

Noncovalent Chemistry of Xenon Opens the Door for Anesthetic Xenon Recovery Using Bio-MOFs

Behra Canturk, Zekiye Erarslan, and Yeliz Gurdal*

Department of Bioengineering,

Adana Alparslan Türkeş Science and Technology University,

Balcalı Mah. Güney Kampüs 10 Sokak No:1U, 01250 Sarıçam/Adana, Türkiye

** ygurdal@atu.edu.tr*

S1. Bio-MOFs under consideration

Table S1. Structural parameters of the Bio-MOFs under consideration. LCD stands for the largest cavity diameter in Å, PLD is pore limiting diameter in Å, and SA is surface area in m²/g. PLD and LCD are defined as the smallest opening along the pore and the largest size of the included sphere that can fit to the pores, respectively. For more detailed information we refer reader to the MOFDB API Database or to the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC).

	MOFs	Ligands	Metal Sites	LCD (Å)	PLD (Å)	Void Fraction	SA (m ² /g)
1	BIPSUQ	Metalloporphyrin	Cu	18.61	16.93	0.83	4502.66
2	BEDYEQ	Metalloporphyrin	Zr	32.02	31	0.86	2737.39
3	CAYYEG	Metalloporphyrin	Mn	7.23	5.23	0.48	544.7
4	BEWCUD	Metalloporphyrin	Zn	10.59	8.54	0.81	4454.34
5	ADUWIH	Hexacarboxylate	Zn	9.28	6.55	0.72	2605.83
6	ADUWON	Hexacarboxylate	Ni	16.38	6	0.78	4298.28
7	ZEZFIV	Triazine	Na, Zn	10.69	9.42	0.74	3541.03
8	AGOF EJ	Pyrazole	Cu	12.61	8.72	0.76	3269.05
9	DUPVER	Adenine, Tricarboxylic Acid	Zn	9.93	6.47	0.73	2595.58
10	LONWIW	Dimethylformamide	Mg	6.33	5.31	0.66	2526
11	RUGKOV	Adenine, Pyrazole Carboxylic Acid	Zn	6.88	5.43	0.69	2525.58
12	ZUGDEM	Benzene Tricarboxylic acid, Adenine	Zn	9.67	5.99	0.69	2360.71
13	FIQCEN	Benzene Tricarboxylic Acid	Cu	13.19	6.67	0.76	2132.15
14	IVILEG	Adenine Carboxylate	Zn	14.15	13.27	0.72	2021.31
15	VAGTAA	Dimethylformamide	Mg	5.69	4.4	0.59	1703.3
16	ACIBOE	Benzene Tricarboxylic Acid	Zn	8.26	7.04	0.62	1609.46
17	AFUKET	Imidazol	Mn	5.97	4.78	0.55	1468.14
18	WURKEB	Dimethylformamide, Carboxylic Acid	Mn	6.33	4.86	0.63	1463.97
19	DUBWON	Dimethylformamide, Carboxylic Acid	Zn	5.41	4.74	0.57	1224.95
20	CETHEQ	Triazole	Cu	8.75	7.35	0.58	1217.73
21	EZOFEF	Dimethylformamide, Benzene Tricarboxylic Acid	Ni	11.24	4.57	0.64	1161.91
22	NUDLAA	Adenine, Benzoic Acid	Zn	10.11	9.13	0.58	1069.49
23	BEPNOB	Pyridine	Zn	9.66	9.56	0.55	899.02
24	BEPMAM	Pyridine	Zn	9.65	9.57	0.55	898.91
25	BEPLUF	Pyridine	Zn	9.84	9.74	0.56	960.82
26	BEPNUH	Pyridine	Zn	10.31	10.21	0.47	864.84
27	BEPPOD	Pyridine	Zn	9.62	9.5	0.49	796.08
28	BEPPAP	Pyridine	Zn	9.89	9.78	0.43	1029.42
29	XACZEH	Adenine	Cu	10.61	7.24	0.59	720.8
30	BEYSEF	Adenine	Co	5.62	4.75	0.4	1020.51
31	LUSHOX04	Dimethylformamide, Benzene Dicarboxylic Acid	Mn	5.43	4.96	0.54	909.61
32	LIXWAR	Dimethylformamide, Naphthalene	Mn	5.6	3.91	0.53	883.22
33	LUSHOX	Dimethylformamide, Benzene Dicarboxylic Acid	Mn	5.31	4.92	0.5	864.79
34	LUSHOX02	Dimethylformamide, Benzene Dicarboxylic Acid	Mn	5.4	4.93	0.51	859.89
35	LUSHOX01	Dimethylformamide, Benzene Dicarboxylic Acid	Mn	5.26	4.89	0.49	833.1
36	LUSHOX03	Dimethylformamide, Benzene Dicarboxylic Acid	Mn	5.24	4.88	0.52	823.97
37	IZUMUM	Adenine, Carboxylate	Cu	5.58	4.65	0.38	756.79
38	DOMKEX	Porphyrin	Na	6.2	5.2	0.43	730.1
39	ADAXIO	Bipyridine, Benzene Dicarboxylic Acid	Co	5.73	5.01	0.49	724.96
40	QOHTUD	Muconato, Pyridine	Co	6.67	5.81	0.49	694.26
41	BEPNIV	Pyridine, Carboxylate	Zn	8.14	8.04	0.64	687.54
42	BEPPIX	Pyridine, Carboxylate	Zn	7.72	7.6	0.59	630.17
43	XILVIZ	Metalloporphyrin, Naphthalenetetracarboxydiimide	Zn	5.53	4.18	0.64	543.39

S2. Gravimetric and Volumetric Xe Adsorption

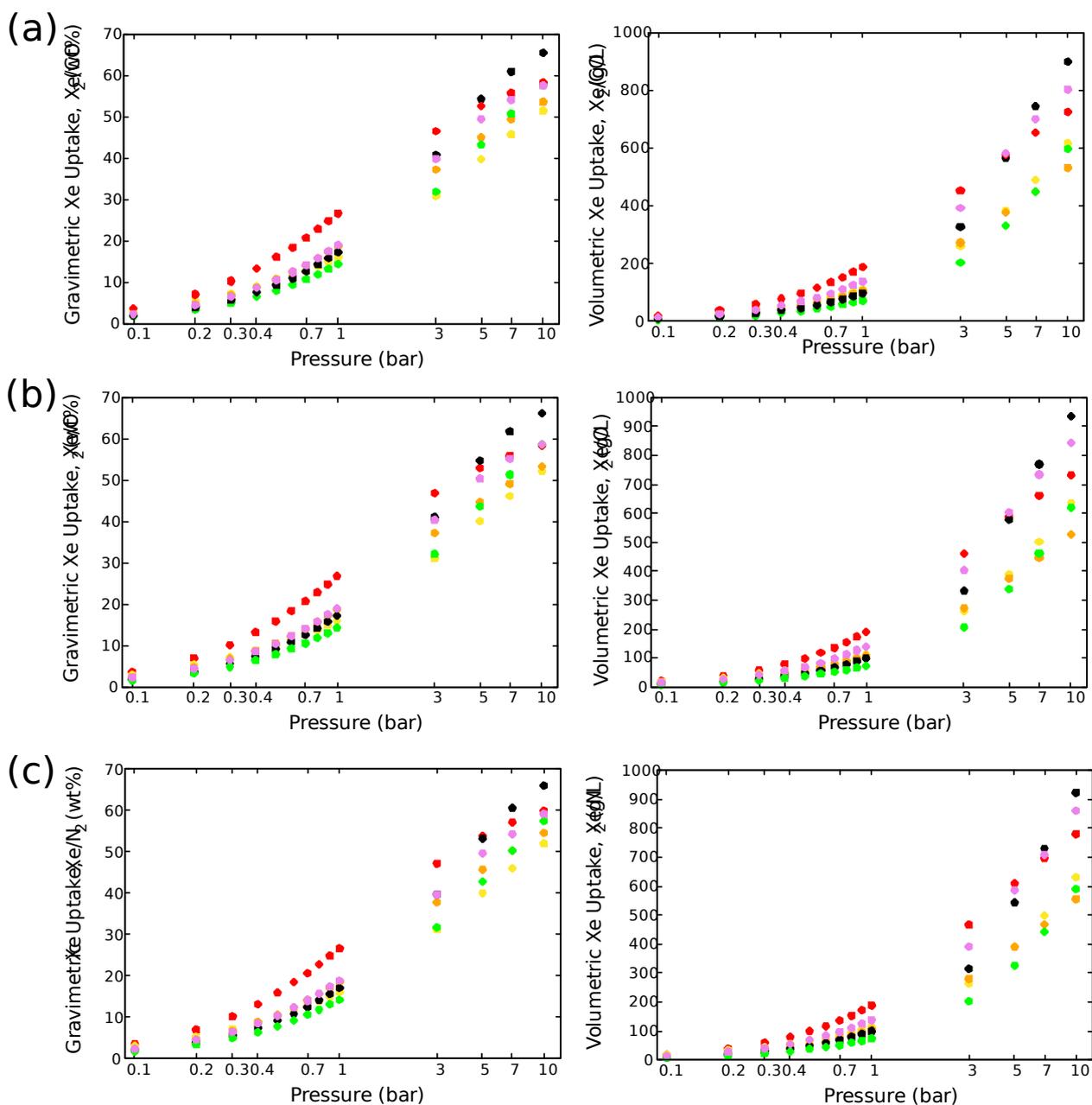


FIG. 1. Gravimetric (wt%) and volumetric (g/L) Xenon adsorption of the top performing Bio-MOFs for (a) Xe/CO₂:80/20, (b) Xe/O₂:80/20, and (c) Xe/N₂:80/20 mixtures calculated at 298 K. While figures on the left hand side show gravimetric Xe uptake varying with pressure, figures on the right hand side depict volumetric Xe uptakes. Color code: red: ADUWON, yellow: AGOFEJ, orange: BEDYEQ, black: BEWCUD, green: BIPSUQ, purple: ZEFIV.

S3. CIF files and calculated DDEC charges of the Bio-MOFs under consideration. Cif files taken from the MOFXDB API Database are modified by adding DDEC6 atomic charges which are calculated in this work.

```

data_ACIBOE_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            17.0713
_cell_length_b            17.0713
_cell_length_c            17.0713
_cell_angle_alpha         105.8300
_cell_angle_beta          105.8300

_cell_angle_gamma         117.0290
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.1614 0.29871    0.62295    0.01267    Uiso  1    0.957
Zn2  Zn   0.67576    0.53845    0.37705    0.01267    Uiso  1    0.959
Zn3  Zn   0.53845    0.1614 0.86269    0.01267    Uiso  1    0.959
Zn4  Zn   0.29871    0.67576    0.13731    0.01267    Uiso  1    0.960
Zn5  Zn   0.17576    0.79871    0.13731    0.01267    Uiso  1    0.957
Zn6  Zn   0.6614 0.03845    0.86269    0.01267    Uiso  1    0.959
Zn7  Zn   0.79871    0.6614 0.62295    0.01267    Uiso  1    0.959
Zn8  Zn   0.03845    0.17576    0.37705    0.01267    Uiso  1    0.958
Zn9  Zn   0.92966    0.11582    0.5    0.01267    Uiso  1    1.049
Zn10 Zn   0.61582    0.42966    0.5    0.01267    Uiso  1    1.049
Zn11 Zn   0.42966    0.92966    0.81384    0.01267    Uiso  1    1.049
Zn12 Zn   0.11582    0.61582    0.18616    0.01267    Uiso  1    1.049
H1   H    0.9406 0.3329 0.9651 0.01267    Uiso  1    0.138
H2   H    0.8573 0.1715 0.6998 0.01267    Uiso  1    0.138
H3   H    0.1229 0.4358 0.8571 0.01267    Uiso  1    0.141
H4   H    0.3678 0.9755 0.0349 0.01267    Uiso  1    0.138
H5   H    0.4717 0.1575 0.3002 0.01267    Uiso  1    0.154
H6   H    0.5787 0.2658 0.1429 0.01267    Uiso  1    0.141
H7   H    0.9755 0.9406 0.6077 0.01267    Uiso  1    0.138
H8   H    0.1575 0.8573 0.6858 0.01267    Uiso  1    0.153
H9   H    0.2658 0.1229 0.6871 0.01267    Uiso  1    0.141
H10  H    0.3329 0.3678 0.3923 0.01267    Uiso  1    0.138

```

H11	H	0.1715	0.4717	0.3142	0.01267	Uiso	1	0.138
H12	H	0.4358	0.5787	0.3129	0.01267	Uiso	1	0.141
H13	H	0.8678	0.8329	0.3923	0.01267	Uiso	1	0.138
H14	H	0.9717	0.6715	0.3142	0.01267	Uiso	1	0.138
H15	H	0.0787	0.9358	0.3129	0.01267	Uiso	1	0.141
H16	H	0.4406	0.4755	0.6077	0.01267	Uiso	1	0.138
H17	H	0.3573	0.6575	0.6858	0.01267	Uiso	1	0.153
H18	H	0.6229	0.7658	0.6871	0.01267	Uiso	1	0.141
H19	H	0.8329	0.4406	0.9651	0.01267	Uiso	1	0.138
H20	H	0.6715	0.3573	0.6998	0.01267	Uiso	1	0.138
H21	H	0.9358	0.6229	0.8571	0.01267	Uiso	1	0.141
H22	H	0.4755	0.8678	0.0349	0.01267	Uiso	1	0.138
H23	H	0.6575	0.9717	0.3002	0.01267	Uiso	1	0.154
H24	H	0.7658	0.0787	0.1429	0.01267	Uiso	1	0.141
C1	C	0.0421	0.3999	0.9242	0.01267	Uiso	1	-0.019
C2	C	0.9539	0.3255	0.9152	0.01267	Uiso	1	-0.106
C3	C	0.8847	0.239	0.8307	0.01267	Uiso	1	-0.006
C4	C	0.9039	0.228	0.7561	0.01267	Uiso	1	-0.116
C5	C	0.9935	0.3021	0.7656	0.01267	Uiso	1	-0.007
C6	C	0.0628	0.3873	0.8503	0.01267	Uiso	1	-0.099
C7	C	0.9788	0.9931	0.3781	0.01267	Uiso	1	0.605
C8	C	0.7908	0.1551	0.8201	0.01267	Uiso	1	0.549
C9	C	0.0175	0.2845	0.686	0.01267	Uiso	1	0.603
C10	C	0.4757	0.1179	0.0758	0.01267	Uiso	1	-0.024
C11	C	0.4103	0.0387	0.0848	0.01267	Uiso	1	-0.104
C12	C	0.4083	0.054	0.1693	0.01267	Uiso	1	-0.006
C13	C	0.4719	0.1478	0.2439	0.01267	Uiso	1	-0.132
C14	C	0.5365	0.2279	0.2344	0.01267	Uiso	1	-0.005
C15	C	0.537	0.2125	0.1497	0.01267	Uiso	1	-0.097
C16	C	0.615	0.6007	0.6219	0.01267	Uiso	1	0.605
C17	C	0.335	0.9707	0.1799	0.01267	Uiso	1	0.549
C18	C	0.5985	0.3315	0.314	0.01267	Uiso	1	0.602
C19	C	0.1179	0.0421	0.6422	0.01267	Uiso	1	-0.023
C20	C	0.0387	0.9539	0.6284	0.01267	Uiso	1	-0.107
C21	C	0.054	0.8847	0.6457	0.01267	Uiso	1	-0.007
C22	C	0.1478	0.9039	0.6759	0.01267	Uiso	1	-0.130
C23	C	0.2279	0.9935	0.6914	0.01267	Uiso	1	-0.007
C24	C	0.2125	0.0628	0.6755	0.01267	Uiso	1	-0.097
C25	C	0.6007	0.9788	0.9857	0.01267	Uiso	1	0.605
C26	C	0.9707	0.7908	0.6357	0.01267	Uiso	1	0.548
C27	C	0.3315	0.0175	0.733	0.01267	Uiso	1	0.603
C28	C	0.3999	0.4757	0.3578	0.01267	Uiso	1	-0.023
C29	C	0.3255	0.4103	0.3716	0.01267	Uiso	1	-0.105
C30	C	0.239	0.4083	0.3543	0.01267	Uiso	1	-0.006
C31	C	0.228	0.4719	0.3241	0.01267	Uiso	1	-0.115
C32	C	0.3021	0.5365	0.3086	0.01267	Uiso	1	-0.008
C33	C	0.3873	0.537	0.3245	0.01267	Uiso	1	-0.096
C34	C	0.9931	0.615	0.0143	0.01267	Uiso	1	0.604
C35	C	0.1551	0.335	0.3643	0.01267	Uiso	1	0.548
C36	C	0.2845	0.5985	0.267	0.01267	Uiso	1	0.603
C37	C	0.9757	0.8999	0.3578	0.01267	Uiso	1	-0.023
C38	C	0.9103	0.8255	0.3716	0.01267	Uiso	1	-0.105

C39	C	0.9083	0.739	0.3543	0.01267	Uiso	1	-0.005
C40	C	0.9719	0.728	0.3241	0.01267	Uiso	1	-0.115
C41	C	0.0365	0.8021	0.3086	0.01267	Uiso	1	-0.008
C42	C	0.037	0.8873	0.3245	0.01267	Uiso	1	-0.096
C43	C	0.115	0.4931	0.0143	0.01267	Uiso	1	0.604
C44	C	0.835	0.6551	0.3643	0.01267	Uiso	1	0.549
C45	C	0.0985	0.7845	0.267	0.01267	Uiso	1	0.603
C46	C	0.5421	0.6179	0.6422	0.01267	Uiso	1	-0.023
C47	C	0.4539	0.5387	0.6284	0.01267	Uiso	1	-0.106
C48	C	0.3847	0.554	0.6457	0.01267	Uiso	1	-0.008
C49	C	0.4039	0.6478	0.6759	0.01267	Uiso	1	-0.131
C50	C	0.4935	0.7279	0.6914	0.01267	Uiso	1	-0.006
C51	C	0.5628	0.7125	0.6755	0.01267	Uiso	1	-0.099
C52	C	0.4788	0.1007	0.9857	0.01267	Uiso	1	0.605
C53	C	0.2908	0.4707	0.6357	0.01267	Uiso	1	0.549
C54	C	0.5175	0.8315	0.733	0.01267	Uiso	1	0.602
C55	C	0.8999	0.5421	0.9242	0.01267	Uiso	1	-0.020
C56	C	0.8255	0.4539	0.9152	0.01267	Uiso	1	-0.106
C57	C	0.739	0.3847	0.8307	0.01267	Uiso	1	-0.006
C58	C	0.728	0.4039	0.7561	0.01267	Uiso	1	-0.117
C59	C	0.8021	0.4935	0.7656	0.01267	Uiso	1	-0.007
C60	C	0.8873	0.5628	0.8503	0.01267	Uiso	1	-0.099
C61	C	0.4931	0.4788	0.3781	0.01267	Uiso	1	0.605
C62	C	0.6551	0.2908	0.8201	0.01267	Uiso	1	0.549
C63	C	0.7845	0.5175	0.686	0.01267	Uiso	1	0.604
C64	C	0.6179	0.9757	0.0758	0.01267	Uiso	1	-0.022
C65	C	0.5387	0.9103	0.0848	0.01267	Uiso	1	-0.107
C66	C	0.554	0.9083	0.1693	0.01267	Uiso	1	-0.007
C67	C	0.6478	0.9719	0.2439	0.01267	Uiso	1	-0.130
C68	C	0.7279	0.0365	0.2344	0.01267	Uiso	1	-0.007
C69	C	0.7125	0.037	0.1497	0.01267	Uiso	1	-0.098
C70	C	0.1007	0.115	0.6219	0.01267	Uiso	1	0.605
C71	C	0.4707	0.835	0.1799	0.01267	Uiso	1	0.549
C72	C	0.8315	0.0985	0.314	0.01267	Uiso	1	0.603
O1	O	0.0404	0.0583	0.3657	0.01267	Uiso	1	-0.506
O2	O	0.9189	0.9986	0.4037	0.01267	Uiso	1	-0.570
O3	O	0.7881	0.1534	0.8939	0.01267	Uiso	1	-0.502
O4	O	0.7239	0.0933	0.7438	0.01267	Uiso	1	-0.373
O5	O	0.9443	0.2252	0.6079	0.01267	Uiso	1	-0.512
O6	O	0.1095	0.3304	0.7061	0.01267	Uiso	1	-0.528
O7	O	0.6926	0.6747	0.6343	0.01267	Uiso	1	-0.502
O8	O	0.5949	0.5152	0.5963	0.01267	Uiso	1	-0.571
O9	O	0.2595	0.8942	0.1061	0.01267	Uiso	1	-0.501
O10	O	0.3495	0.9801	0.2562	0.01267	Uiso	1	-0.374
O11	O	0.6173	0.3364	0.3921	0.01267	Uiso	1	-0.515
O12	O	0.6243	0.4034	0.2939	0.01267	Uiso	1	-0.523
O13	O	0.6747	0.0404	0.9821	0.01267	Uiso	1	-0.504
O14	O	0.5152	0.9189	0.9203	0.01267	Uiso	1	-0.573
O15	O	0.8942	0.7881	0.6347	0.01267	Uiso	1	-0.496
O16	O	0.9801	0.7239	0.6306	0.01267	Uiso	1	-0.375
O17	O	0.3364	0.9443	0.7191	0.01267	Uiso	1	-0.517
O18	O	0.4034	0.1095	0.7791	0.01267	Uiso	1	-0.528

O19	O	0.0583	0.6926	0.0179	0.01267	Uiso	1	-0.503
O20	O	0.9986	0.5949	0.0797	0.01267	Uiso	1	-0.573
O21	O	0.1534	0.2595	0.3653	0.01267	Uiso	1	-0.496
O22	O	0.0933	0.3495	0.3694	0.01267	Uiso	1	-0.376
O23	O	0.2252	0.6173	0.2809	0.01267	Uiso	1	-0.518
O24	O	0.3304	0.6243	0.2209	0.01267	Uiso	1	-0.522
O25	O	0.1926	0.5583	0.0179	0.01267	Uiso	1	-0.503
O26	O	0.0949	0.4986	0.0797	0.01267	Uiso	1	-0.571
O27	O	0.7595	0.6534	0.3653	0.01267	Uiso	1	-0.499
O28	O	0.8495	0.5933	0.3694	0.01267	Uiso	1	-0.377
O29	O	0.1173	0.7252	0.2809	0.01267	Uiso	1	-0.511
O30	O	0.1243	0.8304	0.2209	0.01267	Uiso	1	-0.527
O31	O	0.5404	0.1747	0.9821	0.01267	Uiso	1	-0.503
O32	O	0.4189	0.0152	0.9203	0.01267	Uiso	1	-0.571
O33	O	0.2881	0.3942	0.6347	0.01267	Uiso	1	-0.501
O34	O	0.2239	0.4801	0.6306	0.01267	Uiso	1	-0.372
O35	O	0.4443	0.8364	0.7191	0.01267	Uiso	1	-0.515
O36	O	0.6095	0.9034	0.7791	0.01267	Uiso	1	-0.526
O37	O	0.5583	0.5404	0.3657	0.01267	Uiso	1	-0.506
O38	O	0.4986	0.4189	0.4037	0.01267	Uiso	1	-0.573
O39	O	0.6534	0.2881	0.8939	0.01267	Uiso	1	-0.501
O40	O	0.5933	0.2239	0.7438	0.01267	Uiso	1	-0.370
O41	O	0.7252	0.4443	0.6079	0.01267	Uiso	1	-0.517
O42	O	0.8304	0.6095	0.7061	0.01267	Uiso	1	-0.528
O43	O	0.1747	0.1926	0.6343	0.01267	Uiso	1	-0.503
O44	O	0.0152	0.0949	0.5963	0.01267	Uiso	1	-0.571
O45	O	0.3942	0.7595	0.1061	0.01267	Uiso	1	-0.497
O46	O	0.4801	0.8495	0.2562	0.01267	Uiso	1	-0.378
O47	O	0.8364	0.1173	0.3921	0.01267	Uiso	1	-0.520
O48	O	0.9034	0.1243	0.2939	0.01267	Uiso	1	-0.523
O49	O	0.05109	0.23111	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.622
O50	O	0.73111	0.55109	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.624
O51	O	0.55109	0.05109	0.81998	0.01267	Uiso	1	-0.624
O52	O	0.23111	0.73111	0.18002	0.01267	Uiso	1	-0.625

```

data_ADASOP_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            29.3026
_cell_length_b            29.3026
_cell_length_c            29.3847
_cell_angle_alpha        60.0923
_cell_angle_beta         60.0923
_cell_angle_gamma        89.9999
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn  0.00947  0.74402  0.26718  0.01267  Uiso  1  1.053
Zn2  Zn  0.64498  0.61847  0.3684 0.01267  Uiso  1  1.065
Zn3  Zn  0.72335  0.9888 0.26718  0.01267  Uiso  1  1.075
Zn4  Zn  0.98662  0.01313  0.3684 0.01267  Uiso  1  1.066
Zn5  Zn  0.74402  0.72335  0.26718  0.01267  Uiso  1  1.071
Zn6  Zn  0.61847  0.98662  0.3684 0.01267  Uiso  1  1.066
Zn7  Zn  0.9888 0.00947  0.26718  0.01267  Uiso  1  1.071
Zn8  Zn  0.01313  0.64498  0.3684 0.01267  Uiso  1  1.067
Zn9  Zn  0.99053  0.25598  0.73282  0.01267  Uiso  1  1.053
Zn10 Zn  0.35502  0.38153  0.6316 0.01267  Uiso  1  1.065
Zn11 Zn  0.27665  0.0112 0.73282  0.01267  Uiso  1  1.075
Zn12 Zn  0.01338  0.98687  0.6316 0.01267  Uiso  1  1.066
Zn13 Zn  0.25598  0.27665  0.73282  0.01267  Uiso  1  1.071
Zn14 Zn  0.38153  0.01338  0.6316 0.01267  Uiso  1  1.066
Zn15 Zn  0.0112 0.99053  0.73282  0.01267  Uiso  1  1.071
Zn16 Zn  0.98687  0.35502  0.6316 0.01267  Uiso  1  1.067
Zn17 Zn  0.26529  0.02006  1  0.01267  Uiso  1  0.716
Zn18 Zn  0.63265  0.97455  1  0.01267  Uiso  1  0.508
Zn19 Zn  0.73471  0.97994  0  0.01267  Uiso  1  0.713
Zn20 Zn  0.36735  0.02545  0  0.01267  Uiso  1  0.507
Zn21 Zn  0.02006  0.73471  1  0.01267  Uiso  1  0.573
Zn22 Zn  0.97455  0.36735  1  0.01267  Uiso  1  0.534
Zn23 Zn  0.97994  0.26529  0  0.01267  Uiso  1  0.572
Zn24 Zn  0.02545  0.63265  0  0.01267  Uiso  1  0.534
H1   H   0.18  0.85  0.1504 0.01267  Uiso  1  0.133
H2   H   0.3223 0.8481 0.1412 0.01267  Uiso  1  0.152
H3   H   0.1877 0.704 0.2682 0.01267  Uiso  1  0.140

```

H4	H	0.2599	0.6688	0.262	0.01267	Uiso	1	0.097
H5	H	0.2352	0.681	0.3158	0.01267	Uiso	1	0.095
H6	H	0.6823	0.8068	0.1574	0.01267	Uiso	1	0.133
H7	H	0.5503	0.6654	0.2836	0.01267	Uiso	1	0.148
H8	H	0.5544	0.8009	0.1402	0.01267	Uiso	1	0.133
H9	H	0.4807	0.7394	0.1732	0.01267	Uiso	1	0.099
H10	H	0.46	0.7567	0.2226	0.01267	Uiso	1	0.104
H11	H	0.1572	0.3261	0.6552	0.01267	Uiso	1	0.126
H12	H	0.1658	0.4494	0.505	0.01267	Uiso	1	0.142
H13	H	0.2973	0.4588	0.5148	0.01267	Uiso	1	0.133
H14	H	0.2574	0.593	0.3704	0.01267	Uiso	1	0.130
H15	H	0.3423	0.5235	0.3966	0.01267	Uiso	1	0.093
H16	H	0.3189	0.5458	0.4412	0.01267	Uiso	1	0.092
H17	H	0.3776	0.7396	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.128
H18	H	0.4119	0.623	0.3266	0.01267	Uiso	1	0.125
H19	H	0.6696	0.9996	0.1504	0.01267	Uiso	1	0.135
H20	H	0.5365	0.0107	0.1412	0.01267	Uiso	1	0.155
H21	H	0.5441	0.0278	0.2682	0.01267	Uiso	1	0.143
H22	H	0.4781	0.0692	0.262	0.01267	Uiso	1	0.098
H23	H	0.449	0.0032	0.3158	0.01267	Uiso	1	0.096
H24	H	0.1603	0.0358	0.1574	0.01267	Uiso	1	0.132
H25	H	0.1661	0.051	0.2836	0.01267	Uiso	1	0.148
H26	H	0.3054	0.0589	0.1402	0.01267	Uiso	1	0.137
H27	H	0.3461	0.0874	0.1732	0.01267	Uiso	1	0.107
H28	H	0.3174	0.0207	0.2226	0.01267	Uiso	1	0.105
H29	H	0.1876	0.0187	0.6552	0.01267	Uiso	1	0.127
H30	H	0.3292	0.0456	0.505	0.01267	Uiso	1	0.142
H31	H	0.1879	0.0264	0.5148	0.01267	Uiso	1	0.134
H32	H	0.3722	0.0366	0.3704	0.01267	Uiso	1	0.130
H33	H	0.2611	0.0799	0.3966	0.01267	Uiso	1	0.094
H34	H	0.2399	0.013	0.4412	0.01267	Uiso	1	0.093
H35	H	0.4098	0.0478	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.131
H36	H	0.2615	0.0504	0.3266	0.01267	Uiso	1	0.125
H37	H	0.85	0.6696	0.1504	0.01267	Uiso	1	0.131
H38	H	0.8481	0.5365	0.1412	0.01267	Uiso	1	0.150
H39	H	0.704	0.5441	0.2682	0.01267	Uiso	1	0.141
H40	H	0.6688	0.4781	0.262	0.01267	Uiso	1	0.097
H41	H	0.681	0.449	0.3158	0.01267	Uiso	1	0.095
H42	H	0.8068	0.1603	0.1574	0.01267	Uiso	1	0.134
H43	H	0.6654	0.1661	0.2836	0.01267	Uiso	1	0.148
H44	H	0.8009	0.3054	0.1402	0.01267	Uiso	1	0.131
H45	H	0.7394	0.3461	0.1732	0.01267	Uiso	1	0.099
H46	H	0.7567	0.3174	0.2226	0.01267	Uiso	1	0.101
H47	H	0.3261	0.1876	0.6552	0.01267	Uiso	1	0.128
H48	H	0.4494	0.3292	0.505	0.01267	Uiso	1	0.143
H49	H	0.4588	0.1879	0.5148	0.01267	Uiso	1	0.132
H50	H	0.593	0.3722	0.3704	0.01267	Uiso	1	0.130
H51	H	0.5235	0.2611	0.3966	0.01267	Uiso	1	0.094
H52	H	0.5458	0.2399	0.4412	0.01267	Uiso	1	0.092
H53	H	0.7396	0.4098	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.127
H54	H	0.623	0.2615	0.3266	0.01267	Uiso	1	0.125
H55	H	0.9996	0.18	0.1504	0.01267	Uiso	1	0.133

H56	H	0.0107	0.3223	0.1412	0.01267	Uiso	1	0.105
H57	H	0.0278	0.1877	0.2682	0.01267	Uiso	1	0.140
H58	H	0.0692	0.2599	0.262	0.01267	Uiso	1	0.099
H59	H	0.0032	0.2352	0.3158	0.01267	Uiso	1	0.096
H60	H	0.0358	0.6823	0.1574	0.01267	Uiso	1	0.074
H61	H	0.051	0.5503	0.2836	0.01267	Uiso	1	0.150
H62	H	0.0589	0.5544	0.1402	0.01267	Uiso	1	0.135
H63	H	0.0874	0.4807	0.1732	0.01267	Uiso	1	0.099
H64	H	0.0207	0.46	0.2226	0.01267	Uiso	1	0.103
H65	H	0.0187	0.1572	0.6552	0.01267	Uiso	1	0.127
H66	H	0.0456	0.1658	0.505	0.01267	Uiso	1	0.141
H67	H	0.0264	0.2973	0.5148	0.01267	Uiso	1	0.134
H68	H	0.0366	0.2574	0.3704	0.01267	Uiso	1	0.130
H69	H	0.0799	0.3423	0.3966	0.01267	Uiso	1	0.094
H70	H	0.013	0.3189	0.4412	0.01267	Uiso	1	0.093
H71	H	0.0478	0.3776	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.126
H72	H	0.0504	0.4119	0.3266	0.01267	Uiso	1	0.126
H73	H	0.82	0.15	0.8496	0.01267	Uiso	1	0.133
H74	H	0.6777	0.1519	0.8588	0.01267	Uiso	1	0.153
H75	H	0.8123	0.296	0.7318	0.01267	Uiso	1	0.139
H76	H	0.7401	0.3312	0.738	0.01267	Uiso	1	0.097
H77	H	0.7648	0.319	0.6842	0.01267	Uiso	1	0.095
H78	H	0.3177	0.1932	0.8426	0.01267	Uiso	1	0.133
H79	H	0.4497	0.3346	0.7164	0.01267	Uiso	1	0.147
H80	H	0.4456	0.1991	0.8598	0.01267	Uiso	1	0.133
H81	H	0.5193	0.2606	0.8268	0.01267	Uiso	1	0.098
H82	H	0.54	0.2433	0.7774	0.01267	Uiso	1	0.104
H83	H	0.8428	0.6739	0.3448	0.01267	Uiso	1	0.126
H84	H	0.8342	0.5506	0.495	0.01267	Uiso	1	0.143
H85	H	0.7027	0.5412	0.4852	0.01267	Uiso	1	0.133
H86	H	0.7426	0.407	0.6296	0.01267	Uiso	1	0.130
H87	H	0.6577	0.4765	0.6034	0.01267	Uiso	1	0.092
H88	H	0.6811	0.4542	0.5588	0.01267	Uiso	1	0.091
H89	H	0.6224	0.2604	0.7874	0.01267	Uiso	1	0.129
H90	H	0.5881	0.377	0.6734	0.01267	Uiso	1	0.125
H91	H	0.3304	0.0004	0.8496	0.01267	Uiso	1	0.135
H92	H	0.4635	0.9893	0.8588	0.01267	Uiso	1	0.155
H93	H	0.4559	0.9722	0.7318	0.01267	Uiso	1	0.143
H94	H	0.5219	0.9308	0.738	0.01267	Uiso	1	0.098
H95	H	0.551	0.9968	0.6842	0.01267	Uiso	1	0.096
H96	H	0.8397	0.9642	0.8426	0.01267	Uiso	1	0.131
H97	H	0.8339	0.949	0.7164	0.01267	Uiso	1	0.147
H98	H	0.6946	0.9411	0.8598	0.01267	Uiso	1	0.137
H99	H	0.6539	0.9126	0.8268	0.01267	Uiso	1	0.107
H100	H	0.6826	0.9793	0.7774	0.01267	Uiso	1	0.105
H101	H	0.8124	0.9813	0.3448	0.01267	Uiso	1	0.128
H102	H	0.6708	0.9544	0.495	0.01267	Uiso	1	0.142
H103	H	0.8121	0.9736	0.4852	0.01267	Uiso	1	0.133
H104	H	0.6278	0.9634	0.6296	0.01267	Uiso	1	0.130
H105	H	0.7389	0.9201	0.6034	0.01267	Uiso	1	0.093
H106	H	0.7601	0.987	0.5588	0.01267	Uiso	1	0.092
H107	H	0.5902	0.9522	0.7874	0.01267	Uiso	1	0.130

H108	H	0.7385	0.9496	0.6734	0.01267	Uiso	1	0.125
H109	H	0.15	0.3304	0.8496	0.01267	Uiso	1	0.130
H110	H	0.1519	0.4635	0.8588	0.01267	Uiso	1	0.150
H111	H	0.296	0.4559	0.7318	0.01267	Uiso	1	0.140
H112	H	0.3312	0.5219	0.738	0.01267	Uiso	1	0.098
H113	H	0.319	0.551	0.6842	0.01267	Uiso	1	0.096
H114	H	0.1932	0.8397	0.8426	0.01267	Uiso	1	0.133
H115	H	0.3346	0.8339	0.7164	0.01267	Uiso	1	0.148
H116	H	0.1991	0.6946	0.8598	0.01267	Uiso	1	0.132
H117	H	0.2606	0.6539	0.8268	0.01267	Uiso	1	0.098
H118	H	0.2433	0.6826	0.7774	0.01267	Uiso	1	0.101
H119	H	0.6739	0.8124	0.3448	0.01267	Uiso	1	0.128
H120	H	0.5506	0.6708	0.495	0.01267	Uiso	1	0.143
H121	H	0.5412	0.8121	0.4852	0.01267	Uiso	1	0.132
H122	H	0.407	0.6278	0.6296	0.01267	Uiso	1	0.131
H123	H	0.4765	0.7389	0.6034	0.01267	Uiso	1	0.093
H124	H	0.4542	0.7601	0.5588	0.01267	Uiso	1	0.092
H125	H	0.2604	0.5902	0.7874	0.01267	Uiso	1	0.127
H126	H	0.377	0.7385	0.6734	0.01267	Uiso	1	0.125
H127	H	0.0004	0.82	0.8496	0.01267	Uiso	1	0.135
H128	H	0.9893	0.6777	0.8588	0.01267	Uiso	1	0.103
H129	H	0.9722	0.8123	0.7318	0.01267	Uiso	1	0.140
H130	H	0.9308	0.7401	0.738	0.01267	Uiso	1	0.098
H131	H	0.9968	0.7648	0.6842	0.01267	Uiso	1	0.096
H132	H	0.9642	0.3177	0.8426	0.01267	Uiso	1	0.074
H133	H	0.949	0.4497	0.7164	0.01267	Uiso	1	0.150
H134	H	0.9411	0.4456	0.8598	0.01267	Uiso	1	0.135
H135	H	0.9126	0.5193	0.8268	0.01267	Uiso	1	0.098
H136	H	0.9793	0.54	0.7774	0.01267	Uiso	1	0.103
H137	H	0.9813	0.8428	0.3448	0.01267	Uiso	1	0.127
H138	H	0.9544	0.8342	0.495	0.01267	Uiso	1	0.143
H139	H	0.9736	0.7027	0.4852	0.01267	Uiso	1	0.133
H140	H	0.9634	0.7426	0.6296	0.01267	Uiso	1	0.130
H141	H	0.9201	0.6577	0.6034	0.01267	Uiso	1	0.094
H142	H	0.987	0.6811	0.5588	0.01267	Uiso	1	0.092
H143	H	0.9522	0.6224	0.7874	0.01267	Uiso	1	0.126
H144	H	0.9496	0.5881	0.6734	0.01267	Uiso	1	0.126
C1	C	0.1136	0.7467	0.2528	0.01267	Uiso	1	0.623
C2	C	0.1742	0.7745	0.2186	0.01267	Uiso	1	0.002
C3	C	0.2001	0.8306	0.1666	0.01267	Uiso	1	-0.154
C4	C	0.2556	0.8588	0.138	0.01267	Uiso	1	-0.015
C5	C	0.2801	0.919	0.0876	0.01267	Uiso	1	0.528
C6	C	0.2844	0.8303	0.1606	0.01267	Uiso	1	-0.220
C7	C	0.2565	0.7733	0.214	0.01267	Uiso	1	0.247
C8	C	0.2028	0.7435	0.239	0.01267	Uiso	1	-0.254
C9	C	0.2697	0.689	0.2764	0.01267	Uiso	1	-0.057
C10	C	0.6467	0.8723	0.0908	0.01267	Uiso	1	0.502
C11	C	0.6223	0.8137	0.1418	0.01267	Uiso	1	-0.004
C12	C	0.6465	0.7873	0.1728	0.01267	Uiso	1	-0.156
C13	C	0.6197	0.7329	0.2258	0.01267	Uiso	1	-0.003
C14	C	0.6455	0.706	0.26	0.01267	Uiso	1	0.616
C15	C	0.5684	0.7032	0.2476	0.01267	Uiso	1	-0.215

C16	C	0.544	0.7296	0.2158	0.01267	Uiso	1	0.257
C17	C	0.5707	0.7837	0.1628	0.01267	Uiso	1	-0.259
C18	C	0.4625	0.7249	0.2188	0.01267	Uiso	1	-0.058
C19	C	0.257	0.3643	0.625	0.01267	Uiso	1	0.616
C20	C	0.2294	0.3888	0.5926	0.01267	Uiso	1	0.003
C21	C	0.1764	0.3627	0.6168	0.01267	Uiso	1	-0.139
C22	C	0.1501	0.3859	0.5892	0.01267	Uiso	1	0.003
C23	C	0.0913	0.3576	0.6168	0.01267	Uiso	1	0.629
C24	C	0.1814	0.4345	0.5288	0.01267	Uiso	1	-0.212
C25	C	0.2354	0.4621	0.5018	0.01267	Uiso	1	0.256
C26	C	0.26	0.4398	0.5332	0.01267	Uiso	1	-0.250
C27	C	0.3351	0.6012	0.352	0.01267	Uiso	1	0.132
C28	C	0.2949	0.6174	0.342	0.01267	Uiso	1	-0.245
C29	C	0.3166	0.5431	0.41	0.01267	Uiso	1	-0.058
C30	C	0.3666	0.7031	0.2486	0.01267	Uiso	1	-0.250
C31	C	0.4049	0.6839	0.2596	0.01267	Uiso	1	0.129
C32	C	0.3869	0.6341	0.3148	0.01267	Uiso	1	-0.244
C33	C	0.3105	0.6684	0.2914	0.01267	Uiso	1	0.128
C34	C	0.6336	0.0005	0.2528	0.01267	Uiso	1	0.614
C35	C	0.6072	0.0069	0.2186	0.01267	Uiso	1	0.022
C36	C	0.6333	0.0028	0.1666	0.01267	Uiso	1	-0.111
C37	C	0.6064	0.0032	0.138	0.01267	Uiso	1	-0.394
C38	C	0.6323	0.9934	0.0876	0.01267	Uiso	1	1.349
C39	C	0.555	0.0091	0.1606	0.01267	Uiso	1	-0.139
C40	C	0.5295	0.0127	0.214	0.01267	Uiso	1	0.259
C41	C	0.5582	0.0175	0.239	0.01267	Uiso	1	-0.234
C42	C	0.4539	0.0346	0.2764	0.01267	Uiso	1	-0.055
C43	C	0.2625	0.0369	0.0908	0.01267	Uiso	1	0.943
C44	C	0.2359	0.0445	0.1418	0.01267	Uiso	1	-0.345
C45	C	0.1807	0.0399	0.1728	0.01267	Uiso	1	-0.070
C46	C	0.1545	0.0413	0.2258	0.01267	Uiso	1	0.002
C47	C	0.0945	0.034	0.26	0.01267	Uiso	1	0.615
C48	C	0.184	0.0492	0.2476	0.01267	Uiso	1	-0.208
C49	C	0.2402	0.0546	0.2158	0.01267	Uiso	1	0.273
C50	C	0.2665	0.0535	0.1628	0.01267	Uiso	1	-0.225
C51	C	0.3187	0.0563	0.2188	0.01267	Uiso	1	-0.057
C52	C	0.118	0.0107	0.625	0.01267	Uiso	1	0.616
C53	C	0.178	0.0186	0.5926	0.01267	Uiso	1	0.003
C54	C	0.2068	0.0205	0.6168	0.01267	Uiso	1	-0.135
C55	C	0.2607	0.0249	0.5892	0.01267	Uiso	1	0.003
C56	C	0.2919	0.0256	0.6168	0.01267	Uiso	1	0.631
C57	C	0.2898	0.0367	0.5288	0.01267	Uiso	1	-0.210
C58	C	0.2628	0.0361	0.5018	0.01267	Uiso	1	0.255
C59	C	0.2068	0.027	0.5332	0.01267	Uiso	1	-0.254
C60	C	0.3129	0.0468	0.352	0.01267	Uiso	1	0.135
C61	C	0.3631	0.0406	0.342	0.01267	Uiso	1	-0.244
C62	C	0.2734	0.0469	0.41	0.01267	Uiso	1	-0.062
C63	C	0.3848	0.0483	0.2486	0.01267	Uiso	1	-0.250
C64	C	0.3355	0.0565	0.2596	0.01267	Uiso	1	0.130
C65	C	0.2983	0.0511	0.3148	0.01267	Uiso	1	-0.243
C66	C	0.3981	0.0402	0.2914	0.01267	Uiso	1	0.126
C67	C	0.7467	0.6336	0.2528	0.01267	Uiso	1	0.620

