293828	0.180289	0.703903
Si	Si306	0.800267	0.156705	0.807558
Si	Si307	0.794248	0.310044	0.790783
Si	Si308	0.690579	0.813185	0.298730
Zn	Zn309	0.659357	0.711726	0.497030

C₆H₁₀-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M3 in Black)

Total energy = -1961.63677156 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.768861	0.759786	0.613412
H	H2	0.575346	0.828017	0.415398
H	H3	0.496858	0.795759	0.435079
H	H4	0.597192	0.836796	0.593104
H	H5	0.518463	0.870629	0.573208
H	H6	0.515965	0.794165	0.719292
H	H7	0.468133	0.760496	0.622485
H	H8	0.605320	0.717235	0.689854
H	H9	0.533972	0.668696	0.682583
H	H10	0.591819	0.634028	0.534043
H	H11	0.577899	0.702922	0.387804
H	H12	0.513763	0.560856	0.409940
H	H13	0.524230	0.525976	0.418033
C	C14	0.546998	0.796006	0.465540
C	C15	0.546830	0.824202	0.571313
C	C16	0.518639	0.773156	0.644465
C	C17	0.560535	0.709435	0.646025

C	C18	0.578507	0.686333	0.543120
C	C19	0.571832	0.725270	0.460908
O	O20	0.522873	0.038358	0.219334
O	O21	0.018906	0.548656	0.716511
O	O22	0.527320	0.439235	0.216978
O	O23	0.015717	0.935526	0.708293
O	O24	0.517747	0.949170	0.789615
O	O25	0.023453	0.457202	0.295784
O	O26	0.516384	0.541790	0.793238
O	O27	0.021821	0.035837	0.298066
O	O28	0.404269	0.059205	0.292179
O	O29	0.134359	0.553004	0.799297
O	O30	0.408057	0.432511	0.294137
O	O31	0.132314	0.938393	0.791819
O	O32	0.632850	0.955286	0.706761
O	O33	0.906895	0.439446	0.215512
O	O34	0.634303	0.531466	0.723225
O	O35	0.906231	0.045436	0.214956
O	O36	0.441668	0.123110	0.129702
O	O37	0.112023	0.625512	0.638938
O	O38	0.438932	0.361145	0.134461
O	O39	0.112873	0.865016	0.631022
O	O40	0.611323	0.865903	0.847386
O	O41	0.940946	0.371927	0.376864
O	O42	0.609324	0.618828	0.866141
O	O43	0.935184	0.120618	0.372571
O	O44	0.418682	0.993309	0.123302
O	O45	0.121214	0.494132	0.623743
O	O46	0.426646	0.492127	0.120517
O	O47	0.113793	0.996603	0.616371
O	O48	0.619520	0.994175	0.894892
O	O49	0.915352	0.502095	0.387541
O	O50	0.608282	0.488411	0.907038
O	O51	0.916144	0.990255	0.393367
O	O52	0.341797	0.039247	0.460653
O	O53	0.200229	0.539071	0.964379
O	O54	0.343296	0.452722	0.461127
O	O55	0.198880	0.951531	0.957795
O	O56	0.696708	0.941046	0.539220
O	O57	0.841053	0.426795	0.048460
O	O58	0.707954	0.540376	0.566271
O	O59	0.841565	0.040955	0.044716
O	O60	0.337009	0.947903	0.316151
O	O61	0.210469	0.447038	0.820635

0	062	0.337436	0.542632	0.314537
0	063	0.209553	0.043580	0.814313
0	064	0.717244	0.048329	0.651598
0	065	0.850150	0.545615	0.131450
0	066	0.724169	0.437855	0.690081
0	067	0.829787	0.941207	0.174533
0	068	0.272728	0.060772	0.297525
0	069	0.264368	0.564987	0.796760
0	070	0.277018	0.427077	0.296425
0	071	0.262477	0.925327	0.789740
0	072	0.762238	0.931515	0.708466
0	073	0.776456	0.451116	0.213058
0	074	0.760867	0.558117	0.744896
0	075	0.776590	0.059316	0.211737
0	076	0.315901	0.120293	0.609422
0	077	0.228345	0.617656	0.115690
0	078	0.318773	0.373394	0.612641
0	079	0.226279	0.870064	0.106694
0	080	0.711683	0.876053	0.371383
0	081	0.808722	0.356307	0.891340
0	082	0.717153	0.630100	0.425628
0	083	0.813846	0.124055	0.897783
0	084	0.221260	0.044396	0.532720
0	085	0.320606	0.540613	0.034233
0	086	0.221485	0.441329	0.525757
0	087	0.320481	0.942040	0.021406
0	088	0.816875	0.921507	0.469610
0	089	0.723306	0.442600	0.965523
0	090	0.825525	0.567805	0.492102
0	091	0.718456	0.055134	0.985800
0	092	0.317320	0.989813	0.638229
0	093	0.223911	0.486999	0.140201
0	094	0.309759	0.503844	0.635390
0	095	0.229831	0.000351	0.134487
0	096	0.736831	0.005238	0.379698
0	097	0.830445	0.486501	0.874094
0	098	0.738450	0.503135	0.383648
0	099	0.802970	0.994322	0.869416
0	0100	0.131129	0.127660	0.604033
0	0101	0.410224	0.623291	0.106528
0	0102	0.130876	0.362570	0.603740
0	0103	0.412243	0.862525	0.097089
0	0104	0.916222	0.856579	0.390459
0	0105	0.631093	0.357604	0.903265

0	0106	0.919080	0.634911	0.396570
0	0107	0.624138	0.127035	0.902000
0	0108	0.105963	0.057998	0.443346
0	0109	0.436908	0.552229	0.947450
0	0110	0.101218	0.437425	0.449619
0	0111	0.441334	0.941002	0.946952
0	0112	0.932711	0.919847	0.558632
0	0113	0.616448	0.420096	0.074464
0	0114	0.947382	0.564689	0.555553
0	0115	0.600002	0.057878	0.064542
0	0116	0.145342	0.061641	0.255010
0	0117	0.392187	0.560387	0.762754
0	0118	0.147736	0.421646	0.266784
0	0119	0.392092	0.924151	0.766131
0	0120	0.889867	0.950243	0.740230
0	0121	0.650446	0.456508	0.258410
0	0122	0.890670	0.553972	0.733044
0	0123	0.648994	0.050351	0.248710
0	0124	0.115693	0.946749	0.338042
0	0125	0.431508	0.444165	0.833828
0	0126	0.120833	0.542257	0.332547
0	0127	0.429196	0.044059	0.824676
0	0128	0.953169	0.039672	0.630366
0	0129	0.590777	0.541838	0.135417
0	0130	0.946419	0.448911	0.645279
0	0131	0.605535	0.942431	0.159138
0	0132	0.226930	0.132647	0.149395
0	0133	0.318087	0.635424	0.652188
0	0134	0.227747	0.354335	0.151900
0	0135	0.317236	0.856859	0.645218
0	0136	0.823602	0.864868	0.848934
0	0137	0.728417	0.373370	0.353640
0	0138	0.832952	0.619747	0.877525
0	0139	0.720527	0.133731	0.351123
0	0140	0.523883	0.843275	0.199587
0	0141	0.023007	0.351890	0.715537
0	0142	0.523119	0.644519	0.205427
0	0143	0.020530	0.139994	0.710293
0	0144	0.520459	0.135289	0.781736
0	0145	0.028210	0.631015	0.287458
0	0146	0.524203	0.354580	0.788259
0	0147	0.025270	0.859171	0.281311
0	0148	0.410786	0.839977	0.291731
0	0149	0.139597	0.336611	0.796644

0	0150	0.411458	0.651737	0.299469
0	0151	0.135531	0.152336	0.797610
0	0152	0.638332	0.148085	0.708162
0	0153	0.916894	0.649469	0.199065
0	0154	0.640718	0.336139	0.708634
0	0155	0.910725	0.837299	0.196281
0	0156	0.440736	0.743652	0.163690
0	0157	0.095219	0.245254	0.670293
0	0158	0.591030	0.243220	0.827432
0	0159	0.963890	0.745236	0.316135
0	0160	0.339839	0.853056	0.452800
0	0161	0.209160	0.352798	0.958575
0	0162	0.339221	0.633051	0.458592
0	0163	0.209155	0.135329	0.956068
0	0164	0.706554	0.158627	0.544785
0	0165	0.829240	0.666669	0.061300
0	0166	0.709125	0.349142	0.544407
0	0167	0.833644	0.842536	0.041178
0	0168	0.280286	0.832930	0.279591
0	0169	0.270590	0.333316	0.787612
0	0170	0.281789	0.659961	0.285878
0	0171	0.265919	0.159893	0.783175
0	0172	0.767900	0.159508	0.719421
0	0173	0.791230	0.636897	0.245201
0	0174	0.770715	0.316859	0.711019
0	0175	0.781989	0.823705	0.220883
0	0176	0.303422	0.744561	0.548824
0	0177	0.247761	0.243580	0.052613
0	0178	0.743909	0.252448	0.418976
0	0179	0.801265	0.745243	0.912681
0	0180	0.217633	0.842916	0.517791
0	0181	0.330111	0.344862	0.028627
0	0182	0.218022	0.644663	0.525925
0	0183	0.329972	0.141170	0.028525
0	0184	0.825140	0.152474	0.466538
0	0185	0.718215	0.648144	0.963172
0	0186	0.829984	0.345430	0.472205
0	0187	0.716386	0.841791	0.959853
0	0188	0.136901	0.744395	0.570730
0	0189	0.409523	0.242553	0.070249
0	0190	0.912039	0.246876	0.418657
0	0191	0.633447	0.743968	0.909648
0	0192	0.098827	0.835104	0.439217
0	0193	0.445955	0.334530	0.940698

O	O194	0.100308	0.648824	0.445791
O	O195	0.444836	0.151343	0.937819
O	O196	0.938120	0.161337	0.561880
O	O197	0.602534	0.660439	0.053313
O	O198	0.943471	0.329274	0.564175
O	O199	0.597001	0.838492	0.037755
O	O200	0.151217	0.831822	0.258048
O	O201	0.398718	0.328901	0.755419
O	O202	0.153226	0.661094	0.265463
O	O203	0.394605	0.161368	0.755691
O	O204	0.893562	0.128546	0.742853
O	O205	0.650272	0.639413	0.235545
O	O206	0.895507	0.349641	0.746254
O	O207	0.651893	0.824843	0.214652
O	O208	0.225018	0.744626	0.161697
O	O209	0.319740	0.246649	0.659890
O	O210	0.845414	0.239505	0.821482
O	O211	0.713771	0.746223	0.341615
O	O212	0.721612	0.761960	0.606872
Al	Al213	0.719354	0.661325	0.300456
Si	Si214	0.447053	0.053707	0.190751
Si	Si215	0.096637	0.555242	0.693552
Si	Si216	0.450080	0.431390	0.191515
Si	Si217	0.093941	0.933978	0.686437
Si	Si218	0.595622	0.941368	0.810776
Si	Si219	0.946641	0.442905	0.319578
Si	Si220	0.593016	0.545085	0.824217
Si	Si221	0.944690	0.048111	0.320598
Si	Si222	0.338927	0.026921	0.342058
Si	Si223	0.202578	0.525861	0.846100
Si	Si224	0.341479	0.463620	0.341950
Si	Si225	0.200884	0.964681	0.839170
Si	Si226	0.702291	0.968790	0.651870
Si	Si227	0.843932	0.466520	0.153338
Si	Si228	0.707258	0.516820	0.680853
Si	Si229	0.838782	0.021441	0.161533
Si	Si230	0.298712	0.048578	0.560900
Si	Si231	0.243579	0.546276	0.064598
Si	Si232	0.298211	0.442636	0.559320
Si	Si233	0.243864	0.941035	0.055924
Si	Si234	0.740960	0.935538	0.439578
Si	Si235	0.800808	0.428258	0.944763
Si	Si236	0.747835	0.560196	0.466688
Si	Si237	0.794553	0.053728	0.949275

Si	Si238	0.143312	0.056571	0.549423
Si	Si239	0.398500	0.552022	0.052622
Si	Si240	0.143901	0.434087	0.551029
Si	Si241	0.397937	0.934735	0.047249
Si	Si242	0.895652	0.922662	0.452138
Si	Si243	0.645108	0.426880	0.962497
Si	Si244	0.901850	0.567178	0.456670
Si	Si245	0.640590	0.058549	0.960918
Si	Si246	0.096921	0.025551	0.333752
Si	Si247	0.444103	0.524087	0.835096
Si	Si248	0.098050	0.464460	0.335936
Si	Si249	0.445083	0.964861	0.831867
Si	Si250	0.947382	0.961272	0.659875
Si	Si251	0.596637	0.464861	0.171154
Si	Si252	0.950221	0.528791	0.663729
Si	Si253	0.594563	0.022096	0.172680
Si	Si254	0.218698	0.063014	0.208813
Si	Si255	0.320800	0.565201	0.711693
Si	Si256	0.219172	0.423173	0.213606
Si	Si257	0.321997	0.924903	0.709529
Si	Si258	0.819794	0.935479	0.791397
Si	Si259	0.723548	0.446133	0.301844
Si	Si260	0.828887	0.554116	0.808103
Si	Si261	0.720574	0.061553	0.297288
Si	Si262	0.447337	0.822279	0.187420
Si	Si263	0.096823	0.323908	0.696574
Si	Si264	0.447176	0.665617	0.193007
Si	Si265	0.095241	0.166429	0.695387
Si	Si266	0.593580	0.163937	0.804865
Si	Si267	0.956591	0.665581	0.299846
Si	Si268	0.596598	0.322637	0.807296
Si	Si269	0.953962	0.823939	0.295794
Si	Si270	0.341706	0.868412	0.334831
Si	Si271	0.207339	0.367411	0.840510
Si	Si272	0.342297	0.621643	0.339611
Si	Si273	0.204939	0.122842	0.837650
Si	Si274	0.707442	0.128413	0.656256
Si	Si275	0.845108	0.624346	0.161142
Si	Si276	0.710789	0.359872	0.663516
Si	Si277	0.838998	0.861393	0.157455
Si	Si278	0.294021	0.824119	0.541421
Si	Si279	0.253818	0.323575	0.048175
Si	Si280	0.294390	0.664794	0.546326
Si	Si281	0.253734	0.163680	0.046440

Si	Si282	0.749145	0.174131	0.445611
Si	Si283	0.795309	0.669416	0.953397
Si	Si284	0.752957	0.330085	0.447577
Si	Si285	0.793588	0.823218	0.941114
Si	Si286	0.141355	0.822056	0.539347
Si	Si287	0.406161	0.321006	0.043094
Si	Si288	0.141684	0.665754	0.545287
Si	Si289	0.406406	0.164439	0.041364
Si	Si290	0.902903	0.169920	0.454391
Si	Si291	0.641118	0.667626	0.948868
Si	Si292	0.906607	0.323522	0.457575
Si	Si293	0.639877	0.822149	0.938851
Si	Si294	0.097930	0.868078	0.328782
Si	Si295	0.450013	0.365550	0.829399
Si	Si296	0.100880	0.620729	0.332701
Si	Si297	0.447141	0.122939	0.825005
Si	Si298	0.951024	0.117783	0.661575
Si	Si299	0.593630	0.621661	0.159004
Si	Si300	0.951975	0.369795	0.667834
Si	Si301	0.594771	0.862492	0.152637
Si	Si302	0.220622	0.820837	0.201487
Si	Si303	0.326952	0.321688	0.703858
Si	Si304	0.222179	0.669663	0.206861
Si	Si305	0.323979	0.170959	0.701956
Si	Si306	0.829996	0.162450	0.794785
Si	Si307	0.830065	0.316132	0.792295
Si	Si308	0.715426	0.818553	0.287001
Zn	Zn309	0.690662	0.719694	0.495146

C₆H₁₀-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M1 in Blue) Total energy = -1954.30193768 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.753489	0.758487	0.648099
H	H2	0.619426	0.647739	0.622681
H	H3	0.586962	0.640995	0.450316
H	H4	0.482022	0.708276	0.430291
H	H5	0.547740	0.747725	0.371260
H	H6	0.473906	0.823741	0.479664
H	H7	0.558762	0.830417	0.503452
H	H8	0.463441	0.742958	0.622423
H	H9	0.493508	0.820867	0.662215
H	H10	0.555794	0.718864	0.731296
H	H11	0.605687	0.778698	0.674706
C	C12	0.591886	0.688912	0.590242
C	C13	0.573541	0.684802	0.493371
C	C14	0.528608	0.734421	0.444692
C	C15	0.516395	0.796559	0.508560
C	C16	0.505647	0.777048	0.617379
C	C17	0.566751	0.742200	0.659633
O	O18	0.515364	0.032896	0.217692
O	O19	0.022989	0.534717	0.714568
O	O20	0.524879	0.437328	0.210792
O	O21	0.009324	0.933689	0.707700
O	O22	0.513123	0.948984	0.789621
O	O23	0.018341	0.455396	0.292802
O	O24	0.516214	0.536175	0.791274
O	O25	0.017441	0.036501	0.294107
O	O26	0.397254	0.059252	0.288199
O	O27	0.141508	0.561185	0.780978
O	O28	0.403154	0.438319	0.275733
O	O29	0.127261	0.940329	0.785053
O	O30	0.627996	0.941710	0.707090
O	O31	0.901246	0.438533	0.217237
O	O32	0.638939	0.540404	0.737874
O	O33	0.898870	0.039288	0.220401
O	O34	0.437792	0.118340	0.122993
O	O35	0.098935	0.618468	0.615697
O	O36	0.437364	0.361918	0.122945
O	O37	0.105385	0.862699	0.629126
O	O38	0.600440	0.860757	0.855059
O	O39	0.937072	0.367907	0.373926
O	O40	0.596091	0.616803	0.885657
O	O41	0.930048	0.117614	0.374156
O	O42	0.409124	0.989393	0.123383

0	043	0.127723	0.489140	0.617869
0	044	0.432892	0.493326	0.100351
0	045	0.104134	0.993878	0.607125
0	046	0.619085	0.989638	0.890397
0	047	0.912185	0.497470	0.391879
0	048	0.605064	0.484830	0.911091
0	049	0.919254	0.986663	0.399427
0	050	0.336189	0.039560	0.458123
0	051	0.198896	0.542858	0.954196
0	052	0.340816	0.450208	0.446232
0	053	0.193879	0.951117	0.950973
0	054	0.690954	0.937957	0.540683
0	055	0.837233	0.425540	0.050512
0	056	0.703950	0.532869	0.571472
0	057	0.834443	0.033276	0.049804
0	058	0.336630	0.945019	0.317750
0	059	0.198828	0.446085	0.817579
0	060	0.329504	0.544879	0.307571
0	061	0.206150	0.044243	0.809566
0	062	0.706361	0.042520	0.660590
0	063	0.843311	0.544357	0.134252
0	064	0.716405	0.435582	0.705081
0	065	0.820879	0.935634	0.182974
0	066	0.266093	0.054867	0.295414
0	067	0.271762	0.554291	0.793277
0	068	0.272897	0.428502	0.281763
0	069	0.256941	0.925197	0.782519
0	070	0.758869	0.927526	0.708461
0	071	0.770826	0.448587	0.214533
0	072	0.767638	0.554931	0.738958
0	073	0.769916	0.055417	0.216274
0	074	0.307278	0.121016	0.606056
0	075	0.231675	0.619708	0.105429
0	076	0.320536	0.371231	0.599462
0	077	0.216321	0.869493	0.101053
0	078	0.707115	0.872338	0.374543
0	079	0.811169	0.356120	0.890801
0	080	0.717633	0.626816	0.436998
0	081	0.810505	0.116513	0.901437
0	082	0.216358	0.038512	0.534283
0	083	0.317356	0.532238	0.033968
0	084	0.219498	0.430915	0.508815
0	085	0.314986	0.935502	0.014797
0	086	0.810234	0.930165	0.462923

0	087	0.722615	0.441670	0.959423
0	088	0.823032	0.559122	0.501980
0	089	0.711949	0.053105	0.991581
0	090	0.317231	0.991218	0.637252
0	091	0.212572	0.489794	0.131782
0	092	0.301000	0.501160	0.618210
0	093	0.228350	0.999349	0.126533
0	094	0.718382	0.003426	0.378645
0	095	0.832406	0.486014	0.876198
0	096	0.735076	0.500861	0.386497
0	097	0.792640	0.987861	0.874958
0	098	0.127331	0.124453	0.601365
0	099	0.403651	0.623008	0.095322
0	0100	0.128545	0.357020	0.594628
0	0101	0.407361	0.858558	0.092570
0	0102	0.906665	0.854041	0.396032
0	0103	0.630045	0.354511	0.905647
0	0104	0.913417	0.629932	0.405091
0	0105	0.617569	0.122145	0.903669
0	0106	0.104707	0.058220	0.436447
0	0107	0.425119	0.557550	0.929280
0	0108	0.095954	0.434897	0.445646
0	0109	0.437571	0.940306	0.947090
0	0110	0.920512	0.916494	0.565743
0	0111	0.620222	0.416804	0.077524
0	0112	0.946105	0.557033	0.560790
0	0113	0.590500	0.048385	0.060491
0	0114	0.140193	0.055227	0.246490
0	0115	0.395414	0.545819	0.736914
0	0116	0.142792	0.422467	0.262664
0	0117	0.387268	0.923070	0.767370
0	0118	0.885018	0.948611	0.750428
0	0119	0.645912	0.451456	0.265112
0	0120	0.897694	0.558030	0.744971
0	0121	0.640863	0.058688	0.242526
0	0122	0.107409	0.943838	0.338358
0	0123	0.431344	0.440085	0.841612
0	0124	0.113980	0.541966	0.333695
0	0125	0.424100	0.043327	0.825343
0	0126	0.943580	0.036972	0.633595
0	0127	0.593832	0.538685	0.136826
0	0128	0.933964	0.444220	0.660139
0	0129	0.605823	0.940710	0.173338
0	0130	0.222286	0.130497	0.148362

0	0131	0.317714	0.630306	0.647177
0	0132	0.219407	0.356367	0.141678
0	0133	0.315403	0.857905	0.640447
0	0134	0.817156	0.860177	0.851755
0	0135	0.727100	0.370334	0.357689
0	0136	0.828772	0.619203	0.881611
0	0137	0.716380	0.133813	0.352723
0	0138	0.515493	0.847696	0.204952
0	0139	0.023536	0.353560	0.712372
0	0140	0.512669	0.631969	0.204573
0	0141	0.017487	0.133926	0.709541
0	0142	0.515691	0.133910	0.780779
0	0143	0.018969	0.628043	0.288613
0	0144	0.523444	0.352132	0.789870
0	0145	0.015637	0.856207	0.286265
0	0146	0.399367	0.830569	0.284667
0	0147	0.141381	0.329325	0.785764
0	0148	0.398222	0.655942	0.286756
0	0149	0.132353	0.153093	0.793827
0	0150	0.634406	0.148008	0.711329
0	0151	0.905051	0.649083	0.208884
0	0152	0.639894	0.328720	0.712250
0	0153	0.901165	0.831010	0.202807
0	0154	0.445145	0.740995	0.155062
0	0155	0.086868	0.241785	0.663645
0	0156	0.586721	0.240021	0.834554
0	0157	0.955953	0.742033	0.326148
0	0158	0.332536	0.846732	0.447909
0	0159	0.207479	0.348425	0.948774
0	0160	0.333427	0.635676	0.452393
0	0161	0.204271	0.134436	0.954061
0	0162	0.702700	0.150787	0.547750
0	0163	0.821352	0.665364	0.065610
0	0164	0.707934	0.353008	0.549664
0	0165	0.826227	0.839518	0.045353
0	0166	0.268792	0.836749	0.276414
0	0167	0.272202	0.341284	0.778583
0	0168	0.266975	0.659379	0.287533
0	0169	0.262816	0.161195	0.783274
0	0170	0.764423	0.151673	0.722101
0	0171	0.777945	0.632537	0.244926
0	0172	0.770723	0.316474	0.712122
0	0173	0.771818	0.816823	0.221778
0	0174	0.297429	0.742627	0.555108

O	O175	0.241961	0.242089	0.053305
O	O176	0.738084	0.250641	0.431186
O	O177	0.790995	0.742720	0.916761
O	O178	0.212166	0.841087	0.520532
O	O179	0.325860	0.341826	0.027449
O	O180	0.213831	0.641646	0.529199
O	O181	0.324727	0.140118	0.027328
O	O182	0.820961	0.150441	0.468783
O	O183	0.711938	0.642194	0.963104
O	O184	0.828017	0.342282	0.476332
O	O185	0.709115	0.841928	0.962784
O	O186	0.132102	0.741697	0.572081
O	O187	0.405164	0.240089	0.073700
O	O188	0.909135	0.243971	0.421009
O	O189	0.627611	0.741494	0.922353
O	O190	0.094942	0.830939	0.437327
O	O191	0.438882	0.324329	0.932755
O	O192	0.104176	0.657956	0.427680
O	O193	0.437733	0.153249	0.933301
O	O194	0.933821	0.158593	0.564138
O	O195	0.604082	0.661757	0.072315
O	O196	0.943730	0.329774	0.562260
O	O197	0.591325	0.839329	0.046779
O	O198	0.140465	0.830095	0.251522
O	O199	0.399417	0.329915	0.744082
O	O200	0.141168	0.653790	0.238568
O	O201	0.390678	0.158897	0.748535
O	O202	0.891230	0.129773	0.748071
O	O203	0.636425	0.633191	0.260098
O	O204	0.898234	0.332685	0.747588
O	O205	0.641652	0.818777	0.224952
O	O206	0.218021	0.744943	0.157675
O	O207	0.315954	0.246793	0.657551
O	O208	0.834073	0.234476	0.831938
O	O209	0.705780	0.741833	0.350137
O	O210	0.739990	0.777118	0.585155
Al	Al211	0.710281	0.656403	0.311343
Si	Si212	0.440233	0.050166	0.187491
Si	Si213	0.097780	0.550815	0.681493
Si	Si214	0.448784	0.433024	0.177323
Si	Si215	0.086934	0.932793	0.681843
Si	Si216	0.590109	0.935691	0.811916
Si	Si217	0.942290	0.439982	0.319821
Si	Si218	0.590188	0.544345	0.832949

Si	Si219	0.940733	0.045088	0.322693
Si	Si220	0.333875	0.024521	0.340197
Si	Si221	0.202820	0.525784	0.837048
Si	Si222	0.336687	0.465300	0.328146
Si	Si223	0.196119	0.965227	0.832691
Si	Si224	0.696474	0.962332	0.654383
Si	Si225	0.838252	0.465087	0.155374
Si	Si226	0.707043	0.515213	0.688557
Si	Si227	0.831225	0.015630	0.167373
Si	Si228	0.293878	0.047873	0.559290
Si	Si229	0.240235	0.546356	0.056876
Si	Si230	0.295636	0.438093	0.543781
Si	Si231	0.238361	0.938749	0.049025
Si	Si232	0.732610	0.935196	0.438805
Si	Si233	0.800611	0.427477	0.944065
Si	Si234	0.745464	0.554731	0.474027
Si	Si235	0.787844	0.047853	0.954433
Si	Si236	0.138407	0.053743	0.545088
Si	Si237	0.394670	0.551549	0.040116
Si	Si238	0.142947	0.428304	0.542171
Si	Si239	0.392043	0.931109	0.044644
Si	Si240	0.888938	0.921899	0.455558
Si	Si241	0.644881	0.424095	0.963518
Si	Si242	0.898809	0.560989	0.463898
Si	Si243	0.634881	0.053327	0.960870
Si	Si244	0.092116	0.023245	0.329309
Si	Si245	0.441949	0.519627	0.825784
Si	Si246	0.092719	0.463703	0.332981
Si	Si247	0.440437	0.964237	0.832091
Si	Si248	0.939257	0.958743	0.664477
Si	Si249	0.596519	0.461389	0.172318
Si	Si250	0.949825	0.523384	0.670624
Si	Si251	0.588394	0.019992	0.173608
Si	Si252	0.214267	0.059393	0.204048
Si	Si253	0.321177	0.557342	0.698909
Si	Si254	0.212159	0.424946	0.203995
Si	Si255	0.318801	0.925153	0.706505
Si	Si256	0.813604	0.931329	0.795462
Si	Si257	0.719936	0.442894	0.306014
Si	Si258	0.831615	0.554039	0.811256
Si	Si259	0.711448	0.062191	0.297441
Si	Si260	0.442050	0.819232	0.184058
Si	Si261	0.094696	0.320207	0.689165
Si	Si262	0.440617	0.662779	0.184679

Si	Si263	0.090727	0.163439	0.691867
Si	Si264	0.588685	0.161341	0.807575
Si	Si265	0.947966	0.662709	0.307286
Si	Si266	0.594865	0.318706	0.810970
Si	Si267	0.944816	0.820298	0.302725
Si	Si268	0.334002	0.864929	0.331023
Si	Si269	0.205182	0.366289	0.832117
Si	Si270	0.331985	0.623789	0.333364
Si	Si271	0.201236	0.123251	0.835177
Si	Si272	0.702105	0.122968	0.660468
Si	Si273	0.835263	0.622511	0.165721
Si	Si274	0.708463	0.358314	0.669592
Si	Si275	0.830019	0.855999	0.162822
Si	Si276	0.288749	0.821928	0.541168
Si	Si277	0.248969	0.321781	0.043052
Si	Si278	0.290233	0.662940	0.545475
Si	Si279	0.248471	0.162263	0.045437
Si	Si280	0.744603	0.171367	0.450133
Si	Si281	0.788364	0.666695	0.957066
Si	Si282	0.750438	0.328646	0.453956
Si	Si283	0.785906	0.820927	0.945277
Si	Si284	0.135832	0.819359	0.539297
Si	Si285	0.401848	0.317366	0.038900
Si	Si286	0.137204	0.664751	0.536313
Si	Si287	0.401324	0.162787	0.039303
Si	Si288	0.898796	0.167157	0.456481
Si	Si289	0.635102	0.665258	0.961922
Si	Si290	0.904433	0.320971	0.458179
Si	Si291	0.632452	0.820485	0.947484
Si	Si292	0.089776	0.865197	0.328121
Si	Si293	0.448133	0.361632	0.826717
Si	Si294	0.094647	0.620256	0.322211
Si	Si295	0.441854	0.122233	0.822209
Si	Si296	0.946060	0.115126	0.664114
Si	Si297	0.588133	0.616699	0.170582
Si	Si298	0.949685	0.365148	0.670344
Si	Si299	0.588754	0.861907	0.162362
Si	Si300	0.210881	0.821081	0.196822
Si	Si301	0.326863	0.322863	0.695103
Si	Si302	0.214431	0.668688	0.197161
Si	Si303	0.319176	0.170896	0.698775
Si	Si304	0.824867	0.157389	0.800112
Si	Si305	0.828606	0.310848	0.795303
Si	Si306	0.707371	0.813414	0.293099

Zn Zn307 0.695277 0.718534 0.505041

TS-C₆H₁₀-Dehydro-on-HydroxyO-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS1 in Blue)

Total energy = -1952.18110572 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.744824	0.722081	0.648010
H	H2	0.665823	0.758164	0.605799
H	H3	0.547060	0.744819	0.346317
H	H4	0.541515	0.631002	0.403524
H	H5	0.580352	0.612411	0.579862
H	H6	0.496047	0.626198	0.579051
H	H7	0.571919	0.694600	0.707062
H	H8	0.502628	0.731708	0.652494
H	H9	0.598796	0.807604	0.643005
H	H10	0.586782	0.832400	0.459927
H	H11	0.510981	0.813756	0.515030
C	C12	0.549652	0.734711	0.425346
C	C13	0.546011	0.670907	0.457732
C	C14	0.543360	0.651155	0.565566
C	C15	0.551672	0.711169	0.636127
C	C16	0.593957	0.766321	0.589855
C	C17	0.559330	0.792128	0.495999
O	O18	0.520801	0.036894	0.217049
O	O19	0.017932	0.545400	0.712948
O	O20	0.525441	0.435960	0.215716
O	O21	0.014053	0.933220	0.708590
O	O22	0.517328	0.949397	0.789087
O	O23	0.020793	0.456977	0.294437
O	O24	0.516035	0.537978	0.789074

0	025	0.020694	0.031822	0.296167
0	026	0.402215	0.058876	0.289437
0	027	0.134231	0.552301	0.793848
0	028	0.405300	0.431691	0.289926
0	029	0.131767	0.936473	0.788389
0	030	0.632349	0.952509	0.705956
0	031	0.904545	0.438327	0.214252
0	032	0.634815	0.522484	0.723738
0	033	0.904283	0.037968	0.215569
0	034	0.440297	0.121875	0.126323
0	035	0.109557	0.621884	0.631202
0	036	0.436243	0.359951	0.131030
0	037	0.110066	0.862212	0.629143
0	038	0.609179	0.863517	0.845935
0	039	0.939594	0.369782	0.374212
0	040	0.610283	0.615284	0.858196
0	041	0.934171	0.117584	0.368151
0	042	0.416246	0.992361	0.121174
0	043	0.120007	0.490354	0.621051
0	044	0.427213	0.491308	0.117056
0	045	0.110681	0.993742	0.612708
0	046	0.620676	0.991516	0.894213
0	047	0.911919	0.499615	0.387450
0	048	0.605376	0.485942	0.908857
0	049	0.916652	0.987536	0.396854
0	050	0.339940	0.037630	0.457880
0	051	0.199276	0.537989	0.960123
0	052	0.341260	0.450431	0.457078
0	053	0.198130	0.949893	0.954336
0	054	0.696409	0.935484	0.539976
0	055	0.838301	0.424132	0.047992
0	056	0.706845	0.539168	0.566661
0	057	0.838765	0.035784	0.046370
0	058	0.336746	0.946491	0.312904
0	059	0.209154	0.445635	0.816947
0	060	0.333026	0.540712	0.311488
0	061	0.208839	0.041792	0.810790
0	062	0.717833	0.044452	0.648557
0	063	0.845414	0.543383	0.130750
0	064	0.728834	0.434703	0.685118
0	065	0.823144	0.936826	0.176458
0	066	0.270770	0.058716	0.294988
0	067	0.264482	0.563170	0.793462
0	068	0.274138	0.424761	0.292633

0	069	0.261975	0.923611	0.786651
0	070	0.761486	0.927516	0.709193
0	071	0.773949	0.447485	0.212983
0	072	0.760145	0.556122	0.744387
0	073	0.775277	0.057043	0.214327
0	074	0.312992	0.118413	0.606576
0	075	0.230369	0.616299	0.110682
0	076	0.318466	0.372048	0.610010
0	077	0.223943	0.868885	0.104183
0	078	0.709039	0.871571	0.372053
0	079	0.807469	0.353633	0.889799
0	080	0.709138	0.624976	0.421438
0	081	0.817120	0.120525	0.899761
0	082	0.219680	0.040219	0.531918
0	083	0.319832	0.536007	0.029879
0	084	0.220016	0.437883	0.522385
0	085	0.319489	0.938934	0.018691
0	086	0.815732	0.917848	0.465634
0	087	0.721201	0.439640	0.962470
0	088	0.822131	0.569369	0.487317
0	089	0.716979	0.056823	0.985144
0	090	0.317795	0.988031	0.635865
0	091	0.221729	0.485764	0.136430
0	092	0.307540	0.502632	0.630452
0	093	0.229524	0.999256	0.130416
0	094	0.733400	0.000905	0.379801
0	095	0.829019	0.483855	0.873848
0	096	0.737250	0.498063	0.385442
0	097	0.798859	0.991775	0.870038
0	098	0.129848	0.124593	0.601862
0	099	0.408186	0.621685	0.099160
0	0100	0.128799	0.359055	0.598357
0	0101	0.412306	0.861339	0.095647
0	0102	0.917460	0.853807	0.391882
0	0103	0.628252	0.354825	0.902516
0	0104	0.919198	0.632566	0.394990
0	0105	0.620496	0.124712	0.899710
0	0106	0.105529	0.055741	0.440008
0	0107	0.435611	0.549200	0.941919
0	0108	0.099823	0.435249	0.445775
0	0109	0.440679	0.939996	0.945547
0	0110	0.928957	0.916094	0.561795
0	0111	0.615941	0.416401	0.074845
0	0112	0.943357	0.562524	0.554980

0	0113	0.598210	0.056153	0.062646
0	0114	0.143672	0.058584	0.251065
0	0115	0.392115	0.557572	0.756392
0	0116	0.144750	0.420410	0.261825
0	0117	0.391739	0.922412	0.764687
0	0118	0.888629	0.949307	0.743767
0	0119	0.648117	0.456275	0.258050
0	0120	0.890173	0.551624	0.734385
0	0121	0.647247	0.045197	0.246364
0	0122	0.115495	0.943843	0.336019
0	0123	0.429976	0.441253	0.828223
0	0124	0.119517	0.540690	0.330202
0	0125	0.427371	0.042838	0.822921
0	0126	0.951181	0.036646	0.629201
0	0127	0.587314	0.538303	0.131441
0	0128	0.943669	0.446301	0.643636
0	0129	0.600842	0.939649	0.153273
0	0130	0.225024	0.131233	0.147022
0	0131	0.317844	0.633916	0.648505
0	0132	0.225016	0.352903	0.147393
0	0133	0.317246	0.854979	0.642917
0	0134	0.822921	0.862875	0.852025
0	0135	0.723675	0.369386	0.351257
0	0136	0.831575	0.617156	0.878419
0	0137	0.715746	0.129194	0.353054
0	0138	0.522958	0.838467	0.198997
0	0139	0.021189	0.349052	0.710875
0	0140	0.520789	0.642104	0.199318
0	0141	0.018626	0.137680	0.706598
0	0142	0.517743	0.134796	0.777991
0	0143	0.026913	0.628892	0.283092
0	0144	0.522678	0.351195	0.785044
0	0145	0.024636	0.856559	0.279153
0	0146	0.409532	0.837596	0.290064
0	0147	0.137902	0.335504	0.791859
0	0148	0.409155	0.647498	0.293088
0	0149	0.133064	0.149399	0.795524
0	0150	0.636201	0.142013	0.705610
0	0151	0.914493	0.646111	0.197715
0	0152	0.640291	0.337297	0.707573
0	0153	0.908839	0.836748	0.197241
0	0154	0.437728	0.741399	0.160360
0	0155	0.094006	0.242443	0.667614
0	0156	0.591838	0.240822	0.821208

0	0157	0.962574	0.742790	0.312674
0	0158	0.337604	0.852246	0.450181
0	0159	0.206891	0.350921	0.954263
0	0160	0.338626	0.631841	0.454809
0	0161	0.207395	0.133039	0.953423
0	0162	0.707884	0.156834	0.546757
0	0163	0.825663	0.664876	0.062307
0	0164	0.708256	0.344830	0.542751
0	0165	0.830025	0.837784	0.043986
0	0166	0.279326	0.831820	0.276046
0	0167	0.268977	0.331833	0.783872
0	0168	0.279403	0.658974	0.283868
0	0169	0.263174	0.159110	0.780098
0	0170	0.764864	0.154934	0.725231
0	0171	0.789272	0.635036	0.247320
0	0172	0.769427	0.312239	0.710102
0	0173	0.781137	0.817334	0.225227
0	0174	0.301882	0.743058	0.545354
0	0175	0.245589	0.241852	0.048930
0	0176	0.741541	0.248613	0.415760
0	0177	0.799008	0.742475	0.911492
0	0178	0.216170	0.841766	0.518033
0	0179	0.327785	0.343233	0.024616
0	0180	0.217418	0.642293	0.523046
0	0181	0.328079	0.139477	0.026105
0	0182	0.823865	0.149112	0.460654
0	0183	0.716067	0.645364	0.961460
0	0184	0.827712	0.342327	0.465700
0	0185	0.713959	0.838710	0.958297
0	0186	0.136492	0.741964	0.569245
0	0187	0.407125	0.241221	0.067742
0	0188	0.910873	0.244051	0.415078
0	0189	0.632162	0.740850	0.904526
0	0190	0.098057	0.832233	0.437190
0	0191	0.444181	0.332799	0.937805
0	0192	0.100946	0.649584	0.438913
0	0193	0.442568	0.150793	0.934512
0	0194	0.936373	0.157756	0.557656
0	0195	0.597945	0.655823	0.045010
0	0196	0.940086	0.326821	0.561259
0	0197	0.594427	0.833516	0.035548
0	0198	0.150325	0.828615	0.256087
0	0199	0.397154	0.325296	0.752673
0	0200	0.151382	0.658048	0.256427

O	O201	0.391793	0.159496	0.752563
O	O202	0.891624	0.126715	0.738985
O	O203	0.649204	0.636573	0.225049
O	O204	0.894059	0.346260	0.744479
O	O205	0.651676	0.824296	0.210676
O	O206	0.224615	0.743166	0.157450
O	O207	0.317326	0.244876	0.655878
O	O208	0.844381	0.236464	0.821941
O	O209	0.706403	0.742097	0.340405
O	O210	0.725404	0.750857	0.597990
Al	Al211	0.715107	0.657886	0.297301
Si	Si212	0.445091	0.052719	0.188176
Si	Si213	0.095470	0.552464	0.688791
Si	Si214	0.448275	0.429857	0.188379
Si	Si215	0.091972	0.931506	0.684320
Si	Si216	0.594915	0.939532	0.810107
Si	Si217	0.944212	0.441455	0.318431
Si	Si218	0.592317	0.540451	0.821894
Si	Si219	0.943711	0.043795	0.320098
Si	Si220	0.337372	0.025473	0.339260
Si	Si221	0.201931	0.524616	0.841828
Si	Si222	0.338398	0.461724	0.338067
Si	Si223	0.200255	0.962874	0.835726
Si	Si224	0.702102	0.965061	0.651471
Si	Si225	0.840885	0.464135	0.152691
Si	Si226	0.708090	0.512865	0.679816
Si	Si227	0.835643	0.016676	0.163261
Si	Si228	0.297254	0.046176	0.558630
Si	Si229	0.242976	0.544199	0.060249
Si	Si230	0.296678	0.440549	0.555755
Si	Si231	0.242795	0.939272	0.052726
Si	Si232	0.739352	0.931109	0.438920
Si	Si233	0.798921	0.425373	0.943567
Si	Si234	0.744519	0.557903	0.464651
Si	Si235	0.793235	0.051337	0.950283
Si	Si236	0.141750	0.053518	0.546964
Si	Si237	0.397526	0.549511	0.047327
Si	Si238	0.142376	0.430922	0.547108
Si	Si239	0.396916	0.933136	0.045416
Si	Si240	0.894818	0.919296	0.453203
Si	Si241	0.642981	0.423824	0.962023
Si	Si242	0.899015	0.565744	0.454953
Si	Si243	0.639155	0.057185	0.959422
Si	Si244	0.096088	0.022494	0.330998