C68	C	0.7745	0.6072	0.2186	0.01267	Uiso	1	0.007
C69	C	0.8306	0.6333	0.1666	0.01267	Uiso	1	-0.158
C70	C	0.8588	0.6064	0.138	0.01267	Uiso	1	-0.013
C71	C	0.919	0.6323	0.0876	0.01267	Uiso	1	0.559
C72	C	0.8303	0.555	0.1606	0.01267	Uiso	1	-0.211
C73	C	0.7733	0.5295	0.214	0.01267	Uiso	1	0.248
C74	C	0.7435	0.5582	0.239	0.01267	Uiso	1	-0.252
C75	C	0.689	0.4539	0.2764	0.01267	Uiso	1	-0.054
C76	C	0.8723	0.2625	0.0908	0.01267	Uiso	1	0.550
C77	C	0.8137	0.2359	0.1418	0.01267	Uiso	1	0.002
C78	C	0.7873	0.1807	0.1728	0.01267	Uiso	1	-0.141
C79	C	0.7329	0.1545	0.2258	0.01267	Uiso	1	-0.002
C80	C	0.706	0.0945	0.26	0.01267	Uiso	1	0.616
C81	C	0.7032	0.184	0.2476	0.01267	Uiso	1	-0.215
C82	C	0.7296	0.2402	0.2158	0.01267	Uiso	1	0.260
C83	C	0.7837	0.2665	0.1628	0.01267	Uiso	1	-0.263
C84	C	0.7249	0.3187	0.2188	0.01267	Uiso	1	-0.057
C85	C	0.3643	0.118	0.625	0.01267	Uiso	1	0.616
C86	C	0.3888	0.178	0.5926	0.01267	Uiso	1	0.001
C87	C	0.3627	0.2068	0.6168	0.01267	Uiso	1	-0.138
C88	C	0.3859	0.2607	0.5892	0.01267	Uiso	1	0.004
C89	C	0.3576	0.2919	0.6168	0.01267	Uiso	1	0.629
C90	C	0.4345	0.2898	0.5288	0.01267	Uiso	1	-0.211
C91	C	0.4621	0.2628	0.5018	0.01267	Uiso	1	0.255
C92	C	0.4398	0.2068	0.5332	0.01267	Uiso	1	-0.252
C93	C	0.6012	0.3129	0.352	0.01267	Uiso	1	0.133
C94	C	0.6174	0.3631	0.342	0.01267	Uiso	1	-0.242
C95	C	0.5431	0.2734	0.41	0.01267	Uiso	1	-0.061
C96	C	0.7031	0.3848	0.2486	0.01267	Uiso	1	-0.250
C97	C	0.6839	0.3355	0.2596	0.01267	Uiso	1	0.127
C98	C	0.6341	0.2983	0.3148	0.01267	Uiso	1	-0.244
C99	C	0.6684	0.3981	0.2914	0.01267	Uiso	1	0.126
C100	C	0.0005	0.1136	0.2528	0.01267	Uiso	1	0.621
C101	C	0.0069	0.1742	0.2186	0.01267	Uiso	1	0.010
C102	C	0.0028	0.2001	0.1666	0.01267	Uiso	1	-0.157
C103	C	0.0032	0.2556	0.138	0.01267	Uiso	1	0.009
C104	C	0.9934	0.2801	0.0876	0.01267	Uiso	1	0.616
C105	C	0.0091	0.2844	0.1606	0.01267	Uiso	1	-0.267
C106	C	0.0127	0.2565	0.214	0.01267	Uiso	1	0.265
C107	C	0.0175	0.2028	0.239	0.01267	Uiso	1	-0.260
C108	C	0.0346	0.2697	0.2764	0.01267	Uiso	1	-0.055
C109	C	0.0369	0.6467	0.0908	0.01267	Uiso	1	0.608
C110	C	0.0445	0.6223	0.1418	0.01267	Uiso	1	0.019
C111	C	0.0399	0.6465	0.1728	0.01267	Uiso	1	-0.186
C112	C	0.0413	0.6197	0.2258	0.01267	Uiso	1	0.020
C113	C	0.034	0.6455	0.26	0.01267	Uiso	1	0.618
C114	C	0.0492	0.5684	0.2476	0.01267	Uiso	1	-0.221
C115	C	0.0546	0.544	0.2158	0.01267	Uiso	1	0.267
C116	C	0.0535	0.5707	0.1628	0.01267	Uiso	1	-0.257
C117	C	0.0563	0.4625	0.2188	0.01267	Uiso	1	-0.058
C118	C	0.0107	0.257	0.625	0.01267	Uiso	1	0.616
C119	C	0.0186	0.2294	0.5926	0.01267	Uiso	1	0.003

C120	C	0.0205	0.1764	0.6168	0.01267	Uiso	1	-0.136
C121	C	0.0249	0.1501	0.5892	0.01267	Uiso	1	0.000
C122	C	0.0256	0.0913	0.6168	0.01267	Uiso	1	0.629
C123	C	0.0367	0.1814	0.5288	0.01267	Uiso	1	-0.210
C124	C	0.0361	0.2354	0.5018	0.01267	Uiso	1	0.254
C125	C	0.027	0.26	0.5332	0.01267	Uiso	1	-0.250
C126	C	0.0468	0.3351	0.352	0.01267	Uiso	1	0.134
C127	C	0.0406	0.2949	0.342	0.01267	Uiso	1	-0.244
C128	C	0.0469	0.3166	0.41	0.01267	Uiso	1	-0.061
C129	C	0.0483	0.3666	0.2486	0.01267	Uiso	1	-0.250
C130	C	0.0565	0.4049	0.2596	0.01267	Uiso	1	0.128
C131	C	0.0511	0.3869	0.3148	0.01267	Uiso	1	-0.244
C132	C	0.0402	0.3105	0.2914	0.01267	Uiso	1	0.127
C133	C	0.8864	0.2533	0.7472	0.01267	Uiso	1	0.622
C134	C	0.8258	0.2255	0.7814	0.01267	Uiso	1	0.002
C135	C	0.7999	0.1694	0.8334	0.01267	Uiso	1	-0.155
C136	C	0.7444	0.1412	0.862	0.01267	Uiso	1	-0.013
C137	C	0.7199	0.081	0.9124	0.01267	Uiso	1	0.527
C138	C	0.7156	0.1697	0.8394	0.01267	Uiso	1	-0.222
C139	C	0.7435	0.2267	0.786	0.01267	Uiso	1	0.248
C140	C	0.7972	0.2565	0.761	0.01267	Uiso	1	-0.254
C141	C	0.7303	0.311	0.7236	0.01267	Uiso	1	-0.055
C142	C	0.3533	0.1277	0.9092	0.01267	Uiso	1	0.503
C143	C	0.3777	0.1863	0.8582	0.01267	Uiso	1	-0.006
C144	C	0.3535	0.2127	0.8272	0.01267	Uiso	1	-0.156
C145	C	0.3803	0.2671	0.7742	0.01267	Uiso	1	-0.003
C146	C	0.3545	0.294	0.74	0.01267	Uiso	1	0.617
C147	C	0.4316	0.2968	0.7524	0.01267	Uiso	1	-0.213
C148	C	0.456	0.2704	0.7842	0.01267	Uiso	1	0.257
C149	C	0.4293	0.2163	0.8372	0.01267	Uiso	1	-0.256
C150	C	0.5375	0.2751	0.7812	0.01267	Uiso	1	-0.056
C151	C	0.743	0.6357	0.375	0.01267	Uiso	1	0.620
C152	C	0.7706	0.6112	0.4074	0.01267	Uiso	1	0.001
C153	C	0.8236	0.6373	0.3832	0.01267	Uiso	1	-0.138
C154	C	0.8499	0.6141	0.4108	0.01267	Uiso	1	0.002
C155	C	0.9087	0.6424	0.3832	0.01267	Uiso	1	0.631
C156	C	0.8186	0.5655	0.4712	0.01267	Uiso	1	-0.212
C157	C	0.7646	0.5379	0.4982	0.01267	Uiso	1	0.256
C158	C	0.74	0.5602	0.4668	0.01267	Uiso	1	-0.249
C159	C	0.6649	0.3988	0.648	0.01267	Uiso	1	0.130
C160	C	0.7051	0.3826	0.658	0.01267	Uiso	1	-0.245
C161	C	0.6834	0.4569	0.59	0.01267	Uiso	1	-0.055
C162	C	0.6334	0.2969	0.7514	0.01267	Uiso	1	-0.251
C163	C	0.5951	0.3161	0.7404	0.01267	Uiso	1	0.127
C164	C	0.6131	0.3659	0.6852	0.01267	Uiso	1	-0.243
C165	C	0.6895	0.3316	0.7086	0.01267	Uiso	1	0.127
C166	C	0.3664	0.9995	0.7472	0.01267	Uiso	1	0.614
C167	C	0.3928	0.9931	0.7814	0.01267	Uiso	1	0.023
C168	C	0.3667	0.9972	0.8334	0.01267	Uiso	1	-0.112
C169	C	0.3936	0.9968	0.862	0.01267	Uiso	1	-0.394
C170	C	0.3677	0.0066	0.9124	0.01267	Uiso	1	1.349
C171	C	0.445	0.9909	0.8394	0.01267	Uiso	1	-0.138

C172	C	0.4705	0.9873	0.786	0.01267	Uiso	1	0.257
C173	C	0.4418	0.9825	0.761	0.01267	Uiso	1	-0.234
C174	C	0.5461	0.9654	0.7236	0.01267	Uiso	1	-0.056
C175	C	0.7375	0.9631	0.9092	0.01267	Uiso	1	0.944
C176	C	0.7641	0.9555	0.8582	0.01267	Uiso	1	-0.345
C177	C	0.8193	0.9601	0.8272	0.01267	Uiso	1	-0.070
C178	C	0.8455	0.9587	0.7742	0.01267	Uiso	1	0.003
C179	C	0.9055	0.966	0.74	0.01267	Uiso	1	0.614
C180	C	0.816	0.9508	0.7524	0.01267	Uiso	1	-0.206
C181	C	0.7598	0.9454	0.7842	0.01267	Uiso	1	0.270
C182	C	0.7335	0.9465	0.8372	0.01267	Uiso	1	-0.222
C183	C	0.6813	0.9437	0.7812	0.01267	Uiso	1	-0.057
C184	C	0.882	0.9893	0.375	0.01267	Uiso	1	0.619
C185	C	0.822	0.9814	0.4074	0.01267	Uiso	1	0.004
C186	C	0.7932	0.9795	0.3832	0.01267	Uiso	1	-0.137
C187	C	0.7393	0.9751	0.4108	0.01267	Uiso	1	0.004
C188	C	0.7081	0.9744	0.3832	0.01267	Uiso	1	0.630
C189	C	0.7102	0.9633	0.4712	0.01267	Uiso	1	-0.214
C190	C	0.7372	0.9639	0.4982	0.01267	Uiso	1	0.257
C191	C	0.7932	0.973	0.4668	0.01267	Uiso	1	-0.251
C192	C	0.6871	0.9532	0.648	0.01267	Uiso	1	0.135
C193	C	0.6369	0.9594	0.658	0.01267	Uiso	1	-0.245
C194	C	0.7266	0.9531	0.59	0.01267	Uiso	1	-0.058
C195	C	0.6152	0.9517	0.7514	0.01267	Uiso	1	-0.247
C196	C	0.6645	0.9435	0.7404	0.01267	Uiso	1	0.129
C197	C	0.7017	0.9489	0.6852	0.01267	Uiso	1	-0.244
C198	C	0.6019	0.9598	0.7086	0.01267	Uiso	1	0.126
C199	C	0.2533	0.3664	0.7472	0.01267	Uiso	1	0.621
C200	C	0.2255	0.3928	0.7814	0.01267	Uiso	1	0.003
C201	C	0.1694	0.3667	0.8334	0.01267	Uiso	1	-0.155
C202	C	0.1412	0.3936	0.862	0.01267	Uiso	1	-0.013
C203	C	0.081	0.3677	0.9124	0.01267	Uiso	1	0.557
C204	C	0.1697	0.445	0.8394	0.01267	Uiso	1	-0.211
C205	C	0.2267	0.4705	0.786	0.01267	Uiso	1	0.247
C206	C	0.2565	0.4418	0.761	0.01267	Uiso	1	-0.249
C207	C	0.311	0.5461	0.7236	0.01267	Uiso	1	-0.056
C208	C	0.1277	0.7375	0.9092	0.01267	Uiso	1	0.551
C209	C	0.1863	0.7641	0.8582	0.01267	Uiso	1	0.002
C210	C	0.2127	0.8193	0.8272	0.01267	Uiso	1	-0.140
C211	C	0.2671	0.8455	0.7742	0.01267	Uiso	1	-0.004
C212	C	0.294	0.9055	0.74	0.01267	Uiso	1	0.618
C213	C	0.2968	0.816	0.7524	0.01267	Uiso	1	-0.213
C214	C	0.2704	0.7598	0.7842	0.01267	Uiso	1	0.258
C215	C	0.2163	0.7335	0.8372	0.01267	Uiso	1	-0.263
C216	C	0.2751	0.6813	0.7812	0.01267	Uiso	1	-0.057
C217	C	0.6357	0.882	0.375	0.01267	Uiso	1	0.619
C218	C	0.6112	0.822	0.4074	0.01267	Uiso	1	-0.001
C219	C	0.6373	0.7932	0.3832	0.01267	Uiso	1	-0.135
C220	C	0.6141	0.7393	0.4108	0.01267	Uiso	1	0.001
C221	C	0.6424	0.7081	0.3832	0.01267	Uiso	1	0.629
C222	C	0.5655	0.7102	0.4712	0.01267	Uiso	1	-0.210
C223	C	0.5379	0.7372	0.4982	0.01267	Uiso	1	0.256

C224	C	0.5602	0.7932	0.4668	0.01267	Uiso	1	-0.252
C225	C	0.3988	0.6871	0.648	0.01267	Uiso	1	0.134
C226	C	0.3826	0.6369	0.658	0.01267	Uiso	1	-0.246
C227	C	0.4569	0.7266	0.59	0.01267	Uiso	1	-0.058
C228	C	0.2969	0.6152	0.7514	0.01267	Uiso	1	-0.249
C229	C	0.3161	0.6645	0.7404	0.01267	Uiso	1	0.127
C230	C	0.3659	0.7017	0.6852	0.01267	Uiso	1	-0.244
C231	C	0.3316	0.6019	0.7086	0.01267	Uiso	1	0.128
C232	C	0.9995	0.8864	0.7472	0.01267	Uiso	1	0.621
C233	C	0.9931	0.8258	0.7814	0.01267	Uiso	1	0.012
C234	C	0.9972	0.7999	0.8334	0.01267	Uiso	1	-0.160
C235	C	0.9968	0.7444	0.862	0.01267	Uiso	1	0.009
C236	C	0.0066	0.7199	0.9124	0.01267	Uiso	1	0.617
C237	C	0.9909	0.7156	0.8394	0.01267	Uiso	1	-0.264
C238	C	0.9873	0.7435	0.786	0.01267	Uiso	1	0.265
C239	C	0.9825	0.7972	0.761	0.01267	Uiso	1	-0.261
C240	C	0.9654	0.7303	0.7236	0.01267	Uiso	1	-0.056
C241	C	0.9631	0.3533	0.9092	0.01267	Uiso	1	0.605
C242	C	0.9555	0.3777	0.8582	0.01267	Uiso	1	0.019
C243	C	0.9601	0.3535	0.8272	0.01267	Uiso	1	-0.185
C244	C	0.9587	0.3803	0.7742	0.01267	Uiso	1	0.020
C245	C	0.966	0.3545	0.74	0.01267	Uiso	1	0.619
C246	C	0.9508	0.4316	0.7524	0.01267	Uiso	1	-0.220
C247	C	0.9454	0.456	0.7842	0.01267	Uiso	1	0.265
C248	C	0.9465	0.4293	0.8372	0.01267	Uiso	1	-0.256
C249	C	0.9437	0.5375	0.7812	0.01267	Uiso	1	-0.055
C250	C	0.9893	0.743	0.375	0.01267	Uiso	1	0.618
C251	C	0.9814	0.7706	0.4074	0.01267	Uiso	1	0.002
C252	C	0.9795	0.8236	0.3832	0.01267	Uiso	1	-0.137
C253	C	0.9751	0.8499	0.4108	0.01267	Uiso	1	0.002
C254	C	0.9744	0.9087	0.3832	0.01267	Uiso	1	0.631
C255	C	0.9633	0.8186	0.4712	0.01267	Uiso	1	-0.213
C256	C	0.9639	0.7646	0.4982	0.01267	Uiso	1	0.256
C257	C	0.973	0.74	0.4668	0.01267	Uiso	1	-0.249
C258	C	0.9532	0.6649	0.648	0.01267	Uiso	1	0.133
C259	C	0.9594	0.7051	0.658	0.01267	Uiso	1	-0.244
C260	C	0.9531	0.6834	0.59	0.01267	Uiso	1	-0.059
C261	C	0.9517	0.6334	0.7514	0.01267	Uiso	1	-0.250
C262	C	0.9435	0.5951	0.7404	0.01267	Uiso	1	0.125
C263	C	0.9489	0.6131	0.6852	0.01267	Uiso	1	-0.243
C264	C	0.9598	0.6895	0.7086	0.01267	Uiso	1	0.127
O1	O	0.25392	0.94257	0.0655	0.01267	Uiso	1	-0.462
O2	O	0.32954	0.94235	0.06718	0.01267	Uiso	1	-0.450
O3	O	0.09001	0.77498	0.22862	0.01267	Uiso	1	-0.550
O4	O	0.09153	0.69766	0.30294	0.01267	Uiso	1	-0.593
O5	O	0.2921	0.7472	0.2278	0.01267	Uiso	1	-0.202
O6	O	0.69288	0.73366	0.23718	0.01267	Uiso	1	-0.572
O7	O	0.61578	0.6574	0.31478	0.01267	Uiso	1	-0.597
O8	O	0.69537	0.89744	0.06868	0.01267	Uiso	1	-0.408
O9	O	0.62103	0.89637	0.0657	0.01267	Uiso	1	-0.513
O10	O	0.4936	0.6966	0.241	0.01267	Uiso	1	-0.187
O11	O	0.30327	0.3922	0.60244	0.01267	Uiso	1	-0.570

O12	O	0.22769	0.31406	0.67868	0.01267	Uiso	1	-0.597
O13	O	0.06763	0.31124	0.66932	0.01267	Uiso	1	-0.580
O14	O	0.06883	0.38579	0.5911	0.01267	Uiso	1	-0.566
O15	O	0.2617	0.512	0.44	0.01267	Uiso	1	-0.206
O16	O	0.68058	0.99193	0.0655	0.01267	Uiso	1	-0.587
O17	O	0.60328	0.99047	0.06718	0.01267	Uiso	1	-0.642
O18	O	0.68137	0.9964	0.22862	0.01267	Uiso	1	-0.541
O19	O	0.60553	0.9994	0.30294	0.01267	Uiso	1	-0.589
O20	O	0.4801	0.025	0.2278	0.01267	Uiso	1	-0.194
O21	O	0.06994	0.02916	0.23718	0.01267	Uiso	1	-0.572
O22	O	0.06944	0.02782	0.31478	0.01267	Uiso	1	-0.592
O23	O	0.23595	0.03388	0.06868	0.01267	Uiso	1	-0.546
O24	O	0.31327	0.03793	0.0657	0.01267	Uiso	1	-0.535
O25	O	0.2654	0.0624	0.241	0.01267	Uiso	1	-0.183
O26	O	0.09429	0.00536	0.60244	0.01267	Uiso	1	-0.571
O27	O	0.09363	0.00726	0.67868	0.01267	Uiso	1	-0.595
O28	O	0.26305	0.01944	0.66932	0.01267	Uiso	1	-0.581
O29	O	0.34007	0.02311	0.5911	0.01267	Uiso	1	-0.567
O30	O	0.2983	0.048	0.44	0.01267	Uiso	1	-0.205
O31	O	0.94257	0.68058	0.0655	0.01267	Uiso	1	-0.335
O32	O	0.94235	0.60328	0.06718	0.01267	Uiso	1	-0.509
O33	O	0.77498	0.68137	0.22862	0.01267	Uiso	1	-0.554
O34	O	0.69766	0.60553	0.30294	0.01267	Uiso	1	-0.592
O35	O	0.7472	0.4801	0.2278	0.01267	Uiso	1	-0.203
O36	O	0.73366	0.06994	0.23718	0.01267	Uiso	1	-0.571
O37	O	0.6574	0.06944	0.31478	0.01267	Uiso	1	-0.597
O38	O	0.89744	0.23595	0.06868	0.01267	Uiso	1	-0.497
O39	O	0.89637	0.31327	0.0657	0.01267	Uiso	1	-0.384
O40	O	0.6966	0.2654	0.241	0.01267	Uiso	1	-0.186
O41	O	0.3922	0.09429	0.60244	0.01267	Uiso	1	-0.572
O42	O	0.31406	0.09363	0.67868	0.01267	Uiso	1	-0.596
O43	O	0.31124	0.26305	0.66932	0.01267	Uiso	1	-0.579
O44	O	0.38579	0.34007	0.5911	0.01267	Uiso	1	-0.567
O45	O	0.512	0.2983	0.44	0.01267	Uiso	1	-0.204
O46	O	0.99193	0.25392	0.0655	0.01267	Uiso	1	-0.423
O47	O	0.99047	0.32954	0.06718	0.01267	Uiso	1	-0.355
O48	O	0.9964	0.09001	0.22862	0.01267	Uiso	1	-0.554
O49	O	0.9994	0.09153	0.30294	0.01267	Uiso	1	-0.592
O50	O	0.025	0.2921	0.2278	0.01267	Uiso	1	-0.199
O51	O	0.02916	0.69288	0.23718	0.01267	Uiso	1	-0.591
O52	O	0.02782	0.61578	0.31478	0.01267	Uiso	1	-0.590
O53	O	0.03388	0.69537	0.06868	0.01267	Uiso	1	-0.355
O54	O	0.03793	0.62103	0.0657	0.01267	Uiso	1	-0.440
O55	O	0.0624	0.4936	0.241	0.01267	Uiso	1	-0.183
O56	O	0.00536	0.30327	0.60244	0.01267	Uiso	1	-0.571
O57	O	0.00726	0.22769	0.67868	0.01267	Uiso	1	-0.592
O58	O	0.01944	0.06763	0.66932	0.01267	Uiso	1	-0.579
O59	O	0.02311	0.06883	0.5911	0.01267	Uiso	1	-0.567
O60	O	0.048	0.2617	0.44	0.01267	Uiso	1	-0.205
O61	O	0.74608	0.05743	0.9345	0.01267	Uiso	1	-0.462
O62	O	0.67046	0.05765	0.93282	0.01267	Uiso	1	-0.450
O63	O	0.90999	0.22502	0.77138	0.01267	Uiso	1	-0.549

O64	O	0.90847	0.30234	0.69706	0.01267	Uiso	1	-0.593
O65	O	0.7079	0.2528	0.7722	0.01267	Uiso	1	-0.202
O66	O	0.30712	0.26634	0.76282	0.01267	Uiso	1	-0.572
O67	O	0.38422	0.3426	0.68522	0.01267	Uiso	1	-0.597
O68	O	0.30463	0.10256	0.93132	0.01267	Uiso	1	-0.409
O69	O	0.37897	0.10363	0.9343	0.01267	Uiso	1	-0.513
O70	O	0.5064	0.3034	0.759	0.01267	Uiso	1	-0.189
O71	O	0.69673	0.6078	0.39756	0.01267	Uiso	1	-0.573
O72	O	0.77231	0.68594	0.32132	0.01267	Uiso	1	-0.598
O73	O	0.93237	0.68876	0.33068	0.01267	Uiso	1	-0.581
O74	O	0.93117	0.61421	0.4089	0.01267	Uiso	1	-0.566
O75	O	0.7383	0.488	0.56	0.01267	Uiso	1	-0.208
O76	O	0.31942	0.00807	0.9345	0.01267	Uiso	1	-0.588
O77	O	0.39672	0.00953	0.93282	0.01267	Uiso	1	-0.642
O78	O	0.31863	0.0036	0.77138	0.01267	Uiso	1	-0.541
O79	O	0.39447	0.0006	0.69706	0.01267	Uiso	1	-0.589
O80	O	0.5199	0.975	0.7722	0.01267	Uiso	1	-0.193
O81	O	0.93006	0.97084	0.76282	0.01267	Uiso	1	-0.571
O82	O	0.93056	0.97218	0.68522	0.01267	Uiso	1	-0.592
O83	O	0.76405	0.96612	0.93132	0.01267	Uiso	1	-0.545
O84	O	0.68673	0.96207	0.9343	0.01267	Uiso	1	-0.535
O85	O	0.7346	0.9376	0.759	0.01267	Uiso	1	-0.182
O86	O	0.90571	0.99464	0.39756	0.01267	Uiso	1	-0.573
O87	O	0.90637	0.99274	0.32132	0.01267	Uiso	1	-0.596
O88	O	0.73695	0.98056	0.33068	0.01267	Uiso	1	-0.580
O89	O	0.65993	0.97689	0.4089	0.01267	Uiso	1	-0.567
O90	O	0.7017	0.952	0.56	0.01267	Uiso	1	-0.208
O91	O	0.05743	0.31942	0.9345	0.01267	Uiso	1	-0.334
O92	O	0.05765	0.39672	0.93282	0.01267	Uiso	1	-0.509
O93	O	0.22502	0.31863	0.77138	0.01267	Uiso	1	-0.555
O94	O	0.30234	0.39447	0.69706	0.01267	Uiso	1	-0.592
O95	O	0.2528	0.5199	0.7722	0.01267	Uiso	1	-0.203
O96	O	0.26634	0.93006	0.76282	0.01267	Uiso	1	-0.572
O97	O	0.3426	0.93056	0.68522	0.01267	Uiso	1	-0.597
O98	O	0.10256	0.76405	0.93132	0.01267	Uiso	1	-0.497
O99	O	0.10363	0.68673	0.9343	0.01267	Uiso	1	-0.385
O100	O	0.3034	0.7346	0.759	0.01267	Uiso	1	-0.187
O101	O	0.6078	0.90571	0.39756	0.01267	Uiso	1	-0.574
O102	O	0.68594	0.90637	0.32132	0.01267	Uiso	1	-0.597
O103	O	0.68876	0.73695	0.33068	0.01267	Uiso	1	-0.579
O104	O	0.61421	0.65993	0.4089	0.01267	Uiso	1	-0.566
O105	O	0.488	0.7017	0.56	0.01267	Uiso	1	-0.207
O106	O	0.00807	0.74608	0.9345	0.01267	Uiso	1	-0.425
O107	O	0.00953	0.67046	0.93282	0.01267	Uiso	1	-0.356
O108	O	0.0036	0.90999	0.77138	0.01267	Uiso	1	-0.554
O109	O	0.0006	0.90847	0.69706	0.01267	Uiso	1	-0.592
O110	O	0.975	0.7079	0.7722	0.01267	Uiso	1	-0.199
O111	O	0.97084	0.30712	0.76282	0.01267	Uiso	1	-0.591
O112	O	0.97218	0.38422	0.68522	0.01267	Uiso	1	-0.590
O113	O	0.96612	0.30463	0.93132	0.01267	Uiso	1	-0.355
O114	O	0.96207	0.37897	0.9343	0.01267	Uiso	1	-0.437
O115	O	0.9376	0.5064	0.759	0.01267	Uiso	1	-0.184

O116	O	0.99464	0.69673	0.39756	0.01267	Uiso	1	-0.571
O117	O	0.99274	0.77231	0.32132	0.01267	Uiso	1	-0.593
O118	O	0.98056	0.93237	0.33068	0.01267	Uiso	1	-0.581
O119	O	0.97689	0.93117	0.4089	0.01267	Uiso	1	-0.567
O120	O	0.952	0.7383	0.56	0.01267	Uiso	1	-0.206

```

data_ADUWIH_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            22.0720
_cell_length_b            22.0720
_cell_length_c            22.0720
_cell_angle_alpha        90.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.59254   0.90746   0.59254   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn2  Zn   0.90746   0.59254   0.59254   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn3  Zn   0.90746   0.90746   0.90746   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn4  Zn   0.59254   0.59254   0.90746   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn5  Zn   0.40746   0.09254   0.40746   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn6  Zn   0.09254   0.40746   0.40746   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn7  Zn   0.09254   0.09254   0.09254   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn8  Zn   0.40746   0.40746   0.09254   0.01267   Uiso  1   1.016
Zn9  Zn   0.5   0   0.5   0.01267   Uiso  1   1.080
Zn10 Zn   0   0.5   0.5   0.01267   Uiso  1   1.080
Zn11 Zn   0   0   0   0.01267   Uiso  1   1.080
Zn12 Zn   0.5   0.5   0   0.01267   Uiso  1   1.080
H1   H   0.5356 0.7475 0.5035 0.01267   Uiso  1   0.147
H2   H   0.4461 0.6938 0.3545 0.01267   Uiso  1   0.138
H3   H   0.4381 0.7939 0.3256 0.01267   Uiso  1   0.109
H4   H   0.481  0.8695 0.3815 0.01267   Uiso  1   0.126
H5   H   0.4298 0.6092 0.4201 0.01267   Uiso  1   0.104
H6   H   0.4899 0.5982 0.3828 0.01267   Uiso  1   0.101
H7   H   0.9644 0.7525 0.5035 0.01267   Uiso  1   0.147
H8   H   0.0539 0.8062 0.3545 0.01267   Uiso  1   0.138
H9   H   0.0619 0.7061 0.3256 0.01267   Uiso  1   0.109
H10  H   0.019  0.6305 0.3815 0.01267   Uiso  1   0.126
H11  H   0.0702 0.8908 0.4201 0.01267   Uiso  1   0.106
H12  H   0.0101 0.9018 0.3828 0.01267   Uiso  1   0.101
H13  H   0.9644 0.7475 0.9965 0.01267   Uiso  1   0.147
H14  H   0.0539 0.6938 0.1455 0.01267   Uiso  1   0.138

```

H15	H	0.0619	0.7939	0.1744	0.01267	Uiso	1	0.109
H16	H	0.019	0.8695	0.1185	0.01267	Uiso	1	0.126
H17	H	0.0702	0.6092	0.0799	0.01267	Uiso	1	0.106
H18	H	0.0101	0.5982	0.1172	0.01267	Uiso	1	0.101
H19	H	0.5356	0.7525	0.9965	0.01267	Uiso	1	0.147
H20	H	0.4461	0.8062	0.1455	0.01267	Uiso	1	0.138
H21	H	0.4381	0.7061	0.1744	0.01267	Uiso	1	0.109
H22	H	0.481	0.6305	0.1185	0.01267	Uiso	1	0.126
H23	H	0.4298	0.8908	0.0799	0.01267	Uiso	1	0.104
H24	H	0.4899	0.9018	0.1172	0.01267	Uiso	1	0.101
H25	H	0.5035	0.5356	0.7475	0.01267	Uiso	1	0.147
H26	H	0.3545	0.4461	0.6938	0.01267	Uiso	1	0.138
H27	H	0.3256	0.4381	0.7939	0.01267	Uiso	1	0.109
H28	H	0.3815	0.481	0.8695	0.01267	Uiso	1	0.126
H29	H	0.4201	0.4298	0.6092	0.01267	Uiso	1	0.104
H30	H	0.3828	0.4899	0.5982	0.01267	Uiso	1	0.101
H31	H	0.5035	0.9644	0.7525	0.01267	Uiso	1	0.147
H32	H	0.3545	0.0539	0.8062	0.01267	Uiso	1	0.138
H33	H	0.3256	0.0619	0.7061	0.01267	Uiso	1	0.109
H34	H	0.3815	0.019	0.6305	0.01267	Uiso	1	0.126
H35	H	0.4201	0.0702	0.8908	0.01267	Uiso	1	0.106
H36	H	0.3828	0.0101	0.9018	0.01267	Uiso	1	0.101
H37	H	0.9965	0.9644	0.7475	0.01267	Uiso	1	0.147
H38	H	0.1455	0.0539	0.6938	0.01267	Uiso	1	0.138
H39	H	0.1744	0.0619	0.7939	0.01267	Uiso	1	0.109
H40	H	0.1185	0.019	0.8695	0.01267	Uiso	1	0.126
H41	H	0.0799	0.0702	0.6092	0.01267	Uiso	1	0.106
H42	H	0.1172	0.0101	0.5982	0.01267	Uiso	1	0.101
H43	H	0.9965	0.5356	0.7525	0.01267	Uiso	1	0.147
H44	H	0.1455	0.4461	0.8062	0.01267	Uiso	1	0.138
H45	H	0.1744	0.4381	0.7061	0.01267	Uiso	1	0.109
H46	H	0.1185	0.481	0.6305	0.01267	Uiso	1	0.126
H47	H	0.0799	0.4298	0.8908	0.01267	Uiso	1	0.104
H48	H	0.1172	0.4899	0.9018	0.01267	Uiso	1	0.101
H49	H	0.7475	0.5035	0.5356	0.01267	Uiso	1	0.147
H50	H	0.6938	0.3545	0.4461	0.01267	Uiso	1	0.138
H51	H	0.7939	0.3256	0.4381	0.01267	Uiso	1	0.109
H52	H	0.8695	0.3815	0.481	0.01267	Uiso	1	0.126
H53	H	0.6092	0.4201	0.4298	0.01267	Uiso	1	0.104
H54	H	0.5982	0.3828	0.4899	0.01267	Uiso	1	0.101
H55	H	0.7525	0.5035	0.9644	0.01267	Uiso	1	0.147
H56	H	0.8062	0.3545	0.0539	0.01267	Uiso	1	0.138
H57	H	0.7061	0.3256	0.0619	0.01267	Uiso	1	0.109
H58	H	0.6305	0.3815	0.019	0.01267	Uiso	1	0.126
H59	H	0.8908	0.4201	0.0702	0.01267	Uiso	1	0.106
H60	H	0.9018	0.3828	0.0101	0.01267	Uiso	1	0.101
H61	H	0.7475	0.9965	0.9644	0.01267	Uiso	1	0.147
H62	H	0.6938	0.1455	0.0539	0.01267	Uiso	1	0.138
H63	H	0.7939	0.1744	0.0619	0.01267	Uiso	1	0.109
H64	H	0.8695	0.1185	0.019	0.01267	Uiso	1	0.126
H65	H	0.6092	0.0799	0.0702	0.01267	Uiso	1	0.106
H66	H	0.5982	0.1172	0.0101	0.01267	Uiso	1	0.101

H67	H	0.7525	0.9965	0.5356	0.01267	Uiso	1	0.147
H68	H	0.8062	0.1455	0.4461	0.01267	Uiso	1	0.138
H69	H	0.7061	0.1744	0.4381	0.01267	Uiso	1	0.109
H70	H	0.6305	0.1185	0.481	0.01267	Uiso	1	0.126
H71	H	0.8908	0.0799	0.4298	0.01267	Uiso	1	0.104
H72	H	0.9018	0.1172	0.4899	0.01267	Uiso	1	0.101
H73	H	0.4644	0.2525	0.4965	0.01267	Uiso	1	0.147
H74	H	0.5539	0.3062	0.6455	0.01267	Uiso	1	0.138
H75	H	0.5619	0.2061	0.6744	0.01267	Uiso	1	0.109
H76	H	0.519	0.1305	0.6185	0.01267	Uiso	1	0.126
H77	H	0.5702	0.3908	0.5799	0.01267	Uiso	1	0.105
H78	H	0.5101	0.4018	0.6172	0.01267	Uiso	1	0.101
H79	H	0.0356	0.2475	0.4965	0.01267	Uiso	1	0.147
H80	H	0.9461	0.1938	0.6455	0.01267	Uiso	1	0.138
H81	H	0.9381	0.2939	0.6744	0.01267	Uiso	1	0.109
H82	H	0.981	0.3695	0.6185	0.01267	Uiso	1	0.126
H83	H	0.9298	0.1092	0.5799	0.01267	Uiso	1	0.104
H84	H	0.9899	0.0982	0.6172	0.01267	Uiso	1	0.101
H85	H	0.0356	0.2525	0.0035	0.01267	Uiso	1	0.147
H86	H	0.9461	0.3062	0.8545	0.01267	Uiso	1	0.138
H87	H	0.9381	0.2061	0.8256	0.01267	Uiso	1	0.109
H88	H	0.981	0.1305	0.8815	0.01267	Uiso	1	0.126
H89	H	0.9298	0.3908	0.9201	0.01267	Uiso	1	0.104
H90	H	0.9899	0.4018	0.8828	0.01267	Uiso	1	0.101
H91	H	0.4644	0.2475	0.0035	0.01267	Uiso	1	0.147
H92	H	0.5539	0.1938	0.8545	0.01267	Uiso	1	0.138
H93	H	0.5619	0.2939	0.8256	0.01267	Uiso	1	0.109
H94	H	0.519	0.3695	0.8815	0.01267	Uiso	1	0.126
H95	H	0.5702	0.1092	0.9201	0.01267	Uiso	1	0.106
H96	H	0.5101	0.0982	0.8828	0.01267	Uiso	1	0.100
H97	H	0.4965	0.4644	0.2525	0.01267	Uiso	1	0.147
H98	H	0.6455	0.5539	0.3062	0.01267	Uiso	1	0.138
H99	H	0.6744	0.5619	0.2061	0.01267	Uiso	1	0.109
H100	H	0.6185	0.519	0.1305	0.01267	Uiso	1	0.126
H101	H	0.5799	0.5702	0.3908	0.01267	Uiso	1	0.105
H102	H	0.6172	0.5101	0.4018	0.01267	Uiso	1	0.101
H103	H	0.4965	0.0356	0.2475	0.01267	Uiso	1	0.147
H104	H	0.6455	0.9461	0.1938	0.01267	Uiso	1	0.138
H105	H	0.6744	0.9381	0.2939	0.01267	Uiso	1	0.109
H106	H	0.6185	0.981	0.3695	0.01267	Uiso	1	0.126
H107	H	0.5799	0.9298	0.1092	0.01267	Uiso	1	0.104
H108	H	0.6172	0.9899	0.0982	0.01267	Uiso	1	0.101
H109	H	0.0035	0.0356	0.2525	0.01267	Uiso	1	0.147
H110	H	0.8545	0.9461	0.3062	0.01267	Uiso	1	0.138
H111	H	0.8256	0.9381	0.2061	0.01267	Uiso	1	0.109
H112	H	0.8815	0.981	0.1305	0.01267	Uiso	1	0.126
H113	H	0.9201	0.9298	0.3908	0.01267	Uiso	1	0.104
H114	H	0.8828	0.9899	0.4018	0.01267	Uiso	1	0.101
H115	H	0.0035	0.4644	0.2475	0.01267	Uiso	1	0.147
H116	H	0.8545	0.5539	0.1938	0.01267	Uiso	1	0.138
H117	H	0.8256	0.5619	0.2939	0.01267	Uiso	1	0.109
H118	H	0.8815	0.519	0.3695	0.01267	Uiso	1	0.126

H119	H	0.9201	0.5702	0.1092	0.01267	Uiso	1	0.106	
H120	H	0.8828	0.5101	0.0982	0.01267	Uiso	1	0.100	
H121	H	0.2525	0.4965	0.4644	0.01267	Uiso	1	0.147	
H122	H	0.3062	0.6455	0.5539	0.01267	Uiso	1	0.138	
H123	H	0.2061	0.6744	0.5619	0.01267	Uiso	1	0.109	
H124	H	0.1305	0.6185	0.519	0.01267	Uiso	1	0.126	
H125	H	0.3908	0.5799	0.5702	0.01267	Uiso	1	0.105	
H126	H	0.4018	0.6172	0.5101	0.01267	Uiso	1	0.101	
H127	H	0.2475	0.4965	0.0356	0.01267	Uiso	1	0.147	
H128	H	0.1938	0.6455	0.9461	0.01267	Uiso	1	0.138	
H129	H	0.2939	0.6744	0.9381	0.01267	Uiso	1	0.109	
H130	H	0.3695	0.6185	0.981	0.01267	Uiso	1	0.126	
H131	H	0.1092	0.5799	0.9298	0.01267	Uiso	1	0.104	
H132	H	0.0982	0.6172	0.9899	0.01267	Uiso	1	0.101	
H133	H	0.2525	0.0035	0.0356	0.01267	Uiso	1	0.147	
H134	H	0.3062	0.8545	0.9461	0.01267	Uiso	1	0.138	
H135	H	0.2061	0.8256	0.9381	0.01267	Uiso	1	0.109	
H136	H	0.1305	0.8815	0.981	0.01267	Uiso	1	0.126	
H137	H	0.3908	0.9201	0.9298	0.01267	Uiso	1	0.104	
H138	H	0.4018	0.8828	0.9899	0.01267	Uiso	1	0.101	
H139	H	0.2475	0.0035	0.4644	0.01267	Uiso	1	0.147	
H140	H	0.1938	0.8545	0.5539	0.01267	Uiso	1	0.138	
H141	H	0.2939	0.8256	0.5619	0.01267	Uiso	1	0.109	
H142	H	0.3695	0.8815	0.519	0.01267	Uiso	1	0.126	
H143	H	0.1092	0.9201	0.5702	0.01267	Uiso	1	0.106	
H144	H	0.0982	0.8828	0.5101	0.01267	Uiso	1	0.100	
C1	C	0.51173		0.81511	0.44898	0.01267	Uiso	1	0.001
C2	C	0.51652		0.75665	0.46709	0.01267	Uiso	1	-0.245
C3	C	0.49283		0.70996	0.43111	0.01267	Uiso	1	0.260
C4	C	0.463	0.7241	0.3783	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C5	C	0.4586	0.7842	0.3612	0.01267	Uiso	1	-0.065	
C6	C	0.4832	0.82951		0.3947	0.01267	Uiso	1	-0.140
C7	C	0.53662		0.86454	0.48846	0.01267	Uiso	1	0.616
C8	C	0.47326		0.60328	0.42321	0.01267	Uiso	1	-0.066
C9	C	0.48786		0.5492	0.46263	0.01267	Uiso	1	0.010
C10	C	0.98827		0.68489	0.44898	0.01267	Uiso	1	0.001
C11	C	0.98348		0.74335	0.46709	0.01267	Uiso	1	-0.245
C12	C	0.00717		0.79004	0.43111	0.01267	Uiso	1	0.260
C13	C	0.037	0.7759	0.3783	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C14	C	0.0414	0.7158	0.3612	0.01267	Uiso	1	-0.064	
C15	C	0.0168	0.67049		0.3947	0.01267	Uiso	1	-0.139
C16	C	0.96338		0.63546	0.48846	0.01267	Uiso	1	0.617
C17	C	0.02674		0.89672	0.42321	0.01267	Uiso	1	-0.068
C18	C	0.01214		0.9508	0.46263	0.01267	Uiso	1	0.010
C19	C	0.98827		0.81511	0.05102	0.01267	Uiso	1	0.001
C20	C	0.98348		0.75665	0.03291	0.01267	Uiso	1	-0.244
C21	C	0.00717		0.70996	0.06889	0.01267	Uiso	1	0.260
C22	C	0.037	0.7241	0.1217	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C23	C	0.0414	0.7842	0.1388	0.01267	Uiso	1	-0.065	
C24	C	0.0168	0.82951		0.1053	0.01267	Uiso	1	-0.139
C25	C	0.96338		0.86454	0.01154	0.01267	Uiso	1	0.616
C26	C	0.02674		0.60328	0.07679	0.01267	Uiso	1	-0.069