Si	Si245	0.443264	0.521038	0.829726
Si	Si246	0.095940	0.463133	0.332659
Si	Si247	0.444190	0.963826	0.830460
Si	Si248	0.945262	0.958705	0.661257
Si	Si249	0.594596	0.462100	0.169863
Si	Si250	0.948314	0.526136	0.662451
Si	Si251	0.592028	0.019308	0.169835
Si	Si252	0.217224	0.061156	0.205626
Si	Si253	0.320173	0.563406	0.707251
Si	Si254	0.216456	0.421648	0.209331
Si	Si255	0.321937	0.923057	0.707180
Si	Si256	0.818324	0.933007	0.793226
Si	Si257	0.720800	0.442927	0.301489
Si	Si258	0.827998	0.551649	0.808530
Si	Si259	0.717726	0.057543	0.297759
Si	Si260	0.445858	0.819666	0.185777
Si	Si261	0.095108	0.321307	0.692277
Si	Si262	0.444684	0.663027	0.187197
Si	Si263	0.093525	0.163623	0.692627
Si	Si264	0.591621	0.161209	0.801178
Si	Si265	0.955311	0.663111	0.297244
Si	Si266	0.595581	0.320643	0.804461
Si	Si267	0.953235	0.821822	0.295150
Si	Si268	0.340590	0.866967	0.332226
Si	Si269	0.205593	0.365964	0.836324
Si	Si270	0.339955	0.619655	0.335857
Si	Si271	0.203030	0.120866	0.834931
Si	Si272	0.706792	0.124352	0.656670
Si	Si273	0.842003	0.622029	0.161632
Si	Si274	0.711203	0.357014	0.661373
Si	Si275	0.835782	0.857330	0.159986
Si	Si276	0.292808	0.822723	0.539380
Si	Si277	0.251465	0.321873	0.044072
Si	Si278	0.293682	0.663249	0.542799
Si	Si279	0.251772	0.161909	0.043708
Si	Si280	0.747415	0.170657	0.444305
Si	Si281	0.793159	0.666842	0.953466
Si	Si282	0.750464	0.326290	0.444108
Si	Si283	0.791434	0.820262	0.942061
Si	Si284	0.140046	0.819749	0.538023
Si	Si285	0.403808	0.319522	0.039784
Si	Si286	0.140984	0.663776	0.540552
Si	Si287	0.404417	0.163155	0.038498
Si	Si288	0.901638	0.166852	0.449900

Si	Si289	0.639195	0.664234	0.943336
Si	Si290	0.904599	0.320788	0.453619
Si	Si291	0.637596	0.818794	0.936484
Si	Si292	0.097281	0.865235	0.326801
Si	Si293	0.448477	0.362622	0.825810
Si	Si294	0.099958	0.619252	0.327154
Si	Si295	0.444732	0.121839	0.822007
Si	Si296	0.949161	0.115089	0.658225
Si	Si297	0.590754	0.618408	0.152080
Si	Si298	0.949689	0.367029	0.664946
Si	Si299	0.592666	0.859378	0.149706
Si	Si300	0.219555	0.819082	0.198428
Si	Si301	0.325433	0.319636	0.700522
Si	Si302	0.221494	0.667997	0.201755
Si	Si303	0.321282	0.169331	0.698685
Si	Si304	0.829336	0.159246	0.795789
Si	Si305	0.828890	0.312781	0.791348
Si	Si306	0.712539	0.814621	0.287080
Zn	Zn307	0.670805	0.712097	0.484615

M-C₆H₉Zn-OH₂-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M2 in Blue) Total energy = -1953.75185020 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.768800	0.717531	0.565613
H	H2	0.727606	0.748242	0.651576
H	H3	0.560361	0.782727	0.436290
H	H4	0.505735	0.835631	0.568965
H	H5	0.581618	0.817081	0.621596
H	H6	0.453178	0.670835	0.724578
H	H7	0.497014	0.781210	0.744000

H	H8	0.505040	0.673231	0.411012
H	H9	0.451426	0.732480	0.463632
H	H10	0.518380	0.616523	0.571673
H	H11	0.434356	0.629781	0.553554
C	C12	0.552647	0.750078	0.500640
C	C13	0.537244	0.793407	0.591935
C	C14	0.477666	0.694412	0.662123
C	C15	0.502464	0.755813	0.673108
C	C16	0.495708	0.702272	0.478330
C	C17	0.480859	0.656042	0.566101
O	O18	0.488677	0.030714	0.211992
O	O19	0.995428	0.532255	0.709671
O	O20	0.499115	0.442726	0.206219
O	O21	0.987705	0.943620	0.706838
O	O22	0.495054	0.958099	0.790134
O	O23	0.991398	0.460270	0.291216
O	O24	0.487690	0.542466	0.793088
O	O25	0.997592	0.044293	0.292833
O	O26	0.371506	0.059191	0.283164
O	O27	0.111803	0.558431	0.785452
O	O28	0.377048	0.452807	0.268159
O	O29	0.109897	0.955705	0.765676
O	O30	0.612742	0.933428	0.717890
O	O31	0.876093	0.431271	0.213225
O	O32	0.609431	0.537536	0.731396
O	O33	0.873692	0.035670	0.239764
O	O34	0.412134	0.115854	0.116331
O	O35	0.074316	0.617723	0.619140
O	O36	0.409249	0.365677	0.127131
O	O37	0.078011	0.866991	0.626698
O	O38	0.572958	0.871289	0.880276
O	O39	0.914652	0.370136	0.376878
O	O40	0.575251	0.623469	0.871824
O	O41	0.910607	0.121669	0.379960
O	O42	0.379989	0.986889	0.121201
O	O43	0.104934	0.488280	0.620921
O	O44	0.409771	0.495939	0.087675
O	O45	0.074690	0.996905	0.585068
O	O46	0.602995	0.000623	0.884512
O	O47	0.880181	0.498102	0.381408
O	O48	0.578451	0.493102	0.911760
O	O49	0.912575	0.991078	0.416744
O	O50	0.306972	0.062785	0.450962
O	O51	0.176997	0.563478	0.952812

0	052	0.310001	0.448247	0.433776
0	053	0.176434	0.945847	0.931185
0	054	0.680198	0.926182	0.553258
0	055	0.811228	0.424486	0.045745
0	056	0.677494	0.533699	0.568750
0	057	0.809083	0.045188	0.072255
0	058	0.320922	0.947103	0.356977
0	059	0.166217	0.447968	0.857862
0	060	0.295556	0.551961	0.314267
0	061	0.194086	0.051308	0.815644
0	062	0.666157	0.043836	0.641890
0	063	0.826373	0.541790	0.133141
0	064	0.691158	0.435953	0.698607
0	065	0.792344	0.938428	0.185302
0	066	0.241635	0.040188	0.285285
0	067	0.242211	0.544072	0.786175
0	068	0.247755	0.435023	0.262015
0	069	0.238522	0.933742	0.759027
0	070	0.742747	0.950810	0.719858
0	071	0.746242	0.450440	0.210339
0	072	0.738706	0.555311	0.739612
0	073	0.744641	0.054626	0.242090
0	074	0.277137	0.131159	0.611891
0	075	0.210874	0.630387	0.113374
0	076	0.303669	0.375360	0.592183
0	077	0.182274	0.874041	0.091039
0	078	0.706594	0.866787	0.384733
0	079	0.778860	0.359775	0.883352
0	080	0.684420	0.623040	0.429861
0	081	0.798538	0.116393	0.911970
0	082	0.194413	0.038980	0.544559
0	083	0.290628	0.537046	0.041482
0	084	0.192669	0.423851	0.510681
0	085	0.293333	0.922483	0.009605
0	086	0.791563	0.953632	0.457478
0	087	0.697009	0.450127	0.957792
0	088	0.794740	0.563678	0.495486
0	089	0.690920	0.063402	0.994831
0	090	0.307085	0.002642	0.625371
0	091	0.178958	0.502059	0.126252
0	092	0.273731	0.504004	0.604174
0	093	0.211182	0.002843	0.101389
0	094	0.677466	0.996196	0.387540
0	095	0.808466	0.488595	0.874372

0	096	0.710148	0.496060	0.386840
0	097	0.776577	0.986197	0.903081
0	098	0.102861	0.126929	0.595002
0	099	0.379420	0.625824	0.097982
0	0100	0.090915	0.358790	0.585306
0	0101	0.396558	0.858246	0.081652
0	0102	0.880145	0.862184	0.404840
0	0103	0.606958	0.363618	0.897281
0	0104	0.892430	0.628748	0.409058
0	0105	0.591395	0.130549	0.915438
0	0106	0.095216	0.066105	0.421232
0	0107	0.392046	0.566066	0.923963
0	0108	0.071835	0.444823	0.441941
0	0109	0.413826	0.946665	0.940993
0	0110	0.889377	0.921281	0.579753
0	0111	0.594152	0.420424	0.073103
0	0112	0.916614	0.546162	0.556832
0	0113	0.569302	0.047438	0.061761
0	0114	0.117947	0.037708	0.229935
0	0115	0.366765	0.535810	0.734051
0	0116	0.116606	0.429073	0.258126
0	0117	0.369764	0.929251	0.757029
0	0118	0.867424	0.951275	0.770518
0	0119	0.620903	0.451322	0.261335
0	0120	0.869572	0.561573	0.740063
0	0121	0.613632	0.060589	0.246376
0	0122	0.075451	0.944749	0.353661
0	0123	0.410378	0.444006	0.858167
0	0124	0.085992	0.549339	0.324300
0	0125	0.402012	0.049620	0.819879
0	0126	0.910548	0.043128	0.644732
0	0127	0.572853	0.542313	0.136739
0	0128	0.902544	0.441482	0.675863
0	0129	0.582506	0.941323	0.176452
0	0130	0.197195	0.127625	0.152557
0	0131	0.292705	0.628579	0.654247
0	0132	0.186772	0.369042	0.120928
0	0133	0.301953	0.869758	0.617740
0	0134	0.787802	0.861466	0.847921
0	0135	0.701894	0.367643	0.348357
0	0136	0.800573	0.621768	0.878982
0	0137	0.683512	0.128418	0.375094
0	0138	0.492459	0.848136	0.215925
0	0139	0.993406	0.349338	0.717161

0	0140	0.488720	0.631800	0.205969
0	0141	0.996039	0.133882	0.708380
0	0142	0.493198	0.141542	0.784391
0	0143	0.995937	0.642920	0.289106
0	0144	0.496426	0.355063	0.791124
0	0145	0.989007	0.853924	0.294285
0	0146	0.370052	0.837848	0.272467
0	0147	0.115063	0.338584	0.776830
0	0148	0.375165	0.655335	0.291254
0	0149	0.112164	0.152680	0.789155
0	0150	0.614919	0.152188	0.724079
0	0151	0.879987	0.650140	0.212730
0	0152	0.610539	0.332433	0.704926
0	0153	0.873853	0.836791	0.210400
0	0154	0.422061	0.742110	0.160820
0	0155	0.064038	0.242925	0.664277
0	0156	0.564430	0.246799	0.838595
0	0157	0.918775	0.745879	0.337451
0	0158	0.299649	0.827081	0.431789
0	0159	0.187441	0.328333	0.934050
0	0160	0.309718	0.642941	0.459543
0	0161	0.177245	0.143564	0.958241
0	0162	0.686462	0.163441	0.565312
0	0163	0.797336	0.661975	0.066955
0	0164	0.680192	0.353560	0.541601
0	0165	0.807420	0.845870	0.042573
0	0166	0.241807	0.863758	0.263553
0	0167	0.243176	0.363331	0.763373
0	0168	0.244724	0.671264	0.296046
0	0169	0.242528	0.171189	0.794439
0	0170	0.743545	0.128714	0.735439
0	0171	0.754721	0.622815	0.245839
0	0172	0.741260	0.315843	0.704325
0	0173	0.743434	0.818541	0.207767
0	0174	0.272884	0.744844	0.576866
0	0175	0.215169	0.244379	0.076720
0	0176	0.715847	0.250290	0.426747
0	0177	0.768900	0.745080	0.923031
0	0178	0.188093	0.841228	0.530005
0	0179	0.299870	0.340408	0.029676
0	0180	0.189877	0.645372	0.535701
0	0181	0.298000	0.145489	0.029667
0	0182	0.797641	0.149639	0.466515
0	0183	0.685822	0.647277	0.967502

O	O184	0.801645	0.346246	0.471704
O	O185	0.686694	0.844450	0.970190
O	O186	0.105649	0.742785	0.580808
O	O187	0.382233	0.241392	0.079613
O	O188	0.882811	0.246822	0.422654
O	O189	0.604104	0.747100	0.920492
O	O190	0.073593	0.826660	0.438008
O	O191	0.414447	0.325116	0.937882
O	O192	0.080471	0.659546	0.433458
O	O193	0.409482	0.158823	0.931240
O	O194	0.908849	0.163501	0.568163
O	O195	0.570772	0.662413	0.060762
O	O196	0.914879	0.332690	0.564632
O	O197	0.574641	0.831242	0.067163
O	O198	0.114148	0.838430	0.251017
O	O199	0.371022	0.339138	0.752623
O	O200	0.119284	0.664805	0.244974
O	O201	0.368687	0.165934	0.743857
O	O202	0.871850	0.145448	0.755567
O	O203	0.614690	0.645012	0.245713
O	O204	0.868163	0.324312	0.748651
O	O205	0.617178	0.826418	0.254344
O	O206	0.198024	0.755544	0.165933
O	O207	0.288890	0.256092	0.665196
O	O208	0.791691	0.234426	0.834488
O	O209	0.694706	0.739963	0.346788
O	O210	0.726168	0.716256	0.597680
Al	Al211	0.688156	0.656910	0.305879
Si	Si212	0.413505	0.048243	0.182145
Si	Si213	0.071241	0.549133	0.682762
Si	Si214	0.423098	0.439410	0.172082
Si	Si215	0.063479	0.940743	0.670737
Si	Si216	0.570386	0.940957	0.819445
Si	Si217	0.916085	0.440019	0.316273
Si	Si218	0.563404	0.549285	0.828004
Si	Si219	0.922666	0.048440	0.332403
Si	Si220	0.310197	0.026957	0.343330
Si	Si221	0.174395	0.528129	0.844759
Si	Si222	0.307644	0.471929	0.319277
Si	Si223	0.179775	0.971584	0.817709
Si	Si224	0.675284	0.964345	0.659229
Si	Si225	0.814851	0.462774	0.151744
Si	Si226	0.679483	0.515595	0.685259
Si	Si227	0.805000	0.018392	0.185256

Si	Si228	0.271353	0.059171	0.558361
Si	Si229	0.214387	0.558570	0.058806
Si	Si230	0.269700	0.437742	0.535785
Si	Si231	0.216142	0.936175	0.033986
Si	Si232	0.713956	0.935632	0.444799
Si	Si233	0.773747	0.430608	0.940136
Si	Si234	0.717092	0.553755	0.469272
Si	Si235	0.768445	0.052896	0.969907
Si	Si236	0.116884	0.057557	0.536544
Si	Si237	0.368139	0.556534	0.038249
Si	Si238	0.115438	0.429305	0.539563
Si	Si239	0.370550	0.928824	0.038154
Si	Si240	0.868343	0.931749	0.464288
Si	Si241	0.619322	0.431599	0.960033
Si	Si242	0.870916	0.558786	0.459918
Si	Si243	0.613893	0.060365	0.964305
Si	Si244	0.071404	0.023277	0.324825
Si	Si245	0.414387	0.522225	0.827913
Si	Si246	0.066450	0.470798	0.328103
Si	Si247	0.420128	0.970886	0.826477
Si	Si248	0.913988	0.964847	0.675223
Si	Si249	0.571761	0.464640	0.169178
Si	Si250	0.920913	0.520367	0.671159
Si	Si251	0.563671	0.019993	0.174873
Si	Si252	0.192205	0.051610	0.192730
Si	Si253	0.293502	0.552569	0.695355
Si	Si254	0.182929	0.434115	0.191709
Si	Si255	0.303877	0.934182	0.689717
Si	Si256	0.793617	0.938174	0.810223
Si	Si257	0.695070	0.441751	0.301070
Si	Si258	0.804191	0.556350	0.808878
Si	Si259	0.680144	0.059606	0.312477
Si	Si260	0.420349	0.821210	0.182879
Si	Si261	0.065799	0.322199	0.685988
Si	Si262	0.416873	0.663777	0.188812
Si	Si263	0.068830	0.164288	0.689250
Si	Si264	0.565850	0.167818	0.815519
Si	Si265	0.921442	0.666918	0.311542
Si	Si266	0.569426	0.324571	0.808079
Si	Si267	0.915632	0.824481	0.311564
Si	Si268	0.307997	0.869242	0.330414
Si	Si269	0.178144	0.369897	0.832420
Si	Si270	0.306942	0.630165	0.340596
Si	Si271	0.180847	0.129574	0.839682

Si	Si272	0.678074	0.122080	0.667310
Si	Si273	0.812784	0.618854	0.166570
Si	Si274	0.680138	0.359484	0.661704
Si	Si275	0.804672	0.859946	0.161328
Si	Si276	0.265445	0.821067	0.539828
Si	Si277	0.222501	0.321036	0.041203
Si	Si278	0.266328	0.665838	0.555350
Si	Si279	0.221857	0.165618	0.053252
Si	Si280	0.721019	0.172730	0.457941
Si	Si281	0.763080	0.668149	0.959623
Si	Si282	0.724806	0.329159	0.447806
Si	Si283	0.762827	0.823732	0.947829
Si	Si284	0.111412	0.819636	0.543695
Si	Si285	0.376488	0.318523	0.043588
Si	Si286	0.112721	0.666207	0.542597
Si	Si287	0.375362	0.165337	0.039390
Si	Si288	0.874994	0.170143	0.459385
Si	Si289	0.608993	0.669624	0.956175
Si	Si290	0.878272	0.324033	0.458685
Si	Si291	0.609577	0.823378	0.959926
Si	Si292	0.063280	0.866002	0.333809
Si	Si293	0.422865	0.365818	0.834499
Si	Si294	0.070537	0.628787	0.323339
Si	Si295	0.418203	0.128894	0.820216
Si	Si296	0.921739	0.121521	0.669325
Si	Si297	0.563371	0.620931	0.164679
Si	Si298	0.919538	0.362285	0.676423
Si	Si299	0.566928	0.861795	0.178138
Si	Si300	0.184039	0.832664	0.194138
Si	Si301	0.301685	0.333282	0.694559
Si	Si302	0.192891	0.679367	0.204842
Si	Si303	0.294780	0.179957	0.703814
Si	Si304	0.801221	0.156476	0.808043
Si	Si305	0.795501	0.309899	0.792817
Si	Si306	0.690357	0.812867	0.298356
Zn	Zn307	0.638200	0.702424	0.502015

TS-C₆H₉ZnOH₂-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS2 in Blue)

Total energy = -1951.89755663 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'
_cell_length_a 20.357621
_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c		13.476578		
_cell_angle_alpha		90.000000		
_cell_angle_beta		90.000000		
_cell_angle_gamma		90.000000		
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'		
loop_				
_atom_site_type_symbol				
_atom_site_label				
_atom_site_fract_x				
_atom_site_fract_y				
_atom_site_fract_z				
H	H1	0.738972	0.748244	0.618882
H	H2	0.651111	0.751584	0.661636
H	H3	0.559994	0.784349	0.444171
H	H4	0.563203	0.833597	0.601335
H	H5	0.612014	0.770275	0.670614
H	H6	0.434633	0.682979	0.712334
H	H7	0.488643	0.791642	0.730914
H	H8	0.522654	0.658998	0.423409
H	H9	0.461157	0.716556	0.455871
H	H10	0.533446	0.623104	0.599039
H	H11	0.450971	0.616641	0.561963
C	C12	0.558211	0.747072	0.503655
C	C13	0.550484	0.780967	0.598929
C	C14	0.471682	0.698772	0.659247
C	C15	0.500789	0.758942	0.669311
C	C16	0.506592	0.692736	0.482469
C	C17	0.490250	0.652659	0.576288
O	O18	0.488630	0.030551	0.211642
O	O19	0.994698	0.532939	0.707454
O	O20	0.499159	0.443064	0.205840
O	O21	0.987608	0.943611	0.706613
O	O22	0.494569	0.958476	0.790078
O	O23	0.991226	0.460254	0.291344
O	O24	0.487424	0.544930	0.792436
O	O25	0.997327	0.044008	0.292614
O	O26	0.371747	0.059863	0.283514
O	O27	0.110690	0.558139	0.785922
O	O28	0.377153	0.453378	0.267956
O	O29	0.109518	0.956814	0.766345
O	O30	0.611640	0.932979	0.717008
O	O31	0.876607	0.430637	0.211491
O	O32	0.608127	0.534538	0.727533
O	O33	0.873561	0.035784	0.238753

0	034	0.412403	0.116470	0.116607
0	035	0.075195	0.618031	0.619156
0	036	0.409083	0.366093	0.127120
0	037	0.079005	0.867174	0.628123
0	038	0.571980	0.872338	0.881221
0	039	0.914156	0.369887	0.375890
0	040	0.578383	0.625142	0.862970
0	041	0.910486	0.121313	0.379975
0	042	0.379424	0.987717	0.121458
0	043	0.104951	0.488559	0.620952
0	044	0.409781	0.496273	0.087378
0	045	0.074803	0.996803	0.584997
0	046	0.603286	0.001564	0.882601
0	047	0.879188	0.497735	0.379794
0	048	0.578505	0.495511	0.911270
0	049	0.911756	0.990718	0.415715
0	050	0.306959	0.063269	0.451038
0	051	0.176977	0.564460	0.952491
0	052	0.310035	0.448692	0.433352
0	053	0.176500	0.945982	0.931336
0	054	0.678461	0.926711	0.552208
0	055	0.811019	0.423956	0.044100
0	056	0.677022	0.533945	0.565928
0	057	0.808584	0.043598	0.071409
0	058	0.321097	0.947695	0.356834
0	059	0.166497	0.448514	0.858955
0	060	0.295961	0.552635	0.314303
0	061	0.194556	0.051697	0.816363
0	062	0.666032	0.043571	0.643121
0	063	0.826663	0.541041	0.132027
0	064	0.691460	0.435154	0.694332
0	065	0.791207	0.938273	0.187513
0	066	0.241797	0.040731	0.285099
0	067	0.241279	0.544862	0.785103
0	068	0.247767	0.435986	0.261389
0	069	0.238005	0.934019	0.758682
0	070	0.742188	0.949034	0.718689
0	071	0.746685	0.449364	0.209169
0	072	0.737582	0.553948	0.738375
0	073	0.744705	0.055544	0.241525
0	074	0.277055	0.131668	0.611914
0	075	0.211774	0.630835	0.113310
0	076	0.303598	0.376009	0.591934
0	077	0.181676	0.874635	0.091764

0	078	0.706320	0.864939	0.387037
0	079	0.777563	0.360424	0.881081
0	080	0.681042	0.620859	0.422926
0	081	0.798795	0.117128	0.913208
0	082	0.194265	0.039531	0.544202
0	083	0.290422	0.536847	0.040971
0	084	0.192672	0.424594	0.510255
0	085	0.293091	0.922418	0.010637
0	086	0.791027	0.952872	0.457947
0	087	0.696698	0.450988	0.956982
0	088	0.793589	0.564891	0.491225
0	089	0.690576	0.064167	0.994660
0	090	0.306781	0.003107	0.625380
0	091	0.178492	0.502777	0.125932
0	092	0.273984	0.504723	0.603533
0	093	0.210918	0.003409	0.101363
0	094	0.677363	0.994151	0.384108
0	095	0.808260	0.489233	0.873772
0	096	0.710339	0.494289	0.385850
0	097	0.775189	0.987379	0.900486
0	098	0.102577	0.126966	0.595398
0	099	0.378676	0.625878	0.098434
0	0100	0.091458	0.359066	0.585633
0	0101	0.397317	0.859269	0.081554
0	0102	0.879974	0.861810	0.404656
0	0103	0.606181	0.365686	0.894658
0	0104	0.893512	0.628039	0.406680
0	0105	0.590324	0.130906	0.916372
0	0106	0.094688	0.066396	0.421408
0	0107	0.391875	0.566591	0.924031
0	0108	0.071748	0.444817	0.441931
0	0109	0.413204	0.947888	0.941103
0	0110	0.889508	0.921604	0.579364
0	0111	0.593216	0.421166	0.071069
0	0112	0.915104	0.545727	0.555121
0	0113	0.569009	0.046002	0.060794
0	0114	0.117898	0.038351	0.230229
0	0115	0.366365	0.536167	0.734571
0	0116	0.116589	0.429422	0.258029
0	0117	0.369327	0.929861	0.757385
0	0118	0.867016	0.952876	0.769480
0	0119	0.621250	0.450683	0.259415
0	0120	0.868755	0.561607	0.738745
0	0121	0.613667	0.060576	0.245174

0	0122	0.075783	0.944980	0.353416
0	0123	0.412082	0.444747	0.857753
0	0124	0.085874	0.549445	0.324603
0	0125	0.402000	0.050493	0.819131
0	0126	0.911497	0.043586	0.643522
0	0127	0.573022	0.542618	0.136970
0	0128	0.902340	0.441555	0.675001
0	0129	0.582434	0.940861	0.177288
0	0130	0.197086	0.128232	0.152746
0	0131	0.293346	0.629168	0.654161
0	0132	0.186937	0.369815	0.120410
0	0133	0.302153	0.870149	0.617906
0	0134	0.789458	0.862270	0.848986
0	0135	0.701363	0.366126	0.346075
0	0136	0.798754	0.622200	0.876403
0	0137	0.682819	0.126519	0.377141
0	0138	0.492941	0.847060	0.215919
0	0139	0.992840	0.349094	0.715790
0	0140	0.489032	0.632771	0.204307
0	0141	0.995761	0.134992	0.708639
0	0142	0.492975	0.142924	0.784247
0	0143	0.996842	0.643780	0.287475
0	0144	0.495833	0.354192	0.789075
0	0145	0.989152	0.854066	0.294822
0	0146	0.370393	0.838590	0.272268
0	0147	0.113887	0.339758	0.777893
0	0148	0.376287	0.655638	0.291841
0	0149	0.111951	0.152513	0.789590
0	0150	0.614913	0.152067	0.724979
0	0151	0.880844	0.649576	0.210593
0	0152	0.610208	0.332009	0.703341
0	0153	0.874226	0.837603	0.210063
0	0154	0.420975	0.742475	0.159768
0	0155	0.064995	0.243296	0.664622
0	0156	0.565270	0.247430	0.839281
0	0157	0.918787	0.745693	0.335505
0	0158	0.300129	0.827718	0.431761
0	0159	0.187504	0.328475	0.933691
0	0160	0.310775	0.643479	0.459728
0	0161	0.177386	0.144175	0.958432
0	0162	0.686852	0.163168	0.566349
0	0163	0.798425	0.661088	0.064487
0	0164	0.679259	0.351661	0.539397
0	0165	0.806552	0.846670	0.043444

0	0166	0.242082	0.864171	0.263441
0	0167	0.241960	0.363821	0.762118
0	0168	0.245920	0.672199	0.295838
0	0169	0.242181	0.171860	0.794211
0	0170	0.743352	0.128239	0.736897
0	0171	0.755335	0.623150	0.243233
0	0172	0.740816	0.314853	0.702567
0	0173	0.744125	0.817472	0.209480
0	0174	0.273681	0.745333	0.576755
0	0175	0.215353	0.244992	0.076914
0	0176	0.715392	0.248858	0.425069
0	0177	0.768973	0.745733	0.923905
0	0178	0.188431	0.841486	0.529708
0	0179	0.299953	0.340879	0.028975
0	0180	0.190520	0.645922	0.534989
0	0181	0.298073	0.145880	0.030255
0	0182	0.797549	0.148990	0.466433
0	0183	0.685256	0.648688	0.969150
0	0184	0.800881	0.345310	0.470035
0	0185	0.686674	0.845487	0.968316
0	0186	0.106316	0.743027	0.580865
0	0187	0.382298	0.241955	0.079411
0	0188	0.882534	0.246477	0.421639
0	0189	0.603622	0.748041	0.918740
0	0190	0.073430	0.827401	0.439142
0	0191	0.414728	0.325861	0.937745
0	0192	0.080805	0.659834	0.433297
0	0193	0.409370	0.159193	0.931389
0	0194	0.908578	0.164046	0.568060
0	0195	0.566501	0.659960	0.052338
0	0196	0.914026	0.332631	0.563628
0	0197	0.575655	0.830843	0.067337
0	0198	0.114457	0.838098	0.252299
0	0199	0.369933	0.340348	0.753430
0	0200	0.120417	0.664599	0.245380
0	0201	0.368388	0.166860	0.744036
0	0202	0.871577	0.145131	0.755526
0	0203	0.615807	0.649612	0.235124
0	0204	0.867651	0.324506	0.747763
0	0205	0.617509	0.826045	0.254869
0	0206	0.198380	0.755953	0.165825
0	0207	0.288702	0.256726	0.664896
0	0208	0.791624	0.234706	0.834162
0	0209	0.694032	0.738908	0.347765

O	O210	0.703030	0.716621	0.616352
Al	Al211	0.687593	0.655941	0.301100
Si	Si212	0.413513	0.048806	0.182307
Si	Si213	0.070802	0.549372	0.682406
Si	Si214	0.423141	0.439799	0.171871
Si	Si215	0.063516	0.941007	0.671182
Si	Si216	0.570029	0.941528	0.819227
Si	Si217	0.915724	0.439840	0.315338
Si	Si218	0.563941	0.549958	0.824745
Si	Si219	0.922321	0.048223	0.331840
Si	Si220	0.310281	0.027573	0.343321
Si	Si221	0.173842	0.528655	0.844751
Si	Si222	0.307726	0.472527	0.318912
Si	Si223	0.179623	0.972087	0.818055
Si	Si224	0.674721	0.963863	0.659101
Si	Si225	0.815128	0.462017	0.150292
Si	Si226	0.679121	0.514832	0.681869
Si	Si227	0.804634	0.018209	0.185093
Si	Si228	0.271153	0.059724	0.558281
Si	Si229	0.214334	0.559045	0.058498
Si	Si230	0.269676	0.438330	0.535349
Si	Si231	0.215850	0.936515	0.034493
Si	Si232	0.713581	0.934930	0.444582
Si	Si233	0.773347	0.431067	0.938703
Si	Si234	0.716053	0.553880	0.465901
Si	Si235	0.768040	0.053149	0.969325
Si	Si236	0.116617	0.057763	0.536574
Si	Si237	0.367844	0.556694	0.038222
Si	Si238	0.115457	0.429641	0.539538
Si	Si239	0.370322	0.929604	0.038505
Si	Si240	0.868028	0.931302	0.464046
Si	Si241	0.618904	0.433117	0.958435
Si	Si242	0.869937	0.558992	0.457783
Si	Si243	0.613645	0.060591	0.963888
Si	Si244	0.071224	0.023508	0.324833
Si	Si245	0.414663	0.523051	0.827913
Si	Si246	0.066242	0.470924	0.328148
Si	Si247	0.419717	0.971778	0.826520
Si	Si248	0.914086	0.965355	0.674534
Si	Si249	0.571733	0.464803	0.168174
Si	Si250	0.919997	0.520636	0.669578
Si	Si251	0.563574	0.019537	0.174438
Si	Si252	0.192108	0.052194	0.192839
Si	Si253	0.293239	0.553019	0.695201

Si	Si254	0.182775	0.434794	0.191355
Si	Si255	0.303503	0.934715	0.689750
Si	Si256	0.793476	0.938416	0.809236
Si	Si257	0.695284	0.440590	0.299599
Si	Si258	0.803122	0.556573	0.807037
Si	Si259	0.680009	0.058960	0.311707
Si	Si260	0.420408	0.821504	0.182505
Si	Si261	0.065646	0.322617	0.686044
Si	Si262	0.416829	0.664149	0.188277
Si	Si263	0.068825	0.164629	0.689594
Si	Si264	0.565788	0.168438	0.816063
Si	Si265	0.921930	0.666742	0.309701
Si	Si266	0.569290	0.324944	0.806674
Si	Si267	0.915737	0.824423	0.311342
Si	Si268	0.308234	0.869855	0.330246
Si	Si269	0.177591	0.370453	0.832569
Si	Si270	0.307768	0.630730	0.340686
Si	Si271	0.180839	0.129971	0.839956
Si	Si272	0.678091	0.121848	0.668365
Si	Si273	0.813622	0.618388	0.164341
Si	Si274	0.679844	0.358545	0.659338
Si	Si275	0.804572	0.860075	0.162134
Si	Si276	0.265752	0.821557	0.539650
Si	Si277	0.222583	0.321560	0.040905
Si	Si278	0.266865	0.666325	0.555087
Si	Si279	0.221917	0.166196	0.053532
Si	Si280	0.720824	0.171739	0.458358
Si	Si281	0.762748	0.668542	0.958348
Si	Si282	0.724186	0.327838	0.445729
Si	Si283	0.763001	0.824312	0.947535
Si	Si284	0.111732	0.819997	0.544280
Si	Si285	0.376552	0.319047	0.043267
Si	Si286	0.113193	0.666514	0.542310
Si	Si287	0.375419	0.165814	0.039640
Si	Si288	0.874800	0.169961	0.459083
Si	Si289	0.608783	0.670121	0.951766
Si	Si290	0.877696	0.323732	0.457526
Si	Si291	0.609736	0.823921	0.959139
Si	Si292	0.063349	0.866191	0.334428
Si	Si293	0.422930	0.366268	0.834059
Si	Si294	0.070940	0.629002	0.323117
Si	Si295	0.418074	0.129827	0.820088
Si	Si296	0.921681	0.121973	0.669098
Si	Si297	0.562778	0.621785	0.159354

Si	Si298	0.918964	0.362364	0.675309
Si	Si299	0.567306	0.861285	0.178154
Si	Si300	0.184054	0.832937	0.194571
Si	Si301	0.301053	0.333972	0.694338
Si	Si302	0.193721	0.679756	0.204866
Si	Si303	0.294500	0.180632	0.703720
Si	Si304	0.801230	0.156634	0.808663
Si	Si305	0.794898	0.310009	0.791496
Si	Si306	0.690520	0.812390	0.298937
Zn	Zn307	0.652271	0.710882	0.493755

C₆H₈-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M3 in Blue)

Total energy = -1953.15608577 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.750761	0.784989	0.631792
H	H2	0.606206	0.787522	0.677654
H	H3	0.524655	0.786819	0.634555
H	H4	0.616686	0.667688	0.667989
H	H5	0.540987	0.682801	0.724976
H	H6	0.511855	0.600504	0.596006
H	H7	0.519900	0.633618	0.420000
H	H8	0.581453	0.735452	0.372063
H	H9	0.610509	0.820328	0.496320
H	H10	0.488333	0.500877	0.467328
H	H11	0.514854	0.493934	0.431377
C	C12	0.572857	0.762165	0.626664
C	C13	0.567143	0.688224	0.654636
C	C14	0.535274	0.647075	0.574860
C	C15	0.539795	0.664702	0.478433

C	C16	0.574072	0.725422	0.450460
C	C17	0.593760	0.771264	0.520056
O	O18	0.521273	0.033338	0.217485
O	O19	0.021738	0.540248	0.719313
O	O20	0.526141	0.438696	0.219503
O	O21	0.013585	0.932398	0.707415
O	O22	0.516119	0.943346	0.789988
O	O23	0.019185	0.457865	0.297837
O	O24	0.517749	0.536526	0.796804
O	O25	0.022207	0.035129	0.295577
O	O26	0.404022	0.056860	0.293448
O	O27	0.140579	0.556895	0.789361
O	O28	0.402850	0.430145	0.280190
O	O29	0.129593	0.940363	0.791755
O	O30	0.630155	0.947454	0.703229
O	O31	0.901299	0.435525	0.224908
O	O32	0.638112	0.524616	0.739270
O	O33	0.905599	0.045897	0.215058
O	O34	0.440808	0.119273	0.129049
O	O35	0.104194	0.621470	0.627335
O	O36	0.444263	0.360858	0.123521
O	O37	0.113221	0.863207	0.634155
O	O38	0.611294	0.861304	0.848463
O	O39	0.941201	0.371516	0.386119
O	O40	0.606721	0.614266	0.876779
O	O41	0.936820	0.120080	0.372949
O	O42	0.414238	0.990278	0.125283
O	O43	0.124263	0.490793	0.620928
O	O44	0.432717	0.492218	0.110423
O	O45	0.110230	0.994344	0.613218
O	O46	0.619602	0.990591	0.889365
O	O47	0.912016	0.501103	0.394049
O	O48	0.603779	0.484009	0.920741
O	O49	0.917796	0.989837	0.392946
O	O50	0.340854	0.037855	0.461447
O	O51	0.200976	0.538534	0.958730
O	O52	0.342238	0.449035	0.452238
O	O53	0.198094	0.949288	0.956373
O	O54	0.695476	0.935060	0.538111
O	O55	0.835606	0.422283	0.058571
O	O56	0.706454	0.543587	0.579186
O	O57	0.840122	0.035316	0.045192
O	O58	0.338294	0.944771	0.319043
O	O59	0.205923	0.444755	0.817129

0	060	0.336242	0.541488	0.309546
0	061	0.210733	0.042558	0.814933
0	062	0.714021	0.043216	0.651941
0	063	0.850802	0.542845	0.134333
0	064	0.729738	0.436455	0.691199
0	065	0.833658	0.937981	0.179237
0	066	0.272545	0.056943	0.297322
0	067	0.271310	0.557327	0.796065
0	068	0.272217	0.427815	0.290680
0	069	0.259088	0.922757	0.786039
0	070	0.759585	0.925895	0.707627
0	071	0.771915	0.455744	0.221810
0	072	0.764197	0.555293	0.755195
0	073	0.775739	0.054252	0.212873
0	074	0.313637	0.118373	0.610647
0	075	0.231066	0.617610	0.108696
0	076	0.318317	0.369741	0.603987
0	077	0.222440	0.868877	0.107577
0	078	0.713945	0.873600	0.368871
0	079	0.809506	0.352483	0.897865
0	080	0.714781	0.630261	0.434466
0	081	0.811654	0.116974	0.897236
0	082	0.220387	0.040192	0.534595
0	083	0.319346	0.532490	0.038298
0	084	0.220125	0.435262	0.516404
0	085	0.319490	0.935761	0.019466
0	086	0.815734	0.925919	0.467122
0	087	0.722263	0.440176	0.964119
0	088	0.823479	0.567001	0.500536
0	089	0.716674	0.049091	0.987583
0	090	0.318220	0.988005	0.638936
0	091	0.215629	0.487595	0.136955
0	092	0.306063	0.500393	0.625515
0	093	0.231895	0.999194	0.131196
0	094	0.728309	0.004430	0.379865
0	095	0.833397	0.482164	0.882853
0	096	0.734085	0.501816	0.397805
0	097	0.800237	0.987331	0.870576
0	098	0.131033	0.125016	0.603477
0	099	0.406311	0.622071	0.102334
0	0100	0.130545	0.358802	0.601597
0	0101	0.413043	0.859523	0.096865
0	0102	0.912241	0.856426	0.387286
0	0103	0.628788	0.353529	0.913563

0	0104	0.918583	0.633416	0.407190
0	0105	0.624656	0.122948	0.901272
0	0106	0.106792	0.056909	0.440951
0	0107	0.429115	0.555274	0.938219
0	0108	0.097795	0.433682	0.448889
0	0109	0.441449	0.940131	0.949141
0	0110	0.930849	0.917556	0.557051
0	0111	0.621297	0.415981	0.086151
0	0112	0.945635	0.559998	0.563819
0	0113	0.596354	0.051103	0.060222
0	0114	0.145710	0.057611	0.252291
0	0115	0.396646	0.548534	0.746861
0	0116	0.142662	0.420717	0.264740
0	0117	0.389343	0.922398	0.770697
0	0118	0.887221	0.946132	0.738970
0	0119	0.647108	0.453534	0.272672
0	0120	0.894603	0.552353	0.745952
0	0121	0.647191	0.054109	0.242976
0	0122	0.114215	0.944366	0.338718
0	0123	0.433278	0.439632	0.844014
0	0124	0.118270	0.540698	0.337030
0	0125	0.431153	0.041960	0.824616
0	0126	0.950217	0.036656	0.631479
0	0127	0.595600	0.538904	0.141485
0	0128	0.941766	0.444486	0.655187
0	0129	0.608785	0.939917	0.165745
0	0130	0.227211	0.130869	0.150407
0	0131	0.320613	0.630650	0.650315
0	0132	0.222581	0.354377	0.148035
0	0133	0.318156	0.854896	0.644814
0	0134	0.821446	0.858511	0.845582
0	0135	0.730693	0.372457	0.360492
0	0136	0.834701	0.615155	0.891336
0	0137	0.721508	0.133252	0.348593
0	0138	0.523876	0.842487	0.202002
0	0139	0.025387	0.351223	0.719188
0	0140	0.518124	0.635638	0.206031
0	0141	0.020691	0.134968	0.710635
0	0142	0.520522	0.134823	0.782482
0	0143	0.024243	0.627628	0.290948
0	0144	0.525490	0.351099	0.791650
0	0145	0.024015	0.856228	0.284353
0	0146	0.409801	0.835215	0.290842
0	0147	0.143716	0.329780	0.792708