C27	C	0.01214	0.5492	0.03737	0.01267	Uiso	1	0.011
C28	C	0.51173	0.68489	0.05102	0.01267	Uiso	1	0.001
C29	C	0.51652	0.74335	0.03291	0.01267	Uiso	1	-0.244
C30	C	0.49283	0.79004	0.06889	0.01267	Uiso	1	0.260
C31	C	0.463	0.7759	0.1217	0.01267	Uiso	1	-0.260
C32	C	0.4586	0.7158	0.1388	0.01267	Uiso	1	-0.065
C33	C	0.4832	0.67049	0.1053	0.01267	Uiso	1	-0.140
C34	C	0.53662	0.63546	0.01154	0.01267	Uiso	1	0.617
C35	C	0.47326	0.89672	0.07679	0.01267	Uiso	1	-0.066
C36	C	0.48786	0.9508	0.03737	0.01267	Uiso	1	0.010
C37	C	0.44898	0.51173	0.81511	0.01267	Uiso	1	0.001
C38	C	0.46709	0.51652	0.75665	0.01267	Uiso	1	-0.244
C39	C	0.43111	0.49283	0.70996	0.01267	Uiso	1	0.260
C40	C	0.3783	0.463	0.7241	0.01267	Uiso	1	-0.260
C41	C	0.3612	0.4586	0.7842	0.01267	Uiso	1	-0.065
C42	C	0.3947	0.4832	0.82951	0.01267	Uiso	1	-0.140
C43	C	0.48846	0.53662	0.86454	0.01267	Uiso	1	0.616
C44	C	0.42321	0.47326	0.60328	0.01267	Uiso	1	-0.066
C45	C	0.46263	0.48786	0.5492	0.01267	Uiso	1	0.010
C46	C	0.44898	0.98827	0.68489	0.01267	Uiso	1	0.001
C47	C	0.46709	0.98348	0.74335	0.01267	Uiso	1	-0.245
C48	C	0.43111	0.00717	0.79004	0.01267	Uiso	1	0.260
C49	C	0.3783	0.037	0.7759	0.01267	Uiso	1	-0.260
C50	C	0.3612	0.0414	0.7158	0.01267	Uiso	1	-0.064
C51	C	0.3947	0.0168	0.67049	0.01267	Uiso	1	-0.139
C52	C	0.48846	0.96338	0.63546	0.01267	Uiso	1	0.617
C53	C	0.42321	0.02674	0.89672	0.01267	Uiso	1	-0.068
C54	C	0.46263	0.01214	0.9508	0.01267	Uiso	1	0.010
C55	C	0.05102	0.98827	0.81511	0.01267	Uiso	1	0.001
C56	C	0.03291	0.98348	0.75665	0.01267	Uiso	1	-0.244
C57	C	0.06889	0.00717	0.70996	0.01267	Uiso	1	0.260
C58	C	0.1217	0.037	0.7241	0.01267	Uiso	1	-0.260
C59	C	0.1388	0.0414	0.7842	0.01267	Uiso	1	-0.065
C60	C	0.1053	0.0168	0.82951	0.01267	Uiso	1	-0.139
C61	C	0.01154	0.96338	0.86454	0.01267	Uiso	1	0.616
C62	C	0.07679	0.02674	0.60328	0.01267	Uiso	1	-0.069
C63	C	0.03737	0.01214	0.5492	0.01267	Uiso	1	0.011
C64	C	0.05102	0.51173	0.68489	0.01267	Uiso	1	0.001
C65	C	0.03291	0.51652	0.74335	0.01267	Uiso	1	-0.244
C66	C	0.06889	0.49283	0.79004	0.01267	Uiso	1	0.260
C67	C	0.1217	0.463	0.7759	0.01267	Uiso	1	-0.260
C68	C	0.1388	0.4586	0.7158	0.01267	Uiso	1	-0.065
C69	C	0.1053	0.4832	0.67049	0.01267	Uiso	1	-0.140
C70	C	0.01154	0.53662	0.63546	0.01267	Uiso	1	0.617
C71	C	0.07679	0.47326	0.89672	0.01267	Uiso	1	-0.066
C72	C	0.03737	0.48786	0.9508	0.01267	Uiso	1	0.010
C73	C	0.81511	0.44898	0.51173	0.01267	Uiso	1	0.001
C74	C	0.75665	0.46709	0.51652	0.01267	Uiso	1	-0.244
C75	C	0.70996	0.43111	0.49283	0.01267	Uiso	1	0.260
C76	C	0.7241	0.3783	0.463	0.01267	Uiso	1	-0.260
C77	C	0.7842	0.3612	0.4586	0.01267	Uiso	1	-0.065
C78	C	0.82951	0.3947	0.4832	0.01267	Uiso	1	-0.140

C79	C	0.86454	0.48846	0.53662	0.01267	Uiso	1	0.616
C80	C	0.60328	0.42321	0.47326	0.01267	Uiso	1	-0.066
C81	C	0.5492	0.46263	0.48786	0.01267	Uiso	1	0.010
C82	C	0.68489	0.44898	0.98827	0.01267	Uiso	1	0.001
C83	C	0.74335	0.46709	0.98348	0.01267	Uiso	1	-0.245
C84	C	0.79004	0.43111	0.00717	0.01267	Uiso	1	0.260
C85	C	0.7759	0.3783	0.037	0.01267	Uiso	1	-0.260
C86	C	0.7158	0.3612	0.0414	0.01267	Uiso	1	-0.065
C87	C	0.67049	0.3947	0.0168	0.01267	Uiso	1	-0.139
C88	C	0.63546	0.48846	0.96338	0.01267	Uiso	1	0.617
C89	C	0.89672	0.42321	0.02674	0.01267	Uiso	1	-0.068
C90	C	0.9508	0.46263	0.01214	0.01267	Uiso	1	0.010
C91	C	0.81511	0.05102	0.98827	0.01267	Uiso	1	0.001
C92	C	0.75665	0.03291	0.98348	0.01267	Uiso	1	-0.244
C93	C	0.70996	0.06889	0.00717	0.01267	Uiso	1	0.260
C94	C	0.7241	0.1217	0.037	0.01267	Uiso	1	-0.260
C95	C	0.7842	0.1388	0.0414	0.01267	Uiso	1	-0.065
C96	C	0.82951	0.1053	0.0168	0.01267	Uiso	1	-0.139
C97	C	0.86454	0.01154	0.96338	0.01267	Uiso	1	0.616
C98	C	0.60328	0.07679	0.02674	0.01267	Uiso	1	-0.069
C99	C	0.5492	0.03737	0.01214	0.01267	Uiso	1	0.011
C100	C	0.68489	0.05102	0.51173	0.01267	Uiso	1	0.001
C101	C	0.74335	0.03291	0.51652	0.01267	Uiso	1	-0.244
C102	C	0.79004	0.06889	0.49283	0.01267	Uiso	1	0.260
C103	C	0.7759	0.1217	0.463	0.01267	Uiso	1	-0.260
C104	C	0.7158	0.1388	0.4586	0.01267	Uiso	1	-0.065
C105	C	0.67049	0.1053	0.4832	0.01267	Uiso	1	-0.140
C106	C	0.63546	0.01154	0.53662	0.01267	Uiso	1	0.617
C107	C	0.89672	0.07679	0.47326	0.01267	Uiso	1	-0.066
C108	C	0.9508	0.03737	0.48786	0.01267	Uiso	1	0.010
C109	C	0.48827	0.18489	0.55102	0.01267	Uiso	1	0.001
C110	C	0.48348	0.24335	0.53291	0.01267	Uiso	1	-0.245
C111	C	0.50717	0.29004	0.56889	0.01267	Uiso	1	0.260
C112	C	0.537	0.2759	0.6217	0.01267	Uiso	1	-0.260
C113	C	0.5414	0.2158	0.6388	0.01267	Uiso	1	-0.064
C114	C	0.5168	0.17049	0.6053	0.01267	Uiso	1	-0.140
C115	C	0.46338	0.13546	0.51154	0.01267	Uiso	1	0.616
C116	C	0.52674	0.39672	0.57679	0.01267	Uiso	1	-0.066
C117	C	0.51214	0.4508	0.53737	0.01267	Uiso	1	0.010
C118	C	0.01173	0.31511	0.55102	0.01267	Uiso	1	0.001
C119	C	0.01652	0.25665	0.53291	0.01267	Uiso	1	-0.245
C120	C	0.99283	0.20996	0.56889	0.01267	Uiso	1	0.260
C121	C	0.963	0.2241	0.6217	0.01267	Uiso	1	-0.260
C122	C	0.9586	0.2842	0.6388	0.01267	Uiso	1	-0.065
C123	C	0.9832	0.32951	0.6053	0.01267	Uiso	1	-0.139
C124	C	0.03662	0.36454	0.51154	0.01267	Uiso	1	0.616
C125	C	0.97326	0.10328	0.57679	0.01267	Uiso	1	-0.066
C126	C	0.98786	0.0492	0.53737	0.01267	Uiso	1	0.011
C127	C	0.01173	0.18489	0.94898	0.01267	Uiso	1	0.001
C128	C	0.01652	0.24335	0.96709	0.01267	Uiso	1	-0.244
C129	C	0.99283	0.29004	0.93111	0.01267	Uiso	1	0.260
C130	C	0.963	0.2759	0.8783	0.01267	Uiso	1	-0.260

C131	C	0.9586	0.2158	0.8612	0.01267	Uiso	1	-0.065	
C132	C	0.9832	0.17049	0.8947	0.01267	Uiso	1	-0.140	
C133	C	0.03662	0.13546	0.98846	0.01267	Uiso	1	0.616	
C134	C	0.97326	0.39672	0.92321	0.01267	Uiso	1	-0.066	
C135	C	0.98786	0.4508	0.96263	0.01267	Uiso	1	0.011	
C136	C	0.48827	0.31511	0.94898	0.01267	Uiso	1	0.001	
C137	C	0.48348	0.25665	0.96709	0.01267	Uiso	1	-0.244	
C138	C	0.50717	0.20996	0.93111	0.01267	Uiso	1	0.260	
C139	C	0.537	0.2241	0.8783	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C140	C	0.5414	0.2842	0.8612	0.01267	Uiso	1	-0.064	
C141	C	0.5168	0.32951	0.8947	0.01267	Uiso	1	-0.139	
C142	C	0.46338	0.36454	0.98846	0.01267	Uiso	1	0.616	
C143	C	0.52674	0.10328	0.92321	0.01267	Uiso	1	-0.068	
C144	C	0.51214	0.0492	0.96263	0.01267	Uiso	1	0.011	
C145	C	0.55102	0.48827	0.18489	0.01267	Uiso	1	0.001	
C146	C	0.53291	0.48348	0.24335	0.01267	Uiso	1	-0.245	
C147	C	0.56889	0.50717	0.29004	0.01267	Uiso	1	0.260	
C148	C	0.6217	0.537	0.2759	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C149	C	0.6388	0.5414	0.2158	0.01267	Uiso	1	-0.064	
C150	C	0.6053	0.5168	0.17049	0.01267	Uiso	1	-0.140	
C151	C	0.51154	0.46338	0.13546	0.01267	Uiso	1	0.616	
C152	C	0.57679	0.52674	0.39672	0.01267	Uiso	1	-0.066	
C153	C	0.53737	0.51214	0.4508	0.01267	Uiso	1	0.010	
C154	C	0.55102	0.01173	0.31511	0.01267	Uiso	1	0.001	
C155	C	0.53291	0.01652	0.25665	0.01267	Uiso	1	-0.245	
C156	C	0.56889	0.99283	0.20996	0.01267	Uiso	1	0.260	
C157	C	0.6217	0.963	0.2241	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C158	C	0.6388	0.9586	0.2842	0.01267	Uiso	1	-0.065	
C159	C	0.6053	0.9832	0.32951	0.01267	Uiso	1	-0.139	
C160	C	0.51154	0.03662	0.36454	0.01267	Uiso	1	0.616	
C161	C	0.57679	0.97326	0.10328	0.01267	Uiso	1	-0.066	
C162	C	0.53737	0.98786	0.0492	0.01267	Uiso	1	0.011	
C163	C	0.94898	0.01173	0.18489	0.01267	Uiso	1	0.001	
C164	C	0.96709	0.01652	0.24335	0.01267	Uiso	1	-0.244	
C165	C	0.93111	0.99283	0.29004	0.01267	Uiso	1	0.260	
C166	C	0.8783	0.963	0.2759	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C167	C	0.8612	0.9586	0.2158	0.01267	Uiso	1	-0.065	
C168	C	0.8947	0.9832	0.17049	0.01267	Uiso	1	-0.140	
C169	C	0.98846	0.03662	0.13546	0.01267	Uiso	1	0.616	
C170	C	0.92321	0.97326	0.39672	0.01267	Uiso	1	-0.066	
C171	C	0.96263	0.98786	0.4508	0.01267	Uiso	1	0.011	
C172	C	0.94898	0.48827	0.31511	0.01267	Uiso	1	0.001	
C173	C	0.96709	0.48348	0.25665	0.01267	Uiso	1	-0.244	
C174	C	0.93111	0.50717	0.20996	0.01267	Uiso	1	0.260	
C175	C	0.8783	0.537	0.2241	0.01267	Uiso	1	-0.260	
C176	C	0.8612	0.5414	0.2842	0.01267	Uiso	1	-0.064	
C177	C	0.8947	0.5168	0.32951	0.01267	Uiso	1	-0.139	
C178	C	0.98846	0.46338	0.36454	0.01267	Uiso	1	0.616	
C179	C	0.92321	0.52674	0.10328	0.01267	Uiso	1	-0.068	
C180	C	0.96263	0.51214	0.0492	0.01267	Uiso	1	0.011	
C181	C	0.18489	0.55102	0.48827	0.01267	Uiso	1	0.001	
C182	C	0.24335	0.53291	0.48348	0.01267	Uiso	1	-0.245	

C183	C	0.29004	0.56889	0.50717	0.01267	Uiso	1	0.260
C184	C	0.2759	0.6217	0.537	0.01267	Uiso	1	-0.260
C185	C	0.2158	0.6388	0.5414	0.01267	Uiso	1	-0.064
C186	C	0.17049	0.6053	0.5168	0.01267	Uiso	1	-0.140
C187	C	0.13546	0.51154	0.46338	0.01267	Uiso	1	0.616
C188	C	0.39672	0.57679	0.52674	0.01267	Uiso	1	-0.066
C189	C	0.4508	0.53737	0.51214	0.01267	Uiso	1	0.010
C190	C	0.31511	0.55102	0.01173	0.01267	Uiso	1	0.001
C191	C	0.25665	0.53291	0.01652	0.01267	Uiso	1	-0.245
C192	C	0.20996	0.56889	0.99283	0.01267	Uiso	1	0.260
C193	C	0.2241	0.6217	0.963	0.01267	Uiso	1	-0.260
C194	C	0.2842	0.6388	0.9586	0.01267	Uiso	1	-0.065
C195	C	0.32951	0.6053	0.9832	0.01267	Uiso	1	-0.139
C196	C	0.36454	0.51154	0.03662	0.01267	Uiso	1	0.616
C197	C	0.10328	0.57679	0.97326	0.01267	Uiso	1	-0.066
C198	C	0.0492	0.53737	0.98786	0.01267	Uiso	1	0.011
C199	C	0.18489	0.94898	0.01173	0.01267	Uiso	1	0.001
C200	C	0.24335	0.96709	0.01652	0.01267	Uiso	1	-0.244
C201	C	0.29004	0.93111	0.99283	0.01267	Uiso	1	0.260
C202	C	0.2759	0.8783	0.963	0.01267	Uiso	1	-0.260
C203	C	0.2158	0.8612	0.9586	0.01267	Uiso	1	-0.065
C204	C	0.17049	0.8947	0.9832	0.01267	Uiso	1	-0.140
C205	C	0.13546	0.98846	0.03662	0.01267	Uiso	1	0.616
C206	C	0.39672	0.92321	0.97326	0.01267	Uiso	1	-0.066
C207	C	0.4508	0.96263	0.98786	0.01267	Uiso	1	0.011
C208	C	0.31511	0.94898	0.48827	0.01267	Uiso	1	0.001
C209	C	0.25665	0.96709	0.48348	0.01267	Uiso	1	-0.244
C210	C	0.20996	0.93111	0.50717	0.01267	Uiso	1	0.260
C211	C	0.2241	0.8783	0.537	0.01267	Uiso	1	-0.260
C212	C	0.2842	0.8612	0.5414	0.01267	Uiso	1	-0.065
C213	C	0.32951	0.8947	0.5168	0.01267	Uiso	1	-0.139
C214	C	0.36454	0.98846	0.46338	0.01267	Uiso	1	0.616
C215	C	0.10328	0.92321	0.52674	0.01267	Uiso	1	-0.068
C216	C	0.0492	0.96263	0.51214	0.01267	Uiso	1	0.011
O1	O	0.53458	0.91755	0.47055	0.01267	Uiso	1	-0.567
O2	O	0.55924	0.8477	0.53876	0.01267	Uiso	1	-0.582
O3	O	0.5014	0.6534	0.45378	0.01267	Uiso	1	-0.208
O4	O	0.96542	0.58245	0.47055	0.01267	Uiso	1	-0.567
O5	O	0.94076	0.6523	0.53876	0.01267	Uiso	1	-0.582
O6	O	0.9986	0.8466	0.45378	0.01267	Uiso	1	-0.208
O7	O	0.96542	0.91755	0.02945	0.01267	Uiso	1	-0.567
O8	O	0.94076	0.8477	0.96124	0.01267	Uiso	1	-0.583
O9	O	0.9986	0.6534	0.04622	0.01267	Uiso	1	-0.208
O10	O	0.53458	0.58245	0.02945	0.01267	Uiso	1	-0.567
O11	O	0.55924	0.6523	0.96124	0.01267	Uiso	1	-0.582
O12	O	0.5014	0.8466	0.04622	0.01267	Uiso	1	-0.208
O13	O	0.47055	0.53458	0.91755	0.01267	Uiso	1	-0.567
O14	O	0.53876	0.55924	0.8477	0.01267	Uiso	1	-0.582
O15	O	0.45378	0.5014	0.6534	0.01267	Uiso	1	-0.208
O16	O	0.47055	0.96542	0.58245	0.01267	Uiso	1	-0.567
O17	O	0.53876	0.94076	0.6523	0.01267	Uiso	1	-0.582
O18	O	0.45378	0.9986	0.8466	0.01267	Uiso	1	-0.208

O19	O	0.02945	0.96542	0.91755	0.01267	Uiso	1	-0.567
O20	O	0.96124	0.94076	0.8477	0.01267	Uiso	1	-0.583
O21	O	0.04622	0.9986	0.6534	0.01267	Uiso	1	-0.208
O22	O	0.02945	0.53458	0.58245	0.01267	Uiso	1	-0.567
O23	O	0.96124	0.55924	0.6523	0.01267	Uiso	1	-0.582
O24	O	0.04622	0.5014	0.8466	0.01267	Uiso	1	-0.208
O25	O	0.91755	0.47055	0.53458	0.01267	Uiso	1	-0.567
O26	O	0.8477	0.53876	0.55924	0.01267	Uiso	1	-0.582
O27	O	0.6534	0.45378	0.5014	0.01267	Uiso	1	-0.208
O28	O	0.58245	0.47055	0.96542	0.01267	Uiso	1	-0.567
O29	O	0.6523	0.53876	0.94076	0.01267	Uiso	1	-0.582
O30	O	0.8466	0.45378	0.9986	0.01267	Uiso	1	-0.208
O31	O	0.91755	0.02945	0.96542	0.01267	Uiso	1	-0.567
O32	O	0.8477	0.96124	0.94076	0.01267	Uiso	1	-0.583
O33	O	0.6534	0.04622	0.9986	0.01267	Uiso	1	-0.208
O34	O	0.58245	0.02945	0.53458	0.01267	Uiso	1	-0.567
O35	O	0.6523	0.96124	0.55924	0.01267	Uiso	1	-0.582
O36	O	0.8466	0.04622	0.5014	0.01267	Uiso	1	-0.208
O37	O	0.46542	0.08245	0.52945	0.01267	Uiso	1	-0.567
O38	O	0.44076	0.1523	0.46124	0.01267	Uiso	1	-0.583
O39	O	0.4986	0.3466	0.54622	0.01267	Uiso	1	-0.208
O40	O	0.03458	0.41755	0.52945	0.01267	Uiso	1	-0.567
O41	O	0.05924	0.3477	0.46124	0.01267	Uiso	1	-0.583
O42	O	0.0014	0.1534	0.54622	0.01267	Uiso	1	-0.208
O43	O	0.03458	0.08245	0.97055	0.01267	Uiso	1	-0.567
O44	O	0.05924	0.1523	0.03876	0.01267	Uiso	1	-0.582
O45	O	0.0014	0.3466	0.95378	0.01267	Uiso	1	-0.208
O46	O	0.46542	0.41755	0.97055	0.01267	Uiso	1	-0.567
O47	O	0.44076	0.3477	0.03876	0.01267	Uiso	1	-0.582
O48	O	0.4986	0.1534	0.95378	0.01267	Uiso	1	-0.208
O49	O	0.52945	0.46542	0.08245	0.01267	Uiso	1	-0.567
O50	O	0.46124	0.44076	0.1523	0.01267	Uiso	1	-0.583
O51	O	0.54622	0.4986	0.3466	0.01267	Uiso	1	-0.208
O52	O	0.52945	0.03458	0.41755	0.01267	Uiso	1	-0.567
O53	O	0.46124	0.05924	0.3477	0.01267	Uiso	1	-0.583
O54	O	0.54622	0.0014	0.1534	0.01267	Uiso	1	-0.208
O55	O	0.97055	0.03458	0.08245	0.01267	Uiso	1	-0.567
O56	O	0.03876	0.05924	0.1523	0.01267	Uiso	1	-0.582
O57	O	0.95378	0.0014	0.3466	0.01267	Uiso	1	-0.208
O58	O	0.97055	0.46542	0.41755	0.01267	Uiso	1	-0.567
O59	O	0.03876	0.44076	0.3477	0.01267	Uiso	1	-0.582
O60	O	0.95378	0.4986	0.1534	0.01267	Uiso	1	-0.208
O61	O	0.08245	0.52945	0.46542	0.01267	Uiso	1	-0.567
O62	O	0.1523	0.46124	0.44076	0.01267	Uiso	1	-0.583
O63	O	0.3466	0.54622	0.4986	0.01267	Uiso	1	-0.208
O64	O	0.41755	0.52945	0.03458	0.01267	Uiso	1	-0.567
O65	O	0.3477	0.46124	0.05924	0.01267	Uiso	1	-0.583
O66	O	0.1534	0.54622	0.0014	0.01267	Uiso	1	-0.208
O67	O	0.08245	0.97055	0.03458	0.01267	Uiso	1	-0.567
O68	O	0.1523	0.03876	0.05924	0.01267	Uiso	1	-0.582
O69	O	0.3466	0.95378	0.0014	0.01267	Uiso	1	-0.208
O70	O	0.41755	0.97055	0.46542	0.01267	Uiso	1	-0.567

O71	O	0.3477	0.03876	0.44076	0.01267	Uiso	1	-0.582
O72	O	0.1534	0.95378	0.4986	0.01267	Uiso	1	-0.208

data_image0 ADUWON_clean.cif

_cell_length_a 30.014

_cell_length_b 30.014

_cell_length_c 30.014

_cell_angle_alpha 90

_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x, y, z'

loop_

_atom_site_label

_atom_site_occupancy

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv

_atom_site_type_symbol

_atom_site_charge

H1	1	0.2353	0.1982	0.3491	Biso	1	H	0.113
H2	1	0.7353	0.6982	0.8491	Biso	1	H	0.112
H3	1	0.7647	0.8018	0.3491	Biso	1	H	0.113
H4	1	0.2647	0.3018	0.8491	Biso	1	H	0.112
H5	1	0.7647	0.1982	0.6509	Biso	1	H	0.113
H6	1	0.2647	0.6982	0.1509	Biso	1	H	0.111
H7	1	0.2353	0.8018	0.6509	Biso	1	H	0.113
H8	1	0.7353	0.3018	0.1509	Biso	1	H	0.113
H9	1	0.3491	0.2353	0.1982	Biso	1	H	0.113
H10	1	0.8491	0.7353	0.6982	Biso	1	H	0.112
H11	1	0.3491	0.7647	0.8018	Biso	1	H	0.113
H12	1	0.8491	0.2647	0.3018	Biso	1	H	0.112
H13	1	0.6509	0.7647	0.1982	Biso	1	H	0.113
H14	1	0.1509	0.2647	0.6982	Biso	1	H	0.111
H15	1	0.6509	0.2353	0.8018	Biso	1	H	0.112
H16	1	0.1509	0.7353	0.3018	Biso	1	H	0.112
H17	1	0.1982	0.3491	0.2353	Biso	1	H	0.113
H18	1	0.6982	0.8491	0.7353	Biso	1	H	0.112
H19	1	0.8018	0.3491	0.7647	Biso	1	H	0.113
H20	1	0.3018	0.8491	0.2647	Biso	1	H	0.113
H21	1	0.1982	0.6509	0.7647	Biso	1	H	0.113
H22	1	0.6982	0.1509	0.2647	Biso	1	H	0.111
H23	1	0.8018	0.6509	0.2353	Biso	1	H	0.112
H24	1	0.3018	0.1509	0.7353	Biso	1	H	0.113
H25	1	0.1982	0.2353	0.6509	Biso	1	H	0.113
H26	1	0.6982	0.7353	0.1509	Biso	1	H	0.113

H27	1	0.8018	0.7647	0.6509	Biso	1	H	0.113
H28	1	0.3018	0.2647	0.1509	Biso	1	H	0.113
H29	1	0.1982	0.7647	0.3491	Biso	1	H	0.113
H30	1	0.6982	0.2647	0.8491	Biso	1	H	0.111
H31	1	0.8018	0.2353	0.3491	Biso	1	H	0.112
H32	1	0.3018	0.7353	0.8491	Biso	1	H	0.112
H33	1	0.2353	0.3491	0.8018	Biso	1	H	0.112
H34	1	0.7353	0.8491	0.3018	Biso	1	H	0.112
H35	1	0.7647	0.3491	0.1982	Biso	1	H	0.113
H36	1	0.2647	0.8491	0.6982	Biso	1	H	0.111
H37	1	0.7647	0.6509	0.8018	Biso	1	H	0.113
H38	1	0.2647	0.1509	0.3018	Biso	1	H	0.113
H39	1	0.2353	0.6509	0.1982	Biso	1	H	0.113
H40	1	0.7353	0.1509	0.6982	Biso	1	H	0.113
H41	1	0.3491	0.1982	0.7647	Biso	1	H	0.113
H42	1	0.8491	0.6982	0.2647	Biso	1	H	0.111
H43	1	0.3491	0.8018	0.2353	Biso	1	H	0.112
H44	1	0.8491	0.3018	0.7353	Biso	1	H	0.112
H45	1	0.6509	0.1982	0.2353	Biso	1	H	0.113
H46	1	0.1509	0.6982	0.7353	Biso	1	H	0.113
H47	1	0.6509	0.8018	0.7647	Biso	1	H	0.113
H48	1	0.1509	0.3018	0.2647	Biso	1	H	0.113
H49	1	0.7647	0.8018	0.6509	Biso	1	H	0.113
H50	1	0.2647	0.3018	0.1509	Biso	1	H	0.113
H51	1	0.2353	0.1982	0.6509	Biso	1	H	0.113
H52	1	0.7353	0.6982	0.1509	Biso	1	H	0.113
H53	1	0.2353	0.8018	0.3491	Biso	1	H	0.112
H54	1	0.7353	0.3018	0.8491	Biso	1	H	0.112
H55	1	0.7647	0.1982	0.3491	Biso	1	H	0.113
H56	1	0.2647	0.6982	0.8491	Biso	1	H	0.111
H57	1	0.6509	0.7647	0.8018	Biso	1	H	0.113
H58	1	0.1509	0.2647	0.3018	Biso	1	H	0.113
H59	1	0.6509	0.2353	0.1982	Biso	1	H	0.113
H60	1	0.1509	0.7353	0.6982	Biso	1	H	0.113
H61	1	0.3491	0.2353	0.8018	Biso	1	H	0.112
H62	1	0.8491	0.7353	0.3018	Biso	1	H	0.112
H63	1	0.3491	0.7647	0.1982	Biso	1	H	0.113
H64	1	0.8491	0.2647	0.6982	Biso	1	H	0.111
H65	1	0.8018	0.6509	0.7647	Biso	1	H	0.113
H66	1	0.3018	0.1509	0.2647	Biso	1	H	0.113
H67	1	0.1982	0.6509	0.2353	Biso	1	H	0.113
H68	1	0.6982	0.1509	0.7353	Biso	1	H	0.113
H69	1	0.8018	0.3491	0.2353	Biso	1	H	0.112
H70	1	0.3018	0.8491	0.7353	Biso	1	H	0.112
H71	1	0.1982	0.3491	0.7647	Biso	1	H	0.113
H72	1	0.6982	0.8491	0.2647	Biso	1	H	0.111
H73	1	0.8018	0.7647	0.3491	Biso	1	H	0.113
H74	1	0.3018	0.2647	0.8491	Biso	1	H	0.112
H75	1	0.1982	0.2353	0.3491	Biso	1	H	0.113
H76	1	0.6982	0.7353	0.8491	Biso	1	H	0.112
H77	1	0.8018	0.2353	0.6509	Biso	1	H	0.112
H78	1	0.3018	0.7353	0.1509	Biso	1	H	0.112

H79	1	0.1982	0.7647	0.6509	Biso	1	H	0.113	
H80	1	0.6982	0.2647	0.1509	Biso	1	H	0.111	
H81	1	0.7647	0.6509	0.1982	Biso	1	H	0.113	
H82	1	0.2647	0.1509	0.6982	Biso	1	H	0.111	
H83	1	0.2353	0.6509	0.8018	Biso	1	H	0.112	
H84	1	0.7353	0.1509	0.3018	Biso	1	H	0.113	
H85	1	0.2353	0.3491	0.1982	Biso	1	H	0.113	
H86	1	0.7353	0.8491	0.6982	Biso	1	H	0.112	
H87	1	0.7647	0.3491	0.8018	Biso	1	H	0.113	
H88	1	0.2647	0.8491	0.3018	Biso	1	H	0.113	
H89	1	0.6509	0.8018	0.2353	Biso	1	H	0.113	
H90	1	0.1509	0.3018	0.7353	Biso	1	H	0.113	
H91	1	0.6509	0.1982	0.7647	Biso	1	H	0.113	
H92	1	0.1509	0.6982	0.2647	Biso	1	H	0.111	
H93	1	0.3491	0.8018	0.7647	Biso	1	H	0.113	
H94	1	0.8491	0.3018	0.2647	Biso	1	H	0.112	
H95	1	0.3491	0.1982	0.2353	Biso	1	H	0.112	
H96	1	0.8491	0.6982	0.7353	Biso	1	H	0.112	
Ni1	1	0	0	0.37657	Biso	1	Ni	0.895	
Ni2	1	0.5	0.5	0.87657	Biso	1	Ni	0.895	
Ni3	1	0	0	0.62343	Biso	1	Ni	0.895	
Ni4	1	0.5	0.5	0.12343	Biso	1	Ni	0.894	
Ni5	1	0.37657	0	0	Biso	1	Ni	0.895	
Ni6	1	0.87657	0.5	0.5	Biso	1	Ni	0.895	
Ni7	1	0.62343	0	0	Biso	1	Ni	0.894	
Ni8	1	0.12343	0.5	0.5	Biso	1	Ni	0.896	
Ni9	1	0	0.37657	0	Biso	1	Ni	0.894	
Ni10	1	0.5	0.87657	0.5	Biso	1	Ni	0.895	
Ni11	1	0	0.62343	0	Biso	1	Ni	0.894	
Ni12	1	0.5	0.12343	0.5	Biso	1	Ni	0.894	
C1	1	0.06793		0.06793	0.3518 Biso	1	C	0.569	
C2	1	0.10191		0.10191	0.3686 Biso	1	C	0.019	
C3	1	0.1099	0.1099	0.4108	Biso	1	C	-0.136	
H97	1	0.0938	0.0938	0.4319	Biso	1	H	0.123	
C4	1	0.1374	0.1374	0.4242	Biso	1	C	-0.045	
H98	1	0.141	0.141	0.4548	Biso	1	H	0.101	
C5	1	0.1641	0.1641	0.395	Biso	1	C	-0.265	
H99	1	0.1847	0.1847	0.4055	Biso	1	H	0.138	
C6	1	0.15711		0.15711	0.3501 Biso	1	C	0.266	
C7	1	0.12524		0.12524	0.3352 Biso	1	C	-0.235	
H100	1	0.1201	0.1201	0.3051	Biso	1	H	0.162	
C8	1	0.21207		0.21207	0.3314 Biso	1	C	-0.074	
C9	1	0.23111		0.23111	0.28973	Biso	1	C	0.011
O1	1	0.0639	0.0639	0.31089	Biso	1	O	-0.413	
O2	1	0.04748		0.04748	0.38002	Biso	1	O	-0.481
O3	1	0.17918		0.17918	0.31775	Biso	1	O	-0.189
C10	1	0.56793		0.56793	0.8518 Biso	1	C	0.568	
C11	1	0.60191		0.60191	0.8686 Biso	1	C	0.019	
C12	1	0.6099	0.6099	0.9108	Biso	1	C	-0.138	
H101	1	0.5938	0.5938	0.9319	Biso	1	H	0.125	
C13	1	0.6374	0.6374	0.9242	Biso	1	C	-0.045	
H102	1	0.641	0.641	0.9548	Biso	1	H	0.101	

C14	1	0.6641	0.6641	0.895	Biso	1	C	-0.265			
H103	1	0.6847	0.6847	0.9055	Biso	1	H	0.137			
C15	1	0.65711		0.65711		0.8501	Biso	1	C	0.266	
C16	1	0.62524		0.62524		0.8352	Biso	1	C	-0.235	
H104	1	0.6201	0.6201	0.8051	Biso	1	H	0.162			
C17	1	0.71207		0.71207		0.8314	Biso	1	C	-0.074	
C18	1	0.73111		0.73111		0.78973		Biso	1	C	0.011
O4	1	0.5639	0.5639	0.81089		Biso	1	O	-0.412		
O5	1	0.54748		0.54748		0.88002		Biso	1	O	-0.481
O6	1	0.67918		0.67918		0.81775		Biso	1	O	-0.189
C19	1	0.93207		0.93207		0.3518	Biso	1	C	0.569	
C20	1	0.89809		0.89809		0.3686	Biso	1	C	0.019	
C21	1	0.8901	0.8901	0.4108	Biso	1	C	-0.136			
H105	1	0.9062	0.9062	0.4319	Biso	1	H	0.123			
C22	1	0.8626	0.8626	0.4242	Biso	1	C	-0.045			
H106	1	0.859	0.859	0.4548	Biso	1	H	0.101			
C23	1	0.8359	0.8359	0.395	Biso	1	C	-0.265			
H107	1	0.8153	0.8153	0.4055	Biso	1	H	0.138			
C24	1	0.84289		0.84289		0.3501	Biso	1	C	0.266	
C25	1	0.87476		0.87476		0.3352	Biso	1	C	-0.235	
H108	1	0.8799	0.8799	0.3051	Biso	1	H	0.162			
C26	1	0.78793		0.78793		0.3314	Biso	1	C	-0.074	
C27	1	0.76889		0.76889		0.28973		Biso	1	C	0.011
O7	1	0.9361	0.9361	0.31089		Biso	1	O	-0.413		
O8	1	0.95252		0.95252		0.38002		Biso	1	O	-0.481
O9	1	0.82082		0.82082		0.31775		Biso	1	O	-0.189
C28	1	0.43207		0.43207		0.8518	Biso	1	C	0.568	
C29	1	0.39809		0.39809		0.8686	Biso	1	C	0.020	
C30	1	0.3901	0.3901	0.9108	Biso	1	C	-0.136			
H109	1	0.4062	0.4062	0.9319	Biso	1	H	0.123			
C31	1	0.3626	0.3626	0.9242	Biso	1	C	-0.044			
H110	1	0.359	0.359	0.9548	Biso	1	H	0.101			
C32	1	0.3359	0.3359	0.895	Biso	1	C	-0.265			
H111	1	0.3153	0.3153	0.9055	Biso	1	H	0.138			
C33	1	0.34289		0.34289		0.8501	Biso	1	C	0.266	
C34	1	0.37476		0.37476		0.8352	Biso	1	C	-0.235	
H112	1	0.3799	0.3799	0.8051	Biso	1	H	0.162			
C35	1	0.28793		0.28793		0.8314	Biso	1	C	-0.074	
C36	1	0.26889		0.26889		0.78973		Biso	1	C	0.011
O10	1	0.4361	0.4361	0.81089		Biso	1	O	-0.413		
O11	1	0.45252		0.45252		0.88002		Biso	1	O	-0.481
O12	1	0.32082		0.32082		0.81775		Biso	1	O	-0.189
C37	1	0.93207		0.06793		0.6482	Biso	1	C	0.569	
C38	1	0.89809		0.10191		0.6314	Biso	1	C	0.019	
C39	1	0.8901	0.1099	0.5892	Biso	1	C	-0.139			
H113	1	0.9062	0.0938	0.5681	Biso	1	H	0.125			
C40	1	0.8626	0.1374	0.5758	Biso	1	C	-0.044			
H114	1	0.859	0.141	0.5452	Biso	1	H	0.101			
C41	1	0.8359	0.1641	0.605	Biso	1	C	-0.266			
H115	1	0.8153	0.1847	0.5945	Biso	1	H	0.138			
C42	1	0.84289		0.15711		0.6499	Biso	1	C	0.266	
C43	1	0.87476		0.12524		0.6648	Biso	1	C	-0.234	

H116	1	0.8799	0.1201	0.6949	Biso	1	H	0.162		
C44	1	0.78793		0.21207		0.6686	Biso	1	C	-0.074
C45	1	0.76889		0.23111		0.71027	Biso	1	C	0.011
O13	1	0.9361	0.0639	0.68911		Biso	1	O	-0.413	
O14	1	0.95252		0.04748		0.61998	Biso	1	O	-0.480
O15	1	0.82082		0.17918		0.68225	Biso	1	O	-0.190
C46	1	0.43207		0.56793		0.1482	Biso	1	C	0.569
C47	1	0.39809		0.60191		0.1314	Biso	1	C	0.019
C48	1	0.3901	0.6099	0.0892	Biso	1	C	-0.139		
H117	1	0.4062	0.5938	0.0681	Biso	1	H	0.125		
C49	1	0.3626	0.6374	0.0758	Biso	1	C	-0.045		
H118	1	0.359	0.641	0.0452	Biso	1	H	0.101		
C50	1	0.3359	0.6641	0.105	Biso	1	C	-0.265		
H119	1	0.3153	0.6847	0.0945	Biso	1	H	0.138		
C51	1	0.34289		0.65711		0.1499	Biso	1	C	0.266
C52	1	0.37476		0.62524		0.1648	Biso	1	C	-0.234
H120	1	0.3799	0.6201	0.1949	Biso	1	H	0.162		
C53	1	0.28793		0.71207		0.1686	Biso	1	C	-0.072
C54	1	0.26889		0.73111		0.21027	Biso	1	C	0.011
O16	1	0.4361	0.5639	0.18911		Biso	1	O	-0.413	
O17	1	0.45252		0.54748		0.11998	Biso	1	O	-0.481
O18	1	0.32082		0.67918		0.18225	Biso	1	O	-0.190
C55	1	0.06793		0.93207		0.6482	Biso	1	C	0.569
C56	1	0.10191		0.89809		0.6314	Biso	1	C	0.019
C57	1	0.1099	0.8901	0.5892	Biso	1	C	-0.139		
H121	1	0.0938	0.9062	0.5681	Biso	1	H	0.125		
C58	1	0.1374	0.8626	0.5758	Biso	1	C	-0.044		
H122	1	0.141	0.859	0.5452	Biso	1	H	0.101		
C59	1	0.1641	0.8359	0.605	Biso	1	C	-0.265		
H123	1	0.1847	0.8153	0.5945	Biso	1	H	0.138		
C60	1	0.15711		0.84289		0.6499	Biso	1	C	0.266
C61	1	0.12524		0.87476		0.6648	Biso	1	C	-0.234
H124	1	0.1201	0.8799	0.6949	Biso	1	H	0.162		
C62	1	0.21207		0.78793		0.6686	Biso	1	C	-0.074
C63	1	0.23111		0.76889		0.71027	Biso	1	C	0.010
O19	1	0.0639	0.9361	0.68911		Biso	1	O	-0.413	
O20	1	0.04748		0.95252		0.61998	Biso	1	O	-0.480
O21	1	0.17918		0.82082		0.68225	Biso	1	O	-0.189
C64	1	0.56793		0.43207		0.1482	Biso	1	C	0.569
C65	1	0.60191		0.39809		0.1314	Biso	1	C	0.019
C66	1	0.6099	0.3901	0.0892	Biso	1	C	-0.138		
H125	1	0.5938	0.4062	0.0681	Biso	1	H	0.125		
C67	1	0.6374	0.3626	0.0758	Biso	1	C	-0.044		
H126	1	0.641	0.359	0.0452	Biso	1	H	0.101		
C68	1	0.6641	0.3359	0.105	Biso	1	C	-0.265		
H127	1	0.6847	0.3153	0.0945	Biso	1	H	0.138		
C69	1	0.65711		0.34289		0.1499	Biso	1	C	0.266
C70	1	0.62524		0.37476		0.1648	Biso	1	C	-0.234
H128	1	0.6201	0.3799	0.1949	Biso	1	H	0.162		
C71	1	0.71207		0.28793		0.1686	Biso	1	C	-0.072
C72	1	0.73111		0.26889		0.21027	Biso	1	C	0.011
O22	1	0.5639	0.4361	0.18911		Biso	1	O	-0.413	

O23	1	0.54748	0.45252	0.11998	Biso	1	O	-0.481
O24	1	0.67918	0.32082	0.18225	Biso	1	O	-0.189
C73	1	0.3518	0.06793	0.06793	Biso	1	C	0.569
C74	1	0.3686	0.10191	0.10191	Biso	1	C	0.019
C75	1	0.4108	0.1099	0.1099	Biso	1	C	-0.136
H129	1	0.4319	0.0938	0.0938	Biso	1	H	0.123
C76	1	0.4242	0.1374	0.1374	Biso	1	C	-0.045
H130	1	0.4548	0.141	0.141	Biso	1	H	0.101
C77	1	0.395	0.1641	0.1641	Biso	1	C	-0.265
H131	1	0.4055	0.1847	0.1847	Biso	1	H	0.138
C78	1	0.3501	0.15711	0.15711	Biso	1	C	0.266
C79	1	0.3352	0.12524	0.12524	Biso	1	C	-0.235
H132	1	0.3051	0.1201	0.1201	Biso	1	H	0.162
C80	1	0.3314	0.21207	0.21207	Biso	1	C	-0.074
C81	1	0.28973	0.23111	0.23111	Biso	1	C	0.011
O25	1	0.31089	0.0639	0.0639	Biso	1	O	-0.413
O26	1	0.38002	0.04748	0.04748	Biso	1	O	-0.481
O27	1	0.31775	0.17918	0.17918	Biso	1	O	-0.190
C82	1	0.8518	0.56793	0.56793	Biso	1	C	0.568
C83	1	0.8686	0.60191	0.60191	Biso	1	C	0.019
C84	1	0.9108	0.6099	0.6099	Biso	1	C	-0.138
H133	1	0.9319	0.5938	0.5938	Biso	1	H	0.125
C85	1	0.9242	0.6374	0.6374	Biso	1	C	-0.045
H134	1	0.9548	0.641	0.641	Biso	1	H	0.101
C86	1	0.895	0.6641	0.6641	Biso	1	C	-0.265
H135	1	0.9055	0.6847	0.6847	Biso	1	H	0.137
C87	1	0.8501	0.65711	0.65711	Biso	1	C	0.266
C88	1	0.8352	0.62524	0.62524	Biso	1	C	-0.234
H136	1	0.8051	0.6201	0.6201	Biso	1	H	0.162
C89	1	0.8314	0.71207	0.71207	Biso	1	C	-0.074
C90	1	0.78973	0.73111	0.73111	Biso	1	C	0.010
O28	1	0.81089	0.5639	0.5639	Biso	1	O	-0.413
O29	1	0.88002	0.54748	0.54748	Biso	1	O	-0.480
O30	1	0.81775	0.67918	0.67918	Biso	1	O	-0.189
C91	1	0.3518	0.93207	0.93207	Biso	1	C	0.569
C92	1	0.3686	0.89809	0.89809	Biso	1	C	0.019
C93	1	0.4108	0.8901	0.8901	Biso	1	C	-0.136
H137	1	0.4319	0.9062	0.9062	Biso	1	H	0.123
C94	1	0.4242	0.8626	0.8626	Biso	1	C	-0.044
H138	1	0.4548	0.859	0.859	Biso	1	H	0.101
C95	1	0.395	0.8359	0.8359	Biso	1	C	-0.265
H139	1	0.4055	0.8153	0.8153	Biso	1	H	0.138
C96	1	0.3501	0.84289	0.84289	Biso	1	C	0.266
C97	1	0.3352	0.87476	0.87476	Biso	1	C	-0.235
H140	1	0.3051	0.8799	0.8799	Biso	1	H	0.162
C98	1	0.3314	0.78793	0.78793	Biso	1	C	-0.074
C99	1	0.28973	0.76889	0.76889	Biso	1	C	0.010
O31	1	0.31089	0.9361	0.9361	Biso	1	O	-0.413
O32	1	0.38002	0.95252	0.95252	Biso	1	O	-0.481
O33	1	0.31775	0.82082	0.82082	Biso	1	O	-0.189
C100	1	0.8518	0.43207	0.43207	Biso	1	C	0.568
C101	1	0.8686	0.39809	0.39809	Biso	1	C	0.020

C102	1	0.9108	0.3901	0.3901	Biso	1	C	-0.137	
H141	1	0.9319	0.4062	0.4062	Biso	1	H	0.123	
C103	1	0.9242	0.3626	0.3626	Biso	1	C	-0.044	
H142	1	0.9548	0.359	0.359	Biso	1	H	0.101	
C104	1	0.895	0.3359	0.3359	Biso	1	C	-0.266	
H143	1	0.9055	0.3153	0.3153	Biso	1	H	0.138	
C105	1	0.8501	0.34289	0.34289	Biso	1	C	0.266	
C106	1	0.8352	0.37476	0.37476	Biso	1	C	-0.235	
H144	1	0.8051	0.3799	0.3799	Biso	1	H	0.162	
C107	1	0.8314	0.28793	0.28793	Biso	1	C	-0.074	
C108	1	0.78973	0.26889	0.26889	Biso	1	C	0.011	
O34	1	0.81089	0.4361	0.4361	Biso	1	O	-0.413	
O35	1	0.88002	0.45252	0.45252	Biso	1	O	-0.480	
O36	1	0.81775	0.32082	0.32082	Biso	1	O	-0.189	
C109	1	0.6482	0.93207	0.06793	Biso	1	C	0.569	
C110	1	0.6314	0.89809	0.10191	Biso	1	C	0.019	
C111	1	0.5892	0.8901	0.1099	Biso	1	C	-0.139	
H145	1	0.5681	0.9062	0.0938	Biso	1	H	0.125	
C112	1	0.5758	0.8626	0.1374	Biso	1	C	-0.045	
H146	1	0.5452	0.859	0.141	Biso	1	H	0.101	
C113	1	0.605	0.8359	0.1641	Biso	1	C	-0.265	
H147	1	0.5945	0.8153	0.1847	Biso	1	H	0.138	
C114	1	0.6499	0.84289	0.15711	Biso	1	C	0.266	
C115	1	0.6648	0.87476	0.12524	Biso	1	C	-0.235	
H148	1	0.6949	0.8799	0.1201	Biso	1	H	0.162	
C116	1	0.6686	0.78793	0.21207	Biso	1	C	-0.074	
C117	1	0.71027	0.76889	0.23111	Biso	1	C	0.011	
O37	1	0.68911	0.9361	0.0639	Biso	1	O	-0.413	
O38	1	0.61998	0.95252	0.04748	Biso	1	O	-0.481	
O39	1	0.68225	0.82082	0.17918	Biso	1	O	-0.190	
C118	1	0.1482	0.43207	0.56793	Biso	1	C	0.569	
C119	1	0.1314	0.39809	0.60191	Biso	1	C	0.019	
C120	1	0.0892	0.3901	0.6099	Biso	1	C	-0.138	
H149	1	0.0681	0.4062	0.5938	Biso	1	H	0.125	
C121	1	0.0758	0.3626	0.6374	Biso	1	C	-0.045	
H150	1	0.0452	0.359	0.641	Biso	1	H	0.101	
C122	1	0.105	0.3359	0.6641	Biso	1	C	-0.265	
H151	1	0.0945	0.3153	0.6847	Biso	1	H	0.138	
C123	1	0.1499	0.34289	0.65711	Biso	1	C	0.266	
C124	1	0.1648	0.37476	0.62524	Biso	1	C	-0.235	
H152	1	0.1949	0.3799	0.6201	Biso	1	H	0.162	
C125	1	0.1686	0.28793	0.71207	Biso	1	C	-0.072	
C126	1	0.21027	0.26889	0.73111	Biso	1	C	0.011	
O40	1	0.18911	0.4361	0.5639	Biso	1	O	-0.413	
O41	1	0.11998	0.45252	0.54748	Biso	1	O	-0.481	
O42	1	0.18225	0.32082	0.67918	Biso	1	O	-0.189	
C127	1	0.6482	0.06793	0.93207	Biso	1	C	0.569	
C128	1	0.6314	0.10191	0.89809	Biso	1	C	0.019	
C129	1	0.5892	0.1099	0.8901	Biso	1	C	-0.139	
H153	1	0.5681	0.0938	0.9062	Biso	1	H	0.125	
C130	1	0.5758	0.1374	0.8626	Biso	1	C	-0.044	
H154	1	0.5452	0.141	0.859	Biso	1	H	0.101	

C131	1	0.605	0.1641	0.8359	Biso	1	C	-0.265	
H155	1	0.5945	0.1847	0.8153	Biso	1	H	0.138	
C132	1	0.6499	0.15711	0.84289	Biso	1	C	0.266	
C133	1	0.6648	0.12524	0.87476	Biso	1	C	-0.234	
H156	1	0.6949	0.1201	0.8799	Biso	1	H	0.162	
C134	1	0.6686	0.21207	0.78793	Biso	1	C	-0.074	
C135	1	0.71027	0.23111	0.76889	Biso	1	C	0.011	
O43	1	0.68911	0.0639	0.9361	Biso	1	O	-0.413	
O44	1	0.61998	0.04748	0.95252	Biso	1	O	-0.481	
O45	1	0.68225	0.17918	0.82082	Biso	1	O	-0.190	
C136	1	0.1482	0.56793	0.43207	Biso	1	C	0.569	
C137	1	0.1314	0.60191	0.39809	Biso	1	C	0.019	
C138	1	0.0892	0.6099	0.3901	Biso	1	C	-0.138	
H157	1	0.0681	0.5938	0.4062	Biso	1	H	0.125	
C139	1	0.0758	0.6374	0.3626	Biso	1	C	-0.045	
H158	1	0.0452	0.641	0.359	Biso	1	H	0.101	
C140	1	0.105	0.6641	0.3359	Biso	1	C	-0.265	
H159	1	0.0945	0.6847	0.3153	Biso	1	H	0.138	
C141	1	0.1499	0.65711	0.34289	Biso	1	C	0.266	
C142	1	0.1648	0.62524	0.37476	Biso	1	C	-0.235	
H160	1	0.1949	0.6201	0.3799	Biso	1	H	0.162	
C143	1	0.1686	0.71207	0.28793	Biso	1	C	-0.072	
C144	1	0.21027	0.73111	0.26889	Biso	1	C	0.011	
O46	1	0.18911	0.5639	0.4361	Biso	1	O	-0.413	
O47	1	0.11998	0.54748	0.45252	Biso	1	O	-0.481	
O48	1	0.18225	0.67918	0.32082	Biso	1	O	-0.189	
C145	1	0.06793	0.3518	0.06793	Biso	1	C	0.569	
C146	1	0.10191	0.3686	0.10191	Biso	1	C	0.019	
C147	1	0.1099	0.4108	0.1099	Biso	1	C	-0.136	
H161	1	0.0938	0.4319	0.0938	Biso	1	H	0.123	
C148	1	0.1374	0.4242	0.1374	Biso	1	C	-0.045	
H162	1	0.141	0.4548	0.141	Biso	1	H	0.101	
C149	1	0.1641	0.395	0.1641	Biso	1	C	-0.265	
H163	1	0.1847	0.4055	0.1847	Biso	1	H	0.138	
C150	1	0.15711	0.3501	0.15711	Biso	1	C	0.266	
C151	1	0.12524	0.3352	0.12524	Biso	1	C	-0.235	
H164	1	0.1201	0.3051	0.1201	Biso	1	H	0.162	
C152	1	0.21207	0.3314	0.21207	Biso	1	C	-0.074	
C153	1	0.23111	0.28973	0.23111	Biso	1	C	0.011	
O49	1	0.0639	0.31089	0.0639	Biso	1	O	-0.412	
O50	1	0.04748	0.38002	0.04748	Biso	1	O	-0.481	
O51	1	0.17918	0.31775	0.17918	Biso	1	O	-0.189	
C154	1	0.56793	0.8518	0.56793	Biso	1	C	0.568	
C155	1	0.60191	0.8686	0.60191	Biso	1	C	0.019	
C156	1	0.6099	0.9108	0.6099	Biso	1	C	-0.138	
H165	1	0.5938	0.9319	0.5938	Biso	1	H	0.125	
C157	1	0.6374	0.9242	0.6374	Biso	1	C	-0.045	
H166	1	0.641	0.9548	0.641	Biso	1	H	0.101	
C158	1	0.6641	0.895	0.6641	Biso	1	C	-0.265	
H167	1	0.6847	0.9055	0.6847	Biso	1	H	0.137	
C159	1	0.65711	0.8501	0.65711	Biso	1	C	0.266	
C160	1	0.62524	0.8352	0.62524	Biso	1	C	-0.234	

H168	1	0.6201	0.8051	0.6201	Biso	1	H	0.162		
C161	1	0.71207		0.8314	0.71207		Biso	1	C	-0.074
C162	1	0.73111		0.78973		0.73111	Biso	1	C	0.011
O52	1	0.5639	0.81089		0.5639	Biso	1	O	-0.412	
O53	1	0.54748		0.88002		0.54748	Biso	1	O	-0.480
O54	1	0.67918		0.81775		0.67918	Biso	1	O	-0.189
C163	1	0.93207		0.3518	0.93207		Biso	1	C	0.569
C164	1	0.89809		0.3686	0.89809		Biso	1	C	0.019
C165	1	0.8901	0.4108	0.8901	Biso	1	C	-0.136		
H169	1	0.9062	0.4319	0.9062	Biso	1	H	0.123		
C166	1	0.8626	0.4242	0.8626	Biso	1	C	-0.045		
H170	1	0.859	0.4548	0.859	Biso	1	H	0.101		
C167	1	0.8359	0.395	0.8359	Biso	1	C	-0.265		
H171	1	0.8153	0.4055	0.8153	Biso	1	H	0.138		
C168	1	0.84289		0.3501	0.84289		Biso	1	C	0.266
C169	1	0.87476		0.3352	0.87476		Biso	1	C	-0.235
H172	1	0.8799	0.3051	0.8799	Biso	1	H	0.162		
C170	1	0.78793		0.3314	0.78793		Biso	1	C	-0.074
C171	1	0.76889		0.28973		0.76889	Biso	1	C	0.010
O55	1	0.9361	0.31089		0.9361	Biso	1	O	-0.412	
O56	1	0.95252		0.38002		0.95252	Biso	1	O	-0.482
O57	1	0.82082		0.31775		0.82082	Biso	1	O	-0.189
C172	1	0.43207		0.8518	0.43207		Biso	1	C	0.568
C173	1	0.39809		0.8686	0.39809		Biso	1	C	0.020
C174	1	0.3901	0.9108	0.3901	Biso	1	C	-0.137		
H173	1	0.4062	0.9319	0.4062	Biso	1	H	0.123		
C175	1	0.3626	0.9242	0.3626	Biso	1	C	-0.044		
H174	1	0.359	0.9548	0.359	Biso	1	H	0.101		
C176	1	0.3359	0.895	0.3359	Biso	1	C	-0.266		
H175	1	0.3153	0.9055	0.3153	Biso	1	H	0.138		
C177	1	0.34289		0.8501	0.34289		Biso	1	C	0.266
C178	1	0.37476		0.8352	0.37476		Biso	1	C	-0.234
H176	1	0.3799	0.8051	0.3799	Biso	1	H	0.162		
C179	1	0.28793		0.8314	0.28793		Biso	1	C	-0.074
C180	1	0.26889		0.78973		0.26889	Biso	1	C	0.011
O58	1	0.4361	0.81089		0.4361	Biso	1	O	-0.413	
O59	1	0.45252		0.88002		0.45252	Biso	1	O	-0.481
O60	1	0.32082		0.81775		0.32082	Biso	1	O	-0.189
C181	1	0.06793		0.6482	0.93207		Biso	1	C	0.569
C182	1	0.10191		0.6314	0.89809		Biso	1	C	0.019
C183	1	0.1099	0.5892	0.8901	Biso	1	C	-0.139		
H177	1	0.0938	0.5681	0.9062	Biso	1	H	0.125		
C184	1	0.1374	0.5758	0.8626	Biso	1	C	-0.044		
H178	1	0.141	0.5452	0.859	Biso	1	H	0.101		
C185	1	0.1641	0.605	0.8359	Biso	1	C	-0.265		
H179	1	0.1847	0.5945	0.8153	Biso	1	H	0.138		
C186	1	0.15711		0.6499	0.84289		Biso	1	C	0.266
C187	1	0.12524		0.6648	0.87476		Biso	1	C	-0.235
H180	1	0.1201	0.6949	0.8799	Biso	1	H	0.162		
C188	1	0.21207		0.6686	0.78793		Biso	1	C	-0.074
C189	1	0.23111		0.71027		0.76889	Biso	1	C	0.011
O61	1	0.0639	0.68911		0.9361	Biso	1	O	-0.413	

O62	1	0.04748	0.61998	0.95252	Biso	1	O	-0.480
O63	1	0.17918	0.68225	0.82082	Biso	1	O	-0.189
C190	1	0.56793	0.1482	0.43207	Biso	1	C	0.569
C191	1	0.60191	0.1314	0.39809	Biso	1	C	0.019
C192	1	0.6099	0.0892	0.3901	Biso	1	C	-0.138
H181	1	0.5938	0.0681	0.4062	Biso	1	H	0.125
C193	1	0.6374	0.0758	0.3626	Biso	1	C	-0.045
H182	1	0.641	0.0452	0.359	Biso	1	H	0.101
C194	1	0.6641	0.105	0.3359	Biso	1	C	-0.265
H183	1	0.6847	0.0945	0.3153	Biso	1	H	0.138
C195	1	0.65711	0.1499	0.34289	Biso	1	C	0.266
C196	1	0.62524	0.1648	0.37476	Biso	1	C	-0.234
H184	1	0.6201	0.1949	0.3799	Biso	1	H	0.162
C197	1	0.71207	0.1686	0.28793	Biso	1	C	-0.072
C198	1	0.73111	0.21027	0.26889	Biso	1	C	0.011
O64	1	0.5639	0.18911	0.4361	Biso	1	O	-0.413
O65	1	0.54748	0.11998	0.45252	Biso	1	O	-0.480
O66	1	0.67918	0.18225	0.32082	Biso	1	O	-0.189
C199	1	0.93207	0.6482	0.06793	Biso	1	C	0.569
C200	1	0.89809	0.6314	0.10191	Biso	1	C	0.019
C201	1	0.8901	0.5892	0.1099	Biso	1	C	-0.139
H185	1	0.9062	0.5681	0.0938	Biso	1	H	0.125
C202	1	0.8626	0.5758	0.1374	Biso	1	C	-0.044
H186	1	0.859	0.5452	0.141	Biso	1	H	0.101
C203	1	0.8359	0.605	0.1641	Biso	1	C	-0.265
H187	1	0.8153	0.5945	0.1847	Biso	1	H	0.138
C204	1	0.84289	0.6499	0.15711	Biso	1	C	0.266
C205	1	0.87476	0.6648	0.12524	Biso	1	C	-0.234
H188	1	0.8799	0.6949	0.1201	Biso	1	H	0.162
C206	1	0.78793	0.6686	0.21207	Biso	1	C	-0.074
C207	1	0.76889	0.71027	0.23111	Biso	1	C	0.011
O67	1	0.9361	0.68911	0.0639	Biso	1	O	-0.414
O68	1	0.95252	0.61998	0.04748	Biso	1	O	-0.481
O69	1	0.82082	0.68225	0.17918	Biso	1	O	-0.189
C208	1	0.43207	0.1482	0.56793	Biso	1	C	0.568
C209	1	0.39809	0.1314	0.60191	Biso	1	C	0.019
C210	1	0.3901	0.0892	0.6099	Biso	1	C	-0.138
H189	1	0.4062	0.0681	0.5938	Biso	1	H	0.125
C211	1	0.3626	0.0758	0.6374	Biso	1	C	-0.045
H190	1	0.359	0.0452	0.641	Biso	1	H	0.101
C212	1	0.3359	0.105	0.6641	Biso	1	C	-0.265
H191	1	0.3153	0.0945	0.6847	Biso	1	H	0.138
C213	1	0.34289	0.1499	0.65711	Biso	1	C	0.266
C214	1	0.37476	0.1648	0.62524	Biso	1	C	-0.234
H192	1	0.3799	0.1949	0.6201	Biso	1	H	0.162
C215	1	0.28793	0.1686	0.71207	Biso	1	C	-0.072
C216	1	0.26889	0.21027	0.73111	Biso	1	C	0.011
O70	1	0.4361	0.18911	0.5639	Biso	1	O	-0.413
O71	1	0.45252	0.11998	0.54748	Biso	1	O	-0.480
O72	1	0.32082	0.18225	0.67918	Biso	1	O	-0.189
C217	1	0.06793	0.06793	0.6482	Biso	1	C	0.569
C218	1	0.10191	0.10191	0.6314	Biso	1	C	0.019

C219	1	0.1099	0.1099	0.5892	Biso	1	C	-0.138	
H193	1	0.0938	0.0938	0.5681	Biso	1	H	0.125	
C220	1	0.1374	0.1374	0.5758	Biso	1	C	-0.045	
H194	1	0.141	0.141	0.5452	Biso	1	H	0.101	
C221	1	0.1641	0.1641	0.605	Biso	1	C	-0.265	
H195	1	0.1847	0.1847	0.5945	Biso	1	H	0.138	
C222	1	0.15711		0.15711	0.6499	Biso	1	C	0.266
C223	1	0.12524		0.12524	0.6648	Biso	1	C	-0.235
H196	1	0.1201	0.1201	0.6949	Biso	1	H	0.162	
C224	1	0.21207		0.21207	0.6686	Biso	1	C	-0.074
C225	1	0.23111		0.23111	0.71027	Biso	1	C	0.011
O73	1	0.0639	0.0639	0.68911	Biso	1	O	-0.414	
O74	1	0.04748		0.04748	0.61998	Biso	1	O	-0.480
O75	1	0.17918		0.17918	0.68225	Biso	1	O	-0.189
C226	1	0.56793		0.56793	0.1482	Biso	1	C	0.568
C227	1	0.60191		0.60191	0.1314	Biso	1	C	0.019
C228	1	0.6099	0.6099	0.0892	Biso	1	C	-0.138	
H197	1	0.5938	0.5938	0.0681	Biso	1	H	0.125	
C229	1	0.6374	0.6374	0.0758	Biso	1	C	-0.045	
H198	1	0.641	0.641	0.0452	Biso	1	H	0.101	
C230	1	0.6641	0.6641	0.105	Biso	1	C	-0.264	
H199	1	0.6847	0.6847	0.0945	Biso	1	H	0.138	
C231	1	0.65711		0.65711	0.1499	Biso	1	C	0.266
C232	1	0.62524		0.62524	0.1648	Biso	1	C	-0.235
H200	1	0.6201	0.6201	0.1949	Biso	1	H	0.162	
C233	1	0.71207		0.71207	0.1686	Biso	1	C	-0.074
C234	1	0.73111		0.73111	0.21027	Biso	1	C	0.011
O76	1	0.5639	0.5639	0.18911	Biso	1	O	-0.413	
O77	1	0.54748		0.54748	0.11998	Biso	1	O	-0.479
O78	1	0.67918		0.67918	0.18225	Biso	1	O	-0.189
C235	1	0.93207		0.93207	0.6482	Biso	1	C	0.569
C236	1	0.89809		0.89809	0.6314	Biso	1	C	0.019
C237	1	0.8901	0.8901	0.5892	Biso	1	C	-0.136	
H201	1	0.9062	0.9062	0.5681	Biso	1	H	0.123	
C238	1	0.8626	0.8626	0.5758	Biso	1	C	-0.044	
H202	1	0.859	0.859	0.5452	Biso	1	H	0.101	
C239	1	0.8359	0.8359	0.605	Biso	1	C	-0.265	
H203	1	0.8153	0.8153	0.5945	Biso	1	H	0.138	
C240	1	0.84289		0.84289	0.6499	Biso	1	C	0.266
C241	1	0.87476		0.87476	0.6648	Biso	1	C	-0.235
H204	1	0.8799	0.8799	0.6949	Biso	1	H	0.162	
C242	1	0.78793		0.78793	0.6686	Biso	1	C	-0.075
C243	1	0.76889		0.76889	0.71027	Biso	1	C	0.011
O79	1	0.9361	0.9361	0.68911	Biso	1	O	-0.414	
O80	1	0.95252		0.95252	0.61998	Biso	1	O	-0.481
O81	1	0.82082		0.82082	0.68225	Biso	1	O	-0.189
C244	1	0.43207		0.43207	0.1482	Biso	1	C	0.568
C245	1	0.39809		0.39809	0.1314	Biso	1	C	0.019
C246	1	0.3901	0.3901	0.0892	Biso	1	C	-0.137	
H205	1	0.4062	0.4062	0.0681	Biso	1	H	0.123	
C247	1	0.3626	0.3626	0.0758	Biso	1	C	-0.044	
H206	1	0.359	0.359	0.0452	Biso	1	H	0.101	

C248	1	0.3359	0.3359	0.105	Biso	1	C	-0.266					
H207	1	0.3153	0.3153	0.0945	Biso	1	H	0.138					
C249	1	0.34289		0.34289		0.1499	Biso	1	C	0.266			
C250	1	0.37476		0.37476		0.1648	Biso	1	C	-0.235			
H208	1	0.3799	0.3799	0.1949	Biso	1	H	0.162					
C251	1	0.28793		0.28793		0.1686	Biso	1	C	-0.074			
C252	1	0.26889		0.26889		0.21027		Biso	1	C	0.011		
O82	1	0.4361	0.4361	0.18911			Biso	1	O	-0.413			
O83	1	0.45252		0.45252		0.11998		Biso	1	O	-0.480		
O84	1	0.32082		0.32082		0.18225		Biso	1	O	-0.190		
C253	1	0.06793		0.93207		0.3518		Biso	1	C	0.569		
C254	1	0.10191		0.89809		0.3686		Biso	1	C	0.019		
C255	1	0.1099	0.8901	0.4108	Biso	1	C	-0.138					
H209	1	0.0938	0.9062	0.4319	Biso	1	H	0.125					
C256	1	0.1374	0.8626	0.4242	Biso	1	C	-0.045					
H210	1	0.141	0.859	0.4548	Biso	1	H	0.101					
C257	1	0.1641	0.8359	0.395	Biso	1	C	-0.265					
H211	1	0.1847	0.8153	0.4055	Biso	1	H	0.138					
C258	1	0.15711		0.84289		0.3501		Biso	1	C	0.266		
C259	1	0.12524		0.87476		0.3352		Biso	1	C	-0.235		
H212	1	0.1201	0.8799	0.3051	Biso	1	H	0.162					
C260	1	0.21207		0.78793		0.3314		Biso	1	C	-0.074		
C261	1	0.23111		0.76889		0.28973			Biso	1	C	0.011	
O85	1	0.0639	0.9361	0.31089			Biso	1	O	-0.412			
O86	1	0.04748		0.95252		0.38002			Biso	1	O	-0.481	
O87	1	0.17918		0.82082		0.31775			Biso	1	O	-0.189	
C262	1	0.56793		0.43207		0.8518			Biso	1	C	0.568	
C263	1	0.60191		0.39809		0.8686			Biso	1	C	0.019	
C264	1	0.6099	0.3901	0.9108	Biso	1	C	-0.138					
H213	1	0.5938	0.4062	0.9319	Biso	1	H	0.125					
C265	1	0.6374	0.3626	0.9242	Biso	1	C	-0.045					
H214	1	0.641	0.359	0.9548	Biso	1	H	0.101					
C266	1	0.6641	0.3359	0.895	Biso	1	C	-0.265					
H215	1	0.6847	0.3153	0.9055	Biso	1	H	0.138					
C267	1	0.65711		0.34289		0.8501			Biso	1	C	0.266	
C268	1	0.62524		0.37476		0.8352			Biso	1	C	-0.235	
H216	1	0.6201	0.3799	0.8051	Biso	1	H	0.162					
C269	1	0.71207		0.28793		0.8314			Biso	1	C	-0.072	
C270	1	0.73111		0.26889		0.78973				Biso	1	C	0.011
O88	1	0.5639	0.4361	0.81089			Biso	1	O	-0.412			
O89	1	0.54748		0.45252		0.88002				Biso	1	O	-0.481
O90	1	0.67918		0.32082		0.81775				Biso	1	O	-0.189
C271	1	0.93207		0.06793		0.3518				Biso	1	C	0.569
C272	1	0.89809		0.10191		0.3686				Biso	1	C	0.019
C273	1	0.8901	0.1099	0.4108	Biso	1	C	-0.138					
H217	1	0.9062	0.0938	0.4319	Biso	1	H	0.125					
C274	1	0.8626	0.1374	0.4242	Biso	1	C	-0.045					
H218	1	0.859	0.141	0.4548	Biso	1	H	0.101					
C275	1	0.8359	0.1641	0.395	Biso	1	C	-0.265					
H219	1	0.8153	0.1847	0.4055	Biso	1	H	0.138					
C276	1	0.84289		0.15711		0.3501				Biso	1	C	0.266
C277	1	0.87476		0.12524		0.3352				Biso	1	C	-0.235

H220	1	0.8799	0.1201	0.3051	Biso	1	H	0.162			
C278	1	0.78793		0.21207		0.3314	Biso	1	C	-0.074	
C279	1	0.76889		0.23111		0.28973		Biso	1	C	0.011
O91	1	0.9361	0.0639	0.31089		Biso	1	O		-0.412	
O92	1	0.95252		0.04748		0.38002		Biso	1	O	-0.481
O93	1	0.82082		0.17918		0.31775		Biso	1	O	-0.189
C280	1	0.43207		0.56793		0.8518	Biso	1	C	0.568	
C281	1	0.39809		0.60191		0.8686	Biso	1	C	0.019	
C282	1	0.3901	0.6099	0.9108	Biso	1	C			-0.138	
H221	1	0.4062	0.5938	0.9319	Biso	1	H	0.125			
C283	1	0.3626	0.6374	0.9242	Biso	1	C			-0.045	
H222	1	0.359	0.641	0.9548	Biso	1	H	0.101			
C284	1	0.3359	0.6641	0.895	Biso	1	C			-0.264	
H223	1	0.3153	0.6847	0.9055	Biso	1	H	0.138			
C285	1	0.34289		0.65711		0.8501	Biso	1	C	0.266	
C286	1	0.37476		0.62524		0.8352	Biso	1	C	-0.235	
H224	1	0.3799	0.6201	0.8051	Biso	1	H	0.162			
C287	1	0.28793		0.71207		0.8314	Biso	1	C	-0.072	
C288	1	0.26889		0.73111		0.78973		Biso	1	C	0.011
O94	1	0.4361	0.5639	0.81089		Biso	1	O		-0.412	
O95	1	0.45252		0.54748		0.88002		Biso	1	O	-0.481
O96	1	0.32082		0.67918		0.81775		Biso	1	O	-0.189
C289	1	0.06793		0.3518	0.93207		Biso	1	C	0.569	
C290	1	0.10191		0.3686	0.89809		Biso	1	C	0.019	
C291	1	0.1099	0.4108	0.8901	Biso	1	C			-0.139	
H225	1	0.0938	0.4319	0.9062	Biso	1	H	0.125			
C292	1	0.1374	0.4242	0.8626	Biso	1	C			-0.044	
H226	1	0.141	0.4548	0.859	Biso	1	H	0.101			
C293	1	0.1641	0.395	0.8359	Biso	1	C			-0.265	
H227	1	0.1847	0.4055	0.8153	Biso	1	H	0.138			
C294	1	0.15711		0.3501	0.84289		Biso	1	C	0.266	
C295	1	0.12524		0.3352	0.87476		Biso	1	C	-0.235	
H228	1	0.1201	0.3051	0.8799	Biso	1	H	0.162			
C296	1	0.21207		0.3314	0.78793		Biso	1	C	-0.074	
C297	1	0.23111		0.28973	0.76889		Biso	1	C	0.011	
O97	1	0.0639	0.31089		0.9361	Biso	1	O		-0.412	
O98	1	0.04748		0.38002	0.95252		Biso	1	O	-0.481	
O99	1	0.17918		0.31775	0.82082		Biso	1	O	-0.189	
C298	1	0.56793		0.8518	0.43207		Biso	1	C	0.568	
C299	1	0.60191		0.8686	0.39809		Biso	1	C	0.019	
C300	1	0.6099	0.9108	0.3901	Biso	1	C			-0.138	
H229	1	0.5938	0.9319	0.4062	Biso	1	H	0.125			
C301	1	0.6374	0.9242	0.3626	Biso	1	C			-0.046	
H230	1	0.641	0.9548	0.359	Biso	1	H	0.101			
C302	1	0.6641	0.895	0.3359	Biso	1	C			-0.265	
H231	1	0.6847	0.9055	0.3153	Biso	1	H	0.138			
C303	1	0.65711		0.8501	0.34289		Biso	1	C	0.266	
C304	1	0.62524		0.8352	0.37476		Biso	1	C	-0.235	
H232	1	0.6201	0.8051	0.3799	Biso	1	H	0.162			
C305	1	0.71207		0.8314	0.28793		Biso	1	C	-0.072	
C306	1	0.73111		0.78973	0.26889		Biso	1	C	0.011	
O100	1	0.5639	0.81089		0.4361	Biso	1	O		-0.412	

O101	1	0.54748	0.88002	0.45252	Biso	1	O	-0.481
O102	1	0.67918	0.81775	0.32082	Biso	1	O	-0.189
C307	1	0.93207	0.3518	0.06793	Biso	1	C	0.569
C308	1	0.89809	0.3686	0.10191	Biso	1	C	0.019
C309	1	0.8901	0.4108	0.1099	Biso	1	C	-0.138
H233	1	0.9062	0.4319	0.0938	Biso	1	H	0.125
C310	1	0.8626	0.4242	0.1374	Biso	1	C	-0.045
H234	1	0.859	0.4548	0.141	Biso	1	H	0.101
C311	1	0.8359	0.395	0.1641	Biso	1	C	-0.265
H235	1	0.8153	0.4055	0.1847	Biso	1	H	0.138
C312	1	0.84289	0.3501	0.15711	Biso	1	C	0.266
C313	1	0.87476	0.3352	0.12524	Biso	1	C	-0.235
H236	1	0.8799	0.3051	0.1201	Biso	1	H	0.162
C314	1	0.78793	0.3314	0.21207	Biso	1	C	-0.074
C315	1	0.76889	0.28973	0.23111	Biso	1	C	0.011
O103	1	0.9361	0.31089	0.0639	Biso	1	O	-0.413
O104	1	0.95252	0.38002	0.04748	Biso	1	O	-0.481
O105	1	0.82082	0.31775	0.17918	Biso	1	O	-0.189
C316	1	0.43207	0.8518	0.56793	Biso	1	C	0.568
C317	1	0.39809	0.8686	0.60191	Biso	1	C	0.019
C318	1	0.3901	0.9108	0.6099	Biso	1	C	-0.138
H237	1	0.4062	0.9319	0.5938	Biso	1	H	0.125
C319	1	0.3626	0.9242	0.6374	Biso	1	C	-0.045
H238	1	0.359	0.9548	0.641	Biso	1	H	0.101
C320	1	0.3359	0.895	0.6641	Biso	1	C	-0.265
H239	1	0.3153	0.9055	0.6847	Biso	1	H	0.138
C321	1	0.34289	0.8501	0.65711	Biso	1	C	0.266
C322	1	0.37476	0.8352	0.62524	Biso	1	C	-0.235
H240	1	0.3799	0.8051	0.6201	Biso	1	H	0.162
C323	1	0.28793	0.8314	0.71207	Biso	1	C	-0.072
C324	1	0.26889	0.78973	0.73111	Biso	1	C	0.011
O106	1	0.4361	0.81089	0.5639	Biso	1	O	-0.413
O107	1	0.45252	0.88002	0.54748	Biso	1	O	-0.481
O108	1	0.32082	0.81775	0.67918	Biso	1	O	-0.189
C325	1	0.93207	0.6482	0.93207	Biso	1	C	0.569
C326	1	0.89809	0.6314	0.89809	Biso	1	C	0.019
C327	1	0.8901	0.5892	0.8901	Biso	1	C	-0.137
H241	1	0.9062	0.5681	0.9062	Biso	1	H	0.123
C328	1	0.8626	0.5758	0.8626	Biso	1	C	-0.044
H242	1	0.859	0.5452	0.859	Biso	1	H	0.101
C329	1	0.8359	0.605	0.8359	Biso	1	C	-0.265
H243	1	0.8153	0.5945	0.8153	Biso	1	H	0.138
C330	1	0.84289	0.6499	0.84289	Biso	1	C	0.266
C331	1	0.87476	0.6648	0.87476	Biso	1	C	-0.235
H244	1	0.8799	0.6949	0.8799	Biso	1	H	0.162
C332	1	0.78793	0.6686	0.78793	Biso	1	C	-0.075
C333	1	0.76889	0.71027	0.76889	Biso	1	C	0.011
O109	1	0.9361	0.68911	0.9361	Biso	1	O	-0.413
O110	1	0.95252	0.61998	0.95252	Biso	1	O	-0.481
O111	1	0.82082	0.68225	0.82082	Biso	1	O	-0.190
C334	1	0.43207	0.1482	0.43207	Biso	1	C	0.568
C335	1	0.39809	0.1314	0.39809	Biso	1	C	0.019

C336	1	0.3901	0.0892	0.3901	Biso	1	C	-0.137	
H245	1	0.4062	0.0681	0.4062	Biso	1	H	0.123	
C337	1	0.3626	0.0758	0.3626	Biso	1	C	-0.044	
H246	1	0.359	0.0452	0.359	Biso	1	H	0.101	
C338	1	0.3359	0.105	0.3359	Biso	1	C	-0.266	
H247	1	0.3153	0.0945	0.3153	Biso	1	H	0.138	
C339	1	0.34289		0.1499	0.34289	Biso	1	C	0.266
C340	1	0.37476		0.1648	0.37476	Biso	1	C	-0.235
H248	1	0.3799	0.1949	0.3799	Biso	1	H	0.162	
C341	1	0.28793		0.1686	0.28793	Biso	1	C	-0.074
C342	1	0.26889		0.21027	0.26889	Biso	1	C	0.011
O112	1	0.4361	0.18911		0.4361	Biso	1	O	-0.412
O113	1	0.45252		0.11998	0.45252	Biso	1	O	-0.481
O114	1	0.32082		0.18225	0.32082	Biso	1	O	-0.189
C343	1	0.06793		0.6482	0.06793	Biso	1	C	0.569
C344	1	0.10191		0.6314	0.10191	Biso	1	C	0.019
C345	1	0.1099	0.5892	0.1099	Biso	1	C	-0.138	
H249	1	0.0938	0.5681	0.0938	Biso	1	H	0.125	
C346	1	0.1374	0.5758	0.1374	Biso	1	C	-0.045	
H250	1	0.141	0.5452	0.141	Biso	1	H	0.101	
C347	1	0.1641	0.605	0.1641	Biso	1	C	-0.265	
H251	1	0.1847	0.5945	0.1847	Biso	1	H	0.138	
C348	1	0.15711		0.6499	0.15711	Biso	1	C	0.266
C349	1	0.12524		0.6648	0.12524	Biso	1	C	-0.235
H252	1	0.1201	0.6949	0.1201	Biso	1	H	0.162	
C350	1	0.21207		0.6686	0.21207	Biso	1	C	-0.074
C351	1	0.23111		0.71027	0.23111	Biso	1	C	0.011
O115	1	0.0639	0.68911		0.0639	Biso	1	O	-0.413
O116	1	0.04748		0.61998	0.04748	Biso	1	O	-0.481
O117	1	0.17918		0.68225	0.17918	Biso	1	O	-0.190
C352	1	0.56793		0.1482	0.56793	Biso	1	C	0.569
C353	1	0.60191		0.1314	0.60191	Biso	1	C	0.019
C354	1	0.6099	0.0892	0.6099	Biso	1	C	-0.138	
H253	1	0.5938	0.0681	0.5938	Biso	1	H	0.125	
C355	1	0.6374	0.0758	0.6374	Biso	1	C	-0.045	
H254	1	0.641	0.0452	0.641	Biso	1	H	0.101	
C356	1	0.6641	0.105	0.6641	Biso	1	C	-0.265	
H255	1	0.6847	0.0945	0.6847	Biso	1	H	0.138	
C357	1	0.65711		0.1499	0.65711	Biso	1	C	0.266
C358	1	0.62524		0.1648	0.62524	Biso	1	C	-0.235
H256	1	0.6201	0.1949	0.6201	Biso	1	H	0.162	
C359	1	0.71207		0.1686	0.71207	Biso	1	C	-0.074
C360	1	0.73111		0.21027	0.73111	Biso	1	C	0.011
O118	1	0.5639	0.18911		0.5639	Biso	1	O	-0.412
O119	1	0.54748		0.11998	0.54748	Biso	1	O	-0.480
O120	1	0.67918		0.18225	0.67918	Biso	1	O	-0.190
C361	1	0.3518	0.06793		0.93207	Biso	1	C	0.569
C362	1	0.3686	0.10191		0.89809	Biso	1	C	0.019
C363	1	0.4108	0.1099	0.8901	Biso	1	C	-0.139	
H257	1	0.4319	0.0938	0.9062	Biso	1	H	0.125	
C364	1	0.4242	0.1374	0.8626	Biso	1	C	-0.044	
H258	1	0.4548	0.141	0.859	Biso	1	H	0.101	

C365	1	0.395	0.1641	0.8359	Biso	1	C	-0.265	
H259	1	0.4055	0.1847	0.8153	Biso	1	H	0.138	
C366	1	0.3501	0.15711	0.84289	Biso	1	C	0.266	
C367	1	0.3352	0.12524	0.87476	Biso	1	C	-0.234	
H260	1	0.3051	0.1201	0.8799	Biso	1	H	0.162	
C368	1	0.3314	0.21207	0.78793	Biso	1	C	-0.074	
C369	1	0.28973	0.23111	0.76889	Biso	1	C	0.011	
O121	1	0.31089	0.0639	0.9361	Biso	1	O	-0.413	
O122	1	0.38002	0.04748	0.95252	Biso	1	O	-0.481	
O123	1	0.31775	0.17918	0.82082	Biso	1	O	-0.189	
C370	1	0.8518	0.56793	0.43207	Biso	1	C	0.568	
C371	1	0.8686	0.60191	0.39809	Biso	1	C	0.019	
C372	1	0.9108	0.6099	0.3901	Biso	1	C	-0.138	
H261	1	0.9319	0.5938	0.4062	Biso	1	H	0.125	
C373	1	0.9242	0.6374	0.3626	Biso	1	C	-0.045	
H262	1	0.9548	0.641	0.359	Biso	1	H	0.101	
C374	1	0.895	0.6641	0.3359	Biso	1	C	-0.265	
H263	1	0.9055	0.6847	0.3153	Biso	1	H	0.138	
C375	1	0.8501	0.65711	0.34289	Biso	1	C	0.266	
C376	1	0.8352	0.62524	0.37476	Biso	1	C	-0.234	
H264	1	0.8051	0.6201	0.3799	Biso	1	H	0.162	
C377	1	0.8314	0.71207	0.28793	Biso	1	C	-0.072	
C378	1	0.78973	0.73111	0.26889	Biso	1	C	0.011	
O124	1	0.81089	0.5639	0.4361	Biso	1	O	-0.413	
O125	1	0.88002	0.54748	0.45252	Biso	1	O	-0.480	
O126	1	0.81775	0.67918	0.32082	Biso	1	O	-0.189	
C379	1	0.3518	0.93207	0.06793	Biso	1	C	0.569	
C380	1	0.3686	0.89809	0.10191	Biso	1	C	0.019	
C381	1	0.4108	0.8901	0.1099	Biso	1	C	-0.138	
H265	1	0.4319	0.9062	0.0938	Biso	1	H	0.125	
C382	1	0.4242	0.8626	0.1374	Biso	1	C	-0.045	
H266	1	0.4548	0.859	0.141	Biso	1	H	0.101	
C383	1	0.395	0.8359	0.1641	Biso	1	C	-0.265	
H267	1	0.4055	0.8153	0.1847	Biso	1	H	0.138	
C384	1	0.3501	0.84289	0.15711	Biso	1	C	0.266	
C385	1	0.3352	0.87476	0.12524	Biso	1	C	-0.235	
H268	1	0.3051	0.8799	0.1201	Biso	1	H	0.162	
C386	1	0.3314	0.78793	0.21207	Biso	1	C	-0.074	
C387	1	0.28973	0.76889	0.23111	Biso	1	C	0.011	
O127	1	0.31089	0.9361	0.0639	Biso	1	O	-0.412	
O128	1	0.38002	0.95252	0.04748	Biso	1	O	-0.480	
O129	1	0.31775	0.82082	0.17918	Biso	1	O	-0.189	
C388	1	0.8518	0.43207	0.56793	Biso	1	C	0.568	
C389	1	0.8686	0.39809	0.60191	Biso	1	C	0.019	
C390	1	0.9108	0.3901	0.6099	Biso	1	C	-0.138	
H269	1	0.9319	0.4062	0.5938	Biso	1	H	0.125	
C391	1	0.9242	0.3626	0.6374	Biso	1	C	-0.045	
H270	1	0.9548	0.359	0.641	Biso	1	H	0.101	
C392	1	0.895	0.3359	0.6641	Biso	1	C	-0.265	
H271	1	0.9055	0.3153	0.6847	Biso	1	H	0.138	
C393	1	0.8501	0.34289	0.65711	Biso	1	C	0.266	
C394	1	0.8352	0.37476	0.62524	Biso	1	C	-0.234	