0	0148	0.405135	0.652980	0.294411
0	0149	0.135526	0.150603	0.796764
0	0150	0.638390	0.145367	0.707601
0	0151	0.911243	0.648178	0.209966
0	0152	0.643848	0.337530	0.718117
0	0153	0.911138	0.831171	0.195091
0	0154	0.444426	0.740976	0.160372
0	0155	0.092202	0.241963	0.668445
0	0156	0.594007	0.240460	0.829217
0	0157	0.962615	0.743085	0.323234
0	0158	0.338960	0.848040	0.452103
0	0159	0.211641	0.350559	0.954631
0	0160	0.336256	0.630854	0.455925
0	0161	0.207980	0.134324	0.956762
0	0162	0.706956	0.152990	0.543448
0	0163	0.824532	0.665453	0.072301
0	0164	0.709077	0.345372	0.550495
0	0165	0.835017	0.843628	0.038730
0	0166	0.279485	0.831499	0.277852
0	0167	0.274900	0.335855	0.784698
0	0168	0.274378	0.656453	0.287332
0	0169	0.265927	0.159670	0.785030
0	0170	0.768306	0.153720	0.717981
0	0171	0.785592	0.626943	0.251775
0	0172	0.773252	0.314859	0.715417
0	0173	0.781483	0.821074	0.215389
0	0174	0.302080	0.741371	0.552044
0	0175	0.246789	0.242113	0.054064
0	0176	0.743995	0.250434	0.422886
0	0177	0.801445	0.741237	0.919060
0	0178	0.217343	0.840575	0.519719
0	0179	0.329881	0.342955	0.035086
0	0180	0.216954	0.641193	0.531875
0	0181	0.329092	0.139627	0.027901
0	0182	0.825723	0.149922	0.465346
0	0183	0.717195	0.644732	0.967160
0	0184	0.830379	0.342177	0.480434
0	0185	0.716244	0.838086	0.961790
0	0186	0.136680	0.742483	0.573908
0	0187	0.408958	0.239580	0.074720
0	0188	0.912835	0.245516	0.422431
0	0189	0.631962	0.740435	0.915337
0	0190	0.098129	0.833685	0.442433
0	0191	0.440124	0.323324	0.933233

O	O192	0.104801	0.654402	0.436598
O	O193	0.443942	0.149852	0.938036
O	O194	0.937543	0.158482	0.563743
O	O195	0.602865	0.659013	0.062141
O	O196	0.943923	0.325474	0.571485
O	O197	0.596959	0.838272	0.040023
O	O198	0.150110	0.828762	0.261162
O	O199	0.401806	0.330599	0.744086
O	O200	0.147287	0.655029	0.249850
O	O201	0.394438	0.158591	0.755181
O	O202	0.894097	0.126830	0.745947
O	O203	0.644169	0.639862	0.247691
O	O204	0.899047	0.340964	0.756380
O	O205	0.651282	0.820092	0.216728
O	O206	0.223141	0.743181	0.160715
O	O207	0.320197	0.244750	0.659731
O	O208	0.841261	0.234145	0.828793
O	O209	0.717713	0.744166	0.342054
O	O210	0.752893	0.740222	0.605388
Al	Al211	0.716328	0.657782	0.307857
Si	Si212	0.445412	0.050180	0.190868
Si	Si213	0.097603	0.552192	0.688352
Si	Si214	0.450718	0.430623	0.183667
Si	Si215	0.091940	0.932645	0.686195
Si	Si216	0.594170	0.935972	0.809258
Si	Si217	0.943376	0.441825	0.326530
Si	Si218	0.592903	0.539865	0.835163
Si	Si219	0.945384	0.047848	0.319782
Si	Si220	0.338827	0.024042	0.343203
Si	Si221	0.204743	0.524117	0.840913
Si	Si222	0.338537	0.461962	0.333426
Si	Si223	0.199481	0.963696	0.838066
Si	Si224	0.699900	0.963716	0.650658
Si	Si225	0.840118	0.464733	0.160988
Si	Si226	0.710127	0.515047	0.690920
Si	Si227	0.839014	0.018234	0.162959
Si	Si228	0.297874	0.046353	0.561935
Si	Si229	0.241916	0.544255	0.061368
Si	Si230	0.296734	0.438407	0.549998
Si	Si231	0.242962	0.938236	0.054449
Si	Si232	0.739249	0.934739	0.437151
Si	Si233	0.800294	0.424486	0.950893
Si	Si234	0.745321	0.560941	0.477686
Si	Si235	0.792628	0.047224	0.950039

Si	Si236	0.142420	0.053993	0.548342
Si	Si237	0.396700	0.550509	0.047831
Si	Si238	0.143256	0.429889	0.547442
Si	Si239	0.396796	0.931448	0.047751
Si	Si240	0.894533	0.922690	0.450247
Si	Si241	0.644509	0.423014	0.971378
Si	Si242	0.899686	0.565402	0.465618
Si	Si243	0.639382	0.053609	0.958962
Si	Si244	0.096939	0.023414	0.332193
Si	Si245	0.443971	0.519467	0.832625
Si	Si246	0.094259	0.463155	0.336554
Si	Si247	0.444357	0.962368	0.833345
Si	Si248	0.945136	0.958007	0.659259
Si	Si249	0.597800	0.462177	0.179573
Si	Si250	0.950294	0.524274	0.671879
Si	Si251	0.593551	0.019435	0.171451
Si	Si252	0.219366	0.060335	0.207626
Si	Si253	0.323182	0.558574	0.704668
Si	Si254	0.213406	0.423140	0.209682
Si	Si255	0.320866	0.922776	0.709777
Si	Si256	0.817647	0.929942	0.790428
Si	Si257	0.721463	0.446213	0.313235
Si	Si258	0.831808	0.550912	0.818988
Si	Si259	0.718211	0.060976	0.295369
Si	Si260	0.447981	0.819385	0.187382
Si	Si261	0.097520	0.320388	0.695439
Si	Si262	0.444256	0.662699	0.189873
Si	Si263	0.094588	0.163341	0.694731
Si	Si264	0.594388	0.161424	0.805183
Si	Si265	0.953678	0.663405	0.308212
Si	Si266	0.598005	0.320393	0.813395
Si	Si267	0.952590	0.821000	0.297395
Si	Si268	0.341434	0.864869	0.334764
Si	Si269	0.209065	0.365194	0.836858
Si	Si270	0.337804	0.620314	0.336760
Si	Si271	0.204838	0.121811	0.838201
Si	Si272	0.706935	0.123858	0.655494
Si	Si273	0.841385	0.620357	0.169118
Si	Si274	0.713485	0.358564	0.668941
Si	Si275	0.840520	0.858566	0.156349
Si	Si276	0.293685	0.820979	0.542434
Si	Si277	0.252931	0.322086	0.048135
Si	Si278	0.293708	0.661602	0.547077
Si	Si279	0.252999	0.162237	0.047046

Si	Si280	0.749660	0.171624	0.445409
Si	Si281	0.794460	0.666068	0.961734
Si	Si282	0.753585	0.327684	0.453750
Si	Si283	0.793525	0.819784	0.942105
Si	Si284	0.141051	0.820135	0.542102
Si	Si285	0.405720	0.317093	0.041434
Si	Si286	0.140616	0.664683	0.542542
Si	Si287	0.405669	0.161979	0.042085
Si	Si288	0.903516	0.168130	0.455614
Si	Si289	0.640055	0.664380	0.956316
Si	Si290	0.907139	0.321388	0.464672
Si	Si291	0.639467	0.819018	0.942010
Si	Si292	0.096773	0.865549	0.331343
Si	Si293	0.450178	0.361269	0.827938
Si	Si294	0.098910	0.619191	0.328672
Si	Si295	0.447278	0.121239	0.825342
Si	Si296	0.950300	0.114658	0.663128
Si	Si297	0.591960	0.618521	0.166114
Si	Si298	0.952359	0.365615	0.675552
Si	Si299	0.595296	0.860416	0.155897
Si	Si300	0.218766	0.819036	0.201921
Si	Si301	0.328647	0.320947	0.698223
Si	Si302	0.219054	0.667199	0.201527
Si	Si303	0.323551	0.169253	0.702588
Si	Si304	0.828672	0.157622	0.796672
Si	Si305	0.830815	0.311553	0.799386
Si	Si306	0.716896	0.815438	0.285220
Zn	Zn307	0.698807	0.724901	0.498484

C₆H₈-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M1 in Green) Total energy = -1945.83321476 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.745085	0.784414	0.631170
H	H2	0.597918	0.781340	0.675383
H	H3	0.517236	0.777478	0.628845
H	H4	0.613413	0.662135	0.664414
H	H5	0.536120	0.673655	0.718428
H	H6	0.512607	0.591076	0.587297
H	H7	0.522482	0.625673	0.412202
H	H8	0.580564	0.730425	0.368112
H	H9	0.604227	0.815479	0.494631
C	C10	0.566535	0.754943	0.622646
C	C11	0.563336	0.680624	0.649344
C	C12	0.534601	0.638694	0.567778
C	C13	0.540146	0.657114	0.471843
C	C14	0.572342	0.719480	0.446028
C	C15	0.588847	0.765645	0.517011
O	O16	0.520779	0.033061	0.217673
O	O17	0.021253	0.541422	0.719633
O	O18	0.527043	0.437916	0.220272
O	O19	0.013279	0.932568	0.707911
O	O20	0.516006	0.943682	0.790586
O	O21	0.020847	0.456950	0.299202
O	O22	0.517758	0.536499	0.796509
O	O23	0.021785	0.034397	0.296060
O	O24	0.403409	0.057694	0.292936
O	O25	0.139140	0.556166	0.793719
O	O26	0.405372	0.432345	0.287666
O	O27	0.129369	0.940472	0.792047
O	O28	0.629958	0.948527	0.703593
O	O29	0.903594	0.436292	0.223129
O	O30	0.637637	0.523394	0.736807
O	O31	0.905157	0.045761	0.215561
O	O32	0.441162	0.119233	0.128035
O	O33	0.106051	0.622260	0.631401
O	O34	0.441522	0.359849	0.131630
O	O35	0.112835	0.863318	0.634555
O	O36	0.611350	0.861459	0.847673
O	O37	0.941024	0.370967	0.384572
O	O38	0.608183	0.614034	0.873702
O	O39	0.936819	0.119560	0.373704
O	O40	0.413693	0.990422	0.125405
O	O41	0.124590	0.491459	0.623655
O	O42	0.431512	0.491081	0.114384

0	043	0.109880	0.994481	0.613535
0	044	0.619511	0.990568	0.890308
0	045	0.913107	0.500774	0.393529
0	046	0.604548	0.484036	0.919376
0	047	0.917002	0.989326	0.393055
0	048	0.340614	0.038141	0.461577
0	049	0.200627	0.537992	0.962316
0	050	0.342645	0.450251	0.457012
0	051	0.197774	0.949262	0.956714
0	052	0.695465	0.934441	0.538840
0	053	0.836708	0.421870	0.057778
0	054	0.707361	0.543241	0.578138
0	055	0.839702	0.035416	0.045765
0	056	0.338436	0.945262	0.319058
0	057	0.206882	0.445191	0.819322
0	058	0.334802	0.541779	0.313007
0	059	0.210679	0.042525	0.815495
0	060	0.714642	0.043198	0.650978
0	061	0.850999	0.542678	0.133000
0	062	0.730059	0.435830	0.689798
0	063	0.832938	0.937991	0.179615
0	064	0.271944	0.057003	0.297836
0	065	0.269861	0.559271	0.798919
0	066	0.274480	0.426396	0.293686
0	067	0.258929	0.922890	0.786361
0	068	0.759231	0.925863	0.708669
0	069	0.773943	0.454521	0.221977
0	070	0.763430	0.554628	0.755446
0	071	0.775238	0.054291	0.213411
0	072	0.312545	0.119081	0.609889
0	073	0.231631	0.617067	0.112041
0	074	0.320460	0.371158	0.609510
0	075	0.221931	0.868952	0.107891
0	076	0.712847	0.872843	0.369600
0	077	0.809156	0.352406	0.897186
0	078	0.714744	0.629098	0.432463
0	079	0.812094	0.117759	0.898361
0	080	0.219973	0.040047	0.534431
0	081	0.319915	0.533125	0.037892
0	082	0.221085	0.435210	0.521382
0	083	0.319151	0.935557	0.019879
0	084	0.815520	0.924154	0.467069
0	085	0.722702	0.440191	0.964977
0	086	0.824159	0.567162	0.498881

0	087	0.716446	0.050039	0.987590
0	088	0.317933	0.988921	0.639669
0	089	0.218184	0.486987	0.140231
0	090	0.306475	0.501490	0.630202
0	091	0.231558	0.999297	0.131492
0	092	0.728743	0.003538	0.380363
0	093	0.833564	0.482165	0.882624
0	094	0.735316	0.500679	0.397275
0	095	0.799943	0.988255	0.870612
0	096	0.130851	0.125127	0.603841
0	097	0.407129	0.621311	0.104194
0	098	0.130325	0.359399	0.604217
0	099	0.412826	0.859532	0.097611
0	0100	0.913039	0.855797	0.388048
0	0101	0.629594	0.353601	0.912131
0	0102	0.919393	0.633164	0.405370
0	0103	0.623646	0.123109	0.901751
0	0104	0.106338	0.057066	0.441205
0	0105	0.431758	0.553358	0.941803
0	0106	0.099193	0.434477	0.451251
0	0107	0.441183	0.939810	0.949584
0	0108	0.930606	0.917569	0.557533
0	0109	0.620793	0.415801	0.084837
0	0110	0.946110	0.560609	0.562937
0	0111	0.596344	0.051390	0.061034
0	0112	0.145191	0.057791	0.252386
0	0113	0.395806	0.552259	0.751916
0	0114	0.144726	0.420309	0.267767
0	0115	0.389192	0.923022	0.770967
0	0116	0.886892	0.947159	0.738954
0	0117	0.648603	0.454620	0.269950
0	0118	0.893783	0.551857	0.744109
0	0119	0.646742	0.052639	0.244222
0	0120	0.114509	0.944447	0.339136
0	0121	0.432061	0.440149	0.840326
0	0122	0.119286	0.540626	0.337452
0	0123	0.431216	0.042224	0.826152
0	0124	0.950660	0.036886	0.631005
0	0125	0.594134	0.538654	0.139699
0	0126	0.942953	0.444851	0.653383
0	0127	0.607809	0.939419	0.164569
0	0128	0.227026	0.130973	0.150781
0	0129	0.319352	0.632064	0.652526
0	0130	0.224197	0.353837	0.150616

0	0131	0.318109	0.855784	0.644790
0	0132	0.822110	0.859431	0.846737
0	0133	0.729837	0.371683	0.359204
0	0134	0.834776	0.615276	0.889828
0	0135	0.720501	0.132341	0.349770
0	0136	0.523999	0.841198	0.201468
0	0137	0.024211	0.350321	0.719670
0	0138	0.519528	0.637267	0.205854
0	0139	0.020444	0.135639	0.710640
0	0140	0.520108	0.135217	0.781956
0	0141	0.025604	0.627785	0.290177
0	0142	0.525119	0.351279	0.792288
0	0143	0.024363	0.856374	0.284120
0	0144	0.410251	0.835913	0.291790
0	0145	0.142026	0.331265	0.795797
0	0146	0.407115	0.651218	0.296625
0	0147	0.135207	0.150171	0.797462
0	0148	0.638304	0.144540	0.708069
0	0149	0.912851	0.647455	0.207935
0	0150	0.642825	0.337932	0.716421
0	0151	0.911237	0.831799	0.195379
0	0152	0.442821	0.740741	0.161969
0	0153	0.093091	0.242248	0.670061
0	0154	0.594106	0.240581	0.828249
0	0155	0.963151	0.742903	0.321646
0	0156	0.338693	0.848617	0.452282
0	0157	0.210769	0.351220	0.957270
0	0158	0.337259	0.631816	0.458152
0	0159	0.207903	0.134383	0.957240
0	0160	0.707035	0.153727	0.544383
0	0161	0.825390	0.665344	0.071122
0	0162	0.708880	0.344641	0.549472
0	0163	0.834469	0.843247	0.039747
0	0164	0.279990	0.831910	0.277509
0	0165	0.273117	0.334715	0.786677
0	0166	0.276749	0.658392	0.288425
0	0167	0.265663	0.159597	0.785316
0	0168	0.768125	0.153524	0.719120
0	0169	0.787380	0.627510	0.251464
0	0170	0.771934	0.313824	0.715504
0	0171	0.781811	0.820813	0.217186
0	0172	0.301727	0.742196	0.552808
0	0173	0.246835	0.242189	0.054401
0	0174	0.744053	0.249929	0.421700

O	O175	0.802000	0.741502	0.918344
O	O176	0.217053	0.841298	0.520041
O	O177	0.329949	0.342953	0.034058
O	O178	0.217120	0.641712	0.530955
O	O179	0.329043	0.139697	0.028382
O	O180	0.825436	0.149398	0.465025
O	O181	0.717634	0.645152	0.966680
O	O182	0.830058	0.342178	0.478922
O	O183	0.716223	0.837904	0.961068
O	O184	0.136838	0.742739	0.574069
O	O185	0.408868	0.239802	0.074864
O	O186	0.912402	0.245176	0.421920
O	O187	0.632172	0.740334	0.913419
O	O188	0.097816	0.833808	0.442864
O	O189	0.443344	0.327531	0.939470
O	O190	0.103332	0.652854	0.439811
O	O191	0.443428	0.151125	0.937206
O	O192	0.936961	0.158827	0.564106
O	O193	0.602431	0.658341	0.059174
O	O194	0.943597	0.325671	0.570317
O	O195	0.596897	0.837525	0.039099
O	O196	0.150544	0.828659	0.262247
O	O197	0.400667	0.327384	0.751803
O	O198	0.149248	0.655926	0.254638
O	O199	0.393994	0.157952	0.754107
O	O200	0.893953	0.126226	0.746177
O	O201	0.646161	0.638859	0.243501
O	O202	0.897469	0.342413	0.754202
O	O203	0.651599	0.820019	0.215572
O	O204	0.223439	0.743236	0.161198
O	O205	0.319560	0.245077	0.660464
O	O206	0.842101	0.234410	0.827700
O	O207	0.716760	0.743475	0.341691
O	O208	0.747523	0.739202	0.606553
Al	Al209	0.717226	0.657305	0.306178
Si	Si210	0.445077	0.050372	0.190623
Si	Si211	0.097623	0.552699	0.691199
Si	Si212	0.450810	0.430455	0.188563
Si	Si213	0.091628	0.932783	0.686568
Si	Si214	0.594111	0.936329	0.809533
Si	Si215	0.944583	0.441599	0.325916
Si	Si216	0.593294	0.539530	0.833401
Si	Si217	0.944986	0.047362	0.320264
Si	Si218	0.338541	0.024502	0.343234

Si	Si219	0.204193	0.524423	0.844192
Si	Si220	0.339339	0.462520	0.338135
Si	Si221	0.199255	0.963705	0.838459
Si	Si222	0.699917	0.963775	0.650973
Si	Si223	0.841550	0.464475	0.160057
Si	Si224	0.710156	0.514371	0.689732
Si	Si225	0.838507	0.018226	0.163487
Si	Si226	0.297394	0.046724	0.561852
Si	Si227	0.242733	0.544007	0.063892
Si	Si228	0.297609	0.439284	0.555104
Si	Si229	0.242609	0.938253	0.054823
Si	Si230	0.739015	0.933722	0.437674
Si	Si231	0.800655	0.424371	0.950644
Si	Si232	0.746041	0.560318	0.476383
Si	Si233	0.792483	0.047896	0.950490
Si	Si234	0.142044	0.054096	0.548546
Si	Si235	0.397403	0.549696	0.050061
Si	Si236	0.143863	0.430456	0.550576
Si	Si237	0.396451	0.931334	0.048187
Si	Si238	0.894399	0.921994	0.450548
Si	Si239	0.644902	0.422978	0.970488
Si	Si240	0.900455	0.565406	0.464337
Si	Si241	0.639052	0.053916	0.959473
Si	Si242	0.096657	0.023367	0.332496
Si	Si243	0.444156	0.520015	0.833762
Si	Si244	0.095734	0.462986	0.338389
Si	Si245	0.444261	0.962580	0.834043
Si	Si246	0.944986	0.958350	0.659385
Si	Si247	0.597959	0.462160	0.178445
Si	Si248	0.950370	0.524675	0.670891
Si	Si249	0.593081	0.018943	0.171730
Si	Si250	0.218917	0.060429	0.207903
Si	Si251	0.322446	0.560548	0.708445
Si	Si252	0.215475	0.422478	0.212731
Si	Si253	0.320702	0.923460	0.710120
Si	Si254	0.817562	0.930577	0.790996
Si	Si255	0.722372	0.445680	0.311996
Si	Si256	0.831518	0.550680	0.818201
Si	Si257	0.717813	0.060149	0.296235
Si	Si258	0.447723	0.819218	0.188001
Si	Si259	0.096996	0.320692	0.697480
Si	Si260	0.444900	0.662476	0.191244
Si	Si261	0.094590	0.163472	0.695315
Si	Si262	0.594067	0.161427	0.805060