H272	1	0.8051	0.3799	0.6201	Biso	1	H	0.162	
C395	1	0.8314	0.28793	0.71207	Biso	1	C	-0.072	
C396	1	0.78973	0.26889	0.73111	Biso	1	C	0.011	
O130	1	0.81089	0.4361	0.5639	Biso	1	O	-0.413	
O131	1	0.88002	0.45252	0.54748	Biso	1	O	-0.481	
O132	1	0.81775	0.32082	0.67918	Biso	1	O	-0.188	
C397	1	0.6482	0.06793	0.06793	Biso	1	C	0.569	
C398	1	0.6314	0.10191	0.10191	Biso	1	C	0.019	
C399	1	0.5892	0.1099	0.1099	Biso	1	C	-0.138	
H273	1	0.5681	0.0938	0.0938	Biso	1	H	0.125	
C400	1	0.5758	0.1374	0.1374	Biso	1	C	-0.045	
H274	1	0.5452	0.141	0.141	Biso	1	H	0.101	
C401	1	0.605	0.1641	0.1641	Biso	1	C	-0.265	
H275	1	0.5945	0.1847	0.1847	Biso	1	H	0.138	
C402	1	0.6499	0.15711	0.15711	Biso	1	C	0.266	
C403	1	0.6648	0.12524	0.12524	Biso	1	C	-0.235	
H276	1	0.6949	0.1201	0.1201	Biso	1	H	0.162	
C404	1	0.6686	0.21207	0.21207	Biso	1	C	-0.074	
C405	1	0.71027	0.23111	0.23111	Biso	1	C	0.011	
O133	1	0.68911	0.0639	0.0639	Biso	1	O	-0.413	
O134	1	0.61998	0.04748	0.04748	Biso	1	O	-0.481	
O135	1	0.68225	0.17918	0.17918	Biso	1	O	-0.189	
C406	1	0.1482	0.56793	0.56793	Biso	1	C	0.569	
C407	1	0.1314	0.60191	0.60191	Biso	1	C	0.019	
C408	1	0.0892	0.6099	0.6099	Biso	1	C	-0.138	
H277	1	0.0681	0.5938	0.5938	Biso	1	H	0.125	
C409	1	0.0758	0.6374	0.6374	Biso	1	C	-0.045	
H278	1	0.0452	0.641	0.641	Biso	1	H	0.101	
C410	1	0.105	0.6641	0.6641	Biso	1	C	-0.265	
H279	1	0.0945	0.6847	0.6847	Biso	1	H	0.138	
C411	1	0.1499	0.65711	0.65711	Biso	1	C	0.266	
C412	1	0.1648	0.62524	0.62524	Biso	1	C	-0.235	
H280	1	0.1949	0.6201	0.6201	Biso	1	H	0.162	
C413	1	0.1686	0.71207	0.71207	Biso	1	C	-0.074	
C414	1	0.21027	0.73111	0.73111	Biso	1	C	0.011	
O136	1	0.18911	0.5639	0.5639	Biso	1	O	-0.413	
O137	1	0.11998	0.54748	0.54748	Biso	1	O	-0.481	
O138	1	0.18225	0.67918	0.67918	Biso	1	O	-0.190	
C415	1	0.6482	0.93207	0.93207	Biso	1	C	0.569	
C416	1	0.6314	0.89809	0.89809	Biso	1	C	0.019	
C417	1	0.5892	0.8901	0.8901	Biso	1	C	-0.139	
H281	1	0.5681	0.9062	0.9062	Biso	1	H	0.125	
C418	1	0.5758	0.8626	0.8626	Biso	1	C	-0.044	
H282	1	0.5452	0.859	0.859	Biso	1	H	0.101	
C419	1	0.605	0.8359	0.8359	Biso	1	C	-0.265	
H283	1	0.5945	0.8153	0.8153	Biso	1	H	0.138	
C420	1	0.6499	0.84289	0.84289	Biso	1	C	0.266	
C421	1	0.6648	0.87476	0.87476	Biso	1	C	-0.235	
H284	1	0.6949	0.8799	0.8799	Biso	1	H	0.162	
C422	1	0.6686	0.78793	0.78793	Biso	1	C	-0.075	
C423	1	0.71027	0.76889	0.76889	Biso	1	C	0.011	
O139	1	0.68911	0.9361	0.9361	Biso	1	O	-0.412	

O140	1	0.61998	0.95252	0.95252	Biso	1	O	-0.480
O141	1	0.68225	0.82082	0.82082	Biso	1	O	-0.189
C424	1	0.1482	0.43207	0.43207	Biso	1	C	0.569
C425	1	0.1314	0.39809	0.39809	Biso	1	C	0.019
C426	1	0.0892	0.3901	0.3901	Biso	1	C	-0.136
H285	1	0.0681	0.4062	0.4062	Biso	1	H	0.123
C427	1	0.0758	0.3626	0.3626	Biso	1	C	-0.044
H286	1	0.0452	0.359	0.359	Biso	1	H	0.101
C428	1	0.105	0.3359	0.3359	Biso	1	C	-0.265
H287	1	0.0945	0.3153	0.3153	Biso	1	H	0.138
C429	1	0.1499	0.34289	0.34289	Biso	1	C	0.266
C430	1	0.1648	0.37476	0.37476	Biso	1	C	-0.235
H288	1	0.1949	0.3799	0.3799	Biso	1	H	0.162
C431	1	0.1686	0.28793	0.28793	Biso	1	C	-0.074
C432	1	0.21027	0.26889	0.26889	Biso	1	C	0.011
O142	1	0.18911	0.4361	0.4361	Biso	1	O	-0.412
O143	1	0.11998	0.45252	0.45252	Biso	1	O	-0.481
O144	1	0.18225	0.32082	0.32082	Biso	1	O	-0.189

```

data_AFUKET_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.5211
_cell_length_b            24.1489
_cell_length_c            37.8771
_cell_angle_alpha        88.2663
_cell_angle_beta         82.0167
_cell_angle_gamma        77.4181
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn   0.39068   0.73654   0.58676   0.01267   Uiso  1  0.7436599999
Mn2  Mn   0.05843   0.73202   0.61748   0.01267   Uiso  1   0.877435
Mn3  Mn   0.79919   0.66961   0.63657   0.01267   Uiso  1   0.771084
Mn4  Mn   0.71398   0.26346   0.41324   0.01267   Uiso  1   0.747678
Mn5  Mn   0.40793   0.26798   0.38252   0.01267   Uiso  1   0.880779
Mn6  Mn   0.10537   0.33039   0.36343   0.01267   Uiso  1   0.762706
Mn7  Mn   0.22744   0.23654   0.91324   0.01267   Uiso  1   0.748908
Mn8  Mn   0.92591   0.23202   0.88252   0.01267   Uiso  1   0.879025
Mn9  Mn   0.68576   0.16961   0.86343   0.01267   Uiso  1   0.761481
Mn10 Mn   0.37722   0.76346   0.08676   0.01267   Uiso  1   0.745642
Mn11 Mn   0.04045   0.76798   0.11748   0.01267   Uiso  1   0.878823
Mn12 Mn   0.7188 0.83039   0.13657   0.01267   Uiso  1   0.769227
H1   H    0.0787 0.8488 0.8296 0.01267   Uiso  1   0.093806
H2   H    0.1098 0.7818 0.8298 0.01267   Uiso  1   0.097496
H3   H    0.3233 0.8694 0.8522 0.01267   Uiso  1   0.100192
H4   H    0.2885 0.8674 0.894 0.01267   Uiso  1   0.090842
H5   H    0.052 0.779 0.8968 0.01267   Uiso  1   0.095304
H6   H    0.0083 0.8454 0.894 0.01267   Uiso  1   0.088697
H7   H    0.3293 0.7644 0.8946 0.01267   Uiso  1   0.078239
H8   H    0.3733 0.7646 0.8534 0.01267   Uiso  1   0.083159
H9   H    0.1242 0.6572 0.8406 0.01267   Uiso  1   0.079197
H10  H    0.1521 0.5912 0.835 0.01267   Uiso  1   0.085479
H11  H    0.4611 0.5582 0.8696 0.01267   Uiso  1   0.090484
H12  H    0.4505 0.5686 0.8288 0.01267   Uiso  1   0.096208
H13  H    0.1721 0.5766 0.8964 0.01267   Uiso  1   0.107349
H14  H    0.1517 0.6416 0.904 0.01267   Uiso  1   0.095504

```

H15	H	0.405	0.6684	0.837	0.01267	Uiso	1	0.098077
H16	H	0.4164	0.66	0.8778	0.01267	Uiso	1	0.093882
H17	H	0.0619	0.8126	0.7724	0.01267	Uiso	1	0.121171
H18	H	0.0707	0.7914	0.7126	0.01267	Uiso	1	0.124436
H19	H	0.4591	0.7738	0.6994	0.01267	Uiso	1	0.128439
H20	H	0.4475	0.7914	0.7594	0.01267	Uiso	1	0.127262
H21	H	0.9786	0.0046	0.8774	0.01267	Uiso	1	0.112875
H22	H	0.9904	0.0934	0.891	0.01267	Uiso	1	0.123518
H23	H	0.3789	0.0404	0.8864	0.01267	Uiso	1	0.104528
H24	H	0.3575	0.9496	0.8748	0.01267	Uiso	1	0.115907
H25	H	0.1827	0.8374	0.9892	0.01267	Uiso	1	0.12766
H26	H	0.0574	0.837	0.045	0.01267	Uiso	1	0.115853
H27	H	0.7627	0.8086	0.9998	0.01267	Uiso	1	0.104305
H28	H	0.8838	0.8068	0.9436	0.01267	Uiso	1	0.117972
H29	H	0.0026	0.6384	0.8016	0.01267	Uiso	1	0.116333
H30	H	0.8864	0.6444	0.755	0.01267	Uiso	1	0.116082
H31	H	0.212	0.6524	0.6898	0.01267	Uiso	1	0.118098
H32	H	0.3267	0.6378	0.7374	0.01267	Uiso	1	0.136401
H33	H	0.285	0.423	0.8522	0.01267	Uiso	1	0.138135
H34	H	0.4086	0.3344	0.8546	0.01267	Uiso	1	0.11306
H35	H	0.7302	0.3938	0.8502	0.01267	Uiso	1	0.121407
H36	H	0.603	0.488	0.8466	0.01267	Uiso	1	0.127957
H37	H	0.4468	0.5796	0.9684	0.01267	Uiso	1	0.138743
H38	H	0.4081	0.6168	0.0264	0.01267	Uiso	1	0.115701
H39	H	0.0553	0.6982	0.0102	0.01267	Uiso	1	0.114467
H40	H	0.0912	0.661	0.9526	0.01267	Uiso	1	0.135728
H41	H	0.8059	0.5646	0.579	0.01267	Uiso	1	0.106073
H42	H	0.8502	0.5442	0.6792	0.01267	Uiso	1	0.125825
H43	H	0.8469	0.4532	0.658	0.01267	Uiso	1	0.141414
H44	H	0.8366	0.3892	0.6188	0.01267	Uiso	1	0.12819
H45	H	0.7952	0.3204	0.581	0.01267	Uiso	1	0.126467
H46	H	0.6822	0.4404	0.512	0.01267	Uiso	1	0.134335
H47	H	0.7209	0.5072	0.552	0.01267	Uiso	1	0.124126
H48	H	0.7323	0.3662	0.4706	0.01267	Uiso	1	0.094956
H49	H	0.7064	0.265	0.5518	0.01267	Uiso	1	0.126698
H50	H	0.7013	0.2146	0.4968	0.01267	Uiso	1	0.11434
H51	H	0.7571	0.1512	0.1704	0.01267	Uiso	1	0.093352
H52	H	0.7214	0.2182	0.1702	0.01267	Uiso	1	0.097267
H53	H	0.0449	0.1306	0.1478	0.01267	Uiso	1	0.099939
H54	H	0.0499	0.1326	0.106	0.01267	Uiso	1	0.092057
H55	H	0.7278	0.221	0.1032	0.01267	Uiso	1	0.095864
H56	H	0.7477	0.1546	0.106	0.01267	Uiso	1	0.089135
H57	H	0.9883	0.2356	0.1054	0.01267	Uiso	1	0.078276
H58	H	0.9913	0.2354	0.1466	0.01267	Uiso	1	0.090473
H59	H	0.622	0.3428	0.1594	0.01267	Uiso	1	0.07799
H60	H	0.5783	0.4088	0.165	0.01267	Uiso	1	0.085839
H61	H	0.8889	0.4418	0.1304	0.01267	Uiso	1	0.090325
H62	H	0.8479	0.4314	0.1712	0.01267	Uiso	1	0.101827
H63	H	0.6451	0.4234	0.1036	0.01267	Uiso	1	0.108507
H64	H	0.6973	0.3584	0.096	0.01267	Uiso	1	0.085993
H65	H	0.9104	0.3316	0.163	0.01267	Uiso	1	0.097379
H66	H	0.9542	0.34	0.1222	0.01267	Uiso	1	0.093006

H67	H	0.6469	0.1874	0.2276	0.01267	Uiso	1	0.119639
H68	H	0.5747	0.2086	0.2874	0.01267	Uiso	1	0.124337
H69	H	0.9323	0.2262	0.3006	0.01267	Uiso	1	0.126775
H70	H	0.9983	0.2086	0.2406	0.01267	Uiso	1	0.126842
H71	H	0.8606	0.9954	0.1226	0.01267	Uiso	1	0.110929
H72	H	0.9748	0.9066	0.109	0.01267	Uiso	1	0.122805
H73	H	0.3057	0.9596	0.1136	0.01267	Uiso	1	0.104965
H74	H	0.1819	0.0504	0.1252	0.01267	Uiso	1	0.115914
H75	H	0.0093	0.1626	0.0108	0.01267	Uiso	1	0.126784
H76	H	0.9394	0.163	0.955	0.01267	Uiso	1	0.117297
H77	H	0.5711	0.1914	0.0002	0.01267	Uiso	1	0.10399
H78	H	0.6342	0.1932	0.0564	0.01267	Uiso	1	0.117745
H79	H	0.4426	0.3616	0.1984	0.01267	Uiso	1	0.116052
H80	H	0.2858	0.3556	0.245	0.01267	Uiso	1	0.118189
H81	H	0.5542	0.3476	0.3102	0.01267	Uiso	1	0.118608
H82	H	0.7019	0.3622	0.2626	0.01267	Uiso	1	0.136826
H83	H	0.5602	0.577	0.1478	0.01267	Uiso	1	0.139037
H84	H	0.5976	0.6656	0.1454	0.01267	Uiso	1	0.1139
H85	H	0.9742	0.6062	0.1498	0.01267	Uiso	1	0.121541
H86	H	0.9376	0.512	0.1534	0.01267	Uiso	1	0.129709
H87	H	0.9948	0.4204	0.0316	0.01267	Uiso	1	0.138889
H88	H	0.0513	0.3832	0.9736	0.01267	Uiso	1	0.116895
H89	H	0.7637	0.3018	0.9898	0.01267	Uiso	1	0.11364
H90	H	0.7048	0.339	0.0474	0.01267	Uiso	1	0.125321
H91	H	0.9495	0.4354	0.421	0.01267	Uiso	1	0.106318
H92	H	0.0736	0.4558	0.3208	0.01267	Uiso	1	0.126443
H93	H	0.9581	0.5468	0.342	0.01267	Uiso	1	0.140788
H94	H	0.8446	0.6108	0.3812	0.01267	Uiso	1	0.129089
H95	H	0.6966	0.6796	0.419	0.01267	Uiso	1	0.127151
H96	H	0.6346	0.5596	0.488	0.01267	Uiso	1	0.135101
H97	H	0.7801	0.4928	0.448	0.01267	Uiso	1	0.123789
H98	H	0.5691	0.6338	0.5294	0.01267	Uiso	1	0.095561
H99	H	0.5232	0.735	0.4482	0.01267	Uiso	1	0.126747
H100	H	0.4127	0.7854	0.5032	0.01267	Uiso	1	0.115075
H101	H	0.1583	0.3488	0.6704	0.01267	Uiso	1	0.100561
H102	H	0.1896	0.2818	0.6702	0.01267	Uiso	1	0.096213
H103	H	0.4255	0.3694	0.6478	0.01267	Uiso	1	0.100362
H104	H	0.4325	0.3674	0.606	0.01267	Uiso	1	0.091724
H105	H	0.1988	0.279	0.6032	0.01267	Uiso	1	0.095843
H106	H	0.1523	0.3454	0.606	0.01267	Uiso	1	0.088591
H107	H	0.4739	0.2644	0.6054	0.01267	Uiso	1	0.078395
H108	H	0.4767	0.2646	0.6466	0.01267	Uiso	1	0.083686
H109	H	0.2148	0.1572	0.6594	0.01267	Uiso	1	0.078412
H110	H	0.2371	0.0912	0.665	0.01267	Uiso	1	0.08583
H111	H	0.5807	0.0582	0.6304	0.01267	Uiso	1	0.091741
H112	H	0.5293	0.0686	0.6712	0.01267	Uiso	1	0.091888
H113	H	0.3185	0.0766	0.6036	0.01267	Uiso	1	0.107587
H114	H	0.3057	0.1416	0.596	0.01267	Uiso	1	0.096478
H115	H	0.492	0.1684	0.663	0.01267	Uiso	1	0.098792
H116	H	0.5442	0.16	0.6222	0.01267	Uiso	1	0.094288
H117	H	0.0843	0.3126	0.7276	0.01267	Uiso	1	0.120599
H118	H	0.0333	0.2914	0.7874	0.01267	Uiso	1	0.124534

H119	H	0.4085	0.2738	0.8006	0.01267	Uiso	1	0.138822
H120	H	0.4569	0.2914	0.7406	0.01267	Uiso	1	0.125758
H121	H	0.106	0.5046	0.6226	0.01267	Uiso	1	0.110937
H122	H	0.1314	0.5934	0.609	0.01267	Uiso	1	0.123385
H123	H	0.5153	0.5404	0.6136	0.01267	Uiso	1	0.106209
H124	H	0.4823	0.4496	0.6252	0.01267	Uiso	1	0.119816
H125	H	0.4219	0.3374	0.5108	0.01267	Uiso	1	0.126288
H126	H	0.3524	0.337	0.455	0.01267	Uiso	1	0.117327
H127	H	0.0125	0.3086	0.5002	0.01267	Uiso	1	0.103446
H128	H	0.0774	0.3068	0.5564	0.01267	Uiso	1	0.11835
H129	H	0.0542	0.1384	0.6984	0.01267	Uiso	1	0.115139
H130	H	0.8914	0.1444	0.745	0.01267	Uiso	1	0.116598
H131	H	0.1518	0.1524	0.8102	0.01267	Uiso	1	0.117724
H132	H	0.3141	0.1378	0.7626	0.01267	Uiso	1	0.136431
H133	H	0.3872	0.923	0.6478	0.01267	Uiso	1	0.13873
H134	H	0.5132	0.8344	0.6454	0.01267	Uiso	1	0.114028
H135	H	0.8304	0.8938	0.6498	0.01267	Uiso	1	0.12307
H136	H	0.6996	0.988	0.6534	0.01267	Uiso	1	0.128215
H137	H	0.6652	0.0796	0.5316	0.01267	Uiso	1	0.137905
H138	H	0.6845	0.1168	0.4736	0.01267	Uiso	1	0.118027
H139	H	0.3155	0.1982	0.4898	0.01267	Uiso	1	0.11362
H140	H	0.2938	0.161	0.5474	0.01267	Uiso	1	0.12595
H141	H	0.6349	0.0646	0.921	0.01267	Uiso	1	0.106152
H142	H	0.7794	0.0442	0.8208	0.01267	Uiso	1	0.125829
H143	H	0.7549	0.9532	0.842	0.01267	Uiso	1	0.14098
H144	H	0.7054	0.8892	0.8812	0.01267	Uiso	1	0.128727
H145	H	0.6262	0.8204	0.919	0.01267	Uiso	1	0.127174
H146	H	0.4442	0.9404	0.988	0.01267	Uiso	1	0.135291
H147	H	0.5229	0.0072	0.948	0.01267	Uiso	1	0.123632
H148	H	0.4529	0.8662	0.0294	0.01267	Uiso	1	0.095905
H149	H	0.5082	0.765	0.9482	0.01267	Uiso	1	0.126584
H150	H	0.4481	0.7146	0.0032	0.01267	Uiso	1	0.114727
H151	H	0.1775	0.6512	0.3296	0.01267	Uiso	1	0.092405
H152	H	0.1416	0.7182	0.3298	0.01267	Uiso	1	0.097334
H153	H	0.4427	0.6306	0.3522	0.01267	Uiso	1	0.099944
H154	H	0.4059	0.6326	0.394	0.01267	Uiso	1	0.091538
H155	H	0.081	0.721	0.3968	0.01267	Uiso	1	0.095704
H156	H	0.1037	0.6546	0.394	0.01267	Uiso	1	0.088517
H157	H	0.3437	0.7356	0.3946	0.01267	Uiso	1	0.079146
H158	H	0.3879	0.7354	0.3534	0.01267	Uiso	1	0.083822
H159	H	0.0314	0.8428	0.3406	0.01267	Uiso	1	0.078866
H160	H	0.9933	0.9088	0.335	0.01267	Uiso	1	0.085995
H161	H	0.2693	0.9418	0.3696	0.01267	Uiso	1	0.091518
H162	H	0.2691	0.9314	0.3288	0.01267	Uiso	1	0.092493
H163	H	0.9987	0.9234	0.3964	0.01267	Uiso	1	0.107978
H164	H	0.0433	0.8584	0.404	0.01267	Uiso	1	0.087255
H165	H	0.3234	0.8316	0.337	0.01267	Uiso	1	0.098713
H166	H	0.3264	0.84	0.3778	0.01267	Uiso	1	0.094275
H167	H	0.1245	0.6874	0.2724	0.01267	Uiso	1	0.121431
H168	H	0.1121	0.7086	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.123438
H169	H	0.4829	0.7262	0.1994	0.01267	Uiso	1	0.127907
H170	H	0.4889	0.7086	0.2594	0.01267	Uiso	1	0.126699

H171	H	0.2332	0.4954	0.3774	0.01267	Uiso	1	0.110016
H172	H	0.3338	0.4066	0.391	0.01267	Uiso	1	0.121902
H173	H	0.6693	0.4596	0.3864	0.01267	Uiso	1	0.10488
H174	H	0.5571	0.5504	0.3748	0.01267	Uiso	1	0.113097
H175	H	0.2701	0.6626	0.4892	0.01267	Uiso	1	0.128354
H176	H	0.1444	0.663	0.545	0.01267	Uiso	1	0.115228
H177	H	0.8213	0.6914	0.4998	0.01267	Uiso	1	0.104735
H178	H	0.9406	0.6932	0.4436	0.01267	Uiso	1	0.117342
H179	H	0.891	0.8616	0.3016	0.01267	Uiso	1	0.115855
H180	H	0.7808	0.8556	0.255	0.01267	Uiso	1	0.117967
H181	H	0.1144	0.8476	0.1898	0.01267	Uiso	1	0.117886
H182	H	0.2145	0.8622	0.2374	0.01267	Uiso	1	0.136855
H183	H	0.958	0.077	0.3522	0.01267	Uiso	1	0.137563
H184	H	0.993	0.1656	0.3546	0.01267	Uiso	1	0.114012
H185	H	0.374	0.1062	0.3502	0.01267	Uiso	1	0.120775
H186	H	0.341	0.012	0.3466	0.01267	Uiso	1	0.128368
H187	H	0.2764	0.9204	0.4684	0.01267	Uiso	1	0.139416
H188	H	0.2749	0.8832	0.5264	0.01267	Uiso	1	0.118337
H189	H	0.0035	0.8018	0.5102	0.01267	Uiso	1	0.113653
H190	H	0.0022	0.839	0.4526	0.01267	Uiso	1	0.126046
H191	H	0.6205	0.9354	0.079	0.01267	Uiso	1	0.106679
H192	H	0.6444	0.9558	0.1792	0.01267	Uiso	1	0.126241
H193	H	0.5501	0.0468	0.158	0.01267	Uiso	1	0.141038
H194	H	0.4758	0.1108	0.1188	0.01267	Uiso	1	0.128516
H195	H	0.3656	0.1796	0.081	0.01267	Uiso	1	0.126481
H196	H	0.3726	0.0596	0.012	0.01267	Uiso	1	0.136614
H197	H	0.4781	0.9928	0.052	0.01267	Uiso	1	0.124633
H198	H	0.3485	0.1338	0.9706	0.01267	Uiso	1	0.095466
H199	H	0.2214	0.235	0.0518	0.01267	Uiso	1	0.126566
H200	H	0.1659	0.2854	0.9968	0.01267	Uiso	1	0.11483
C1	C	0.19864	0.81482	0.8683	0.01267	Uiso	1	0.095069
C2	C	0.14592	0.81502	0.83214	0.01267	Uiso	1	-0.08537
C3	C	0.2534	0.86782	0.87158	0.01267	Uiso	1	-0.07729
C4	C	0.08119	0.8143	0.89732	0.01267	Uiso	1	-0.083112
C5	C	0.29902	0.76432	0.87164	0.01267	Uiso	1	-0.091558
C6	C	0.28897	0.61538	0.86108	0.01267	Uiso	1	0.086788
C7	C	0.19294	0.62368	0.83424	0.01267	Uiso	1	-0.077675
C8	C	0.40145	0.56332	0.85178	0.01267	Uiso	1	-0.089235
C9	C	0.21711	0.60748	0.8971	0.01267	Uiso	1	-0.099783
C10	C	0.35606	0.66502	0.86026	0.01267	Uiso	1	-0.090117
C11	C	0.25261	0.80404	0.77174	0.01267	Uiso	1	0.269849
C12	C	0.14254	0.8044	0.75792	0.01267	Uiso	1	-0.255477
C13	C	0.14733	0.79266	0.72188	0.01267	Uiso	1	-0.083849
C14	C	0.26358	0.78328	0.70056	0.01267	Uiso	1	-0.045272
C15	C	0.37844	0.78176	0.71396	0.01267	Uiso	1	-0.093518
C16	C	0.37045	0.79232	0.74978	0.01267	Uiso	1	-0.228133
C17	C	0.26695	0.76754	0.66136	0.01267	Uiso	1	0.577716
C18	C	0.16743	0.96814	0.8764	0.01267	Uiso	1	0.287257
C19	C	0.05984	0.01202	0.8801	0.01267	Uiso	1	-0.215832
C20	C	0.06624	0.0649	0.88742	0.01267	Uiso	1	-0.078094
C21	C	0.18584	0.07638	0.88954	0.01267	Uiso	1	-0.061972
C22	C	0.29642	0.03318	0.88498	0.01267	Uiso	1	-0.095593

C23	C	0.28311	0.97896	0.87822	0.01267	Uiso	1	-0.259872
C24	C	0.1991	0.13576	0.89804	0.01267	Uiso	1	0.564924
C25	C	0.04613	0.82184	0.9613	0.01267	Uiso	1	0.275132
C26	C	0.09775	0.83126	0.99104	0.01267	Uiso	1	-0.225967
C27	C	0.02194	0.83166	0.02446	0.01267	Uiso	1	-0.074382
C28	C	0.8994	0.82434	0.02706	0.01267	Uiso	1	-0.049735
C29	C	0.84794	0.81456	0.99736	0.01267	Uiso	1	-0.090363
C30	C	0.91961	0.81326	0.96372	0.01267	Uiso	1	-0.256003
C31	C	0.82086	0.82296	0.06272	0.01267	Uiso	1	0.575078
C32	C	0.17479	0.6366	0.77422	0.01267	Uiso	1	0.281285
C33	C	0.04595	0.63992	0.77858	0.01267	Uiso	1	-0.250974
C34	C	0.97508	0.64534	0.7511	0.01267	Uiso	1	-0.087023
C35	C	0.03547	0.6524	0.71706	0.01267	Uiso	1	-0.064098
C36	C	0.16779	0.64902	0.7126	0.01267	Uiso	1	-0.072217
C37	C	0.2362	0.6407	0.7411	0.01267	Uiso	1	-0.215693
C38	C	0.9582	0.66122	0.68738	0.01267	Uiso	1	0.584215
C39	C	0.43417	0.46366	0.851	0.01267	Uiso	1	0.272343
C40	C	0.37511	0.41762	0.85236	0.01267	Uiso	1	-0.214822
C41	C	0.44904	0.36514	0.85378	0.01267	Uiso	1	-0.084577
C42	C	0.58031	0.3553	0.85408	0.01267	Uiso	1	-0.056521
C43	C	0.63939	0.39994	0.85108	0.01267	Uiso	1	-0.088061
C44	C	0.56306	0.45696	0.84912	0.01267	Uiso	1	-0.268711
C45	C	0.66436	0.29762	0.85886	0.01267	Uiso	1	0.595735
C46	C	0.26738	0.61818	0.95566	0.01267	Uiso	1	0.275787
C47	C	0.36755	0.60382	0.97668	0.01267	Uiso	1	-0.236003
C48	C	0.3445	0.62732	0.01128	0.01267	Uiso	1	-0.104042
C49	C	0.23155	0.6649	0.0228	0.01267	Uiso	1	-0.060399
C50	C	0.13636	0.67526	0.00182	0.01267	Uiso	1	-0.077998
C51	C	0.1571	0.65198	0.96722	0.01267	Uiso	1	-0.266538
C52	C	0.21891	0.69452	0.05886	0.01267	Uiso	1	0.603867
C53	C	0.81337	0.5493	0.60156	0.01267	Uiso	1	0.086143
C54	C	0.84048	0.53664	0.656	0.01267	Uiso	1	-0.025501
C55	C	0.83524	0.4869	0.64522	0.01267	Uiso	1	-0.136305
C56	C	0.78408	0.45388	0.58696	0.01267	Uiso	1	0.17932
C57	C	0.80582	0.39982	0.59714	0.01267	Uiso	1	-0.166749
C58	C	0.78064	0.3584	0.57432	0.01267	Uiso	1	-0.17232
C59	C	0.73557	0.37452	0.54294	0.01267	Uiso	1	0.18149
C60	C	0.7131	0.4286	0.5334	0.01267	Uiso	1	-0.174004
C61	C	0.73856	0.4688	0.55788	0.01267	Uiso	1	-0.170373
C62	C	0.71888	0.33522	0.48462	0.01267	Uiso	1	0.09428
C63	C	0.70847	0.28	0.52886	0.01267	Uiso	1	-0.163609
C64	C	0.70265	0.25274	0.49856	0.01267	Uiso	1	-0.014028
C65	C	0.88176	0.18518	0.1317	0.01267	Uiso	1	0.096622
C66	C	0.79308	0.18498	0.16786	0.01267	Uiso	1	-0.08597
C67	C	0.9928	0.13218	0.12842	0.01267	Uiso	1	-0.078695
C68	C	0.79281	0.1857	0.10268	0.01267	Uiso	1	-0.085196
C69	C	0.93498	0.23568	0.12836	0.01267	Uiso	1	-0.097612
C70	C	0.76543	0.38462	0.13892	0.01267	Uiso	1	0.086569
C71	C	0.65086	0.37632	0.16576	0.01267	Uiso	1	-0.074304
C72	C	0.81655	0.43668	0.14822	0.01267	Uiso	1	-0.094366
C73	C	0.72169	0.39252	0.1029	0.01267	Uiso	1	-0.093584
C74	C	0.88134	0.33498	0.13974	0.01267	Uiso	1	-0.088787

C75	C	0.82839	0.19596	0.22826	0.01267	Uiso	1	0.269343
C76	C	0.70486	0.1956	0.24208	0.01267	Uiso	1	-0.253465
C77	C	0.66187	0.20734	0.27812	0.01267	Uiso	1	-0.083236
C78	C	0.74742	0.21672	0.29944	0.01267	Uiso	1	-0.049137
C79	C	0.87416	0.21824	0.28604	0.01267	Uiso	1	-0.090186
C80	C	0.91255	0.20768	0.25022	0.01267	Uiso	1	-0.22629
C81	C	0.69585	0.23246	0.33864	0.01267	Uiso	1	0.575457
C82	C	0.01197	0.03186	0.1236	0.01267	Uiso	1	0.286522
C83	C	0.95196	0.98798	0.1199	0.01267	Uiso	1	-0.215288
C84	C	0.01856	0.9351	0.11258	0.01267	Uiso	1	-0.076149
C85	C	0.15176	0.92362	0.11046	0.01267	Uiso	1	-0.061927
C86	C	0.21458	0.96682	0.11502	0.01267	Uiso	1	-0.096849
C87	C	0.14029	0.02104	0.12178	0.01267	Uiso	1	-0.259252
C88	C	0.2329	0.86424	0.10196	0.01267	Uiso	1	0.566574
C89	C	0.82927	0.17816	0.0387	0.01267	Uiso	1	0.274786
C90	C	0.92005	0.16874	0.00896	0.01267	Uiso	1	-0.224842
C91	C	0.87806	0.16834	0.97554	0.01267	Uiso	1	-0.077688
C92	C	0.7508	0.17566	0.97294	0.01267	Uiso	1	-0.050023
C93	C	0.65986	0.18544	0.00264	0.01267	Uiso	1	-0.091078
C94	C	0.69659	0.18674	0.03628	0.01267	Uiso	1	-0.254044
C95	C	0.70654	0.17704	0.93728	0.01267	Uiso	1	0.574915
C96	C	0.58561	0.3634	0.22578	0.01267	Uiso	1	0.282601
C97	C	0.46445	0.36008	0.22142	0.01267	Uiso	1	-0.249793
C98	C	0.37152	0.35466	0.2489	0.01267	Uiso	1	-0.093772
C99	C	0.40493	0.3476	0.28294	0.01267	Uiso	1	-0.057363
C100	C	0.52941	0.35098	0.2874	0.01267	Uiso	1	-0.073882
C101	C	0.618	0.3593	0.2589	0.01267	Uiso	1	-0.217674
C102	C	0.3068	0.33878	0.31262	0.01267	Uiso	1	0.582848
C103	C	0.74883	0.53634	0.149	0.01267	Uiso	1	0.273096
C104	C	0.64509	0.58238	0.14764	0.01267	Uiso	1	-0.218678
C105	C	0.66796	0.63486	0.14622	0.01267	Uiso	1	-0.084741
C106	C	0.78969	0.6447	0.14592	0.01267	Uiso	1	-0.052417
C107	C	0.89041	0.60006	0.14892	0.01267	Uiso	1	-0.089051
C108	C	0.86914	0.54304	0.15088	0.01267	Uiso	1	-0.270075
C109	C	0.82084	0.70238	0.14114	0.01267	Uiso	1	0.593948
C110	C	0.84122	0.38182	0.04434	0.01267	Uiso	1	0.276336
C111	C	0.94805	0.39618	0.02332	0.01267	Uiso	1	-0.23568
C112	C	0.9831	0.37268	0.98872	0.01267	Uiso	1	-0.106793
C113	C	0.91925	0.3351	0.9772	0.01267	Uiso	1	-0.059788
C114	C	0.81344	0.32474	0.99818	0.01267	Uiso	1	-0.076471
C115	C	0.7763	0.34802	0.03278	0.01267	Uiso	1	-0.255833
C116	C	0.97229	0.30548	0.94114	0.01267	Uiso	1	0.602418
C117	C	0.96423	0.4507	0.39844	0.01267	Uiso	1	0.083419
C118	C	0.03312	0.46336	0.344	0.01267	Uiso	1	-0.028449
C119	C	0.96736	0.5131	0.35478	0.01267	Uiso	1	-0.13384
C120	C	0.82492	0.54612	0.41304	0.01267	Uiso	1	0.177117
C121	C	0.80278	0.60018	0.40286	0.01267	Uiso	1	-0.167271
C122	C	0.71336	0.6416	0.42568	0.01267	Uiso	1	-0.173083
C123	C	0.65303	0.62548	0.45706	0.01267	Uiso	1	0.181812
C124	C	0.6751	0.5714	0.4666	0.01267	Uiso	1	-0.174386
C125	C	0.76524	0.5312	0.44212	0.01267	Uiso	1	-0.170965
C126	C	0.53872	0.66478	0.51538	0.01267	Uiso	1	0.092445

C127	C	0.51733	0.72	0.47114	0.01267	Uiso	1	-0.161796
C128	C	0.45395	0.74726	0.50144	0.01267	Uiso	1	-0.01549
C129	C	0.31694	0.31482	0.6317	0.01267	Uiso	1	0.096677
C130	C	0.22806	0.31502	0.66786	0.01267	Uiso	1	-0.090978
C131	C	0.37498	0.36782	0.62842	0.01267	Uiso	1	-0.078816
C132	C	0.22851	0.3143	0.60268	0.01267	Uiso	1	-0.08365
C133	C	0.42066	0.26432	0.62836	0.01267	Uiso	1	-0.092695
C134	C	0.40005	0.11538	0.63892	0.01267	Uiso	1	0.085845
C135	C	0.27718	0.12368	0.66576	0.01267	Uiso	1	-0.0757
C136	C	0.50323	0.06332	0.64822	0.01267	Uiso	1	-0.085766
C137	C	0.36421	0.10748	0.6029	0.01267	Uiso	1	-0.098431
C138	C	0.46632	0.16502	0.63974	0.01267	Uiso	1	-0.092893
C139	C	0.27435	0.30404	0.72826	0.01267	Uiso	1	0.268611
C140	C	0.15046	0.3044	0.74208	0.01267	Uiso	1	-0.254632
C141	C	0.11921	0.29266	0.77812	0.01267	Uiso	1	-0.083381
C142	C	0.21414	0.28328	0.79944	0.01267	Uiso	1	-0.047706
C143	C	0.3424	0.28176	0.78604	0.01267	Uiso	1	-0.101353
C144	C	0.37023	0.29232	0.75022	0.01267	Uiso	1	-0.225017
C145	C	0.17831	0.26754	0.83864	0.01267	Uiso	1	0.575787
C146	C	0.29383	0.46814	0.6236	0.01267	Uiso	1	0.284583
C147	C	0.18994	0.51202	0.6199	0.01267	Uiso	1	-0.212764
C148	C	0.20366	0.5649	0.61258	0.01267	Uiso	1	-0.079229
C149	C	0.32538	0.57638	0.61046	0.01267	Uiso	1	-0.060657
C150	C	0.4314	0.53318	0.61502	0.01267	Uiso	1	-0.099333
C151	C	0.41133	0.47896	0.62178	0.01267	Uiso	1	-0.26065
C152	C	0.34714	0.63576	0.60196	0.01267	Uiso	1	0.566456
C153	C	0.25743	0.32184	0.5387	0.01267	Uiso	1	0.277277
C154	C	0.33879	0.33126	0.50896	0.01267	Uiso	1	-0.224333
C155	C	0.2964	0.33166	0.47554	0.01267	Uiso	1	-0.076201
C156	C	0.17646	0.32434	0.47294	0.01267	Uiso	1	-0.050937
C157	C	0.0953	0.31456	0.50264	0.01267	Uiso	1	-0.089188
C158	C	0.13333	0.31326	0.53628	0.01267	Uiso	1	-0.256816
C159	C	0.13358	0.32296	0.43728	0.01267	Uiso	1	0.574532
C160	C	0.19901	0.1366	0.72578	0.01267	Uiso	1	0.280551
C161	C	0.07453	0.13992	0.72142	0.01267	Uiso	1	-0.24733
C162	C	0.97618	0.14534	0.7489	0.01267	Uiso	1	-0.091522
C163	C	0.00253	0.1524	0.78294	0.01267	Uiso	1	-0.059155
C164	C	0.13039	0.14902	0.7874	0.01267	Uiso	1	-0.072631
C165	C	0.2273	0.1407	0.7589	0.01267	Uiso	1	-0.215821
C166	C	0.89558	0.16122	0.81262	0.01267	Uiso	1	0.582112
C167	C	0.53517	0.96366	0.649	0.01267	Uiso	1	0.273642
C168	C	0.47747	0.91762	0.64764	0.01267	Uiso	1	-0.217975
C169	C	0.55282	0.86514	0.64622	0.01267	Uiso	1	-0.084999
C170	C	0.68439	0.8553	0.64592	0.01267	Uiso	1	-0.053267
C171	C	0.74047	0.89994	0.64892	0.01267	Uiso	1	-0.091575
C172	C	0.66218	0.95696	0.65088	0.01267	Uiso	1	-0.268181
C173	C	0.77322	0.79762	0.64114	0.01267	Uiso	1	0.595595
C174	C	0.47304	0.11818	0.54434	0.01267	Uiso	1	0.279382
C175	C	0.59423	0.10382	0.52332	0.01267	Uiso	1	-0.234808
C176	C	0.60578	0.12732	0.48872	0.01267	Uiso	1	-0.10887
C177	C	0.50435	0.1649	0.4772	0.01267	Uiso	1	-0.059867
C178	C	0.38818	0.17526	0.49818	0.01267	Uiso	1	-0.075034

C179	C	0.37432	0.15198	0.53278	0.01267	Uiso	1	-0.260734
C180	C	0.52777	0.19452	0.44114	0.01267	Uiso	1	0.604
C181	C	0.66493	0.0493	0.89844	0.01267	Uiso	1	0.082872
C182	C	0.74648	0.03664	0.844	0.01267	Uiso	1	-0.026166
C183	C	0.73046	0.9869	0.85478	0.01267	Uiso	1	-0.136078
C184	C	0.62104	0.95388	0.91304	0.01267	Uiso	1	0.177622
C185	C	0.65296	0.89982	0.90286	0.01267	Uiso	1	-0.16551
C186	C	0.60496	0.8584	0.92568	0.01267	Uiso	1	-0.175039
C187	C	0.52851	0.87452	0.95706	0.01267	Uiso	1	0.186033
C188	C	0.4965	0.9286	0.9666	0.01267	Uiso	1	-0.174224
C189	C	0.54644	0.9688	0.94212	0.01267	Uiso	1	-0.171149
C190	C	0.4535	0.83522	0.01538	0.01267	Uiso	1	0.097581
C191	C	0.48733	0.78	0.97114	0.01267	Uiso	1	-0.156107
C192	C	0.45121	0.75274	0.00144	0.01267	Uiso	1	-0.016148
C193	C	0.26346	0.68518	0.3683	0.01267	Uiso	1	0.0971
C194	C	0.21094	0.68498	0.33214	0.01267	Uiso	1	-0.084405
C195	C	0.37122	0.63218	0.37158	0.01267	Uiso	1	-0.078125
C196	C	0.14549	0.6857	0.39732	0.01267	Uiso	1	-0.083722
C197	C	0.31334	0.73568	0.37164	0.01267	Uiso	1	-0.093796
C198	C	0.15435	0.88462	0.36108	0.01267	Uiso	1	0.085799
C199	C	0.06662	0.87632	0.33424	0.01267	Uiso	1	-0.076814
C200	C	0.21477	0.93668	0.35178	0.01267	Uiso	1	-0.08585
C201	C	0.07459	0.89252	0.3971	0.01267	Uiso	1	-0.094737
C202	C	0.27108	0.83498	0.36026	0.01267	Uiso	1	-0.091737
C203	C	0.30665	0.69596	0.27174	0.01267	Uiso	1	0.271757
C204	C	0.19694	0.6956	0.25792	0.01267	Uiso	1	-0.257436
C205	C	0.18999	0.70734	0.22188	0.01267	Uiso	1	-0.081744
C206	C	0.29686	0.71672	0.20056	0.01267	Uiso	1	-0.049307
C207	C	0.4102	0.71824	0.21396	0.01267	Uiso	1	-0.091447
C208	C	0.41277	0.70768	0.24978	0.01267	Uiso	1	-0.227322
C209	C	0.28449	0.73246	0.16136	0.01267	Uiso	1	0.580659
C210	C	0.38557	0.53186	0.3764	0.01267	Uiso	1	0.286648
C211	C	0.32186	0.48798	0.3801	0.01267	Uiso	1	-0.21416
C212	C	0.38114	0.4351	0.38742	0.01267	Uiso	1	-0.077668
C213	C	0.51222	0.42362	0.38954	0.01267	Uiso	1	-0.059495
C214	C	0.5796	0.46682	0.38498	0.01267	Uiso	1	-0.098691
C215	C	0.51207	0.52104	0.37822	0.01267	Uiso	1	-0.255837
C216	C	0.58486	0.36424	0.39804	0.01267	Uiso	1	0.566455
C217	C	0.11797	0.67816	0.4613	0.01267	Uiso	1	0.275991
C218	C	0.17901	0.66874	0.49104	0.01267	Uiso	1	-0.229177
C219	C	0.1036	0.66834	0.52446	0.01267	Uiso	1	-0.072977
C220	C	0.97374	0.67566	0.52706	0.01267	Uiso	1	-0.05025
C221	C	0.9125	0.68544	0.49736	0.01267	Uiso	1	-0.091469
C222	C	0.98287	0.68674	0.46372	0.01267	Uiso	1	-0.25535
C223	C	0.89382	0.67704	0.56272	0.01267	Uiso	1	0.57349
C224	C	0.06139	0.8634	0.27422	0.01267	Uiso	1	0.28222
C225	C	0.93587	0.86008	0.27858	0.01267	Uiso	1	-0.248892
C226	C	0.87042	0.85466	0.2511	0.01267	Uiso	1	-0.093746
C227	C	0.93787	0.8476	0.21706	0.01267	Uiso	1	-0.061818
C228	C	0.06681	0.85098	0.2126	0.01267	Uiso	1	-0.072448
C229	C	0.1269	0.8593	0.2411	0.01267	Uiso	1	-0.216599
C230	C	0.86942	0.83878	0.18738	0.01267	Uiso	1	0.585465

C231	C	0.14783	0.03634	0.351	0.01267	Uiso	1	0.270818
C232	C	0.04273	0.08238	0.35236	0.01267	Uiso	1	-0.213499
C233	C	0.06418	0.13486	0.35378	0.01267	Uiso	1	-0.087235
C234	C	0.18561	0.1447	0.35408	0.01267	Uiso	1	-0.053463
C235	C	0.28933	0.10006	0.35108	0.01267	Uiso	1	-0.089014
C236	C	0.27002	0.04304	0.34912	0.01267	Uiso	1	-0.267821
C237	C	0.21198	0.20238	0.35886	0.01267	Uiso	1	0.59551
C238	C	0.13556	0.88182	0.45566	0.01267	Uiso	1	0.280498
C239	C	0.22137	0.89618	0.47668	0.01267	Uiso	1	-0.237474
C240	C	0.22182	0.87268	0.51128	0.01267	Uiso	1	-0.108101
C241	C	0.14645	0.8351	0.5228	0.01267	Uiso	1	-0.058402
C242	C	0.06162	0.82474	0.50182	0.01267	Uiso	1	-0.077088
C243	C	0.05908	0.84802	0.46722	0.01267	Uiso	1	-0.25784
C244	C	0.16343	0.80548	0.55886	0.01267	Uiso	1	0.599603
C245	C	0.61267	0.9507	0.10156	0.01267	Uiso	1	0.084772
C246	C	0.62712	0.96336	0.156	0.01267	Uiso	1	-0.026496
C247	C	0.57214	0.0131	0.14522	0.01267	Uiso	1	-0.134561
C248	C	0.48796	0.04612	0.08696	0.01267	Uiso	1	0.180398
C249	C	0.45564	0.10018	0.09714	0.01267	Uiso	1	-0.16687
C250	C	0.38904	0.1416	0.07432	0.01267	Uiso	1	-0.17132
C251	C	0.36009	0.12548	0.04294	0.01267	Uiso	1	0.178807
C252	C	0.3917	0.0714	0.0334	0.01267	Uiso	1	-0.174892
C253	C	0.45736	0.0312	0.05788	0.01267	Uiso	1	-0.172423
C254	C	0.3041	0.16478	0.98462	0.01267	Uiso	1	0.094042
C255	C	0.23847	0.22	0.02886	0.01267	Uiso	1	-0.162171
C256	C	0.20539	0.24726	0.99856	0.01267	Uiso	1	-0.01478
N1	N	0.83002	0.57814	0.62902	0.01267	Uiso	1	-0.26072
N2	N	0.80828	0.49512	0.61012	0.01267	Uiso	1	0.035593
N3	N	0.69946	0.28908	0.4718	0.01267	Uiso	1	-0.248511
N4	N	0.71779	0.33422	0.519	0.01267	Uiso	1	0.053677
N5	N	0.03718	0.42186	0.37098	0.01267	Uiso	1	-0.258843
N6	N	0.91352	0.50488	0.38988	0.01267	Uiso	1	0.037805
N7	N	0.46034	0.71092	0.5282	0.01267	Uiso	1	-0.245629
N8	N	0.57101	0.66578	0.481	0.01267	Uiso	1	0.052509
N9	N	0.70904	0.07814	0.87098	0.01267	Uiso	1	-0.260654
N10	N	0.6684	0.99512	0.88988	0.01267	Uiso	1	0.036056
N11	N	0.42126	0.78908	0.0282	0.01267	Uiso	1	-0.243496
N12	N	0.48679	0.83422	0.981	0.01267	Uiso	1	0.037155
N13	N	0.65816	0.92186	0.12902	0.01267	Uiso	1	-0.260183
N14	N	0.5534	0.00488	0.11012	0.01267	Uiso	1	0.035885
N15	N	0.23854	0.21092	0.9718	0.01267	Uiso	1	-0.24633
N16	N	0.30201	0.16578	0.019	0.01267	Uiso	1	0.052559
O1	O	0.25211	0.71546	0.86832	0.01267	Uiso	1	-0.214397
O2	O	0.25998	0.81416	0.80648	0.01267	Uiso	1	-0.202824
O3	O	0.14506	0.9166	0.87008	0.01267	Uiso	1	-0.204967
O4	O	0.12969	0.82028	0.93014	0.01267	Uiso	1	-0.199316
O5	O	0.25318	0.62976	0.80068	0.01267	Uiso	1	-0.178146
O6	O	0.34623	0.51524	0.8509	0.01267	Uiso	1	-0.200988
O7	O	0.30467	0.59546	0.9222	0.01267	Uiso	1	-0.1971
O8	O	0.1614	0.76846	0.65154	0.01267	Uiso	1	-0.512589
O9	O	0.37818	0.75622	0.64222	0.01267	Uiso	1	-0.510018
O10	O	0.09885	0.17548	0.90242	0.01267	Uiso	1	-0.501042

O11	O	0.30743	0.14322	0.90092	0.01267	Uiso	1	-0.490842
O12	O	0.70111	0.82928	0.0665	0.01267	Uiso	1	-0.523391
O13	O	0.87838	0.81906	0.09098	0.01267	Uiso	1	-0.510328
O14	O	0.84281	0.6592	0.69078	0.01267	Uiso	1	-0.480138
O15	O	0.01499	0.6705	0.65672	0.01267	Uiso	1	-0.540291
O16	O	0.60311	0.25672	0.86086	0.01267	Uiso	1	-0.536546
O17	O	0.77951	0.2927	0.85988	0.01267	Uiso	1	-0.483582
O18	O	0.10427	0.71654	0.07112	0.01267	Uiso	1	-0.499758
O19	O	0.32097	0.6944	0.07006	0.01267	Uiso	1	-0.499752
O20	O	0.83589	0.28454	0.13168	0.01267	Uiso	1	-0.215065
O21	O	0.88062	0.18584	0.19352	0.01267	Uiso	1	-0.203493
O22	O	0.93174	0.0834	0.12992	0.01267	Uiso	1	-0.204369
O23	O	0.88011	0.17972	0.06986	0.01267	Uiso	1	-0.199113
O24	O	0.68362	0.37024	0.19932	0.01267	Uiso	1	-0.179011
O25	O	0.71237	0.48476	0.1491	0.01267	Uiso	1	-0.201577
O26	O	0.82233	0.40454	0.0778	0.01267	Uiso	1	-0.194401
O27	O	0.5814	0.23154	0.34846	0.01267	Uiso	1	-0.512774
O28	O	0.77662	0.24378	0.35778	0.01267	Uiso	1	-0.508159
O29	O	0.17675	0.82452	0.09758	0.01267	Uiso	1	-0.502653
O30	O	0.35157	0.85678	0.09908	0.01267	Uiso	1	-0.491034
O31	O	0.59689	0.17072	0.9335	0.01267	Uiso	1	-0.523659
O32	O	0.78842	0.18094	0.90902	0.01267	Uiso	1	-0.514566
O33	O	0.19279	0.3408	0.30922	0.01267	Uiso	1	-0.476779
O34	O	0.34221	0.3295	0.34328	0.01267	Uiso	1	-0.547528
O35	O	0.72069	0.74328	0.13914	0.01267	Uiso	1	-0.538849
O36	O	0.93209	0.7073	0.14012	0.01267	Uiso	1	-0.482108
O37	O	0.89193	0.28346	0.92888	0.01267	Uiso	1	-0.498067
O38	O	0.08543	0.3056	0.92994	0.01267	Uiso	1	-0.498682
O39	O	0.37043	0.21546	0.63168	0.01267	Uiso	1	-0.214402
O40	O	0.31646	0.31416	0.69352	0.01267	Uiso	1	-0.203233
O41	O	0.26514	0.4166	0.62992	0.01267	Uiso	1	-0.20532
O42	O	0.30983	0.32028	0.56986	0.01267	Uiso	1	-0.200841
O43	O	0.30386	0.12976	0.69932	0.01267	Uiso	1	-0.177911
O44	O	0.44713	0.01524	0.6491	0.01267	Uiso	1	-0.202257
O45	O	0.47687	0.09546	0.5778	0.01267	Uiso	1	-0.196792
O46	O	0.06294	0.26846	0.84846	0.01267	Uiso	1	-0.511674
O47	O	0.2704	0.25622	0.85778	0.01267	Uiso	1	-0.510256
O48	O	0.25127	0.67548	0.59758	0.01267	Uiso	1	-0.501958
O49	O	0.45835	0.64322	0.59908	0.01267	Uiso	1	-0.492191
O50	O	0.01761	0.32928	0.4335	0.01267	Uiso	1	-0.522259
O51	O	0.21936	0.31906	0.40902	0.01267	Uiso	1	-0.510922
O52	O	0.78359	0.1592	0.80922	0.01267	Uiso	1	-0.477794
O53	O	0.92171	0.1705	0.84328	0.01267	Uiso	1	-0.536938
O54	O	0.71397	0.75672	0.63914	0.01267	Uiso	1	-0.538691
O55	O	0.88939	0.7927	0.64012	0.01267	Uiso	1	-0.483784
O56	O	0.42539	0.21654	0.42888	0.01267	Uiso	1	-0.498782
O57	O	0.64103	0.1944	0.42994	0.01267	Uiso	1	-0.4976
O58	O	0.21757	0.78454	0.36832	0.01267	Uiso	1	-0.213572
O59	O	0.32414	0.68584	0.30648	0.01267	Uiso	1	-0.203508
O60	O	0.31166	0.5834	0.37008	0.01267	Uiso	1	-0.205184
O61	O	0.19997	0.67972	0.43014	0.01267	Uiso	1	-0.19962
O62	O	0.13294	0.87024	0.30068	0.01267	Uiso	1	-0.17787

O63	O	0.11147	0.98476	0.3509	0.01267	Uiso	1	-0.201062
O64	O	0.15013	0.90454	0.4222	0.01267	Uiso	1	-0.195828
O65	O	0.17986	0.73154	0.15154	0.01267	Uiso	1	-0.513983
O66	O	0.3844	0.74378	0.14222	0.01267	Uiso	1	-0.511557
O67	O	0.52433	0.32452	0.40242	0.01267	Uiso	1	-0.503228
O68	O	0.70065	0.35678	0.40092	0.01267	Uiso	1	-0.491718
O69	O	0.78039	0.67072	0.5665	0.01267	Uiso	1	-0.524622
O70	O	0.94744	0.68094	0.59098	0.01267	Uiso	1	-0.515314
O71	O	0.75201	0.8408	0.19078	0.01267	Uiso	1	-0.476968
O72	O	0.93549	0.8295	0.15672	0.01267	Uiso	1	-0.551935
O73	O	0.10983	0.24328	0.36086	0.01267	Uiso	1	-0.537506
O74	O	0.32221	0.2073	0.35988	0.01267	Uiso	1	-0.484509
O75	O	0.07081	0.78346	0.57112	0.01267	Uiso	1	-0.496215
O76	O	0.26537	0.8056	0.57006	0.01267	Uiso	1	-0.497025

```

data_CAYYEG_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            9.3307
_cell_length_b            19.4814
_cell_length_c            19.4814
_cell_angle_alpha         62.4988
_cell_angle_beta          80.8133
_cell_angle_gamma         99.1867
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn    0    0    0.5  0.01267    Uiso  1    0.507349
H1   H     0.5243 0.7768 0.5794 0.01267    Uiso  1    0.132861
H2   H     0.4359 0.8523 0.6417 0.01267    Uiso  1    0.128157
H3   H     0.3035 0.8833 0.3532 0.01267    Uiso  1    0.133353
H4   H     0.0441 0.797  0.4031 0.01267    Uiso  1    0.129026
H5   H     0.6092 0.9911 0.4193 0.01267    Uiso  1    0.122985
H6   H     0.8226 0.9962 0.3407 0.01267    Uiso  1    0.078303
H7   H     0.6518 0.0511 0.1619 0.01267    Uiso  1    0.086535
H8   H     0.4254 0.0453 0.235  0.01267    Uiso  1    0.130652
H9   H     0.8373 0.6877 0.5764 0.01267    Uiso  1    0.136738
H10  H     0.7345 0.5739 0.5745 0.01267    Uiso  1    0.097336
H11  H     0.5582 0.6936 0.4038 0.01267    Uiso  1    0.092334
H12  H     0.6548 0.811  0.4006 0.01267    Uiso  1    0.141226
H13  H     0.4757 0.2232 0.4206 0.01267    Uiso  1    0.132743
H14  H     0.5641 0.1477 0.3583 0.01267    Uiso  1    0.12798
H15  H     0.6965 0.1167 0.6468 0.01267    Uiso  1    0.133442
H16  H     0.9559 0.203  0.5969 0.01267    Uiso  1    0.128988
H17  H     0.3908 0.0089 0.5807 0.01267    Uiso  1    0.122727
H18  H     0.1774 0.0038 0.6593 0.01267    Uiso  1    0.078262
H19  H     0.3482 0.9489 0.8381 0.01267    Uiso  1    0.086745
H20  H     0.5746 0.9547 0.765  0.01267    Uiso  1    0.130616
H21  H     0.1627 0.3123 0.4236 0.01267    Uiso  1    0.136604
H22  H     0.2655 0.4261 0.4255 0.01267    Uiso  1    0.097089
H23  H     0.4418 0.3064 0.5962 0.01267    Uiso  1    0.092323
H24  H     0.3452 0.189  0.5994 0.01267    Uiso  1    0.141294
C1   C     0.26645    0.13483    0.47168    0.01267    Uiso  1    0.16927
C2   C     0.5802 0.8238 0.5742 0.01267    Uiso  1    -0.207289

```

C3	C	0.5313	0.8652	0.6087	0.01267	Uiso	1	-0.198023	
C4	C	0.65554		0.93349	0.58447	0.01267	Uiso	1	0.165053
C5	C	0.65698		0.98975	0.61151	0.01267	Uiso	1	-0.10696
C6	C	0.78323		0.04939	0.5978	0.01267	Uiso	1	0.164032
C7	C	0.2196	0.8892	0.3807	0.01267	Uiso	1	-0.205084	
C8	C	0.0764	0.8415	0.4083	0.01267	Uiso	1	-0.201459	
C9	C	0.98398		0.87298	0.44704	0.01267	Uiso	1	0.165137
C10	C	0.17117		0.1607	0.51309	0.01267	Uiso	1	-0.115041
C11	C	0.48923		0.01658	0.33759	0.01267	Uiso	1	0.136727
C12	C	0.6131	0.0029	0.3669	0.01267	Uiso	1	-0.212754	
C13	C	0.7417	0.0068	0.3189	0.01267	Uiso	1	0.079216	
C14	C	0.642	0.0383	0.2151	0.01267	Uiso	1	0.075007	
C15	C	0.5046	0.0352	0.2585	0.01267	Uiso	1	-0.215223	
C16	C	0.24032		0.2362	0.51194	0.01267	Uiso	1	0.154056
C17	C	0.219	0.3093	0.4597	0.01267	Uiso	1	-0.205697	
C18	C	0.2815	0.3779	0.4611	0.01267	Uiso	1	0.073895	
C19	C	0.6156	0.6925	0.439	0.01267	Uiso	1	0.0847	
C20	C	0.6736	0.7638	0.4365	0.01267	Uiso	1	-0.187399	
C21	C	0.73355		0.86517	0.52832	0.01267	Uiso	1	0.169389
C22	C	0.4198	0.1762	0.4258	0.01267	Uiso	1	-0.207244	
C23	C	0.4687	0.1348	0.3913	0.01267	Uiso	1	-0.198114	
C24	C	0.34446		0.06651	0.41553	0.01267	Uiso	1	0.165146
C25	C	0.34302		0.01025	0.38849	0.01267	Uiso	1	-0.107035
C26	C	0.21677		0.95061	0.4022	0.01267	Uiso	1	0.164116
C27	C	0.7804	0.1108	0.6193	0.01267	Uiso	1	-0.205036	
C28	C	0.9236	0.1585	0.5917	0.01267	Uiso	1	-0.201519	
C29	C	0.01602		0.12702	0.55296	0.01267	Uiso	1	0.165109
C30	C	0.82883		0.8393	0.48691	0.01267	Uiso	1	-0.114942
C31	C	0.51077		0.98342	0.66241	0.01267	Uiso	1	0.136536
C32	C	0.3869	0.9971	0.6331	0.01267	Uiso	1	-0.212566	
C33	C	0.2583	0.9932	0.6811	0.01267	Uiso	1	0.079018	
C34	C	0.358	0.9617	0.7849	0.01267	Uiso	1	0.074906	
C35	C	0.4954	0.9648	0.7415	0.01267	Uiso	1	-0.215069	
C36	C	0.75968		0.7638	0.48806	0.01267	Uiso	1	0.153823
C37	C	0.781	0.6907	0.5403	0.01267	Uiso	1	-0.205532	
C38	C	0.7185	0.6221	0.5389	0.01267	Uiso	1	0.073685	
C39	C	0.3844	0.3075	0.561	0.01267	Uiso	1	0.084825	
C40	C	0.3264	0.2362	0.5635	0.01267	Uiso	1	-0.187341	
N1	N	0.22436		0.0672	0.46552	0.01267	Uiso	1	-0.320365
N2	N	0.9276	0.05994		0.55894	0.01267	Uiso	1	-0.315274
N3	N	0.7583	0.0245	0.2439	0.01267	Uiso	1	-0.269697	
N4	N	0.36327		0.37752	0.51151	0.01267	Uiso	1	-0.163758
N5	N	0.77564		0.9328	0.53448	0.01267	Uiso	1	-0.32066
N6	N	0.0724	0.94006		0.44106	0.01267	Uiso	1	-0.315453
N7	N	0.2417	0.9755	0.7561	0.01267	Uiso	1	-0.26932	
N8	N	0.63673		0.62248	0.48849	0.01267	Uiso	1	-0.163639
Mn2	Mn	0.5	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1	0.501155	
H25	H	0.1037	0.5794	0.6438	0.01267	Uiso	1	0.133465	
H26	H	0.0776	0.6417	0.506	0.01267	Uiso	1	0.130063	
H27	H	0.6567	0.3532	0.7635	0.01267	Uiso	1	0.130203	
H28	H	0.4472	0.4031	0.7999	0.01267	Uiso	1	0.128944	
H29	H	0.0285	0.4193	0.5896	0.01267	Uiso	1	0.122305	

H30	H	0.1633	0.3407	0.6631	0.01267	Uiso	1	0.080367	
H31	H	0.8137	0.1619	0.787	0.01267	Uiso	1	0.085713	
H32	H	0.6604	0.235	0.7197	0.01267	Uiso	1	0.130165	
H33	H	0.4137	0.5764	0.7359	0.01267	Uiso	1	0.13641	
H34	H	0.309	0.5745	0.8516	0.01267	Uiso	1	0.095519	
H35	H	0.962	0.4038	0.9026	0.01267	Uiso	1	0.091805	
H36	H	0.0554	0.4006	0.7884	0.01267	Uiso	1	0.139121	
H37	H	0.8963	0.4206	0.3562	0.01267	Uiso	1	0.133306	
H38	H	0.9224	0.3583	0.494	0.01267	Uiso	1	0.13015	
H39	H	0.3433	0.6468	0.2365	0.01267	Uiso	1	0.130124	
H40	H	0.5528	0.5969	0.2001	0.01267	Uiso	1	0.128704	
H41	H	0.9715	0.5807	0.4104	0.01267	Uiso	1	0.122472	
H42	H	0.8367	0.6593	0.3369	0.01267	Uiso	1	0.080515	
H43	H	0.1863	0.8381	0.213	0.01267	Uiso	1	0.0856	
H44	H	0.3396	0.765	0.2803	0.01267	Uiso	1	0.13008	
H45	H	0.5863	0.4236	0.2641	0.01267	Uiso	1	0.136617	
H46	H	0.691	0.4255	0.1484	0.01267	Uiso	1	0.095679	
H47	H	0.038	0.5962	0.0974	0.01267	Uiso	1	0.091658	
H48	H	0.9446	0.5994	0.2116	0.01267	Uiso	1	0.139058	
C41	C	0.73813		0.47168	0.39349	0.01267	Uiso	1	0.162758
C42	C	0.1544	0.5742	0.602	0.01267	Uiso	1	-0.207053	
C43	C	0.14	0.6087	0.5261	0.01267	Uiso	1	-0.202588	
C44	C	0.24001		0.58447	0.48204	0.01267	Uiso	1	0.168412
C45	C	0.26849		0.61151	0.39874	0.01267	Uiso	1	-0.110783
C46	C	0.38103		0.5978	0.35281	0.01267	Uiso	1	0.167369
C47	C	0.6003	0.3807	0.7301	0.01267	Uiso	1	-0.203449	
C48	C	0.4847	0.4083	0.7502	0.01267	Uiso	1	-0.200451	
C49	C	0.43102		0.44704	0.67998	0.01267	Uiso	1	0.162973
C50	C	0.68426		0.51309	0.32621	0.01267	Uiso	1	-0.111867
C51	C	0.82682		0.33759	0.64583	0.01267	Uiso	1	0.134085
C52	C	0.98	0.3669	0.6302	0.01267	Uiso	1	-0.208398	
C53	C	0.0606	0.3189	0.6743	0.01267	Uiso	1	0.074832	
C54	C	0.8571	0.2151	0.7466	0.01267	Uiso	1	0.079477	
C55	C	0.7631	0.2585	0.7063	0.01267	Uiso	1	-0.215783	
C56	C	0.75226		0.51194	0.25186	0.01267	Uiso	1	0.154374
C57	C	0.6787	0.4597	0.231	0.01267	Uiso	1	-0.20511	
C58	C	0.7426	0.4611	0.161	0.01267	Uiso	1	0.075109	
C59	C	0.0546	0.439	0.8685	0.01267	Uiso	1	0.087274	
C60	C	0.1101	0.4365	0.7997	0.01267	Uiso	1	-0.185922	
C61	C	0.26187		0.52832	0.60651	0.01267	Uiso	1	0.162854
C62	C	0.8456	0.4258	0.398	0.01267	Uiso	1	-0.207097	
C63	C	0.86	0.3913	0.4739	0.01267	Uiso	1	-0.202607	
C64	C	0.75999		0.41553	0.51796	0.01267	Uiso	1	0.168433
C65	C	0.73151		0.38849	0.60126	0.01267	Uiso	1	-0.110644
C66	C	0.61897		0.4022	0.64719	0.01267	Uiso	1	0.167434
C67	C	0.3997	0.6193	0.2699	0.01267	Uiso	1	-0.203434	
C68	C	0.5153	0.5917	0.2498	0.01267	Uiso	1	-0.200407	
C69	C	0.56898		0.55296	0.32002	0.01267	Uiso	1	0.162864
C70	C	0.31574		0.48691	0.67379	0.01267	Uiso	1	-0.112006
C71	C	0.17318		0.66241	0.35417	0.01267	Uiso	1	0.134411
C72	C	0.02	0.6331	0.3698	0.01267	Uiso	1	-0.208481	
C73	C	0.9394	0.6811	0.3257	0.01267	Uiso	1	0.07489	

C74	C	0.1429	0.7849	0.2534	0.01267	Uiso	1	0.079269	
C75	C	0.2369	0.7415	0.2937	0.01267	Uiso	1	-0.215996	
C76	C	0.24774		0.48806	0.74814	0.01267	Uiso	1	0.154415
C77	C	0.3213	0.5403	0.769	0.01267	Uiso	1	-0.205144	
C78	C	0.2574	0.5389	0.839	0.01267	Uiso	1	0.075023	
C79	C	0.9454	0.561	0.1315	0.01267	Uiso	1	0.087298	
C80	C	0.8899	0.5635	0.2003	0.01267	Uiso	1	-0.185905	
N9	N	0.68988		0.46552	0.46728	0.01267	Uiso	1	-0.316787
N10	N	0.48654		0.55894	0.38112	0.01267	Uiso	1	-0.31521
N11	N	0.0022	0.2439	0.7316	0.01267	Uiso	1	-0.271912	
N12	N	0.87478		0.51151	0.11097	0.01267	Uiso	1	-0.16565
N13	N	0.31012		0.53448	0.53272	0.01267	Uiso	1	-0.316904
N14	N	0.51346		0.44106	0.61888	0.01267	Uiso	1	-0.315321
N15	N	0.9978	0.7561	0.2684	0.01267	Uiso	1	-0.271936	
N16	N	0.12522		0.48849	0.88903	0.01267	Uiso	1	-0.165192
Mn3	Mn	0	0.5	0	0.01267	Uiso	1	0.503496	
H49	H	0.7475	0.6438	0.7768	0.01267	Uiso	1	0.132666	
H50	H	0.5836	0.506	0.8523	0.01267	Uiso	1	0.127436	
H51	H	0.4202	0.7635	0.8833	0.01267	Uiso	1	0.131732	
H52	H	0.2471	0.7999	0.797	0.01267	Uiso	1	0.129487	
H53	H	0.6181	0.5896	0.9911	0.01267	Uiso	1	0.122854	
H54	H	0.8264	0.6631	0.9962	0.01267	Uiso	1	0.078479	
H55	H	0.6007	0.787	0.0511	0.01267	Uiso	1	0.086195	
H56	H	0.3801	0.7197	0.0453	0.01267	Uiso	1	0.129678	
H57	H	0.1496	0.7359	0.6877	0.01267	Uiso	1	0.134793	
H58	H	0.1606	0.8516	0.5739	0.01267	Uiso	1	0.094569	
H59	H	0.8646	0.9026	0.6936	0.01267	Uiso	1	0.09201	
H60	H	0.8438	0.7884	0.811	0.01267	Uiso	1	0.140173	
H61	H	0.2525	0.3562	0.2232	0.01267	Uiso	1	0.13281	
H62	H	0.4164	0.494	0.1477	0.01267	Uiso	1	0.127483	
H63	H	0.5798	0.2365	0.1167	0.01267	Uiso	1	0.131828	
H64	H	0.7529	0.2001	0.203	0.01267	Uiso	1	0.12957	
H65	H	0.3819	0.4104	0.0089	0.01267	Uiso	1	0.122824	
H66	H	0.1736	0.3369	0.0038	0.01267	Uiso	1	0.078514	
H67	H	0.3993	0.213	0.9489	0.01267	Uiso	1	0.086211	
H68	H	0.6199	0.2803	0.9547	0.01267	Uiso	1	0.129672	
H69	H	0.8504	0.2641	0.3123	0.01267	Uiso	1	0.134831	
H70	H	0.8394	0.1484	0.4261	0.01267	Uiso	1	0.094815	
H71	H	0.1354	0.0974	0.3064	0.01267	Uiso	1	0.092099	
H72	H	0.1562	0.2116	0.189	0.01267	Uiso	1	0.139975	
C81	C	0.13162		0.39349	0.13483	0.01267	Uiso	1	0.16528
C82	C	0.7564	0.602	0.8238	0.01267	Uiso	1	-0.207906	
C83	C	0.6661	0.5261	0.8652	0.01267	Uiso	1	-0.199934	
C84	C	0.72205		0.48204	0.93349	0.01267	Uiso	1	0.168519
C85	C	0.66723		0.39874	0.98975	0.01267	Uiso	1	-0.111868
C86	C	0.73384		0.35281	0.04939	0.01267	Uiso	1	0.167435
C87	C	0.3304	0.7301	0.8892	0.01267	Uiso	1	-0.205541	
C88	C	0.2349	0.7502	0.8415	0.01267	Uiso	1	-0.20173	
C89	C	0.111	0.67998		0.87298	0.01267	Uiso	1	0.16282
C90	C	0.01047		0.32621	0.1607	0.01267	Uiso	1	-0.111029
C91	C	0.47265		0.64583	0.01658	0.01267	Uiso	1	0.135133
C92	C	0.6102	0.6302	0.0029	0.01267	Uiso	1	-0.208695	

C93	C	0.7349	0.6743	0.0068	0.01267	Uiso	1	0.076297	
C94	C	0.6037	0.7466	0.0383	0.01267	Uiso	1	0.076294	
C95	C	0.4694	0.7063	0.0352	0.01267	Uiso	1	-0.214232	
C96	C	0.00412	0.25186	0.2362	0.01267	Uiso	1	0.151902	
C97	C	0.9097	0.231	0.3093	0.01267	Uiso	1	-0.203629	
C98	C	0.9036	0.161	0.3779	0.01267	Uiso	1	0.076828	
C99	C	0.9231	0.8685	0.6925	0.01267	Uiso	1	0.087265	
C100	C	0.9098	0.7997	0.7638	0.01267	Uiso	1	-0.186989	
C101	C	0.86838	0.60651	0.86517	0.01267	Uiso	1	0.165227	
C102	C	0.2436	0.398	0.1762	0.01267	Uiso	1	-0.207702	
C103	C	0.3339	0.4739	0.1348	0.01267	Uiso	1	-0.200061	
C104	C	0.27795	0.51796	0.06651	0.01267	Uiso	1	0.168365	
C105	C	0.33277	0.60126	0.01025	0.01267	Uiso	1	-0.111788	
C106	C	0.26616	0.64719	0.95061	0.01267	Uiso	1	0.167403	
C107	C	0.6696	0.2699	0.1108	0.01267	Uiso	1	-0.20551	
C108	C	0.7651	0.2498	0.1585	0.01267	Uiso	1	-0.201555	
C109	C	0.889	0.32002	0.12702	0.01267	Uiso	1	0.162805	
C110	C	0.98953	0.67379	0.8393	0.01267	Uiso	1	-0.110915	
C111	C	0.52735	0.35417	0.98342	0.01267	Uiso	1	0.135272	
C112	C	0.3898	0.3698	0.9971	0.01267	Uiso	1	-0.208625	
C113	C	0.2651	0.3257	0.9932	0.01267	Uiso	1	0.076298	
C114	C	0.3963	0.2534	0.9617	0.01267	Uiso	1	0.076261	
C115	C	0.5306	0.2937	0.9648	0.01267	Uiso	1	-0.214443	
C116	C	0.99588	0.74814	0.7638	0.01267	Uiso	1	0.151677	
C117	C	0.0903	0.769	0.6907	0.01267	Uiso	1	-0.203499	
C118	C	0.0964	0.839	0.6221	0.01267	Uiso	1	0.076793	
C119	C	0.0769	0.1315	0.3075	0.01267	Uiso	1	0.086977	
C120	C	0.0902	0.2003	0.2362	0.01267	Uiso	1	-0.187128	
N17	N	0.15716	0.46728	0.0672	0.01267	Uiso	1	-0.318322	
N18	N	0.86766	0.38112	0.05994	0.01267	Uiso	1	-0.31494	
N19	N	0.7338	0.7316	0.0245	0.01267	Uiso	1	-0.271161	
N20	N	0.98575	0.11097	0.37752	0.01267	Uiso	1	-0.170109	
N21	N	0.84284	0.53272	0.9328	0.01267	Uiso	1	-0.318194	
N22	N	0.13234	0.61888	0.94006	0.01267	Uiso	1	-0.314678	
N23	N	0.2662	0.2684	0.9755	0.01267	Uiso	1	-0.271049	
N24	N	0.01425	0.88903	0.62248	0.01267	Uiso	1	-0.170355	

data_image0 LONWIW_clean

_cell_length_a 13.6132
_cell_length_b 18.0261
_cell_length_c 22.945
_cell_angle_alpha 69.574
_cell_angle_beta 88.899
_cell_angle_gamma 89.147

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Mg1	1	0.91179	0.79426	0.39759	Biso	1	Mg	1.542641
Mg2	1	0.12418	0.86681	0.25039	Biso	1	Mg	1.509325
Mg3	1	0.34246	0.94376	0.10503	Biso	1	Mg	1.551302
Mg4	1	0.60702	0.69053	0.6117	Biso	1	Mg	1.543091
Mg5	1	0.37601	0.63236	0.75093	Biso	1	Mg	1.513156
Mg6	1	0.1478	0.56977	0.89026	Biso	1	Mg	1.563899
O1	1	0.04652	0.83785	0.40443	Biso	1	O	-0.740734
O2	1	0.16576	0.824	0.34109	Biso	1	O	-0.639733
O3	1	0.47113	0.65929	0.59352	Biso	1	O	-0.751705
O4	1	0.34944	0.66705	0.65819	Biso	1	O	-0.64395
O5	1	0.34043	0.78134	0.38177	Biso	1	O	-0.495195
H1	1	0.297	0.794	0.3574	Biso	1	H	0.398129
O6	1	0.17636	0.71824	0.61661	Biso	1	O	-0.52258
H2	1	0.218	0.701	0.6403	Biso	1	H	0.425465
O7	1	0.87627	0.89513	0.32491	Biso	1	O	-0.748537
O8	1	0.00373	0.93261	0.25854	Biso	1	O	-0.650575
O9	1	0.73573	0.29041	0.25039	Biso	1	O	-0.657846
O10	1	0.86149	0.32613	0.18231	Biso	1	O	-0.758181
O11	1	0.02405	0.07798	0.18795	Biso	1	O	-0.478824
H3	1	0.04	0.03	0.2075	Biso	1	H	0.371659
O12	1	0.7129	0.1429	0.32063	Biso	1	O	-0.493737
H4	1	0.709	0.189	0.3048	Biso	1	H	0.397928
O13	1	0.04662	0.26899	0.65676	Biso	1	O	-0.758838
O14	1	0.95731	0.22905	0.74459	Biso	1	O	-0.650346
O15	1	0.28694	0.54039	0.75617	Biso	1	O	-0.646027
O16	1	0.20119	0.49857	0.84501	Biso	1	O	-0.758469
O17	1	0.98612	0.28631	0.83088	Biso	1	O	-0.460532

H5	1	0.96	0.26	0.8084	Biso	1	H	0.367683		
O18	1	0.25608		0.4845	0.66927	Biso	1	O	-0.473845	
H6	1	0.285	0.509	0.6899	Biso	1	H	0.37512		
O19	1	0.2034	0.96385		0.24678	Biso	1	O	-0.651228	
O20	1	0.29271		0.00416		0.15906	Biso	1	O	-0.761835
O21	1	0.44662		0.23482		0.34564	Biso	1	O	-0.753315
O22	1	0.53339		0.27508		0.25702	Biso	1	O	-0.643549
O23	1	0.2346	0.02026		0.33341		Biso	1	O	-0.473066
H7	1	0.202	0.992	0.3139	Biso	1	H	0.373866		
O24	1	0.50393		0.2182	0.17107		Biso	1	O	-0.468435
H8	1	0.529	0.245	0.1928	Biso	1	H	0.379093		
O25	1	0.08769		0.90934		0.15855	Biso	1	O	-0.643682
O26	1	0.20919		0.90326		0.0934	Biso	1	O	-0.740713
O27	1	0.91288		0.9518	0.11718		Biso	1	O	-0.524983
H9	1	0.956	0.94	0.1399	Biso	1	H	0.42906		
O28	1	0.40439		0.59985		0.84375	Biso	1	O	-0.646514
O29	1	0.28449		0.59627		0.91262	Biso	1	O	-0.753101
O30	1	0.58054		0.54862		0.88105	Biso	1	O	-0.537516
H10	1	0.538	0.558	0.8597	Biso	1	H	0.427985		
O31	1	0.62238		0.59361		0.69141	Biso	1	O	-0.751745
O32	1	0.48919		0.55634		0.75274	Biso	1	O	-0.655626
O33	1	0.75748		0.19871		0.7609	Biso	1	O	-0.651092
O34	1	0.6266	0.16116		0.82458		Biso	1	O	-0.74917
O35	1	0.46302		0.40883		0.82098	Biso	1	O	-0.470851
H11	1	0.443	0.457	0.7989	Biso	1	H	0.366688		
O36	1	0.79035		0.34728		0.69968	Biso	1	O	-0.476845
H12	1	0.797	0.298	0.7138	Biso	1	H	0.372932		
C1	1	0.1316	0.81798		0.39432		Biso	1	C	0.664423
C2	1	0.1991	0.78379		0.44765		Biso	1	C	-0.160636
C3	1	0.2978	0.76704		0.43914		Biso	1	C	0.311149
C4	1	0.3553	0.7327	0.49104			Biso	1	C	-0.227561
H13	1	0.4209	0.7211	0.4854	Biso	1	H	0.136023		
C5	1	0.3181	0.71508		0.55132		Biso	1	C	-0.157007
C6	1	0.2194	0.73302		0.55966		Biso	1	C	0.31462
C7	1	0.1617	0.76738		0.50791		Biso	1	C	-0.237722
H14	1	0.0964	0.7798	0.5134	Biso	1	H	0.131326		
C8	1	0.385	0.67774		0.60466		Biso	1	C	0.674747
C9	1	0.928	0.9463	0.28545			Biso	1	C	0.684244
C10	1	0.8981	0.03165		0.26846		Biso	1	C	-0.159985
C11	1	0.9468	0.092	0.22148			Biso	1	C	0.301271
C12	1	0.917	0.1698	0.20819			Biso	1	C	-0.224976
H15	1	0.9499	0.2097	0.1771	Biso	1	H	0.141475		
C13	1	0.8394	0.18995		0.24004		Biso	1	C	-0.163032
C14	1	0.7901	0.1297	0.28733			Biso	1	C	0.298816
C15	1	0.8212	0.0521	0.30092			Biso	1	C	-0.225451
H16	1	0.7897	0.0123	0.3328	Biso	1	H	0.141356		
C16	1	0.8106	0.2759	0.22252			Biso	1	C	0.687051
C17	1	0.0222	0.27236		0.7085		Biso	1	C	0.686461
C18	1	0.0719	0.33058		0.73064		Biso	1	C	-0.158422
C19	1	0.0527	0.3339	0.78995			Biso	1	C	0.29433
C20	1	0.104	0.3879	0.80892			Biso	1	C	-0.227022
H17	1	0.0926	0.3894	0.8486	Biso	1	H	0.13384		

C21	1	0.1719	0.43938	0.76985	Biso	1	C	-0.161743
C22	1	0.1906	0.43605	0.71044	Biso	1	C	0.298703
C23	1	0.1395	0.3832	0.69163	Biso	1	C	-0.230195
H18	1	0.1502	0.3826	0.6517	Biso	1	H	0.135653
C24	1	0.2234	0.49684	0.79253	Biso	1	C	0.679385
C25	1	0.2682	0.0069	0.21092	Biso	1	C	0.688841
C26	1	0.3186	0.06501	0.23302	Biso	1	C	-0.161743
C27	1	0.3006	0.06847	0.29256	Biso	1	C	0.303702
C28	1	0.3516	0.12214	0.31084	Biso	1	C	-0.232417
H19	1	0.3401	0.1241	0.3504	Biso	1	H	0.135219
C29	1	0.4199	0.17356	0.27155	Biso	1	C	-0.161122
C30	1	0.4378	0.1706	0.21221	Biso	1	C	0.294872
C31	1	0.3862	0.1166	0.1938	Biso	1	C	-0.226757
H20	1	0.3973	0.115	0.1541	Biso	1	H	0.131895
C32	1	0.47	0.23198	0.2937	Biso	1	C	0.681087
C33	1	0.1241	0.92177	0.10482	Biso	1	C	0.670361
C34	1	0.0583	0.96159	0.05165	Biso	1	C	-0.161052
C35	1	0.9582	0.9749	0.06001	Biso	1	C	0.311988
C36	1	0.9014	0.01239	0.00875	Biso	1	C	-0.231302
H21	1	0.8348	0.0206	0.0144	Biso	1	H	0.129846
C37	1	0.3705	0.58236	0.89847	Biso	1	C	0.679412
C38	1	0.4392	0.54091	0.9501	Biso	1	C	-0.156988
C39	1	0.538	0.52572	0.93903	Biso	1	C	0.31361
C40	1	0.4031	0.51491	0.01105	Biso	1	C	-0.229228
H22	1	0.3378	0.5251	0.0185	Biso	1	H	0.137096
C41	1	0.5684	0.54255	0.72878	Biso	1	C	0.685797
C42	1	0.5982	0.45715	0.74682	Biso	1	C	-0.157679
C43	1	0.5446	0.3959	0.79027	Biso	1	C	0.296763
C44	1	0.5739	0.31811	0.80258	Biso	1	C	-0.222653
H23	1	0.5382	0.2778	0.8315	Biso	1	H	0.142175
C45	1	0.6549	0.29833	0.77308	Biso	1	C	-0.158911
C46	1	0.7093	0.3596	0.73049	Biso	1	C	0.300498
C47	1	0.6801	0.43736	0.71839	Biso	1	C	-0.229188
H24	1	0.7166	0.4777	0.6902	Biso	1	H	0.137279
C48	1	0.6816	0.21272	0.78768	Biso	1	C	0.681792
Mg7	1	0.08821	0.20574	0.60241	Biso	1	Mg	1.543059
Mg8	1	0.87582	0.13319	0.74961	Biso	1	Mg	1.509235
Mg9	1	0.65754	0.05624	0.89497	Biso	1	Mg	1.551364
Mg10	1	0.39298	0.30947	0.3883	Biso	1	Mg	1.543268
Mg11	1	0.62399	0.36764	0.24907	Biso	1	Mg	1.513221
Mg12	1	0.8522	0.43023	0.10974	Biso	1	Mg	1.563905
O37	1	0.95348	0.16215	0.59557	Biso	1	O	-0.740526
O38	1	0.83424	0.176	0.65891	Biso	1	O	-0.639811
O39	1	0.52887	0.34071	0.40648	Biso	1	O	-0.751963
O40	1	0.65056	0.33295	0.34181	Biso	1	O	-0.64384
O41	1	0.65957	0.21866	0.61823	Biso	1	O	-0.495822
H25	1	0.703	0.206	0.6426	Biso	1	H	0.398545
O42	1	0.82364	0.28176	0.38339	Biso	1	O	-0.522309
H26	1	0.782	0.299	0.3597	Biso	1	H	0.425269
O43	1	0.12373	0.10487	0.67509	Biso	1	O	-0.748304
O44	1	0.99627	0.06739	0.74146	Biso	1	O	-0.650818
O45	1	0.26427	0.70959	0.74961	Biso	1	O	-0.657611