Si	Si263	0.954732	0.663173	0.306619
Si	Si264	0.597847	0.320559	0.812569
Si	Si265	0.953004	0.820990	0.297212
Si	Si266	0.341596	0.865385	0.334968
Si	Si267	0.208154	0.365593	0.839340
Si	Si268	0.338817	0.620708	0.339065
Si	Si269	0.204671	0.121728	0.838741
Si	Si270	0.707052	0.123767	0.655930
Si	Si271	0.842509	0.620281	0.167854
Si	Si272	0.712948	0.358065	0.667870
Si	Si273	0.840272	0.858552	0.157163
Si	Si274	0.293404	0.821742	0.542681
Si	Si275	0.253121	0.322164	0.049309
Si	Si276	0.293620	0.662409	0.548249
Si	Si277	0.252939	0.162309	0.047472
Si	Si278	0.749369	0.171287	0.445559
Si	Si279	0.794949	0.666240	0.960743
Si	Si280	0.753276	0.327232	0.452513
Si	Si281	0.793662	0.819910	0.942221
Si	Si282	0.140854	0.820415	0.542439
Si	Si283	0.405840	0.317860	0.044697
Si	Si284	0.140752	0.664693	0.544148
Si	Si285	0.405585	0.162316	0.041856
Si	Si286	0.903189	0.167885	0.455667
Si	Si287	0.640497	0.664244	0.954101
Si	Si288	0.906830	0.321230	0.463514
Si	Si289	0.639513	0.818794	0.940907
Si	Si290	0.096948	0.865635	0.331710
Si	Si291	0.450296	0.361661	0.830737
Si	Si292	0.099635	0.619092	0.330557
Si	Si293	0.446961	0.121549	0.825079
Si	Si294	0.950193	0.114812	0.663167
Si	Si295	0.592444	0.618424	0.163747
Si	Si296	0.951890	0.365878	0.674360
Si	Si297	0.595154	0.859774	0.154938
Si	Si298	0.218938	0.819123	0.202284
Si	Si299	0.328297	0.320513	0.702122
Si	Si300	0.220315	0.667659	0.203871
Si	Si301	0.322955	0.169339	0.702424
Si	Si302	0.828888	0.157706	0.797054
Si	Si303	0.830217	0.311653	0.798439
Si	Si304	0.716513	0.814998	0.285486
Zn	Zn305	0.695877	0.722768	0.497262

TS-C₆H₈-Dehydro-on-HydroxyO-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS1 in Green)

Total energy = -1943.86065690 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.740118	0.745865	0.652004
H	H2	0.585052	0.849733	0.515463
H	H3	0.481330	0.866109	0.603219
H	H4	0.418492	0.767452	0.668151
H	H5	0.473532	0.659717	0.691425
H	H6	0.583095	0.642310	0.617337
H	H7	0.599600	0.706034	0.702996
H	H8	0.576091	0.717395	0.478989
H	H9	0.658539	0.758306	0.587663
C	C10	0.561707	0.808351	0.553714
C	C11	0.503997	0.817090	0.601258
C	C12	0.469325	0.760935	0.645993
C	C13	0.499437	0.701780	0.659265
C	C14	0.571456	0.694239	0.635385
C	C15	0.593474	0.740389	0.549715
O	O16	0.518826	0.033839	0.211389
O	O17	0.015287	0.544871	0.713079
O	O18	0.524273	0.435749	0.213115
O	O19	0.011800	0.934314	0.703732
O	O20	0.515363	0.949137	0.786006
O	O21	0.020318	0.456798	0.292159
O	O22	0.513786	0.540208	0.790604
O	O23	0.019131	0.033170	0.292436
O	O24	0.400875	0.059251	0.284897
O	O25	0.131030	0.552147	0.795488
O	O26	0.404783	0.432337	0.289891

0	027	0.129417	0.938244	0.784087
0	028	0.629657	0.952127	0.699756
0	029	0.904144	0.437440	0.211340
0	030	0.631618	0.523454	0.721127
0	031	0.903009	0.042046	0.210618
0	032	0.439704	0.119391	0.119824
0	033	0.106369	0.623603	0.634871
0	034	0.434445	0.359291	0.131238
0	035	0.107855	0.863608	0.624973
0	036	0.608049	0.862854	0.841076
0	037	0.938624	0.370388	0.372951
0	038	0.610427	0.614504	0.859966
0	039	0.933320	0.119208	0.365535
0	040	0.412515	0.990329	0.118461
0	041	0.118672	0.492332	0.620479
0	042	0.424832	0.490311	0.115472
0	043	0.108287	0.995231	0.608126
0	044	0.619953	0.990800	0.887714
0	045	0.911358	0.500094	0.383577
0	046	0.603456	0.484592	0.905534
0	047	0.914033	0.989244	0.390534
0	048	0.339098	0.041414	0.455184
0	049	0.197045	0.538872	0.960892
0	050	0.340195	0.451274	0.456859
0	051	0.196150	0.951013	0.950128
0	052	0.693808	0.936560	0.533131
0	053	0.836692	0.422858	0.045721
0	054	0.704530	0.541881	0.564583
0	055	0.838245	0.036090	0.040700
0	056	0.337294	0.946791	0.315631
0	057	0.205426	0.445451	0.818770
0	058	0.333416	0.542117	0.311971
0	059	0.206128	0.043678	0.807621
0	060	0.714405	0.044909	0.642340
0	061	0.848310	0.542835	0.123628
0	062	0.725038	0.435281	0.679377
0	063	0.825776	0.937939	0.172492
0	064	0.269285	0.057287	0.292268
0	065	0.261363	0.562624	0.793353
0	066	0.273838	0.426235	0.291879
0	067	0.259608	0.925978	0.781811
0	068	0.759008	0.928643	0.702766
0	069	0.773992	0.451380	0.211168
0	070	0.757142	0.555189	0.743177

0	071	0.773399	0.056671	0.207471
0	072	0.308612	0.121269	0.603279
0	073	0.226982	0.616285	0.112882
0	074	0.316222	0.372973	0.609409
0	075	0.220068	0.867789	0.097920
0	076	0.708712	0.870051	0.367333
0	077	0.804861	0.353984	0.886448
0	078	0.713105	0.627356	0.418788
0	079	0.813691	0.119626	0.894000
0	080	0.218127	0.040304	0.528144
0	081	0.317734	0.537935	0.030795
0	082	0.218438	0.439561	0.520908
0	083	0.317458	0.935883	0.013775
0	084	0.813633	0.919914	0.460855
0	085	0.719831	0.440627	0.960753
0	086	0.821697	0.566840	0.487067
0	087	0.715501	0.054601	0.982194
0	088	0.317342	0.991098	0.632949
0	089	0.219915	0.485621	0.135824
0	090	0.305683	0.503285	0.630208
0	091	0.229517	0.997668	0.127171
0	092	0.729711	0.000020	0.370944
0	093	0.827962	0.483891	0.871786
0	094	0.733732	0.499433	0.383348
0	095	0.797482	0.990447	0.865799
0	096	0.129309	0.125862	0.598729
0	097	0.406353	0.621342	0.104679
0	098	0.128007	0.360874	0.598718
0	099	0.410615	0.859257	0.092615
0	0100	0.914414	0.855595	0.384927
0	0101	0.628928	0.354127	0.899294
0	0102	0.916870	0.632768	0.393573
0	0103	0.620797	0.123983	0.895286
0	0104	0.104332	0.058077	0.435931
0	0105	0.433705	0.552148	0.943846
0	0106	0.097848	0.436566	0.445841
0	0107	0.439009	0.938173	0.942720
0	0108	0.927695	0.917631	0.555071
0	0109	0.614194	0.415336	0.071609
0	0110	0.943029	0.561828	0.552697
0	0111	0.595552	0.054107	0.056399
0	0112	0.142416	0.055844	0.246796
0	0113	0.389235	0.555969	0.759024
0	0114	0.144439	0.420108	0.262998

0	0115	0.389495	0.923722	0.761492
0	0116	0.886165	0.948800	0.737247
0	0117	0.647506	0.454725	0.254150
0	0118	0.887078	0.552641	0.730746
0	0119	0.644871	0.050539	0.240196
0	0120	0.111550	0.943846	0.337931
0	0121	0.430707	0.441843	0.834842
0	0122	0.118576	0.541002	0.328525
0	0123	0.426460	0.042920	0.824005
0	0124	0.948613	0.037719	0.625282
0	0125	0.586893	0.537530	0.128461
0	0126	0.940513	0.446315	0.643346
0	0127	0.604761	0.939976	0.153937
0	0128	0.223393	0.129650	0.144623
0	0129	0.316455	0.634161	0.650881
0	0130	0.224545	0.353048	0.147762
0	0131	0.314727	0.857926	0.638054
0	0132	0.819651	0.861634	0.843400
0	0133	0.725403	0.370426	0.347678
0	0134	0.828368	0.617194	0.875561
0	0135	0.717212	0.129643	0.348178
0	0136	0.522024	0.841865	0.195790
0	0137	0.020164	0.350745	0.710353
0	0138	0.520005	0.639532	0.202298
0	0139	0.018217	0.137054	0.703993
0	0140	0.516883	0.134116	0.776074
0	0141	0.026117	0.629869	0.284431
0	0142	0.521657	0.351322	0.785356
0	0143	0.023130	0.855864	0.275133
0	0144	0.408777	0.837827	0.287471
0	0145	0.136791	0.333846	0.791166
0	0146	0.408631	0.650189	0.297294
0	0147	0.132749	0.152555	0.791962
0	0148	0.634670	0.143362	0.701140
0	0149	0.915017	0.645575	0.195714
0	0150	0.638345	0.336489	0.704042
0	0151	0.908366	0.835143	0.190610
0	0152	0.440234	0.741007	0.160803
0	0153	0.091090	0.243570	0.663414
0	0154	0.590520	0.240492	0.819367
0	0155	0.959757	0.743128	0.311728
0	0156	0.335149	0.848586	0.446040
0	0157	0.205119	0.349846	0.954581
0	0158	0.335522	0.632634	0.456464

0	0159	0.205293	0.134198	0.951482
0	0160	0.705667	0.157640	0.541166
0	0161	0.827283	0.665317	0.058753
0	0162	0.706129	0.344316	0.538417
0	0163	0.829966	0.840789	0.036331
0	0164	0.278780	0.834690	0.268976
0	0165	0.267886	0.333277	0.784298
0	0166	0.279147	0.660059	0.283485
0	0167	0.263439	0.160089	0.780503
0	0168	0.763892	0.154575	0.718164
0	0169	0.789579	0.631653	0.241436
0	0170	0.767968	0.313632	0.705798
0	0171	0.780204	0.819323	0.216417
0	0172	0.297716	0.743302	0.549222
0	0173	0.244069	0.241490	0.050492
0	0174	0.742006	0.249238	0.411199
0	0175	0.797502	0.742662	0.908741
0	0176	0.213518	0.841931	0.513935
0	0177	0.326488	0.342360	0.023668
0	0178	0.214974	0.641544	0.527246
0	0179	0.326304	0.139249	0.023847
0	0180	0.823303	0.149780	0.460038
0	0181	0.714776	0.646929	0.964857
0	0182	0.826990	0.343024	0.466157
0	0183	0.712482	0.838916	0.954773
0	0184	0.134243	0.742462	0.568871
0	0185	0.405469	0.240264	0.068901
0	0186	0.909678	0.245119	0.413137
0	0187	0.630162	0.740782	0.904676
0	0188	0.095342	0.830339	0.434025
0	0189	0.443090	0.330787	0.937892
0	0190	0.098819	0.647738	0.441916
0	0191	0.439786	0.153588	0.929948
0	0192	0.936343	0.159235	0.555331
0	0193	0.595972	0.656372	0.046276
0	0194	0.939892	0.327275	0.559938
0	0195	0.592945	0.836168	0.031830
0	0196	0.149453	0.830663	0.254176
0	0197	0.395945	0.328245	0.752332
0	0198	0.150822	0.659892	0.261041
0	0199	0.391462	0.157969	0.746383
0	0200	0.890957	0.128373	0.736485
0	0201	0.648459	0.634616	0.224943
0	0202	0.893011	0.344800	0.743194

O	O203	0.650289	0.821773	0.206158
O	O204	0.222633	0.743332	0.157056
O	O205	0.316715	0.246506	0.656377
O	O206	0.840339	0.236392	0.819642
O	O207	0.710322	0.741511	0.332589
O	O208	0.719106	0.768334	0.596664
Al	Al209	0.716331	0.656165	0.291551
Si	Si210	0.443186	0.050850	0.183352
Si	Si211	0.092904	0.553127	0.689973
Si	Si212	0.446825	0.429598	0.187467
Si	Si213	0.089803	0.932972	0.679864
Si	Si214	0.593130	0.938585	0.804485
Si	Si215	0.943699	0.441377	0.315649
Si	Si216	0.590533	0.540843	0.821065
Si	Si217	0.942211	0.045982	0.315561
Si	Si218	0.336676	0.026188	0.337259
Si	Si219	0.198966	0.524584	0.842860
Si	Si220	0.338052	0.462952	0.337898
Si	Si221	0.197869	0.964642	0.831670
Si	Si222	0.699148	0.965411	0.645134
Si	Si223	0.841087	0.464197	0.149158
Si	Si224	0.704783	0.513580	0.676964
Si	Si225	0.835341	0.018057	0.157934
Si	Si226	0.295491	0.048563	0.555284
Si	Si227	0.240750	0.544930	0.060993
Si	Si228	0.295049	0.441571	0.554941
Si	Si229	0.240832	0.938141	0.047932
Si	Si230	0.737165	0.931548	0.432751
Si	Si231	0.797323	0.425430	0.941211
Si	Si232	0.743980	0.558102	0.463337
Si	Si233	0.791463	0.050297	0.945496
Si	Si234	0.140357	0.054853	0.543086
Si	Si235	0.395505	0.550516	0.049230
Si	Si236	0.140955	0.432640	0.546804
Si	Si237	0.394738	0.930842	0.042034
Si	Si238	0.892659	0.921066	0.447083
Si	Si239	0.641861	0.423314	0.959226
Si	Si240	0.898393	0.565136	0.453008
Si	Si241	0.637919	0.055759	0.954426
Si	Si242	0.094169	0.022744	0.328466
Si	Si243	0.441669	0.521952	0.832845
Si	Si244	0.095099	0.463428	0.332047
Si	Si245	0.442550	0.963605	0.828393
Si	Si246	0.943143	0.959488	0.655708

Si	Si247	0.593469	0.461200	0.166799
Si	Si248	0.946060	0.526151	0.661050
Si	Si249	0.591072	0.019452	0.165418
Si	Si250	0.216175	0.059297	0.202447
Si	Si251	0.317912	0.563195	0.708485
Si	Si252	0.215802	0.421882	0.209417
Si	Si253	0.320000	0.925488	0.703188
Si	Si254	0.815839	0.932703	0.786740
Si	Si255	0.720278	0.443937	0.298446
Si	Si256	0.825433	0.551552	0.806058
Si	Si257	0.716138	0.058661	0.291213
Si	Si258	0.445688	0.819796	0.183923
Si	Si259	0.093724	0.322029	0.691100
Si	Si260	0.444568	0.663013	0.190877
Si	Si261	0.092499	0.164804	0.689193
Si	Si262	0.590711	0.161033	0.798029
Si	Si263	0.954116	0.663310	0.296529
Si	Si264	0.594606	0.320249	0.802268
Si	Si265	0.951400	0.821879	0.290506
Si	Si266	0.339793	0.866827	0.329497
Si	Si267	0.203636	0.365614	0.836819
Si	Si268	0.339190	0.621090	0.337623
Si	Si269	0.201790	0.122683	0.832803
Si	Si270	0.704668	0.124869	0.650997
Si	Si271	0.843491	0.620980	0.156641
Si	Si272	0.708807	0.357139	0.657036
Si	Si273	0.836228	0.858575	0.152935
Si	Si274	0.289938	0.822719	0.536857
Si	Si275	0.250186	0.321442	0.044350
Si	Si276	0.291251	0.663380	0.545564
Si	Si277	0.250083	0.161671	0.042314
Si	Si278	0.747133	0.171276	0.440395
Si	Si279	0.791846	0.667331	0.951886
Si	Si280	0.750207	0.326737	0.441180
Si	Si281	0.789795	0.820888	0.936628
Si	Si282	0.137591	0.819770	0.535166
Si	Si283	0.402410	0.318503	0.039961
Si	Si284	0.138660	0.663802	0.543137
Si	Si285	0.402714	0.162873	0.035521
Si	Si286	0.900942	0.167952	0.448042
Si	Si287	0.637681	0.664527	0.944818
Si	Si288	0.903836	0.321567	0.452718
Si	Si289	0.635878	0.819328	0.933225
Si	Si290	0.095147	0.865124	0.324832

Si	Si291	0.447782	0.363044	0.827408
Si	Si292	0.098952	0.619565	0.329011
Si	Si293	0.443516	0.121916	0.819195
Si	Si294	0.948258	0.115975	0.655591
Si	Si295	0.589422	0.617303	0.152303
Si	Si296	0.948351	0.367153	0.664166
Si	Si297	0.592305	0.860264	0.146840
Si	Si298	0.217805	0.819980	0.194703
Si	Si299	0.324189	0.321347	0.700679
Si	Si300	0.220084	0.668728	0.203324
Si	Si301	0.320055	0.170423	0.696700
Si	Si302	0.827040	0.159250	0.791246
Si	Si303	0.826569	0.312874	0.788416
Si	Si304	0.712648	0.814875	0.279907
Zn	Zn305	0.687700	0.717181	0.477022

M-C₆H₇Zn-OH₂-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M2 in Green) Total energy = -1945.44714981 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.773322	0.728310	0.603661
H	H2	0.543664	0.808881	0.397568
H	H3	0.492337	0.862992	0.541775
H	H4	0.492718	0.804363	0.706706
H	H5	0.508924	0.682721	0.714072
H	H6	0.473964	0.659076	0.518938
H	H7	0.546659	0.622452	0.563671
H	H8	0.559265	0.687255	0.399515
H	H9	0.728495	0.789310	0.627906
C	C10	0.536383	0.781329	0.466159
C	C11	0.508653	0.811477	0.546040

C	C12	0.504279	0.776235	0.640075
C	C13	0.513659	0.709513	0.644411
C	C14	0.523177	0.670641	0.549652
C	C15	0.560395	0.711805	0.472054
O	O16	0.516865	0.034681	0.217460
O	O17	0.019465	0.539704	0.715389
O	O18	0.527395	0.436016	0.211816
O	O19	0.009059	0.935122	0.705185
O	O20	0.513565	0.945204	0.787624
O	O21	0.022659	0.455787	0.295084
O	O22	0.515683	0.538824	0.791576
O	O23	0.017379	0.034886	0.294293
O	O24	0.397655	0.060428	0.285432
O	O25	0.135008	0.554508	0.796473
O	O26	0.408637	0.436293	0.290773
O	O27	0.126848	0.939889	0.785157
O	O28	0.627817	0.952548	0.702490
O	O29	0.907642	0.443336	0.209522
O	O30	0.635378	0.536025	0.725276
O	O31	0.900370	0.045654	0.215176
O	O32	0.439138	0.117814	0.119179
O	O33	0.105446	0.623737	0.635660
O	O34	0.435327	0.358659	0.136263
O	O35	0.105518	0.865242	0.625532
O	O36	0.609926	0.863706	0.843900
O	O37	0.936837	0.368797	0.365598
O	O38	0.603599	0.618465	0.871939
O	O39	0.932490	0.119177	0.373775
O	O40	0.412524	0.988305	0.122744
O	O41	0.125559	0.493324	0.622495
O	O42	0.428281	0.489168	0.111906
O	O43	0.104932	0.997021	0.609478
O	O44	0.615657	0.992450	0.890241
O	O45	0.913543	0.498197	0.387698
O	O46	0.608289	0.486939	0.904871
O	O47	0.913477	0.988756	0.391991
O	O48	0.336838	0.040110	0.456240
O	O49	0.199667	0.537997	0.962696
O	O50	0.343131	0.451309	0.457600
O	O51	0.194569	0.950732	0.950809
O	O52	0.692265	0.932999	0.537219
O	O53	0.840434	0.427697	0.045317
O	O54	0.707534	0.535339	0.565816
O	O55	0.835069	0.034852	0.045323

0	056	0.335753	0.946877	0.314595
0	057	0.206127	0.445590	0.819125
0	058	0.332996	0.542900	0.313481
0	059	0.205602	0.043917	0.809215
0	060	0.714411	0.043322	0.644711
0	061	0.843823	0.546445	0.129174
0	062	0.721719	0.437698	0.697800
0	063	0.827391	0.938071	0.179808
0	064	0.266370	0.056947	0.294150
0	065	0.265613	0.561289	0.796589
0	066	0.277930	0.425160	0.291537
0	067	0.256700	0.925336	0.781388
0	068	0.756393	0.925411	0.706099
0	069	0.776647	0.447789	0.212387
0	070	0.762711	0.559501	0.740912
0	071	0.770665	0.054866	0.213239
0	072	0.307552	0.121380	0.603339
0	073	0.227092	0.617192	0.113450
0	074	0.320233	0.373281	0.611533
0	075	0.220304	0.868594	0.099420
0	076	0.705972	0.876208	0.362876
0	077	0.813049	0.356883	0.887291
0	078	0.716575	0.629349	0.431010
0	079	0.810101	0.117531	0.897231
0	080	0.216446	0.039613	0.531548
0	081	0.319635	0.538981	0.035540
0	082	0.221463	0.436536	0.519763
0	083	0.316298	0.938384	0.014347
0	084	0.810645	0.922731	0.460622
0	085	0.723815	0.440768	0.958804
0	086	0.824795	0.565111	0.493748
0	087	0.712383	0.052900	0.987578
0	088	0.316564	0.991424	0.635438
0	089	0.221361	0.486681	0.139333
0	090	0.305816	0.503503	0.629768
0	091	0.227352	0.998706	0.127325
0	092	0.724165	0.006370	0.382199
0	093	0.831330	0.486772	0.870150
0	094	0.738295	0.503109	0.380897
0	095	0.793010	0.988880	0.869861
0	096	0.128601	0.127268	0.599087
0	097	0.410657	0.620693	0.106548
0	098	0.130546	0.361093	0.602057
0	099	0.406105	0.857651	0.092812