O46	1	0.13851	0.67387	0.81769	Biso	1	O	-0.758607
O47	1	0.97595	0.92202	0.81205	Biso	1	O	-0.479167
H27	1	0.96	0.97	0.7925	Biso	1	H	0.371491
O48	1	0.2871	0.8571	0.67937	Biso	1	O	-0.493677
H28	1	0.291	0.811	0.6952	Biso	1	H	0.398007
O49	1	0.95338	0.73101	0.34324	Biso	1	O	-0.758703
O50	1	0.04269	0.77095	0.25541	Biso	1	O	-0.650149
O51	1	0.71306	0.45961	0.24383	Biso	1	O	-0.64625
O52	1	0.79881	0.50143	0.15499	Biso	1	O	-0.758522
O53	1	0.01388	0.71369	0.16912	Biso	1	O	-0.460573
H29	1	0.04	0.74	0.1916	Biso	1	H	0.367933
O54	1	0.74392	0.5155	0.33073	Biso	1	O	-0.473817
H30	1	0.715	0.491	0.3101	Biso	1	H	0.374887
O55	1	0.7966	0.03615	0.75322	Biso	1	O	-0.650857
O56	1	0.70729	0.99584	0.84094	Biso	1	O	-0.761797
O57	1	0.55338	0.76518	0.65436	Biso	1	O	-0.753405
O58	1	0.46661	0.72492	0.74298	Biso	1	O	-0.643732
O59	1	0.7654	0.97974	0.66659	Biso	1	O	-0.473132
H31	1	0.798	0.008	0.6861	Biso	1	H	0.374142
O60	1	0.49607	0.7818	0.82893	Biso	1	O	-0.468512
H32	1	0.471	0.755	0.8072	Biso	1	H	0.37886
O61	1	0.91231	0.09066	0.84145	Biso	1	O	-0.643592
O62	1	0.79081	0.09674	0.9066	Biso	1	O	-0.74106
O63	1	0.08712	0.0482	0.88282	Biso	1	O	-0.524558
H33	1	0.044	0.06	0.8601	Biso	1	H	0.428868
O64	1	0.59561	0.40015	0.15625	Biso	1	O	-0.646577
O65	1	0.71551	0.40373	0.08738	Biso	1	O	-0.752918
O66	1	0.41946	0.45138	0.11895	Biso	1	O	-0.538181
H34	1	0.462	0.442	0.1403	Biso	1	H	0.428449
O67	1	0.37762	0.40639	0.30859	Biso	1	O	-0.752107
O68	1	0.51081	0.44366	0.24726	Biso	1	O	-0.655397
O69	1	0.24252	0.80129	0.2391	Biso	1	O	-0.651536
O70	1	0.3734	0.83884	0.17542	Biso	1	O	-0.748864
O71	1	0.53698	0.59117	0.17902	Biso	1	O	-0.470937
H35	1	0.557	0.543	0.2011	Biso	1	H	0.366802
O72	1	0.20965	0.65272	0.30032	Biso	1	O	-0.477221
H36	1	0.203	0.702	0.2862	Biso	1	H	0.372854
C49	1	0.8684	0.18202	0.60568	Biso	1	C	0.664274
C50	1	0.8009	0.21621	0.55235	Biso	1	C	-0.160516
C51	1	0.7022	0.23296	0.56086	Biso	1	C	0.311293
C52	1	0.6447	0.2673	0.50896	Biso	1	C	-0.227632
H37	1	0.5791	0.2789	0.5146	Biso	1	H	0.135748
C53	1	0.6819	0.28492	0.44868	Biso	1	C	-0.157184
C54	1	0.7806	0.26698	0.44034	Biso	1	C	0.314666
C55	1	0.8383	0.23262	0.49209	Biso	1	C	-0.237827
H38	1	0.9036	0.2202	0.4866	Biso	1	H	0.131806
C56	1	0.615	0.32226	0.39534	Biso	1	C	0.67494
C57	1	0.072	0.0537	0.71455	Biso	1	C	0.684302
C58	1	0.1019	0.96835	0.73154	Biso	1	C	-0.160142
C59	1	0.0532	0.908	0.77852	Biso	1	C	0.301197
C60	1	0.083	0.8302	0.79181	Biso	1	C	-0.225149
H39	1	0.0501	0.7903	0.8229	Biso	1	H	0.141272

C61	1	0.1606	0.81005	0.75996	Biso	1	C	-0.162875
C62	1	0.2099	0.8703	0.71267	Biso	1	C	0.298348
C63	1	0.1788	0.9479	0.69908	Biso	1	C	-0.225454
H40	1	0.2103	0.9877	0.6672	Biso	1	H	0.141468
C64	1	0.1894	0.7241	0.77748	Biso	1	C	0.687006
C65	1	0.9778	0.72764	0.2915	Biso	1	C	0.6863
C66	1	0.9281	0.66942	0.26936	Biso	1	C	-0.158466
C67	1	0.9473	0.6661	0.21005	Biso	1	C	0.294353
C68	1	0.896	0.6121	0.19108	Biso	1	C	-0.227079
H41	1	0.9074	0.6106	0.1514	Biso	1	H	0.133864
C69	1	0.8281	0.56062	0.23015	Biso	1	C	-0.16186
C70	1	0.8094	0.56395	0.28956	Biso	1	C	0.298584
C71	1	0.8605	0.6168	0.30837	Biso	1	C	-0.230101
H42	1	0.8498	0.6174	0.3483	Biso	1	H	0.135676
C72	1	0.7766	0.50316	0.20747	Biso	1	C	0.679581
C73	1	0.7318	0.9931	0.78908	Biso	1	C	0.688596
C74	1	0.6814	0.93499	0.76698	Biso	1	C	-0.161675
C75	1	0.6994	0.93153	0.70744	Biso	1	C	0.3038
C76	1	0.6484	0.87786	0.68916	Biso	1	C	-0.232384
H43	1	0.6599	0.8759	0.6496	Biso	1	H	0.135185
C77	1	0.5801	0.82644	0.72845	Biso	1	C	-0.161326
C78	1	0.5622	0.8294	0.78779	Biso	1	C	0.295054
C79	1	0.6138	0.8834	0.8062	Biso	1	C	-0.22669
H44	1	0.6027	0.885	0.8459	Biso	1	H	0.131826
C80	1	0.53	0.76802	0.7063	Biso	1	C	0.681375
C81	1	0.8759	0.07823	0.89518	Biso	1	C	0.670549
C82	1	0.9417	0.03841	0.94835	Biso	1	C	-0.161054
C83	1	0.0418	0.0251	0.93999	Biso	1	C	0.311992
C84	1	0.0986	0.98761	0.99125	Biso	1	C	-0.23136
H45	1	0.1652	0.9794	0.9856	Biso	1	H	0.13014
C85	1	0.6295	0.41764	0.10153	Biso	1	C	0.679242
C86	1	0.5608	0.45909	0.0499	Biso	1	C	-0.157069
C87	1	0.462	0.47428	0.06097	Biso	1	C	0.313898
C88	1	0.5969	0.48509	0.98895	Biso	1	C	-0.229005
H46	1	0.6622	0.4749	0.9815	Biso	1	H	0.137301
C89	1	0.4316	0.45745	0.27122	Biso	1	C	0.685799
C90	1	0.4018	0.54285	0.25318	Biso	1	C	-0.157743
C91	1	0.4554	0.6041	0.20973	Biso	1	C	0.296619
C92	1	0.4261	0.68189	0.19742	Biso	1	C	-0.222436
H47	1	0.4618	0.7222	0.1685	Biso	1	H	0.142218
C93	1	0.3451	0.70167	0.22692	Biso	1	C	-0.15908
C94	1	0.2907	0.6404	0.26951	Biso	1	C	0.300453
C95	1	0.3199	0.56264	0.28161	Biso	1	C	-0.229337
H48	1	0.2834	0.5223	0.3098	Biso	1	H	0.137079
C96	1	0.3184	0.78728	0.21232	Biso	1	C	0.681917

```

data_LUSHOX_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1978
_cell_length_b            13.5020
_cell_length_c            17.7070
_cell_angle_alpha         90.0000
_cell_angle_beta          90.0000
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn  0.92547  0.15327  0.4834 0.01267  Uiso  1  1.042392
Mn2  Mn  0.08119  0.38919  0.46763  0.01267  Uiso  1  0.97009
Mn3  Mn  0.42547  0.84673  0.0166 0.01267  Uiso  1  1.04081
Mn4  Mn  0.58119  0.61081  0.03237  0.01267  Uiso  1  0.970709
Mn5  Mn  0.07453  0.84673  0.5166 0.01267  Uiso  1  1.042395
Mn6  Mn  0.91881  0.61081  0.53237  0.01267  Uiso  1  0.969969
Mn7  Mn  0.57453  0.15327  0.9834 0.01267  Uiso  1  1.039901
Mn8  Mn  0.41881  0.38919  0.96763  0.01267  Uiso  1  0.967325
H1   H   0.8078 0.4879 0.2855 0.01267  Uiso  1  0.125814
H2   H   0.6986 0.5063 0.1731 0.01267  Uiso  1  0.11967
H3   H   0.6247 0.2124 0.1678 0.01267  Uiso  1  0.118893
H4   H   0.7238 0.1977 0.2864 0.01267  Uiso  1  0.127494
H5   H   0.7958 0.6961 0.2405 0.01267  Uiso  1  0.121736
H6   H   0.8824 0.7701 0.3482 0.01267  Uiso  1  0.114822
H7   H   0.771  0.0364 0.2697 0.01267  Uiso  1  0.120397
H8   H   0.6837 0.9616 0.1631 0.01267  Uiso  1  0.120514
H9   H   0.3078 0.5121 0.2145 0.01267  Uiso  1  0.12561
H10  H   0.1986 0.4937 0.3269 0.01267  Uiso  1  0.11964
H11  H   0.1247 0.7876 0.3322 0.01267  Uiso  1  0.118935
H12  H   0.2238 0.8023 0.2136 0.01267  Uiso  1  0.127486
H13  H   0.2958 0.3039 0.2595 0.01267  Uiso  1  0.121978
H14  H   0.3824 0.2299 0.1518 0.01267  Uiso  1  0.114881
H15  H   0.271  0.9636 0.2303 0.01267  Uiso  1  0.12028
H16  H   0.1837 0.0384 0.3369 0.01267  Uiso  1  0.120521
H17  H   0.1922 0.5121 0.7145 0.01267  Uiso  1  0.125741
H18  H   0.3014 0.4937 0.8269 0.01267  Uiso  1  0.119883
H19  H   0.3753 0.7876 0.8322 0.01267  Uiso  1  0.119083

```

H20	H	0.2762	0.8023	0.7136	0.01267	Uiso	1	0.127646
H21	H	0.2042	0.3039	0.7595	0.01267	Uiso	1	0.121823
H22	H	0.1176	0.2299	0.6518	0.01267	Uiso	1	0.114882
H23	H	0.229	0.9636	0.7303	0.01267	Uiso	1	0.120109
H24	H	0.3163	0.0384	0.8369	0.01267	Uiso	1	0.120448
H25	H	0.6922	0.4879	0.7855	0.01267	Uiso	1	0.125614
H26	H	0.8014	0.5063	0.6731	0.01267	Uiso	1	0.119607
H27	H	0.8753	0.2124	0.6678	0.01267	Uiso	1	0.118741
H28	H	0.7762	0.1977	0.7864	0.01267	Uiso	1	0.12735
H29	H	0.7042	0.6961	0.7405	0.01267	Uiso	1	0.121977
H30	H	0.6176	0.7701	0.8482	0.01267	Uiso	1	0.114726
H31	H	0.729	0.0364	0.7697	0.01267	Uiso	1	0.120489
H32	H	0.8163	0.9616	0.6631	0.01267	Uiso	1	0.120614
C1	C	0.8511	0.3283	0.3693	0.01267	Uiso	1	0.598473
C2	C	0.7779	0.3398	0.2959	0.01267	Uiso	1	-0.002164
C3	C	0.77	0.4332	0.2621	0.01267	Uiso	1	-0.112652
C4	C	0.7066	0.4438	0.1947	0.01267	Uiso	1	-0.097049
C5	C	0.6532	0.3604	0.1576	0.01267	Uiso	1	-0.044761
C6	C	0.6601	0.2677	0.1915	0.01267	Uiso	1	-0.101792
C7	C	0.7215	0.2588	0.2623	0.01267	Uiso	1	-0.106444
C8	C	0.6764	0.7707	0.1219	0.01267	Uiso	1	0.594764
C9	C	0.7319	0.8205	0.1908	0.01267	Uiso	1	-0.020732
C10	C	0.7908	0.7645	0.2462	0.01267	Uiso	1	-0.113199
C11	C	0.8435	0.809	0.3111	0.01267	Uiso	1	-0.118499
C12	C	0.8373	0.9124	0.3198	0.01267	Uiso	1	-0.020555
C13	C	0.7767	0.9681	0.2642	0.01267	Uiso	1	-0.114015
C14	C	0.7241	0.9231	0.2	0.01267	Uiso	1	-0.105993
C15	C	0.8974	0.961	0.3893	0.01267	Uiso	1	0.615235
C16	C	0.5886	0.3724	0.0829	0.01267	Uiso	1	0.588316
C17	C	0.3511	0.6717	0.1307	0.01267	Uiso	1	0.59818
C18	C	0.2779	0.6602	0.2041	0.01267	Uiso	1	-0.002357
C19	C	0.27	0.5668	0.2379	0.01267	Uiso	1	-0.11277
C20	C	0.2066	0.5562	0.3053	0.01267	Uiso	1	-0.097344
C21	C	0.1532	0.6396	0.3424	0.01267	Uiso	1	-0.045018
C22	C	0.1601	0.7323	0.3085	0.01267	Uiso	1	-0.102181
C23	C	0.2215	0.7412	0.2377	0.01267	Uiso	1	-0.106551
C24	C	0.1764	0.2293	0.3781	0.01267	Uiso	1	0.593275
C25	C	0.2319	0.1795	0.3092	0.01267	Uiso	1	-0.020095
C26	C	0.2908	0.2355	0.2538	0.01267	Uiso	1	-0.112877
C27	C	0.3435	0.191	0.1889	0.01267	Uiso	1	-0.118128
C28	C	0.3373	0.0876	0.1802	0.01267	Uiso	1	-0.02161
C29	C	0.2767	0.0319	0.2358	0.01267	Uiso	1	-0.113059
C30	C	0.2241	0.0769	0.3	0.01267	Uiso	1	-0.106292
C31	C	0.3974	0.039	0.1107	0.01267	Uiso	1	0.617556
C32	C	0.0886	0.6276	0.4171	0.01267	Uiso	1	0.587494
C33	C	0.1489	0.6717	0.6307	0.01267	Uiso	1	0.59856
C34	C	0.2221	0.6602	0.7041	0.01267	Uiso	1	-0.002456
C35	C	0.23	0.5668	0.7379	0.01267	Uiso	1	-0.112515
C36	C	0.2934	0.5562	0.8053	0.01267	Uiso	1	-0.097078
C37	C	0.3468	0.6396	0.8424	0.01267	Uiso	1	-0.044456
C38	C	0.3399	0.7323	0.8085	0.01267	Uiso	1	-0.101947
C39	C	0.2785	0.7412	0.7377	0.01267	Uiso	1	-0.106371

C40	C	0.3236	0.2293	0.8781	0.01267	Uiso	1	0.59328
C41	C	0.2681	0.1795	0.8092	0.01267	Uiso	1	-0.020259
C42	C	0.2092	0.2355	0.7538	0.01267	Uiso	1	-0.113223
C43	C	0.1565	0.191	0.6889	0.01267	Uiso	1	-0.118792
C44	C	0.1627	0.0876	0.6802	0.01267	Uiso	1	-0.020969
C45	C	0.2233	0.0319	0.7358	0.01267	Uiso	1	-0.113986
C46	C	0.2759	0.0769	0.8	0.01267	Uiso	1	-0.106716
C47	C	0.1026	0.039	0.6107	0.01267	Uiso	1	0.615048
C48	C	0.4114	0.6276	0.9171	0.01267	Uiso	1	0.586711
C49	C	0.6489	0.3283	0.8693	0.01267	Uiso	1	0.597121
C50	C	0.7221	0.3398	0.7959	0.01267	Uiso	1	-0.001783
C51	C	0.73	0.4332	0.7621	0.01267	Uiso	1	-0.113139
C52	C	0.7934	0.4438	0.6947	0.01267	Uiso	1	-0.097245
C53	C	0.8468	0.3604	0.6576	0.01267	Uiso	1	-0.045338
C54	C	0.8399	0.2677	0.6915	0.01267	Uiso	1	-0.102022
C55	C	0.7785	0.2588	0.7623	0.01267	Uiso	1	-0.10703
C56	C	0.8236	0.7707	0.6219	0.01267	Uiso	1	0.593313
C57	C	0.7681	0.8205	0.6908	0.01267	Uiso	1	-0.019938
C58	C	0.7092	0.7645	0.7462	0.01267	Uiso	1	-0.112903
C59	C	0.6565	0.809	0.8111	0.01267	Uiso	1	-0.117835
C60	C	0.6627	0.9124	0.8198	0.01267	Uiso	1	-0.021954
C61	C	0.7233	0.9681	0.7642	0.01267	Uiso	1	-0.112921
C62	C	0.7759	0.9231	0.7	0.01267	Uiso	1	-0.106067
C63	C	0.6026	0.961	0.8893	0.01267	Uiso	1	0.617715
C64	C	0.9114	0.3724	0.5829	0.01267	Uiso	1	0.587486
O1	O	0.8208	0.2565	0.4109	0.01267	Uiso	1	-0.556824
O2	O	0.9386	0.3916	0.3823	0.01267	Uiso	1	-0.539379
O3	O	0.603	0.8195	0.0781	0.01267	Uiso	1	-0.585444
O4	O	0.7073	0.6812	0.1106	0.01267	Uiso	1	-0.530736
O5	O	0.5235	0.3005	0.0537	0.01267	Uiso	1	-0.563788
O6	O	0.8528	0.0446	0.4064	0.01267	Uiso	1	-0.537095
O7	O	0.9838	0.9144	0.4239	0.01267	Uiso	1	-0.574792
O8	O	0.5955	0.4533	0.0492	0.01267	Uiso	1	-0.531362
O9	O	0.3208	0.7435	0.0891	0.01267	Uiso	1	-0.556531
O10	O	0.4386	0.6084	0.1177	0.01267	Uiso	1	-0.541877
O11	O	0.103	0.1805	0.4219	0.01267	Uiso	1	-0.581541
O12	O	0.2073	0.3188	0.3894	0.01267	Uiso	1	-0.531587
O13	O	0.0235	0.6995	0.4463	0.01267	Uiso	1	-0.564232
O14	O	0.3528	0.9554	0.0936	0.01267	Uiso	1	-0.53669
O15	O	0.4838	0.0856	0.0761	0.01267	Uiso	1	-0.574088
O16	O	0.0955	0.5467	0.4508	0.01267	Uiso	1	-0.532233
O17	O	0.1792	0.7435	0.5891	0.01267	Uiso	1	-0.556812
O18	O	0.0614	0.6084	0.6177	0.01267	Uiso	1	-0.539484
O19	O	0.397	0.1805	0.9219	0.01267	Uiso	1	-0.584368
O20	O	0.2927	0.3188	0.8894	0.01267	Uiso	1	-0.531313
O21	O	0.4765	0.6995	0.9463	0.01267	Uiso	1	-0.563621
O22	O	0.1472	0.9554	0.5936	0.01267	Uiso	1	-0.53713
O23	O	0.0162	0.0856	0.5761	0.01267	Uiso	1	-0.57483
O24	O	0.4045	0.5467	0.9508	0.01267	Uiso	1	-0.529498
O25	O	0.6792	0.2565	0.9109	0.01267	Uiso	1	-0.556244
O26	O	0.5614	0.3916	0.8823	0.01267	Uiso	1	-0.540566
O27	O	0.897	0.8195	0.5781	0.01267	Uiso	1	-0.581454

O28	O	0.7927	0.6812	0.6106	0.01267	Uiso	1	-0.531644
O29	O	0.9765	0.3005	0.5537	0.01267	Uiso	1	-0.564318
O30	O	0.6472	0.0446	0.9064	0.01267	Uiso	1	-0.535433
O31	O	0.5162	0.9144	0.9239	0.01267	Uiso	1	-0.573157
O32	O	0.9045	0.4533	0.5492	0.01267	Uiso	1	-0.532371

```

data_LUSHOX01_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1620
_cell_length_b            13.4140
_cell_length_c            17.6530
_cell_angle_alpha         90.2100
_cell_angle_beta          90.0000
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn    0.08158    0.38887    0.46798    0.01267    Uiso  1    0.967
Mn2  Mn    0.92445    0.1535 0.48457    0.01267    Uiso  1    1.041
Mn3  Mn    0.58158    0.61113    0.03202    0.01267    Uiso  1    0.965
Mn4  Mn    0.42445    0.8465 0.01543    0.01267    Uiso  1    1.039
Mn5  Mn    0.91842    0.61113    0.53202    0.01267    Uiso  1    0.967
Mn6  Mn    0.07555    0.8465 0.51543    0.01267    Uiso  1    1.042
Mn7  Mn    0.41842    0.38887    0.96798    0.01267    Uiso  1    0.965
Mn8  Mn    0.57555    0.1535 0.98457    0.01267    Uiso  1    1.039
H1   H     0.8778 0.2103 0.6682 0.01267    Uiso  1    0.118
H2   H     0.8024 0.5084 0.6707 0.01267    Uiso  1    0.121
H3   H     0.7798 0.196  0.7881 0.01267    Uiso  1    0.126
H4   H     0.6901 0.491  0.7858 0.01267    Uiso  1    0.124
H5   H     0.2961 0.3063 0.2589 0.01267    Uiso  1    0.122
H6   H     0.1812 0.0361 0.3384 0.01267    Uiso  1    0.121
H7   H     0.3828 0.2305 0.1507 0.01267    Uiso  1    0.115
H8   H     0.2718 0.9603 0.2308 0.01267    Uiso  1    0.129
H9   H     0.3778 0.7897 0.8318 0.01267    Uiso  1    0.117
H10  H     0.3024 0.4916 0.8293 0.01267    Uiso  1    0.121
H11  H     0.2798 0.804  0.7119 0.01267    Uiso  1    0.126
H12  H     0.1901 0.509  0.7142 0.01267    Uiso  1    0.124
H13  H     0.7961 0.6937 0.2411 0.01267    Uiso  1    0.122
H14  H     0.6812 0.9639 0.1616 0.01267    Uiso  1    0.121
H15  H     0.8828 0.7695 0.3493 0.01267    Uiso  1    0.115
H16  H     0.7718 0.0397 0.2692 0.01267    Uiso  1    0.119
H17  H     0.1222 0.7897 0.3318 0.01267    Uiso  1    0.118
H18  H     0.1976 0.4916 0.3293 0.01267    Uiso  1    0.121

```

H19	H	0.2202	0.804	0.2119	0.01267	Uiso	1	0.126	
H20	H	0.3099	0.509	0.2142	0.01267	Uiso	1	0.124	
H21	H	0.7039	0.6937	0.7411	0.01267	Uiso	1	0.122	
H22	H	0.8188	0.9639	0.6616	0.01267	Uiso	1	0.121	
H23	H	0.6172	0.7695	0.8493	0.01267	Uiso	1	0.115	
H24	H	0.7282	0.0397	0.7692	0.01267	Uiso	1	0.129	
H25	H	0.6222	0.2103	0.1682	0.01267	Uiso	1	0.117	
H26	H	0.6976	0.5084	0.1707	0.01267	Uiso	1	0.121	
H27	H	0.7202	0.196	0.2881	0.01267	Uiso	1	0.126	
H28	H	0.8099	0.491	0.2858	0.01267	Uiso	1	0.124	
H29	H	0.2039	0.3063	0.7589	0.01267	Uiso	1	0.122	
H30	H	0.3188	0.0361	0.8384	0.01267	Uiso	1	0.121	
H31	H	0.1172	0.2305	0.6507	0.01267	Uiso	1	0.115	
H32	H	0.2282	0.9603	0.7308	0.01267	Uiso	1	0.128	
C1	C	0.91136		0.37159	0.58272	0.01267	Uiso	1	0.588
C2	C	0.84747		0.36057	0.65796	0.01267	Uiso	1	-0.046
C3	C	0.84139		0.2672	0.69253	0.01267	Uiso	1	-0.103
C4	C	0.79435		0.44465	0.69355	0.01267	Uiso	1	-0.096
C5	C	0.78125		0.2586	0.76307	0.01267	Uiso	1	-0.106
C6	C	0.72974		0.43463	0.76235	0.01267	Uiso	1	-0.110
C7	C	0.72337		0.34132	0.79695	0.01267	Uiso	1	-0.006
C8	C	0.64895		0.32949	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.598
C9	C	0.17617		0.22899	0.3787	0.01267	Uiso	1	0.593
C10	C	0.23126		0.1789	0.30961	0.01267	Uiso	1	-0.025
C11	C	0.29104		0.2359	0.25317	0.01267	Uiso	1	-0.109
C12	C	0.22301		0.07548	0.30084	0.01267	Uiso	1	-0.104
C13	C	0.34307		0.19092	0.18894	0.01267	Uiso	1	-0.114
C14	C	0.27652		0.03066	0.23658	0.01267	Uiso	1	-0.118
C15	C	0.33702		0.08761	0.18049	0.01267	Uiso	1	-0.025
C16	C	0.39582		0.03844	0.11119	0.01267	Uiso	1	0.614
C17	C	0.41136		0.62841	0.91728	0.01267	Uiso	1	0.587
C18	C	0.34747		0.63943	0.84204	0.01267	Uiso	1	-0.046
C19	C	0.34139		0.7328	0.80747	0.01267	Uiso	1	-0.103
C20	C	0.29435		0.55535	0.80645	0.01267	Uiso	1	-0.096
C21	C	0.28125		0.7414	0.73693	0.01267	Uiso	1	-0.106
C22	C	0.22974		0.56537	0.73765	0.01267	Uiso	1	-0.110
C23	C	0.22337		0.65868	0.70305	0.01267	Uiso	1	-0.005
C24	C	0.14895		0.67051	0.6298	0.01267	Uiso	1	0.600
C25	C	0.67617		0.77101	0.1213	0.01267	Uiso	1	0.593
C26	C	0.73126		0.8211	0.19039	0.01267	Uiso	1	-0.025
C27	C	0.79104		0.7641	0.24683	0.01267	Uiso	1	-0.109
C28	C	0.72301		0.92452	0.19916	0.01267	Uiso	1	-0.104
C29	C	0.84307		0.80908	0.31106	0.01267	Uiso	1	-0.115
C30	C	0.77652		0.96934	0.26342	0.01267	Uiso	1	-0.112
C31	C	0.83702		0.91239	0.31951	0.01267	Uiso	1	-0.025
C32	C	0.89582		0.96156	0.38881	0.01267	Uiso	1	0.614
C33	C	0.08864		0.62841	0.41728	0.01267	Uiso	1	0.588
C34	C	0.15253		0.63943	0.34204	0.01267	Uiso	1	-0.046
C35	C	0.15861		0.7328	0.30747	0.01267	Uiso	1	-0.103
C36	C	0.20565		0.55535	0.30645	0.01267	Uiso	1	-0.096
C37	C	0.21875		0.7414	0.23693	0.01267	Uiso	1	-0.106
C38	C	0.27026		0.56537	0.23765	0.01267	Uiso	1	-0.111

C39	C	0.27663	0.65868	0.20305	0.01267	Uiso	1	-0.005
C40	C	0.35105	0.67051	0.1298	0.01267	Uiso	1	0.598
C41	C	0.82383	0.77101	0.6213	0.01267	Uiso	1	0.593
C42	C	0.76874	0.8211	0.69039	0.01267	Uiso	1	-0.024
C43	C	0.70896	0.7641	0.74683	0.01267	Uiso	1	-0.109
C44	C	0.77699	0.92452	0.69916	0.01267	Uiso	1	-0.105
C45	C	0.65693	0.80908	0.81106	0.01267	Uiso	1	-0.114
C46	C	0.72348	0.96934	0.76342	0.01267	Uiso	1	-0.118
C47	C	0.66298	0.91239	0.81951	0.01267	Uiso	1	-0.025
C48	C	0.60418	0.96156	0.88881	0.01267	Uiso	1	0.614
C49	C	0.58864	0.37159	0.08272	0.01267	Uiso	1	0.587
C50	C	0.65253	0.36057	0.15796	0.01267	Uiso	1	-0.046
C51	C	0.65861	0.2672	0.19253	0.01267	Uiso	1	-0.103
C52	C	0.70565	0.44465	0.19355	0.01267	Uiso	1	-0.096
C53	C	0.71875	0.2586	0.26307	0.01267	Uiso	1	-0.106
C54	C	0.77026	0.43463	0.26235	0.01267	Uiso	1	-0.110
C55	C	0.77663	0.34132	0.29695	0.01267	Uiso	1	-0.006
C56	C	0.85105	0.32949	0.3702	0.01267	Uiso	1	0.599
C57	C	0.32383	0.22899	0.8787	0.01267	Uiso	1	0.593
C58	C	0.26874	0.1789	0.80961	0.01267	Uiso	1	-0.025
C59	C	0.20896	0.2359	0.75317	0.01267	Uiso	1	-0.109
C60	C	0.27699	0.07548	0.80084	0.01267	Uiso	1	-0.105
C61	C	0.15693	0.19092	0.68894	0.01267	Uiso	1	-0.115
C62	C	0.22348	0.03066	0.73658	0.01267	Uiso	1	-0.118
C63	C	0.16298	0.08761	0.68049	0.01267	Uiso	1	-0.025
C64	C	0.10418	0.03844	0.61119	0.01267	Uiso	1	0.614
O1	O	0.97675	0.3	0.55436	0.01267	Uiso	1	-0.555
O2	O	0.9029	0.45344	0.54814	0.01267	Uiso	1	-0.538
O3	O	0.55987	0.39203	0.88193	0.01267	Uiso	1	-0.535
O4	O	0.6812	0.25882	0.91271	0.01267	Uiso	1	-0.558
O5	O	0.20917	0.31893	0.39008	0.01267	Uiso	1	-0.533
O6	O	0.10204	0.18064	0.42188	0.01267	Uiso	1	-0.577
O7	O	0.35145	0.95427	0.0933	0.01267	Uiso	1	-0.535
O8	O	0.48501	0.08457	0.07708	0.01267	Uiso	1	-0.578
O9	O	0.47675	0.7	0.94564	0.01267	Uiso	1	-0.557
O10	O	0.4029	0.54656	0.95186	0.01267	Uiso	1	-0.537
O11	O	0.05987	0.60797	0.61807	0.01267	Uiso	1	-0.539
O12	O	0.1812	0.74118	0.58729	0.01267	Uiso	1	-0.558
O13	O	0.70917	0.68107	0.10992	0.01267	Uiso	1	-0.533
O14	O	0.60204	0.81936	0.07812	0.01267	Uiso	1	-0.578
O15	O	0.85145	0.04573	0.4067	0.01267	Uiso	1	-0.535
O16	O	0.98501	0.91543	0.42292	0.01267	Uiso	1	-0.579
O17	O	0.02325	0.7	0.44564	0.01267	Uiso	1	-0.555
O18	O	0.0971	0.54656	0.45186	0.01267	Uiso	1	-0.538
O19	O	0.44013	0.60797	0.11807	0.01267	Uiso	1	-0.535
O20	O	0.3188	0.74118	0.08729	0.01267	Uiso	1	-0.558
O21	O	0.79083	0.68107	0.60992	0.01267	Uiso	1	-0.533
O22	O	0.89796	0.81936	0.57812	0.01267	Uiso	1	-0.577
O23	O	0.64855	0.04573	0.9067	0.01267	Uiso	1	-0.535
O24	O	0.51499	0.91543	0.92292	0.01267	Uiso	1	-0.578
O25	O	0.52325	0.3	0.05436	0.01267	Uiso	1	-0.557
O26	O	0.5971	0.45344	0.04814	0.01267	Uiso	1	-0.537

O27	O	0.94013	0.39203	0.38193	0.01267	Uiso	1	-0.539
O28	O	0.8188	0.25882	0.41271	0.01267	Uiso	1	-0.558
O29	O	0.29083	0.31893	0.89008	0.01267	Uiso	1	-0.533
O30	O	0.39796	0.18064	0.92188	0.01267	Uiso	1	-0.578
O31	O	0.14855	0.95427	0.5933	0.01267	Uiso	1	-0.536
O32	O	0.01499	0.08457	0.57708	0.01267	Uiso	1	-0.579

```

data_LUSHOX02_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1898
_cell_length_b            13.5792
_cell_length_c            17.6223
_cell_angle_alpha        90.7380
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn   0.5797 0.38996   0.46572   0.01267   Uiso  1   0.964
Mn2  Mn   0.42994  0.1524 0.48031   0.01267   Uiso  1   1.036
Mn3  Mn   0.0797 0.61004   0.03428   0.01267   Uiso  1   0.965
Mn4  Mn   0.92994  0.8476 0.01969   0.01267   Uiso  1   1.037
Mn5  Mn   0.4203 0.61004   0.53428   0.01267   Uiso  1   0.962
Mn6  Mn   0.57006  0.8476 0.51969   0.01267   Uiso  1   1.037
Mn7  Mn   0.9203 0.38996   0.96572   0.01267   Uiso  1   0.965
Mn8  Mn   0.07006  0.1524 0.98031   0.01267   Uiso  1   1.037
H1   H    0.615 0.2313 0.6505 0.01267   Uiso  1   0.112
H2   H    0.372 0.2156 0.6662 0.01267   Uiso  1   0.120
H3   H    0.709 0.304 0.7567 0.01267   Uiso  1   0.121
H4   H    0.81  0.044 0.8334 0.01267   Uiso  1   0.124
H5   H    0.186 0.483 0.7874 0.01267   Uiso  1   0.121
H6   H    0.271 0.199 0.7797 0.01267   Uiso  1   0.126
H7   H    0.299 0.5044 0.6725 0.01267   Uiso  1   0.119
H8   H    0.721 0.97  0.7316 0.01267   Uiso  1   0.122
H9   H    0.115 0.7687 0.8495 0.01267   Uiso  1   0.112
H10  H    0.872 0.7844 0.8338 0.01267   Uiso  1   0.120
H11  H    0.209 0.696 0.7433 0.01267   Uiso  1   0.121
H12  H    0.31  0.956 0.6666 0.01267   Uiso  1   0.124
H13  H    0.686 0.517 0.7126 0.01267   Uiso  1   0.121
H14  H    0.771 0.801 0.7203 0.01267   Uiso  1   0.127
H15  H    0.799 0.4956 0.8275 0.01267   Uiso  1   0.119
H16  H    0.221 0.03  0.7684 0.01267   Uiso  1   0.122
H17  H    0.385 0.7687 0.3495 0.01267   Uiso  1   0.112
H18  H    0.628 0.7844 0.3338 0.01267   Uiso  1   0.120

```

H19	H	0.291	0.696	0.2433	0.01267	Uiso	1	0.121
H20	H	0.19	0.956	0.1666	0.01267	Uiso	1	0.124
H21	H	0.814	0.517	0.2126	0.01267	Uiso	1	0.121
H22	H	0.729	0.801	0.2203	0.01267	Uiso	1	0.127
H23	H	0.701	0.4956	0.3275	0.01267	Uiso	1	0.120
H24	H	0.279	0.03	0.2684	0.01267	Uiso	1	0.122
H25	H	0.885	0.2313	0.1505	0.01267	Uiso	1	0.112
H26	H	0.128	0.2156	0.1662	0.01267	Uiso	1	0.120
H27	H	0.791	0.304	0.2567	0.01267	Uiso	1	0.121
H28	H	0.69	0.044	0.3334	0.01267	Uiso	1	0.124
H29	H	0.314	0.483	0.2874	0.01267	Uiso	1	0.121
H30	H	0.229	0.199	0.2797	0.01267	Uiso	1	0.126
H31	H	0.201	0.5044	0.1725	0.01267	Uiso	1	0.119
H32	H	0.779	0.97	0.2316	0.01267	Uiso	1	0.122
C1	C	0.3463	0.3594	0.65631	0.01267	Uiso	1	-0.036
C2	C	0.3377	0.26751	0.68813	0.01267	Uiso	1	-0.113
C3	C	0.2755	0.25695	0.75733	0.01267	Uiso	1	-0.108
C4	C	0.2193	0.33691	0.7936	0.01267	Uiso	1	-0.010
C5	C	0.2283	0.42901	0.7613	0.01267	Uiso	1	-0.108
C6	C	0.2933	0.441	0.69387	0.01267	Uiso	1	-0.101
C7	C	0.41356	0.37258	0.5824	0.01267	Uiso	1	0.591
C8	C	0.1466	0.32411	0.86682	0.01267	Uiso	1	0.610
C9	C	0.6617	0.09177	0.67893	0.01267	Uiso	1	-0.025
C10	C	0.6567	0.1924	0.68793	0.01267	Uiso	1	-0.110
C11	C	0.7093	0.23677	0.75215	0.01267	Uiso	1	-0.117
C12	C	0.7676	0.18157	0.80769	0.01267	Uiso	1	-0.016
C13	C	0.775	0.08066	0.79807	0.01267	Uiso	1	-0.119
C14	C	0.7216	0.03652	0.73429	0.01267	Uiso	1	-0.112
C15	C	0.6018	0.04301	0.60974	0.01267	Uiso	1	0.626
C16	C	0.8237	0.2313	0.87682	0.01267	Uiso	1	0.600
C17	C	0.8463	0.6406	0.84369	0.01267	Uiso	1	-0.037
C18	C	0.8377	0.73249	0.81187	0.01267	Uiso	1	-0.113
C19	C	0.7755	0.74305	0.74267	0.01267	Uiso	1	-0.108
C20	C	0.7193	0.66309	0.7064	0.01267	Uiso	1	-0.010
C21	C	0.7283	0.57099	0.7387	0.01267	Uiso	1	-0.108
C22	C	0.7933	0.559	0.80613	0.01267	Uiso	1	-0.100
C23	C	0.91356	0.62742	0.9176	0.01267	Uiso	1	0.590
C24	C	0.6466	0.67589	0.63318	0.01267	Uiso	1	0.609
C25	C	0.1617	0.90823	0.82107	0.01267	Uiso	1	-0.025
C26	C	0.1567	0.8076	0.81207	0.01267	Uiso	1	-0.110
C27	C	0.2093	0.76323	0.74785	0.01267	Uiso	1	-0.118
C28	C	0.2676	0.81843	0.69231	0.01267	Uiso	1	-0.016
C29	C	0.275	0.91934	0.70193	0.01267	Uiso	1	-0.119
C30	C	0.2216	0.96348	0.76571	0.01267	Uiso	1	-0.112
C31	C	0.1018	0.95699	0.89026	0.01267	Uiso	1	0.626
C32	C	0.3237	0.7687	0.62318	0.01267	Uiso	1	0.600
C33	C	0.6537	0.6406	0.34369	0.01267	Uiso	1	-0.037
C34	C	0.6623	0.73249	0.31187	0.01267	Uiso	1	-0.113
C35	C	0.7245	0.74305	0.24267	0.01267	Uiso	1	-0.108
C36	C	0.7807	0.66309	0.2064	0.01267	Uiso	1	-0.010
C37	C	0.7717	0.57099	0.2387	0.01267	Uiso	1	-0.108
C38	C	0.7067	0.559	0.30613	0.01267	Uiso	1	-0.100