0	0100	0.911294	0.854872	0.390767
0	0101	0.630495	0.355736	0.900917
0	0102	0.919238	0.630758	0.398269
0	0103	0.619240	0.125073	0.901984
0	0104	0.103776	0.059029	0.436589
0	0105	0.433221	0.553843	0.941962
0	0106	0.099275	0.437104	0.449980
0	0107	0.438657	0.938151	0.946207
0	0108	0.923088	0.919112	0.558871
0	0109	0.618592	0.418649	0.071926
0	0110	0.946829	0.558471	0.556186
0	0111	0.592553	0.053586	0.061284
0	0112	0.140141	0.056818	0.246661
0	0113	0.392329	0.555884	0.754658
0	0114	0.147635	0.421152	0.268502
0	0115	0.386989	0.924672	0.766720
0	0116	0.883210	0.951015	0.740736
0	0117	0.650160	0.455395	0.256205
0	0118	0.892762	0.560369	0.736166
0	0119	0.642436	0.055773	0.245205
0	0120	0.109596	0.944768	0.338536
0	0121	0.430489	0.442202	0.836185
0	0122	0.119051	0.541790	0.332786
0	0123	0.428734	0.042878	0.827125
0	0124	0.945904	0.039346	0.628881
0	0125	0.589905	0.539964	0.132557
0	0126	0.934173	0.446448	0.657850
0	0127	0.605474	0.942050	0.164730
0	0128	0.222543	0.130453	0.146021
0	0129	0.316115	0.634207	0.651528
0	0130	0.224409	0.353777	0.149294
0	0131	0.315814	0.858006	0.640579
0	0132	0.819245	0.861073	0.845802
0	0133	0.727102	0.372844	0.353928
0	0134	0.830222	0.619683	0.881346
0	0135	0.718017	0.135115	0.348754
0	0136	0.517934	0.846877	0.196126
0	0137	0.021719	0.354210	0.711394
0	0138	0.521911	0.640102	0.209964
0	0139	0.018819	0.136667	0.706930
0	0140	0.517617	0.135207	0.778419
0	0141	0.026528	0.630240	0.285237
0	0142	0.521984	0.351720	0.789530
0	0143	0.019737	0.856939	0.280756

0	0144	0.404569	0.836142	0.287253
0	0145	0.137174	0.333734	0.794257
0	0146	0.408883	0.650696	0.299051
0	0147	0.133809	0.153742	0.792368
0	0148	0.636607	0.142379	0.708129
0	0149	0.914418	0.646879	0.200077
0	0150	0.637563	0.336172	0.705781
0	0151	0.905068	0.831908	0.197327
0	0152	0.442472	0.740916	0.162366
0	0153	0.089651	0.244635	0.665819
0	0154	0.591437	0.241176	0.823538
0	0155	0.959737	0.742700	0.319416
0	0156	0.333763	0.850529	0.448084
0	0157	0.206874	0.350879	0.955863
0	0158	0.334802	0.633457	0.457231
0	0159	0.205214	0.134886	0.952551
0	0160	0.703520	0.155681	0.543604
0	0161	0.824551	0.668351	0.065169
0	0162	0.709024	0.353089	0.545456
0	0163	0.831197	0.843509	0.039443
0	0164	0.273868	0.835391	0.274480
0	0165	0.267999	0.333228	0.784055
0	0166	0.279796	0.661337	0.283156
0	0167	0.264647	0.159561	0.782039
0	0168	0.766408	0.152471	0.716969
0	0169	0.789857	0.637047	0.250407
0	0170	0.767120	0.315486	0.712159
0	0171	0.775168	0.820682	0.214741
0	0172	0.298270	0.743927	0.550325
0	0173	0.243837	0.242160	0.052047
0	0174	0.740293	0.252774	0.423615
0	0175	0.795953	0.744142	0.914031
0	0176	0.213205	0.842652	0.519398
0	0177	0.327429	0.342446	0.027692
0	0178	0.214278	0.643205	0.528798
0	0179	0.325809	0.139859	0.025627
0	0180	0.822141	0.152240	0.465245
0	0181	0.714552	0.645997	0.963956
0	0182	0.829067	0.344539	0.471877
0	0183	0.712909	0.842113	0.960965
0	0184	0.132920	0.743531	0.571976
0	0185	0.406194	0.240043	0.071684
0	0186	0.910264	0.245825	0.417905
0	0187	0.630681	0.743480	0.913994

O	O188	0.096412	0.830863	0.434774
O	O189	0.444031	0.332197	0.942505
O	O190	0.098287	0.649730	0.443240
O	O191	0.438582	0.154943	0.930153
O	O192	0.934072	0.161708	0.562940
O	O193	0.601154	0.661163	0.059552
O	O194	0.945872	0.334124	0.555340
O	O195	0.592092	0.842519	0.035106
O	O196	0.145216	0.831823	0.251120
O	O197	0.396438	0.326970	0.757551
O	O198	0.151312	0.659906	0.262935
O	O199	0.392245	0.155977	0.744981
O	O200	0.892853	0.129780	0.746486
O	O201	0.649762	0.633447	0.239890
O	O202	0.895393	0.333531	0.737524
O	O203	0.645117	0.820570	0.211022
O	O204	0.221179	0.744251	0.158231
O	O205	0.318032	0.246330	0.657855
O	O206	0.835335	0.235297	0.827943
O	O207	0.708404	0.745121	0.340210
O	O208	0.737700	0.755522	0.578226
Al	Al209	0.717271	0.660217	0.305635
Si	Si210	0.441608	0.050535	0.185773
Si	Si211	0.096274	0.552734	0.691437
Si	Si212	0.449757	0.430302	0.187782
Si	Si213	0.087181	0.934361	0.680953
Si	Si214	0.591587	0.938726	0.807570
Si	Si215	0.945384	0.441793	0.315157
Si	Si216	0.591631	0.545098	0.825032
Si	Si217	0.940693	0.047320	0.319407
Si	Si218	0.334183	0.026064	0.338012
Si	Si219	0.201848	0.524677	0.844474
Si	Si220	0.340667	0.463829	0.338705
Si	Si221	0.195955	0.964913	0.832435
Si	Si222	0.697487	0.964460	0.647851
Si	Si223	0.842219	0.467041	0.150447
Si	Si224	0.707099	0.516796	0.682255
Si	Si225	0.833561	0.018233	0.163310
Si	Si226	0.294049	0.048183	0.556995
Si	Si227	0.242355	0.545434	0.063587
Si	Si228	0.297715	0.440901	0.555325
Si	Si229	0.239595	0.939070	0.048635
Si	Si230	0.733803	0.934351	0.434010
Si	Si231	0.801779	0.428202	0.940430

Si	Si232	0.746884	0.558363	0.467075
Si	Si233	0.788117	0.048736	0.950178
Si	Si234	0.138818	0.055717	0.544463
Si	Si235	0.397878	0.550770	0.049615
Si	Si236	0.144290	0.432294	0.548955
Si	Si237	0.393155	0.930595	0.044229
Si	Si238	0.889848	0.921903	0.449469
Si	Si239	0.645573	0.425265	0.959104
Si	Si240	0.900966	0.563004	0.457600
Si	Si241	0.634916	0.055901	0.959510
Si	Si242	0.092549	0.023785	0.329301
Si	Si243	0.442780	0.522199	0.832051
Si	Si244	0.096955	0.463820	0.336050
Si	Si245	0.441783	0.963162	0.831698
Si	Si246	0.940218	0.961080	0.658700
Si	Si247	0.596836	0.462995	0.168104
Si	Si248	0.948090	0.525959	0.666839
Si	Si249	0.589483	0.021302	0.172130
Si	Si250	0.214150	0.059999	0.203206
Si	Si251	0.319757	0.563005	0.708184
Si	Si252	0.217966	0.422407	0.212055
Si	Si253	0.318683	0.925664	0.705558
Si	Si254	0.813558	0.932392	0.790326
Si	Si255	0.723029	0.445191	0.300617
Si	Si256	0.829279	0.555833	0.808033
Si	Si257	0.713764	0.062369	0.296743
Si	Si258	0.443078	0.820046	0.184381
Si	Si259	0.094455	0.323049	0.693557
Si	Si260	0.446724	0.663071	0.193980
Si	Si261	0.092462	0.165743	0.690669
Si	Si262	0.591248	0.161670	0.802905
Si	Si263	0.954419	0.663034	0.300711
Si	Si264	0.595053	0.320932	0.805567
Si	Si265	0.948966	0.821003	0.296825
Si	Si266	0.336858	0.867026	0.330913
Si	Si267	0.204451	0.365866	0.838023
Si	Si268	0.339070	0.621952	0.338398
Si	Si269	0.202266	0.123064	0.833899
Si	Si270	0.705036	0.123587	0.653778
Si	Si271	0.841426	0.624426	0.163533
Si	Si272	0.708609	0.360579	0.665029
Si	Si273	0.834498	0.858580	0.157514
Si	Si274	0.289982	0.823373	0.539683
Si	Si275	0.250816	0.322050	0.046478

Si	Si276	0.290808	0.664131	0.546750
Si	Si277	0.249627	0.162351	0.043799
Si	Si278	0.746076	0.173879	0.445307
Si	Si279	0.791304	0.668610	0.956741
Si	Si280	0.751533	0.330678	0.448905
Si	Si281	0.789752	0.822404	0.941696
Si	Si282	0.136968	0.820766	0.537581
Si	Si283	0.403318	0.318597	0.044180
Si	Si284	0.137853	0.665022	0.544954
Si	Si285	0.402364	0.162979	0.036660
Si	Si286	0.900026	0.169305	0.454367
Si	Si287	0.637441	0.666993	0.953273
Si	Si288	0.905441	0.323369	0.452630
Si	Si289	0.636328	0.822320	0.939442
Si	Si290	0.093078	0.865971	0.325982
Si	Si291	0.448092	0.363374	0.831316
Si	Si292	0.099106	0.620244	0.331067
Si	Si293	0.444088	0.122109	0.820342
Si	Si294	0.947603	0.117264	0.661582
Si	Si295	0.592736	0.618940	0.162754
Si	Si296	0.949177	0.367171	0.665365
Si	Si297	0.590172	0.863054	0.151841
Si	Si298	0.215189	0.820803	0.195973
Si	Si299	0.325630	0.321080	0.702668
Si	Si300	0.219996	0.669483	0.204116
Si	Si301	0.320575	0.169922	0.697109
Si	Si302	0.826084	0.158251	0.796374
Si	Si303	0.827763	0.311473	0.790933
Si	Si304	0.709184	0.815640	0.282919
Zn	Zn305	0.658845	0.712196	0.491768

TS-C₆H₇ZnOH₂-HTransfer-Concerted-ZnOH⁺ (Fig. 9b/TS2 in Green)

Total energy = -1944.14522895 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

<u>_atom_site_type_symbol</u>				
<u>_atom_site_label</u>				
<u>_atom_site_fract_x</u>				
<u>_atom_site_fract_y</u>				
<u>_atom_site_fract_z</u>				
H	H1	0.740531	0.751636	0.615148
H	H2	0.656008	0.753747	0.657599
H	H3	0.524416	0.657647	0.428492
H	H4	0.559813	0.777884	0.443523
H	H5	0.563949	0.835511	0.600548
H	H6	0.613151	0.772910	0.666323
H	H7	0.489401	0.794085	0.733152
H	H8	0.431741	0.687992	0.709535
H	H9	0.455704	0.614429	0.565091
C	C10	0.521514	0.684497	0.498523
C	C11	0.559290	0.745692	0.509261
C	C12	0.553750	0.782344	0.604447
C	C13	0.501790	0.762098	0.670886
C	C14	0.469725	0.702725	0.657314
C	C15	0.481908	0.661216	0.573056
O	O16	0.488126	0.030978	0.211787
O	O17	0.994003	0.533087	0.707269
O	O18	0.498642	0.443614	0.206185
O	O19	0.987478	0.943971	0.707423
O	O20	0.494499	0.959190	0.790917
O	O21	0.990802	0.460386	0.290967
O	O22	0.486862	0.545394	0.791915
O	O23	0.996958	0.043744	0.292742
O	O24	0.371144	0.060206	0.283434
O	O25	0.109969	0.557968	0.785896
O	O26	0.376487	0.453416	0.267745
O	O27	0.109639	0.956948	0.766140
O	O28	0.611747	0.934122	0.718363
O	O29	0.876271	0.430328	0.210930
O	O30	0.607367	0.534173	0.725763
O	O31	0.873060	0.034844	0.239713
O	O32	0.411859	0.116575	0.116351
O	O33	0.074620	0.618142	0.619214
O	O34	0.409055	0.366073	0.127263
O	O35	0.078374	0.867358	0.628183
O	O36	0.571914	0.873410	0.882785
O	O37	0.914052	0.369633	0.375364
O	O38	0.578684	0.625759	0.860627
O	O39	0.910061	0.121102	0.379808

0	040	0.379072	0.987746	0.121670
0	041	0.104170	0.488629	0.620594
0	042	0.409331	0.496142	0.087072
0	043	0.074319	0.997010	0.585105
0	044	0.602890	0.002635	0.883760
0	045	0.878709	0.497335	0.379260
0	046	0.578505	0.496576	0.910171
0	047	0.911869	0.990618	0.416763
0	048	0.306500	0.063671	0.451118
0	049	0.176514	0.564544	0.952284
0	050	0.309297	0.448861	0.433087
0	051	0.176224	0.946386	0.931516
0	052	0.678731	0.926537	0.553600
0	053	0.811109	0.424524	0.042952
0	054	0.676903	0.534426	0.564520
0	055	0.808281	0.044634	0.072449
0	056	0.320354	0.948102	0.356831
0	057	0.165848	0.448465	0.859085
0	058	0.295300	0.552768	0.313798
0	059	0.194358	0.052023	0.816499
0	060	0.666036	0.044092	0.641812
0	061	0.826973	0.541203	0.132008
0	062	0.691672	0.435547	0.692546
0	063	0.790061	0.938423	0.186716
0	064	0.241197	0.041302	0.285313
0	065	0.240572	0.544722	0.784863
0	066	0.247137	0.436010	0.261186
0	067	0.238205	0.934379	0.759323
0	068	0.742176	0.950457	0.719798
0	069	0.746423	0.449558	0.207809
0	070	0.736609	0.554733	0.737304
0	071	0.744238	0.055501	0.242516
0	072	0.276543	0.131726	0.612234
0	073	0.211545	0.631309	0.112618
0	074	0.303326	0.376107	0.591578
0	075	0.180857	0.875175	0.092042
0	076	0.706524	0.864614	0.388675
0	077	0.776654	0.360637	0.880613
0	078	0.681658	0.621197	0.421592
0	079	0.799045	0.117541	0.913341
0	080	0.193882	0.039558	0.544376
0	081	0.290162	0.537269	0.040696
0	082	0.192113	0.424406	0.510529
0	083	0.292638	0.922289	0.011235

0	084	0.791042	0.952985	0.458741
0	085	0.696125	0.451150	0.957616
0	086	0.793563	0.564992	0.490148
0	087	0.690537	0.065344	0.994926
0	088	0.306513	0.003168	0.625203
0	089	0.178230	0.503288	0.125890
0	090	0.273433	0.504771	0.603394
0	091	0.210744	0.003814	0.101480
0	092	0.677153	0.993709	0.384990
0	093	0.807113	0.489418	0.872416
0	094	0.709997	0.494510	0.384239
0	095	0.775258	0.987773	0.902035
0	096	0.102216	0.127151	0.595273
0	097	0.378901	0.625740	0.099049
0	098	0.090674	0.359109	0.585755
0	099	0.397232	0.859359	0.081515
0	0100	0.879759	0.861751	0.405598
0	0101	0.605647	0.366556	0.893337
0	0102	0.893588	0.627733	0.405139
0	0103	0.590262	0.132127	0.916740
0	0104	0.094385	0.066445	0.421395
0	0105	0.391704	0.566968	0.924067
0	0106	0.071328	0.444559	0.441562
0	0107	0.412566	0.948141	0.941128
0	0108	0.889308	0.921449	0.580400
0	0109	0.591729	0.421663	0.069838
0	0110	0.914996	0.545905	0.554264
0	0111	0.569064	0.047699	0.061823
0	0112	0.117432	0.038540	0.230065
0	0113	0.365671	0.536264	0.734671
0	0114	0.116022	0.429776	0.257428
0	0115	0.369455	0.930102	0.756997
0	0116	0.866940	0.953063	0.770589
0	0117	0.621035	0.449932	0.258279
0	0118	0.867841	0.561628	0.737377
0	0119	0.613142	0.060149	0.246655
0	0120	0.075767	0.944993	0.353402
0	0121	0.411755	0.445171	0.857798
0	0122	0.085255	0.549615	0.325043
0	0123	0.401557	0.050793	0.819211
0	0124	0.910934	0.043587	0.643964
0	0125	0.573047	0.542851	0.137545
0	0126	0.901827	0.441664	0.673935
0	0127	0.581500	0.941190	0.175791

0	0128	0.196487	0.128616	0.152749
0	0129	0.292528	0.629243	0.654282
0	0130	0.186297	0.370316	0.119633
0	0131	0.301706	0.870198	0.618202
0	0132	0.788843	0.862832	0.849512
0	0133	0.701756	0.366112	0.345079
0	0134	0.798279	0.622403	0.875309
0	0135	0.682401	0.126143	0.378451
0	0136	0.492506	0.847042	0.216304
0	0137	0.992129	0.349180	0.716016
0	0138	0.489524	0.633699	0.204486
0	0139	0.995523	0.134711	0.708863
0	0140	0.492700	0.143196	0.784662
0	0141	0.997118	0.644600	0.286567
0	0142	0.495080	0.354516	0.788460
0	0143	0.988710	0.854375	0.295206
0	0144	0.369721	0.839212	0.272095
0	0145	0.113158	0.339710	0.778089
0	0146	0.376944	0.654870	0.292769
0	0147	0.111778	0.152792	0.789399
0	0148	0.614501	0.151942	0.724941
0	0149	0.881307	0.650125	0.209120
0	0150	0.609421	0.333104	0.702017
0	0151	0.873658	0.838274	0.210839
0	0152	0.420179	0.742607	0.160478
0	0153	0.064158	0.243343	0.664676
0	0154	0.565144	0.248118	0.837939
0	0155	0.918284	0.745849	0.335323
0	0156	0.299457	0.828138	0.431805
0	0157	0.187535	0.328391	0.933200
0	0158	0.309917	0.643169	0.459655
0	0159	0.176888	0.144604	0.958465
0	0160	0.686899	0.164284	0.566995
0	0161	0.798315	0.660983	0.063403
0	0162	0.679025	0.351630	0.538280
0	0163	0.806234	0.846143	0.043939
0	0164	0.241374	0.864456	0.263583
0	0165	0.241059	0.364046	0.761153
0	0166	0.246851	0.672932	0.294557
0	0167	0.242043	0.172178	0.794520
0	0168	0.742940	0.128159	0.737437
0	0169	0.756023	0.623940	0.242729
0	0170	0.739905	0.314895	0.702168
0	0171	0.743699	0.817507	0.210332

O	O172	0.273205	0.745399	0.576575
O	O173	0.214998	0.245373	0.077063
O	O174	0.715519	0.248799	0.424139
O	O175	0.768932	0.745937	0.923126
O	O176	0.187957	0.841602	0.530193
O	O177	0.299663	0.341295	0.029400
O	O178	0.189922	0.646155	0.535003
O	O179	0.297535	0.146145	0.030285
O	O180	0.797379	0.148931	0.466893
O	O181	0.684913	0.649251	0.968422
O	O182	0.800815	0.345306	0.469697
O	O183	0.686403	0.845267	0.969193
O	O184	0.105676	0.743176	0.581219
O	O185	0.381865	0.242153	0.079347
O	O186	0.882317	0.246297	0.421443
O	O187	0.602999	0.748496	0.918242
O	O188	0.073044	0.827468	0.439330
O	O189	0.414317	0.326211	0.937710
O	O190	0.080193	0.660134	0.433492
O	O191	0.408802	0.159546	0.931277
O	O192	0.908712	0.163880	0.567811
O	O193	0.565885	0.659384	0.050521
O	O194	0.913864	0.332481	0.563307
O	O195	0.575618	0.830138	0.068317
O	O196	0.113840	0.837872	0.252325
O	O197	0.369100	0.340749	0.753769
O	O198	0.121034	0.664497	0.246089
O	O199	0.368188	0.167107	0.743763
O	O200	0.871205	0.145619	0.755101
O	O201	0.616344	0.650600	0.232953
O	O202	0.866763	0.324903	0.747161
O	O203	0.617065	0.827369	0.256292
O	O204	0.197957	0.756302	0.165349
O	O205	0.288338	0.256874	0.664758
O	O206	0.791044	0.234973	0.833806
O	O207	0.693061	0.739118	0.348074
O	O208	0.703540	0.721215	0.615544
Al	Al209	0.687860	0.656323	0.299406
Si	Si210	0.412968	0.049022	0.182321
Si	Si211	0.070172	0.549419	0.682275
Si	Si212	0.422678	0.439894	0.171889
Si	Si213	0.063285	0.941218	0.671385
Si	Si214	0.569907	0.942434	0.820371
Si	Si215	0.915423	0.439569	0.314764

Si	Si216	0.563516	0.550574	0.822926
Si	Si217	0.922056	0.047860	0.332332
Si	Si218	0.309703	0.027975	0.343389
Si	Si219	0.173222	0.528605	0.844658
Si	Si220	0.307058	0.472670	0.318654
Si	Si221	0.179600	0.972376	0.818196
Si	Si222	0.674693	0.964564	0.659852
Si	Si223	0.815109	0.462137	0.149486
Si	Si224	0.678509	0.515125	0.680461
Si	Si225	0.804054	0.018298	0.185631
Si	Si226	0.270772	0.059835	0.558405
Si	Si227	0.214057	0.559412	0.058171
Si	Si228	0.269148	0.438396	0.535232
Si	Si229	0.215438	0.936819	0.034764
Si	Si230	0.713613	0.934875	0.445858
Si	Si231	0.772654	0.431338	0.938105
Si	Si232	0.716140	0.553727	0.464609
Si	Si233	0.767993	0.053941	0.970044
Si	Si234	0.116266	0.057869	0.536615
Si	Si235	0.367661	0.556874	0.038188
Si	Si236	0.114860	0.429567	0.539459
Si	Si237	0.369930	0.929648	0.038667
Si	Si238	0.868016	0.931286	0.465021
Si	Si239	0.618157	0.433832	0.957596
Si	Si240	0.869958	0.558888	0.456746
Si	Si241	0.613508	0.061863	0.964582
Si	Si242	0.070972	0.023510	0.324832
Si	Si243	0.414253	0.523482	0.827733
Si	Si244	0.065794	0.471046	0.327975
Si	Si245	0.419450	0.972104	0.826621
Si	Si246	0.913872	0.965441	0.675426
Si	Si247	0.571145	0.464885	0.167751
Si	Si248	0.919478	0.520730	0.668776
Si	Si249	0.563083	0.020019	0.174724
Si	Si250	0.191657	0.052573	0.192846
Si	Si251	0.292621	0.553089	0.695102
Si	Si252	0.182271	0.435142	0.190916
Si	Si253	0.303441	0.934845	0.689787
Si	Si254	0.793291	0.939090	0.810337
Si	Si255	0.695141	0.440406	0.298293
Si	Si256	0.802266	0.556805	0.805822
Si	Si257	0.679595	0.058674	0.312829
Si	Si258	0.419877	0.821680	0.182796
Si	Si259	0.064929	0.322650	0.686189

Si	Si260	0.416864	0.664225	0.188869
Si	Si261	0.068452	0.164689	0.689574
Si	Si262	0.565514	0.168979	0.815945
Si	Si263	0.922081	0.667037	0.308695
Si	Si264	0.568715	0.325683	0.805520
Si	Si265	0.915363	0.824695	0.311820
Si	Si266	0.307569	0.870233	0.330332
Si	Si267	0.177031	0.370473	0.832310
Si	Si268	0.307830	0.630741	0.340667
Si	Si269	0.180603	0.130293	0.840026
Si	Si270	0.677886	0.122226	0.668352
Si	Si271	0.814056	0.618701	0.163375
Si	Si272	0.679370	0.358898	0.658208
Si	Si273	0.804014	0.860198	0.162413
Si	Si274	0.265349	0.821670	0.539816
Si	Si275	0.222279	0.321871	0.040729
Si	Si276	0.266377	0.666393	0.555026
Si	Si277	0.221418	0.166572	0.053592
Si	Si278	0.720711	0.171885	0.458692
Si	Si279	0.762449	0.668739	0.957436
Si	Si280	0.724207	0.327793	0.444927
Si	Si281	0.762661	0.824365	0.947760
Si	Si282	0.111281	0.820114	0.544565
Si	Si283	0.376249	0.319277	0.043319
Si	Si284	0.112667	0.666711	0.542506
Si	Si285	0.374890	0.166038	0.039542
Si	Si286	0.874641	0.169816	0.459075
Si	Si287	0.608389	0.670387	0.950256
Si	Si288	0.877594	0.323583	0.457167
Si	Si289	0.609370	0.824096	0.959691
Si	Si290	0.063023	0.866235	0.334622
Si	Si291	0.422336	0.366688	0.834012
Si	Si292	0.070948	0.629292	0.323215
Si	Si293	0.417710	0.130092	0.820090
Si	Si294	0.921444	0.121995	0.669128
Si	Si295	0.562808	0.622159	0.158256
Si	Si296	0.918408	0.362463	0.674915
Si	Si297	0.566749	0.861574	0.178417
Si	Si298	0.183478	0.833167	0.194561
Si	Si299	0.300488	0.334182	0.694062
Si	Si300	0.193978	0.680099	0.204513
Si	Si301	0.294212	0.180826	0.703764
Si	Si302	0.800958	0.156903	0.808627
Si	Si303	0.794070	0.310247	0.791009

Si	Si304	0.690060	0.812978	0.299712
Zn	Zn305	0.654435	0.709666	0.491959

C₆H₆-Phys.Ads-H₂-Phys.Ads-ZnOH⁺ (Fig. 9b/M3 in Green)

Total energy = -1946.05876143 eV

data_

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_cell_length_a 20.357621

_cell_length_b 20.050598

_cell_length_c 13.476578

_cell_angle_alpha 90.000000

_cell_angle_beta 90.000000

_cell_angle_gamma 90.000000

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

loop_

_atom_site_type_symbol

_atom_site_label

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

H	H1	0.747768	0.750053	0.656064
H	H2	0.546330	0.797679	0.705311
H	H3	0.564081	0.848287	0.539054
H	H4	0.565191	0.775885	0.389072
H	H5	0.552104	0.653328	0.406274
H	H6	0.536050	0.602996	0.573433
H	H7	0.531931	0.675871	0.722168
H	H8	0.491305	0.530723	0.438444
H	H9	0.508269	0.502083	0.415406
C	C10	0.547544	0.766434	0.639771
C	C11	0.557410	0.794768	0.546272
C	C12	0.559081	0.753896	0.462117
C	C13	0.551378	0.684742	0.471751
C	C14	0.541892	0.656554	0.565590
C	C15	0.539677	0.697514	0.649393
O	O16	0.521668	0.033058	0.216114
O	O17	0.021441	0.539860	0.716827
O	O18	0.525933	0.437874	0.216139
O	O19	0.014233	0.932332	0.707626
O	O20	0.516222	0.945515	0.789681
O	O21	0.019622	0.456410	0.293856
O	O22	0.517108	0.536499	0.794375
O	O23	0.022535	0.035307	0.294845

0	024	0.404832	0.055906	0.293489
0	025	0.140061	0.556517	0.787205
0	026	0.403080	0.429850	0.278235
0	027	0.130287	0.938701	0.791520
0	028	0.630211	0.946119	0.703270
0	029	0.901943	0.434587	0.220130
0	030	0.637011	0.527696	0.732876
0	031	0.905893	0.042475	0.214483
0	032	0.440587	0.119750	0.130010
0	033	0.103944	0.620299	0.624052
0	034	0.443266	0.361797	0.119410
0	035	0.112725	0.862099	0.633487
0	036	0.608876	0.861936	0.850929
0	037	0.940983	0.369918	0.381216
0	038	0.605842	0.615441	0.873154
0	039	0.935066	0.118537	0.371082
0	040	0.414380	0.990723	0.123850
0	041	0.123805	0.489438	0.619459
0	042	0.432339	0.493453	0.109420
0	043	0.111591	0.993298	0.613366
0	044	0.620911	0.991111	0.888218
0	045	0.912685	0.499633	0.389684
0	046	0.605877	0.485052	0.914759
0	047	0.919525	0.987943	0.393165
0	048	0.341174	0.037140	0.460933
0	049	0.200277	0.538708	0.956840
0	050	0.341924	0.448595	0.450181
0	051	0.198038	0.949575	0.956392
0	052	0.694945	0.938103	0.537135
0	053	0.838502	0.423072	0.051404
0	054	0.705901	0.538468	0.570925
0	055	0.840795	0.035823	0.044525
0	056	0.337881	0.944439	0.317666
0	057	0.205404	0.444511	0.815972
0	058	0.336495	0.541278	0.307632
0	059	0.209935	0.042135	0.813630
0	060	0.711795	0.043910	0.653842
0	061	0.851002	0.542367	0.131736
0	062	0.726316	0.435254	0.692069
0	063	0.830410	0.937261	0.176230
0	064	0.273402	0.057403	0.296517
0	065	0.270665	0.557067	0.794028
0	066	0.272674	0.427615	0.287971
0	067	0.259962	0.922682	0.786987

0	068	0.760390	0.928253	0.707154
0	069	0.772365	0.452353	0.213920
0	070	0.763916	0.555756	0.745162
0	071	0.776349	0.055420	0.211617
0	072	0.314825	0.117679	0.610474
0	073	0.230972	0.617606	0.106704
0	074	0.317025	0.369066	0.601402
0	075	0.222213	0.868715	0.107280
0	076	0.715278	0.871215	0.372343
0	077	0.808956	0.353043	0.892635
0	078	0.719527	0.629289	0.431265
0	079	0.812790	0.117788	0.896775
0	080	0.220768	0.040756	0.533601
0	081	0.318906	0.532252	0.035632
0	082	0.219548	0.435009	0.513244
0	083	0.319338	0.935697	0.019364
0	084	0.816127	0.926711	0.468379
0	085	0.722832	0.440195	0.963659
0	086	0.824420	0.563116	0.499222
0	087	0.717361	0.050356	0.986804
0	088	0.317719	0.987198	0.638175
0	089	0.215313	0.487598	0.134911
0	090	0.304976	0.499788	0.623559
0	091	0.231833	0.998917	0.131487
0	092	0.729228	0.001977	0.375456
0	093	0.831475	0.482971	0.876144
0	094	0.735664	0.502197	0.387097
0	095	0.801200	0.988019	0.870584
0	096	0.130650	0.124248	0.603362
0	097	0.404654	0.623050	0.099619
0	098	0.130375	0.357698	0.598344
0	099	0.413020	0.859705	0.096455
0	0100	0.911141	0.854853	0.388640
0	0101	0.630142	0.354381	0.907287
0	0102	0.916040	0.632332	0.403327
0	0103	0.624675	0.123440	0.900777
0	0104	0.106504	0.055770	0.441275
0	0105	0.428956	0.555676	0.936367
0	0106	0.096986	0.433399	0.446750
0	0107	0.441081	0.939791	0.948065
0	0108	0.931400	0.916254	0.557838
0	0109	0.619421	0.415497	0.080039
0	0110	0.947192	0.559443	0.559093
0	0111	0.596869	0.050781	0.059179

0	0112	0.146257	0.057478	0.253163
0	0113	0.395729	0.547125	0.745226
0	0114	0.143264	0.420268	0.263221
0	0115	0.389926	0.921754	0.768988
0	0116	0.888171	0.945799	0.739854
0	0117	0.647652	0.451211	0.266336
0	0118	0.894045	0.552713	0.739682
0	0119	0.647591	0.054106	0.241655
0	0120	0.113830	0.943763	0.337504
0	0121	0.433492	0.439482	0.844365
0	0122	0.117451	0.540304	0.334839
0	0123	0.428992	0.041895	0.824253
0	0124	0.950489	0.035943	0.630425
0	0125	0.595422	0.537967	0.137796
0	0126	0.941689	0.444247	0.650819
0	0127	0.609443	0.939610	0.165109
0	0128	0.226763	0.130658	0.149673
0	0129	0.320249	0.630033	0.648519
0	0130	0.222701	0.354329	0.145539
0	0131	0.317245	0.854140	0.644837
0	0132	0.821017	0.859244	0.845679
0	0133	0.731554	0.371729	0.356668
0	0134	0.832599	0.616297	0.882329
0	0135	0.721482	0.131848	0.349518
0	0136	0.523167	0.843643	0.203020
0	0137	0.025179	0.351176	0.715883
0	0138	0.516584	0.633664	0.202199
0	0139	0.020187	0.134600	0.710302
0	0140	0.519913	0.133464	0.782731
0	0141	0.023088	0.626939	0.289880
0	0142	0.525135	0.351645	0.788744
0	0143	0.022881	0.855867	0.284730
0	0144	0.408474	0.834203	0.289836
0	0145	0.143271	0.329755	0.789967
0	0146	0.403835	0.653652	0.291673
0	0147	0.135095	0.150557	0.796402
0	0148	0.637211	0.147170	0.706979
0	0149	0.910439	0.648391	0.206707
0	0150	0.642722	0.333793	0.712842
0	0151	0.909816	0.831876	0.195668
0	0152	0.445478	0.741146	0.158748
0	0153	0.091631	0.241331	0.666982
0	0154	0.591466	0.240453	0.829739
0	0155	0.961228	0.742471	0.321862

0	0156	0.338477	0.848480	0.451884
0	0157	0.210562	0.349579	0.952418
0	0158	0.336165	0.630510	0.454111
0	0159	0.208125	0.133536	0.955814
0	0160	0.706395	0.153355	0.543675
0	0161	0.826391	0.664152	0.065063
0	0162	0.709211	0.346809	0.546677
0	0163	0.834001	0.840681	0.038830
0	0164	0.278040	0.831390	0.278607
0	0165	0.274510	0.335782	0.782817
0	0166	0.272863	0.655267	0.286654
0	0167	0.265354	0.159251	0.783531
0	0168	0.767090	0.154085	0.718523
0	0169	0.783840	0.627992	0.243676
0	0170	0.772830	0.314254	0.711141
0	0171	0.780399	0.819693	0.215947
0	0172	0.301741	0.740970	0.550405
0	0173	0.246251	0.241645	0.052712
0	0174	0.743529	0.249846	0.421556
0	0175	0.798829	0.741406	0.914416
0	0176	0.216994	0.840061	0.519010
0	0177	0.329275	0.342307	0.031014
0	0178	0.216929	0.640678	0.529679
0	0179	0.329014	0.139388	0.027977
0	0180	0.825373	0.149896	0.466505
0	0181	0.716563	0.643788	0.964597
0	0182	0.830632	0.341510	0.477251
0	0183	0.715379	0.838994	0.961246
0	0184	0.136330	0.741652	0.572361
0	0185	0.408724	0.239745	0.073622
0	0186	0.912729	0.244248	0.419823
0	0187	0.632237	0.740725	0.914748
0	0188	0.097819	0.833136	0.441566
0	0189	0.439769	0.322048	0.930023
0	0190	0.104833	0.654327	0.433894
0	0191	0.444007	0.149044	0.938623
0	0192	0.938468	0.157602	0.561495
0	0193	0.602750	0.658346	0.060298
0	0194	0.944512	0.325252	0.567287
0	0195	0.596938	0.836492	0.042154
0	0196	0.148753	0.828039	0.259428
0	0197	0.401326	0.331710	0.741191
0	0198	0.145981	0.654370	0.246392
0	0199	0.394089	0.159440	0.756226

O	O200	0.893140	0.126466	0.742791
O	O201	0.642049	0.637987	0.246887
O	O202	0.898520	0.341126	0.751547
O	O203	0.650290	0.819783	0.219683
O	O204	0.222874	0.742945	0.160095
O	O205	0.320051	0.244409	0.658633
O	O206	0.841750	0.234479	0.825716
O	O207	0.717587	0.742198	0.342193
O	O208	0.739408	0.774421	0.595377
Al	Al209	0.714960	0.656389	0.302914
Si	Si210	0.445724	0.050047	0.190379
Si	Si211	0.097494	0.551424	0.685957
Si	Si212	0.450200	0.430921	0.180912
Si	Si213	0.092498	0.931694	0.686020
Si	Si214	0.594081	0.936445	0.809194
Si	Si215	0.943888	0.440239	0.321906
Si	Si216	0.592537	0.541202	0.830397
Si	Si217	0.945479	0.046150	0.319137
Si	Si218	0.339202	0.023597	0.342604
Si	Si219	0.204237	0.523938	0.839141
Si	Si220	0.338749	0.461801	0.331437
Si	Si221	0.199742	0.963241	0.837910
Si	Si222	0.699553	0.963892	0.650671
Si	Si223	0.841192	0.463757	0.155421
Si	Si224	0.708447	0.514042	0.685339
Si	Si225	0.838563	0.017550	0.161771
Si	Si226	0.298257	0.045906	0.561397
Si	Si227	0.241556	0.544277	0.059224
Si	Si228	0.296094	0.438019	0.547571
Si	Si229	0.242863	0.938140	0.054439
Si	Si230	0.739532	0.934149	0.438031
Si	Si231	0.800427	0.424920	0.945870
Si	Si232	0.746881	0.557285	0.472242
Si	Si233	0.793348	0.048044	0.949427
Si	Si234	0.142705	0.053351	0.548217
Si	Si235	0.396055	0.551144	0.045704
Si	Si236	0.142862	0.429115	0.544906
Si	Si237	0.396725	0.931487	0.047048
Si	Si238	0.894653	0.921739	0.451396
Si	Si239	0.644861	0.423432	0.966474
Si	Si240	0.900486	0.563399	0.461718
Si	Si241	0.640031	0.054064	0.958094
Si	Si242	0.097031	0.022952	0.332004
Si	Si243	0.443544	0.519324	0.831039

Si	Si244	0.094317	0.462542	0.334155
Si	Si245	0.443938	0.962507	0.832465
Si	Si246	0.945630	0.957424	0.659474
Si	Si247	0.597213	0.461041	0.174741
Si	Si248	0.950655	0.523876	0.667671
Si	Si249	0.594009	0.019180	0.170393
Si	Si250	0.219635	0.060276	0.207576
Si	Si251	0.322582	0.557942	0.702624
Si	Si252	0.213713	0.422999	0.207370
Si	Si253	0.320983	0.922112	0.709309
Si	Si254	0.817883	0.930669	0.789972
Si	Si255	0.722146	0.444201	0.305810
Si	Si256	0.830653	0.551223	0.811567
Si	Si257	0.718626	0.060240	0.294232
Si	Si258	0.447681	0.819424	0.187064
Si	Si259	0.097276	0.319887	0.692720
Si	Si260	0.443329	0.662801	0.187541
Si	Si261	0.094150	0.162835	0.694236
Si	Si262	0.593324	0.161459	0.805114
Si	Si263	0.952590	0.662965	0.305501
Si	Si264	0.597228	0.319794	0.809854
Si	Si265	0.951457	0.820767	0.297556
Si	Si266	0.340637	0.864550	0.334350
Si	Si267	0.208529	0.364899	0.834831
Si	Si268	0.337277	0.620125	0.334993
Si	Si269	0.204471	0.121359	0.837221
Si	Si270	0.705678	0.124327	0.655872
Si	Si271	0.841285	0.620260	0.163761
Si	Si272	0.712242	0.357328	0.665831
Si	Si273	0.838855	0.857709	0.155945
Si	Si274	0.293434	0.820613	0.541869
Si	Si275	0.252424	0.321547	0.045617
Si	Si276	0.293713	0.661229	0.545296
Si	Si277	0.252777	0.161768	0.046296
Si	Si278	0.749270	0.171092	0.445629
Si	Si279	0.793505	0.665862	0.956452
Si	Si280	0.753765	0.327239	0.450761
Si	Si281	0.792304	0.819896	0.940884
Si	Si282	0.140811	0.819439	0.541158
Si	Si283	0.405189	0.316848	0.038306
Si	Si284	0.140636	0.664066	0.540060
Si	Si285	0.405545	0.161851	0.042300
Si	Si286	0.903203	0.167067	0.454244
Si	Si287	0.639417	0.664368	0.954131

Si	Si288	0.907276	0.320324	0.460942
Si	Si289	0.638585	0.819232	0.942543
Si	Si290	0.096071	0.865019	0.330531
Si	Si291	0.449839	0.361291	0.825698
Si	Si292	0.098231	0.618811	0.326314
Si	Si293	0.446532	0.120849	0.825669
Si	Si294	0.950224	0.114027	0.661501
Si	Si295	0.590576	0.617338	0.163436
Si	Si296	0.952407	0.365367	0.671421
Si	Si297	0.594937	0.860180	0.157235
Si	Si298	0.218027	0.818752	0.201466
Si	Si299	0.328107	0.320883	0.696108
Si	Si300	0.218358	0.666769	0.199898
Si	Si301	0.323549	0.169046	0.702086
Si	Si302	0.828491	0.157716	0.795113
Si	Si303	0.830547	0.311456	0.794970
Si	Si304	0.716201	0.814831	0.286905
Zn	Zn305	0.719548	0.720475	0.492399