C39	C	0.58644	0.62742	0.4176	0.01267	Uiso	1	0.589
C40	C	0.8534	0.67589	0.13318	0.01267	Uiso	1	0.609
C41	C	0.3383	0.90823	0.32107	0.01267	Uiso	1	-0.025
C42	C	0.3433	0.8076	0.31207	0.01267	Uiso	1	-0.110
C43	C	0.2907	0.76323	0.24785	0.01267	Uiso	1	-0.117
C44	C	0.2324	0.81843	0.19231	0.01267	Uiso	1	-0.017
C45	C	0.225	0.91934	0.20193	0.01267	Uiso	1	-0.119
C46	C	0.2784	0.96348	0.26571	0.01267	Uiso	1	-0.112
C47	C	0.3982	0.95699	0.39026	0.01267	Uiso	1	0.626
C48	C	0.1763	0.7687	0.12318	0.01267	Uiso	1	0.600
C49	C	0.1537	0.3594	0.15631	0.01267	Uiso	1	-0.037
C50	C	0.1623	0.26751	0.18813	0.01267	Uiso	1	-0.113
C51	C	0.2245	0.25695	0.25733	0.01267	Uiso	1	-0.108
C52	C	0.2807	0.33691	0.2936	0.01267	Uiso	1	-0.010
C53	C	0.2717	0.42901	0.2613	0.01267	Uiso	1	-0.108
C54	C	0.2067	0.441	0.19387	0.01267	Uiso	1	-0.100
C55	C	0.08644	0.37258	0.0824	0.01267	Uiso	1	0.590
C56	C	0.3534	0.32411	0.36682	0.01267	Uiso	1	0.610
C57	C	0.8383	0.09177	0.17893	0.01267	Uiso	1	-0.025
C58	C	0.8433	0.1924	0.18793	0.01267	Uiso	1	-0.110
C59	C	0.7907	0.23677	0.25215	0.01267	Uiso	1	-0.117
C60	C	0.7324	0.18157	0.30769	0.01267	Uiso	1	-0.016
C61	C	0.725	0.08066	0.29807	0.01267	Uiso	1	-0.119
C62	C	0.7784	0.03652	0.23429	0.01267	Uiso	1	-0.112
C63	C	0.8982	0.04301	0.10974	0.01267	Uiso	1	0.626
C64	C	0.6763	0.2313	0.37682	0.01267	Uiso	1	0.600
O1	O	0.47534	0.30189	0.55181	0.01267	Uiso	1	-0.557
O2	O	0.40978	0.4545	0.55148	0.01267	Uiso	1	-0.537
O3	O	0.06651	0.39005	0.88335	0.01267	Uiso	1	-0.545
O4	O	0.17256	0.25111	0.90503	0.01267	Uiso	1	-0.554
O5	O	0.521	0.09021	0.57356	0.01267	Uiso	1	-0.575
O6	O	0.6375	0.95792	0.59482	0.01267	Uiso	1	-0.542
O7	O	0.89175	0.18249	0.92112	0.01267	Uiso	1	-0.577
O8	O	0.7961	0.32034	0.88695	0.01267	Uiso	1	-0.534
O9	O	0.97534	0.69811	0.94819	0.01267	Uiso	1	-0.557
O10	O	0.90978	0.5455	0.94852	0.01267	Uiso	1	-0.537
O11	O	0.56651	0.60995	0.61665	0.01267	Uiso	1	-0.544
O12	O	0.67256	0.74889	0.59497	0.01267	Uiso	1	-0.553
O13	O	0.021	0.90979	0.92644	0.01267	Uiso	1	-0.575
O14	O	0.1375	0.04208	0.90518	0.01267	Uiso	1	-0.542
O15	O	0.39175	0.81751	0.57888	0.01267	Uiso	1	-0.578
O16	O	0.2961	0.67966	0.61305	0.01267	Uiso	1	-0.532
O17	O	0.52466	0.69811	0.44819	0.01267	Uiso	1	-0.554
O18	O	0.59022	0.5455	0.44852	0.01267	Uiso	1	-0.535
O19	O	0.93349	0.60995	0.11665	0.01267	Uiso	1	-0.544
O20	O	0.82744	0.74889	0.09497	0.01267	Uiso	1	-0.553
O21	O	0.479	0.90979	0.42644	0.01267	Uiso	1	-0.575
O22	O	0.3625	0.04208	0.40518	0.01267	Uiso	1	-0.542
O23	O	0.10825	0.81751	0.07888	0.01267	Uiso	1	-0.577
O24	O	0.2039	0.67966	0.11305	0.01267	Uiso	1	-0.534
O25	O	0.02466	0.30189	0.05181	0.01267	Uiso	1	-0.557
O26	O	0.09022	0.4545	0.05148	0.01267	Uiso	1	-0.537

O27	O	0.43349	0.39005	0.38335	0.01267	Uiso	1	-0.545
O28	O	0.32744	0.25111	0.40503	0.01267	Uiso	1	-0.553
O29	O	0.979	0.09021	0.07356	0.01267	Uiso	1	-0.576
O30	O	0.8625	0.95792	0.09482	0.01267	Uiso	1	-0.542
O31	O	0.60825	0.18249	0.42112	0.01267	Uiso	1	-0.577
O32	O	0.7039	0.32034	0.38695	0.01267	Uiso	1	-0.535

```

data_LUSHOX03_clean
_cell_length_a 13.3961
_cell_length_b 10.1579
_cell_length_c 17.6555
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90.079
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge
Mn1 1 0.8465 0.42418 0.01539 Biso 1 Mn 1.040709
Mn2 1 0.61117 0.58167 0.03189 Biso 1 Mn 0.964634
C1 1 0.628 0.4115 0.91712 Biso 1 C 0.585733
C2 1 0.6396 0.3476 0.84198 Biso 1 C -0.047436
C3 1 0.5654 0.2301 0.7378 Biso 1 C -0.109084
H1 1 0.509 0.1902 0.7146 Biso 1 H 0.123868
C4 1 0.658 0.2237 0.70287 Biso 1 C -0.004425
C5 1 0.7411 0.2813 0.7367 Biso 1 C -0.106758
H2 1 0.8037 0.2795 0.7116 Biso 1 H 0.126347
C6 1 0.9127 0.663 0.81928 Biso 1 C -0.024029
C7 1 0.6706 0.1496 0.63 Biso 1 C 0.59759
C8 1 0.7639 0.7087 0.7464 Biso 1 C -0.108633
H3 1 0.6935 0.7033 0.7405 Biso 1 H 0.121256
C9 1 0.8213 0.7685 0.6902 Biso 1 C -0.025304
C10 1 0.9249 0.7766 0.6991 Biso 1 C -0.103375
H4 1 0.9645 0.8182 0.6615 Biso 1 H 0.120627
C11 1 0.7709 0.8239 0.6213 Biso 1 C 0.593169
C12 1 0.5553 0.2942 0.80615 Biso 1 C -0.093667
H5 1 0.4914 0.3022 0.82894 Biso 1 H 0.120803
C13 1 0.9695 0.7235 0.7632 Biso 1 C -0.10908
H6 1 0.04 0.7285 0.7689 Biso 1 H 0.117158
C14 1 0.7326 0.3414 0.8069 Biso 1 C -0.102058
H7 1 0.7898 0.3781 0.8309 Biso 1 H 0.117549
C15 1 0.8089 0.6566 0.8111 Biso 1 C -0.115804
H8 1 0.7693 0.617 0.8494 Biso 1 H 0.115432
O1 1 0.9154 0.5148 0.92297 Biso 1 O -0.579285
O2 1 0.70009 0.4766 0.94566 Biso 1 O -0.556968

```

O3	1	0.54646	0.4024	0.95199	Biso	1	O	-0.532788
O4	1	0.6079	0.0596	0.61818	Biso	1	O	-0.539664
O5	1	0.7411	0.1817	0.58701	Biso	1	O	-0.555977
O6	1	0.8195	0.8983	0.57794	Biso	1	O	-0.5824
O7	1	0.681	0.7905	0.60982	Biso	1	O	-0.528862
O8	1	0.0456	0.6493	0.90674	Biso	1	O	-0.530378
C16	1	0.962	0.604	0.88885	Biso	1	C	0.613493
Mn3	1	0.1535	0.92418	0.48461	Biso	1	Mn	1.067129
Mn4	1	0.38883	0.08167	0.46811	Biso	1	Mn	0.957951
C17	1	0.372	0.9115	0.58288	Biso	1	C	0.584444
C18	1	0.3604	0.8476	0.65802	Biso	1	C	-0.047437
C19	1	0.4346	0.7301	0.7622	Biso	1	C	-0.109432
H9	1	0.491	0.6902	0.7854	Biso	1	H	0.123434
C20	1	0.342	0.7237	0.79713	Biso	1	C	-0.005446
C21	1	0.2589	0.7813	0.7633	Biso	1	C	-0.106942
H10	1	0.1963	0.7795	0.7884	Biso	1	H	0.126561
C22	1	0.0873	0.163	0.68072	Biso	1	C	-0.023352
C23	1	0.3294	0.6496	0.87	Biso	1	C	0.596928
C24	1	0.2361	0.2087	0.7536	Biso	1	C	-0.10861
H11	1	0.3065	0.2033	0.7595	Biso	1	H	0.12108
C25	1	0.1787	0.2685	0.8098	Biso	1	C	-0.025427
C26	1	0.0751	0.2766	0.8009	Biso	1	C	-0.10344
H12	1	0.0355	0.3182	0.8385	Biso	1	H	0.121285
C27	1	0.2291	0.3239	0.8787	Biso	1	C	0.59308
C28	1	0.4447	0.7942	0.69385	Biso	1	C	-0.094591
H13	1	0.5086	0.8022	0.67106	Biso	1	H	0.120165
C29	1	0.0305	0.2235	0.7368	Biso	1	C	-0.109991
H14	1	0.96	0.2285	0.7311	Biso	1	H	0.117375
C30	1	0.2674	0.8414	0.6931	Biso	1	C	-0.102943
H15	1	0.2102	0.8781	0.6691	Biso	1	H	0.117247
C31	1	0.1911	0.1566	0.6889	Biso	1	C	-0.116256
H16	1	0.2307	0.117	0.6506	Biso	1	H	0.114677
O9	1	0.0846	0.0148	0.57703	Biso	1	O	-0.58351
O10	1	0.29991	0.9766	0.55434	Biso	1	O	-0.558069
O11	1	0.45354	0.9024	0.54801	Biso	1	O	-0.534887
O12	1	0.3921	0.5596	0.88182	Biso	1	O	-0.539155
O13	1	0.2589	0.6817	0.91299	Biso	1	O	-0.55498
O14	1	0.1805	0.3983	0.92206	Biso	1	O	-0.580671
O15	1	0.319	0.2905	0.89018	Biso	1	O	-0.531775
O16	1	0.9544	0.1493	0.59326	Biso	1	O	-0.531371
C32	1	0.038	0.104	0.61115	Biso	1	C	0.611952
Mn5	1	0.1535	0.57582	0.98461	Biso	1	Mn	1.037019
Mn6	1	0.38883	0.41833	0.96811	Biso	1	Mn	0.963446
C33	1	0.372	0.5885	0.08288	Biso	1	C	0.586185
C34	1	0.3604	0.6524	0.15802	Biso	1	C	-0.046217
C35	1	0.4346	0.7699	0.2622	Biso	1	C	-0.108736
H17	1	0.491	0.8098	0.2854	Biso	1	H	0.123692
C36	1	0.342	0.7763	0.29713	Biso	1	C	-0.004577
C37	1	0.2589	0.7187	0.2633	Biso	1	C	-0.10693
H18	1	0.1963	0.7205	0.2884	Biso	1	H	0.126447
C38	1	0.0873	0.337	0.18072	Biso	1	C	-0.024106
C39	1	0.3294	0.8504	0.37	Biso	1	C	0.600289

C40	1	0.2361	0.2913	0.2536	Biso	1	C	-0.108454
H19	1	0.3065	0.2967	0.2595	Biso	1	H	0.121059
C41	1	0.1787	0.2315	0.3098	Biso	1	C	-0.025769
C42	1	0.0751	0.2234	0.3009	Biso	1	C	-0.103948
H20	1	0.0355	0.1818	0.3385	Biso	1	H	0.120588
C43	1	0.2291	0.1761	0.3787	Biso	1	C	0.593576
C44	1	0.4447	0.7058	0.19385	Biso	1	C	-0.094119
H21	1	0.5086	0.6978	0.17106	Biso	1	H	0.12046
C45	1	0.0305	0.2765	0.2368	Biso	1	C	-0.109568
H22	1	0.96	0.2715	0.2311	Biso	1	H	0.117284
C46	1	0.2674	0.6586	0.1931	Biso	1	C	-0.101703
H23	1	0.2102	0.6219	0.1691	Biso	1	H	0.117763
C47	1	0.1911	0.3434	0.1889	Biso	1	C	-0.11571
H24	1	0.2307	0.383	0.1506	Biso	1	H	0.115001
O17	1	0.0846	0.4852	0.07703	Biso	1	O	-0.577987
O18	1	0.29991	0.5234	0.05434	Biso	1	O	-0.557095
O19	1	0.45354	0.5976	0.04801	Biso	1	O	-0.533526
O20	1	0.3921	0.9404	0.38182	Biso	1	O	-0.540582
O21	1	0.2589	0.8183	0.41299	Biso	1	O	-0.561466
O22	1	0.1805	0.1017	0.42206	Biso	1	O	-0.586545
O23	1	0.319	0.2095	0.39018	Biso	1	O	-0.532328
O24	1	0.9544	0.3507	0.09326	Biso	1	O	-0.530336
C48	1	0.038	0.396	0.11115	Biso	1	C	0.61363
Mn7	1	0.8465	0.07582	0.51539	Biso	1	Mn	1.042426
Mn8	1	0.61117	0.91833	0.53189	Biso	1	Mn	0.960759
C49	1	0.628	0.0885	0.41712	Biso	1	C	0.585585
C50	1	0.6396	0.1524	0.34198	Biso	1	C	-0.046992
C51	1	0.5654	0.2699	0.2378	Biso	1	C	-0.109285
H25	1	0.509	0.3098	0.2146	Biso	1	H	0.123771
C52	1	0.658	0.2763	0.20287	Biso	1	C	-0.004556
C53	1	0.7411	0.2187	0.2367	Biso	1	C	-0.106947
H26	1	0.8037	0.2205	0.2116	Biso	1	H	0.126416
C54	1	0.9127	0.837	0.31928	Biso	1	C	-0.024382
C55	1	0.6706	0.3504	0.13	Biso	1	C	0.597566
C56	1	0.7639	0.7913	0.2464	Biso	1	C	-0.108137
H27	1	0.6935	0.7967	0.2405	Biso	1	H	0.121459
C57	1	0.8213	0.7315	0.1902	Biso	1	C	-0.024633
C58	1	0.9249	0.7234	0.1991	Biso	1	C	-0.103266
H28	1	0.9645	0.6818	0.1615	Biso	1	H	0.121183
C59	1	0.7709	0.6761	0.1213	Biso	1	C	0.592564
C60	1	0.5553	0.2058	0.30615	Biso	1	C	-0.093643
H29	1	0.4914	0.1978	0.32894	Biso	1	H	0.120842
C61	1	0.9695	0.7765	0.2632	Biso	1	C	-0.109061
H30	1	0.04	0.7715	0.2689	Biso	1	H	0.117208
C62	1	0.7326	0.1586	0.3069	Biso	1	C	-0.102367
H31	1	0.7898	0.1219	0.3309	Biso	1	H	0.1175
C63	1	0.8089	0.8434	0.3111	Biso	1	C	-0.115039
H32	1	0.7693	0.883	0.3494	Biso	1	H	0.115557
O25	1	0.9154	0.9852	0.42297	Biso	1	O	-0.57779
O26	1	0.70009	0.0234	0.44566	Biso	1	O	-0.557811
O27	1	0.54646	0.0976	0.45199	Biso	1	O	-0.531772
O28	1	0.6079	0.4404	0.11818	Biso	1	O	-0.539157

O29	1	0.7411	0.3183	0.08701	Biso	1	O	-0.556184
O30	1	0.8195	0.6017	0.07794	Biso	1	O	-0.580058
O31	1	0.681	0.7095	0.10982	Biso	1	O	-0.530922
O32	1	0.0456	0.8507	0.40674	Biso	1	O	-0.529145
C64	1	0.962	0.896	0.38885	Biso	1	C	0.614158

data_LUSHOX04

_cell_length_a 13.6353
_cell_length_b 10.2259
_cell_length_c 17.6925
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90.704
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Mn1	1	0.38998	0.92028	0.96582	Biso	1	Mn	0.969566
Mn2	1	0.15231	0.07019	0.98044	Biso	1	Mn	1.042074
O1	1	0.39003	0.06607	0.88339	Biso	1	O	-0.544104
O2	1	0.32015	0.7961	0.88709	Biso	1	O	-0.536068
O3	1	0.30207	0.47525	0.55193	Biso	1	O	-0.55806
O4	1	0.25122	0.17252	0.90529	Biso	1	O	-0.556915
O5	1	0.182	0.89201	0.92125	Biso	1	O	-0.577899
O6	1	0.09025	0.52068	0.57364	Biso	1	O	-0.582295
O7	1	0.45454	0.41015	0.55139	Biso	1	O	-0.537946
O8	1	0.95763	0.6374	0.59482	Biso	1	O	-0.578065
C1	1	0.23073	0.8237	0.87702	Biso	1	C	0.596503
C2	1	0.18104	0.7676	0.80777	Biso	1	C	-0.020459
C3	1	0.23636	0.7091	0.75228	Biso	1	C	-0.112448
H1	1	0.3042	0.705	0.758	Biso	1	H	0.120847
C4	1	0.19228	0.6566	0.68834	Biso	1	C	-0.116251
H2	1	0.2306	0.6179	0.6514	Biso	1	H	0.113577
C5	1	0.09124	0.6615	0.67908	Biso	1	C	-0.024006
C6	1	0.03637	0.7218	0.73425	Biso	1	C	-0.11185
H3	1	0.9686	0.7265	0.7284	Biso	1	H	0.119174
C7	1	0.08052	0.7753	0.79817	Biso	1	C	-0.109242
H4	1	0.0425	0.8164	0.8345	Biso	1	H	0.12158
C8	1	0.32429	0.1467	0.86665	Biso	1	C	0.603806
C9	1	0.33688	0.2194	0.79365	Biso	1	C	-0.007127
C10	1	0.4291	0.2282	0.76131	Biso	1	C	-0.111051
H5	1	0.483	0.19	0.7853	Biso	1	H	0.123844
C11	1	0.44082	0.2932	0.69383	Biso	1	C	-0.100079
H6	1	0.5029	0.3018	0.6733	Biso	1	H	0.119967

C12	1	0.35942	0.3463	0.6563	Biso	1	C	-0.042344
C13	1	0.26732	0.3375	0.68817	Biso	1	C	-0.106083
H7	1	0.2129	0.3725	0.6633	Biso	1	H	0.117018
C14	1	0.25711	0.2759	0.75761	Biso	1	C	-0.105968
H8	1	0.1958	0.2727	0.7801	Biso	1	H	0.12558
C15	1	0.37261	0.4136	0.58246	Biso	1	C	0.589273
C16	1	0.04282	0.6018	0.6099	Biso	1	C	0.630397
Mn3	1	0.61002	0.42028	0.53418	Biso	1	Mn	0.968891
Mn4	1	0.84769	0.57019	0.51956	Biso	1	Mn	1.155602
O9	1	0.60997	0.56607	0.61661	Biso	1	O	-0.545731
O10	1	0.67985	0.2961	0.61291	Biso	1	O	-0.534724
O11	1	0.69793	0.97525	0.94807	Biso	1	O	-0.556786
O12	1	0.74878	0.67252	0.59471	Biso	1	O	-0.581916
O13	1	0.818	0.39201	0.57875	Biso	1	O	-0.596727
O14	1	0.90975	0.02068	0.92636	Biso	1	O	-0.577906
O15	1	0.54546	0.91015	0.94861	Biso	1	O	-0.536079
O16	1	0.04237	0.1374	0.90518	Biso	1	O	-0.542579
C17	1	0.76927	0.3237	0.62298	Biso	1	C	0.601437
C18	1	0.81896	0.2676	0.69223	Biso	1	C	-0.021841
C19	1	0.76364	0.2091	0.74772	Biso	1	C	-0.111346
H9	1	0.6958	0.205	0.742	Biso	1	H	0.121826
C20	1	0.80772	0.1566	0.81166	Biso	1	C	-0.115339
H10	1	0.7694	0.1179	0.8486	Biso	1	H	0.11418
C21	1	0.90876	0.1615	0.82092	Biso	1	C	-0.022834
C22	1	0.96363	0.2218	0.76575	Biso	1	C	-0.111645
H11	1	0.0314	0.2265	0.7716	Biso	1	H	0.119081
C23	1	0.91948	0.2753	0.70183	Biso	1	C	-0.108062
H12	1	0.9575	0.3164	0.6655	Biso	1	H	0.1212
C24	1	0.67571	0.6467	0.63335	Biso	1	C	0.607423
C25	1	0.66312	0.7194	0.70635	Biso	1	C	-0.007393
C26	1	0.5709	0.7282	0.73869	Biso	1	C	-0.110951
H13	1	0.517	0.69	0.7147	Biso	1	H	0.124505
C27	1	0.55918	0.7932	0.80617	Biso	1	C	-0.09968
H14	1	0.4971	0.8018	0.8267	Biso	1	H	0.120511
C28	1	0.64058	0.8463	0.8437	Biso	1	C	-0.042664
C29	1	0.73268	0.8375	0.81183	Biso	1	C	-0.106298
H15	1	0.7871	0.8725	0.8367	Biso	1	H	0.116945
C30	1	0.74289	0.7759	0.74239	Biso	1	C	-0.10582
H16	1	0.8042	0.7727	0.7199	Biso	1	H	0.12486
C31	1	0.62739	0.9136	0.91754	Biso	1	C	0.58919
C32	1	0.95718	0.1018	0.8901	Biso	1	C	0.625533
Mn5	1	0.61002	0.07972	0.03418	Biso	1	Mn	0.970078
Mn6	1	0.84769	0.92981	0.01956	Biso	1	Mn	1.043839
O17	1	0.60997	0.93393	0.11661	Biso	1	O	-0.545309
O18	1	0.67985	0.2039	0.11291	Biso	1	O	-0.533705
O19	1	0.69793	0.52475	0.44807	Biso	1	O	-0.573898
O20	1	0.74878	0.82748	0.09471	Biso	1	O	-0.558915
O21	1	0.818	0.10799	0.07875	Biso	1	O	-0.57814
O22	1	0.90975	0.47932	0.42636	Biso	1	O	-0.60663
O23	1	0.54546	0.58985	0.44861	Biso	1	O	-0.539059
O24	1	0.04237	0.3626	0.40518	Biso	1	O	-0.544107
C33	1	0.76927	0.1763	0.12298	Biso	1	C	0.596613

C34	1	0.81896	0.2324	0.19223	Biso	1	C	-0.019695
C35	1	0.76364	0.2909	0.24772	Biso	1	C	-0.112433
H17	1	0.6958	0.295	0.242	Biso	1	H	0.121556
C36	1	0.80772	0.3434	0.31166	Biso	1	C	-0.115035
H18	1	0.7694	0.3821	0.3486	Biso	1	H	0.113905
C37	1	0.90876	0.3385	0.32092	Biso	1	C	-0.025094
C38	1	0.96363	0.2782	0.26575	Biso	1	C	-0.112084
H19	1	0.0314	0.2735	0.2716	Biso	1	H	0.118865
C39	1	0.91948	0.2247	0.20183	Biso	1	C	-0.108567
H20	1	0.9575	0.1836	0.1655	Biso	1	H	0.121697
C40	1	0.67571	0.8533	0.13335	Biso	1	C	0.60491
C41	1	0.66312	0.7806	0.20635	Biso	1	C	-0.00673
C42	1	0.5709	0.7718	0.23869	Biso	1	C	-0.110551
H21	1	0.517	0.81	0.2147	Biso	1	H	0.124526
C43	1	0.55918	0.7068	0.30617	Biso	1	C	-0.099565
H22	1	0.4971	0.6982	0.3267	Biso	1	H	0.120552
C44	1	0.64058	0.6537	0.3437	Biso	1	C	-0.042205
C45	1	0.73268	0.6625	0.31183	Biso	1	C	-0.106784
H23	1	0.7871	0.6275	0.3367	Biso	1	H	0.116765
C46	1	0.74289	0.7241	0.24239	Biso	1	C	-0.105672
H24	1	0.8042	0.7273	0.2199	Biso	1	H	0.125096
C47	1	0.62739	0.5864	0.41754	Biso	1	C	0.593412
C48	1	0.95718	0.3982	0.3901	Biso	1	C	0.631611
Mn7	1	0.38998	0.57972	0.46582	Biso	1	Mn	0.969756
Mn8	1	0.15231	0.42981	0.48044	Biso	1	Mn	1.063385
O25	1	0.39003	0.43393	0.38339	Biso	1	O	-0.545736
O26	1	0.32015	0.7039	0.38709	Biso	1	O	-0.53729
O27	1	0.30207	0.02475	0.05193	Biso	1	O	-0.558151
O28	1	0.25122	0.32748	0.40529	Biso	1	O	-0.555423
O29	1	0.182	0.60799	0.42125	Biso	1	O	-0.585092
O30	1	0.09025	0.97932	0.07364	Biso	1	O	-0.576871
O31	1	0.45454	0.08985	0.05139	Biso	1	O	-0.538343
O32	1	0.95763	0.8626	0.09482	Biso	1	O	-0.541535
C49	1	0.23073	0.6763	0.37702	Biso	1	C	0.596854
C50	1	0.18104	0.7324	0.30777	Biso	1	C	-0.02024
C51	1	0.23636	0.7909	0.25228	Biso	1	C	-0.112168
H25	1	0.3042	0.795	0.258	Biso	1	H	0.1211
C52	1	0.19228	0.8434	0.18834	Biso	1	C	-0.115749
H26	1	0.2306	0.8821	0.1514	Biso	1	H	0.11397
C53	1	0.09124	0.8385	0.17908	Biso	1	C	-0.02333
C54	1	0.03637	0.7782	0.23425	Biso	1	C	-0.112892
H27	1	0.9686	0.7735	0.2284	Biso	1	H	0.119108
C55	1	0.08052	0.7247	0.29817	Biso	1	C	-0.108965
H28	1	0.0425	0.6836	0.3345	Biso	1	H	0.12116
C56	1	0.32429	0.3533	0.36665	Biso	1	C	0.604422
C57	1	0.33688	0.2806	0.29365	Biso	1	C	-0.007237
C58	1	0.4291	0.2718	0.26131	Biso	1	C	-0.110184
H29	1	0.483	0.31	0.2853	Biso	1	H	0.124194
C59	1	0.44082	0.2068	0.19383	Biso	1	C	-0.099603
H30	1	0.5029	0.1982	0.1733	Biso	1	H	0.120163
C60	1	0.35942	0.1537	0.1563	Biso	1	C	-0.04155
C61	1	0.26732	0.1625	0.18817	Biso	1	C	-0.105405

H31	1	0.2129	0.1275	0.1633	Biso	1	H	0.117587	
C62	1	0.25711		0.2241	0.25761	Biso	1	C	-0.106208
H32	1	0.1958	0.2273	0.2801	Biso	1	H	0.125376	
C63	1	0.37261		0.0864	0.08246	Biso	1	C	0.591082
C64	1	0.04282		0.8982	0.1099	Biso	1	C	0.624759

```

data_VAGTAA_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            9.5856
_cell_length_b            10.0263
_cell_length_c            10.0263
_cell_angle_alpha        107.1440
_cell_angle_beta         109.3330
_cell_angle_gamma        70.6671
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mg1  Mg  0.5  0  0  0.01267  Uiso  1  1.548388
Mg2  Mg  0  0  0  0.01267  Uiso  1  1.548427
H1   H   0.6348 0.8666 0.3296 0.01267  Uiso  1  0.154086
H2   H   0.1526 0.1084 0.3388 0.01267  Uiso  1  0.384376
H3   H   0.8652 0.3296 0.8666 0.01267  Uiso  1  0.154154
H4   H   0.3474 0.3388 0.1084 0.01267  Uiso  1  0.384391
H5   H   0.3652 0.1334 0.6704 0.01267  Uiso  1  0.154161
H6   H   0.8474 0.8916 0.6612 0.01267  Uiso  1  0.384448
H7   H   0.1348 0.6704 0.1334 0.01267  Uiso  1  0.154153
H8   H   0.6526 0.6612 0.8916 0.01267  Uiso  1  0.384476
C1   C   0.3428 0.9516 0.1958 0.01267  Uiso  1  0.66822
C2   C   0.4225 0.9777 0.3533 0.01267  Uiso  1  -0.167525
C3   C   0.5807 0.9197 0.3983 0.01267  Uiso  1  -0.219424
C4   C   0.3428 0.0606 0.458  0.01267  Uiso  1  0.307563
C5   C   0.1572 0.1958 0.9516 0.01267  Uiso  1  0.668312
C6   C   0.0775 0.3533 0.9777 0.01267  Uiso  1  -0.167513
C7   C   0.9193 0.3983 0.9197 0.01267  Uiso  1  -0.219444
C8   C   0.1572 0.458  0.0606 0.01267  Uiso  1  0.307484
C9   C   0.6572 0.0484 0.8042 0.01267  Uiso  1  0.668218
C10  C   0.5775 0.0223 0.6467 0.01267  Uiso  1  -0.167474
C11  C   0.4193 0.0803 0.6017 0.01267  Uiso  1  -0.219281
C12  C   0.6572 0.9394 0.542  0.01267  Uiso  1  0.307619
C13  C   0.8428 0.8042 0.0484 0.01267  Uiso  1  0.668071
C14  C   0.9225 0.6467 0.0223 0.01267  Uiso  1  -0.167455
C15  C   0.0807 0.6017 0.0803 0.01267  Uiso  1  -0.219352
C16  C   0.8428 0.542  0.9394 0.01267  Uiso  1  0.307577
O1   O   0.4198 0.9026 0.105  0.01267  Uiso  1  -0.698614

```

O2	O	0.1968	0.98	0.1642	0.01267	Uiso	1	-0.716551
O3	O	0.189	0.1259	0.4265	0.01267	Uiso	1	-0.486384
O4	O	0.0802	0.105	0.9026	0.01267	Uiso	1	-0.698616
O5	O	0.3032	0.1642	0.98	0.01267	Uiso	1	-0.716736
O6	O	0.311	0.4265	0.1259	0.01267	Uiso	1	-0.486439
O7	O	0.5802	0.0974	0.895	0.01267	Uiso	1	-0.698431
O8	O	0.8032	0.02	0.8358	0.01267	Uiso	1	-0.716745
O9	O	0.811	0.8741	0.5735	0.01267	Uiso	1	-0.486668
O10	O	0.9198	0.895	0.0974	0.01267	Uiso	1	-0.698505
O11	O	0.6968	0.8358	0.02	0.01267	Uiso	1	-0.716489
O12	O	0.689	0.5735	0.8741	0.01267	Uiso	1	-0.486478

data_WURKEB_CLEAN

_cell_length_a 18.2507
_cell_length_b 18.1651
_cell_length_c 18.8518
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Mn1	1	0.22371	0.69334	0.08938	Biso	1	Mn	1.013839
Mn2	1	0.22053	0.4914	0.09417	Biso	1	Mn	0.979793
O1	1	0.23449	0.38399	0.13491	Biso	1	O	-0.549909
O2	1	0.31773	0.52377	0.14579	Biso	1	O	-0.526213
O3	1	0.22958	0.50278	0.48788	Biso	1	O	-0.516116
O4	1	0.64147	0.53542	0.33741	Biso	1	O	-0.579756
O5	1	0.28815	0.4036	0.52109	Biso	1	O	-0.610949
O6	1	0.63283	0.65704	0.34648	Biso	1	O	-0.53176
O7	1	0.27644	0.27736	0.17102	Biso	1	O	-0.568203
O8	1	0.31121	0.64584	0.14813	Biso	1	O	-0.577456
O9	1	0.3162	0.25589	0.29935	Biso	1	O	-0.47933
H1	1	0.3156	0.2476	0.2566	Biso	1	H	0.392943
O10	1	0.4147	0.7213	0.2004	Biso	1	O	-0.49004
H2	1	0.3758	0.7137	0.1801	Biso	1	H	0.386226
C1	1	0.25382	0.34154	0.18274	Biso	1	C	0.632451
C2	1	0.25136	0.36426	0.25903	Biso	1	C	-0.179357
C3	1	0.2167	0.42873	0.27816	Biso	1	C	-0.075849
H3	1	0.1931	0.4565	0.2436	Biso	1	H	0.114686
C4	1	0.2163	0.45305	0.34828	Biso	1	C	-0.134654
H4	1	0.193	0.4969	0.3602	Biso	1	H	0.132027
C5	1	0.2507	0.41174	0.39994	Biso	1	C	-0.005664
C6	1	0.28366	0.34554	0.38221	Biso	1	C	-0.265808
H5	1	0.3058	0.3172	0.4173	Biso	1	H	0.137704
C7	1	0.28382	0.32117	0.31219	Biso	1	C	0.337367
C8	1	0.25542	0.44009	0.47402	Biso	1	C	0.583912
C9	1	0.34118	0.58561	0.16266	Biso	1	C	0.623885
C10	1	0.4122	0.58928	0.20365	Biso	1	C	-0.183735

C11	1	0.4454	0.5247	0.2266	Biso	1	C	-0.075203
H6	1	0.424	0.4795	0.2162	Biso	1	H	0.126062
C12	1	0.5099	0.52706	0.2646	Biso	1	C	-0.148389
H7	1	0.5317	0.4835	0.2796	Biso	1	H	0.125096
C13	1	0.54238	0.59439	0.28078	Biso	1	C	-0.005221
C14	1	0.51002	0.6584	0.25786	Biso	1	C	-0.243183
H8	1	0.5317	0.7035	0.2681	Biso	1	H	0.150127
C15	1	0.4451	0.65631	0.21948	Biso	1	C	0.331185
C16	1	0.61145	0.59602	0.32482	Biso	1	C	0.618561
Mn3	1	0.27629	0.30666	0.58938	Biso	1	Mn	1.026446
Mn4	1	0.27947	0.5086	0.59417	Biso	1	Mn	1.082504
O11	1	0.26551	0.61601	0.63491	Biso	1	O	-0.578413
O12	1	0.18227	0.47623	0.64579	Biso	1	O	-0.553221
O13	1	0.27042	0.49722	0.98788	Biso	1	O	-0.491544
O14	1	0.85853	0.46458	0.83741	Biso	1	O	-0.553802
O15	1	0.21185	0.5964	0.02109	Biso	1	O	-0.583349
O16	1	0.86717	0.34296	0.84648	Biso	1	O	-0.535328
O17	1	0.22356	0.72264	0.67102	Biso	1	O	-0.569003
O18	1	0.18879	0.35416	0.64813	Biso	1	O	-0.583626
O19	1	0.1838	0.74411	0.79935	Biso	1	O	-0.47871
H9	1	0.1844	0.7524	0.7566	Biso	1	H	0.392352
O20	1	0.0853	0.2787	0.7004	Biso	1	O	-0.490818
H10	1	0.1242	0.2863	0.6801	Biso	1	H	0.385984
C17	1	0.24618	0.65846	0.68274	Biso	1	C	0.637272
C18	1	0.24864	0.63574	0.75903	Biso	1	C	-0.180345
C19	1	0.2833	0.57127	0.77816	Biso	1	C	-0.076094
H11	1	0.3069	0.5435	0.7436	Biso	1	H	0.113721
C20	1	0.2837	0.54695	0.84828	Biso	1	C	-0.135321
H12	1	0.307	0.5031	0.8602	Biso	1	H	0.13185
C21	1	0.2493	0.58826	0.89994	Biso	1	C	-0.00625
C22	1	0.21634	0.65446	0.88221	Biso	1	C	-0.265472
H13	1	0.1942	0.6828	0.9173	Biso	1	H	0.137812
C23	1	0.21618	0.67883	0.81219	Biso	1	C	0.337701
C24	1	0.24458	0.55991	0.97402	Biso	1	C	0.575518
C25	1	0.15882	0.41439	0.66266	Biso	1	C	0.630022
C26	1	0.0878	0.41072	0.70365	Biso	1	C	-0.18745
C27	1	0.0546	0.4753	0.7266	Biso	1	C	-0.073601
H14	1	0.076	0.5205	0.7162	Biso	1	H	0.125596
C28	1	0.9901	0.47294	0.7646	Biso	1	C	-0.14991
H15	1	0.9683	0.5165	0.7796	Biso	1	H	0.125159
C29	1	0.95762	0.40561	0.78078	Biso	1	C	-0.003252
C30	1	0.98998	0.3416	0.75786	Biso	1	C	-0.243808
H16	1	0.9683	0.2965	0.7681	Biso	1	H	0.14996
C31	1	0.0549	0.34369	0.71948	Biso	1	C	0.332017
C32	1	0.88855	0.40398	0.82482	Biso	1	C	0.613635
Mn5	1	0.77629	0.19334	0.41062	Biso	1	Mn	1.027655
Mn6	1	0.77947	0.9914	0.40583	Biso	1	Mn	0.990246
O21	1	0.76551	0.88399	0.36509	Biso	1	O	-0.550918
O22	1	0.68227	0.02377	0.35421	Biso	1	O	-0.524181
O23	1	0.77042	0.00278	0.01212	Biso	1	O	-0.51688
O24	1	0.35853	0.03542	0.16259	Biso	1	O	-0.582261
O25	1	0.71185	0.9036	0.97891	Biso	1	O	-0.616998

O26	1	0.36717	0.15704	0.15352	Biso	1	O	-0.543205
O27	1	0.72356	0.77736	0.32898	Biso	1	O	-0.565799
O28	1	0.68879	0.14584	0.35187	Biso	1	O	-0.582209
O29	1	0.6838	0.75589	0.20065	Biso	1	O	-0.479276
H17	1	0.6844	0.7476	0.2434	Biso	1	H	0.392282
O30	1	0.5853	0.2213	0.2996	Biso	1	O	-0.490669
H18	1	0.6242	0.2137	0.3199	Biso	1	H	0.385912
C33	1	0.74618	0.84154	0.31726	Biso	1	C	0.632798
C34	1	0.74864	0.86426	0.24097	Biso	1	C	-0.180994
C35	1	0.7833	0.92873	0.22184	Biso	1	C	-0.076631
H19	1	0.8069	0.9565	0.2564	Biso	1	H	0.114092
C36	1	0.7837	0.95305	0.15172	Biso	1	C	-0.134358
H20	1	0.807	0.9969	0.1398	Biso	1	H	0.132298
C37	1	0.7493	0.91174	0.10006	Biso	1	C	-0.003753
C38	1	0.71634	0.84554	0.11779	Biso	1	C	-0.26499
H21	1	0.6942	0.8172	0.0827	Biso	1	H	0.138075
C39	1	0.71618	0.82117	0.18781	Biso	1	C	0.337462
C40	1	0.74458	0.94009	0.02598	Biso	1	C	0.585131
C41	1	0.65882	0.08561	0.33734	Biso	1	C	0.626294
C42	1	0.5878	0.08928	0.29635	Biso	1	C	-0.186512
C43	1	0.5546	0.0247	0.2734	Biso	1	C	-0.075635
H22	1	0.576	0.9795	0.2838	Biso	1	H	0.125608
C44	1	0.4901	0.02706	0.2354	Biso	1	C	-0.148489
H23	1	0.4683	0.9835	0.2204	Biso	1	H	0.125073
C45	1	0.45762	0.09439	0.21922	Biso	1	C	-0.003009
C46	1	0.48998	0.1584	0.24214	Biso	1	C	-0.243662
H24	1	0.4683	0.2035	0.2319	Biso	1	H	0.150243
C47	1	0.5549	0.15631	0.28052	Biso	1	C	0.331737
C48	1	0.38855	0.09602	0.17518	Biso	1	C	0.617857
Mn7	1	0.72371	0.80666	0.91062	Biso	1	Mn	1.033708
Mn8	1	0.72053	0.0086	0.90583	Biso	1	Mn	1.080856
O31	1	0.73449	0.11601	0.86509	Biso	1	O	-0.576591
O32	1	0.81773	0.97623	0.85421	Biso	1	O	-0.555119
O33	1	0.72958	0.99722	0.51212	Biso	1	O	-0.48989
O34	1	0.14147	0.96458	0.66259	Biso	1	O	-0.551493
O35	1	0.78815	0.0964	0.47891	Biso	1	O	-0.586717
O36	1	0.13283	0.84296	0.65352	Biso	1	O	-0.531229
O37	1	0.77644	0.22264	0.82898	Biso	1	O	-0.566996
O38	1	0.81121	0.85416	0.85187	Biso	1	O	-0.594614
O39	1	0.8162	0.24411	0.70065	Biso	1	O	-0.479212
H25	1	0.8156	0.2524	0.7434	Biso	1	H	0.392721
O40	1	0.9147	0.7787	0.7996	Biso	1	O	-0.491763
H26	1	0.8758	0.7863	0.8199	Biso	1	H	0.385595
C49	1	0.75382	0.15846	0.81726	Biso	1	C	0.636162
C50	1	0.75136	0.13574	0.74097	Biso	1	C	-0.178943
C51	1	0.7167	0.07127	0.72184	Biso	1	C	-0.074708
H27	1	0.6931	0.0435	0.7564	Biso	1	H	0.114299
C52	1	0.7163	0.04695	0.65172	Biso	1	C	-0.134676
H28	1	0.693	0.0031	0.6398	Biso	1	H	0.131932
C53	1	0.7507	0.08826	0.60006	Biso	1	C	-0.007657
C54	1	0.78366	0.15446	0.61779	Biso	1	C	-0.266014
H29	1	0.8058	0.1828	0.5827	Biso	1	H	0.137663

C55	1	0.78382	0.17883	0.68781	Biso	1	C	0.337522
C56	1	0.75542	0.05991	0.52598	Biso	1	C	0.57708
C57	1	0.84118	0.91439	0.83734	Biso	1	C	0.629459
C58	1	0.9122	0.91072	0.79635	Biso	1	C	-0.186826
C59	1	0.9454	0.9753	0.7734	Biso	1	C	-0.073799
H30	1	0.924	0.0205	0.7838	Biso	1	H	0.125416
C60	1	0.0099	0.97294	0.7354	Biso	1	C	-0.150227
H31	1	0.0317	0.0165	0.7204	Biso	1	H	0.124737
C61	1	0.04238	0.90561	0.71922	Biso	1	C	-0.00556
C62	1	0.01002	0.8416	0.74214	Biso	1	C	-0.243988
H32	1	0.0317	0.7965	0.7319	Biso	1	H	0.149489
C63	1	0.9451	0.84369	0.78052	Biso	1	C	0.332316
C64	1	0.11145	0.90398	0.67518	Biso	1	C	0.613737
Mn9	1	0.77629	0.30666	0.91062	Biso	1	Mn	1.0135
Mn10	1	0.77947	0.5086	0.90583	Biso	1	Mn	0.982368
O41	1	0.76551	0.61601	0.86509	Biso	1	O	-0.548882
O42	1	0.68227	0.47623	0.85421	Biso	1	O	-0.525583
O43	1	0.77042	0.49722	0.51212	Biso	1	O	-0.516028
O44	1	0.35853	0.46458	0.66259	Biso	1	O	-0.579575
O45	1	0.71185	0.5964	0.47891	Biso	1	O	-0.610932
O46	1	0.36717	0.34296	0.65352	Biso	1	O	-0.531742
O47	1	0.72356	0.72264	0.82898	Biso	1	O	-0.563315
O48	1	0.68879	0.35416	0.85187	Biso	1	O	-0.577337
O49	1	0.6838	0.74411	0.70065	Biso	1	O	-0.47884
H33	1	0.6844	0.7524	0.7434	Biso	1	H	0.39294
O50	1	0.5853	0.2787	0.7996	Biso	1	O	-0.490088
H34	1	0.6242	0.2863	0.8199	Biso	1	H	0.38647
C65	1	0.74618	0.65846	0.81726	Biso	1	C	0.632046
C66	1	0.74864	0.63574	0.74097	Biso	1	C	-0.179994
C67	1	0.7833	0.57127	0.72184	Biso	1	C	-0.07575
H35	1	0.8069	0.5435	0.7564	Biso	1	H	0.114659
C68	1	0.7837	0.54695	0.65172	Biso	1	C	-0.134443
H36	1	0.807	0.5031	0.6398	Biso	1	H	0.132126
C69	1	0.7493	0.58826	0.60006	Biso	1	C	-0.005335
C70	1	0.71634	0.65446	0.61779	Biso	1	C	-0.265516
H37	1	0.6942	0.6828	0.5827	Biso	1	H	0.137809
C71	1	0.71618	0.67883	0.68781	Biso	1	C	0.337307
C72	1	0.74458	0.55991	0.52598	Biso	1	C	0.583941
C73	1	0.65882	0.41439	0.83734	Biso	1	C	0.62415
C74	1	0.5878	0.41072	0.79635	Biso	1	C	-0.184412
C75	1	0.5546	0.4753	0.7734	Biso	1	C	-0.075065
H38	1	0.576	0.5205	0.7838	Biso	1	H	0.126063
C76	1	0.4901	0.47294	0.7354	Biso	1	C	-0.148248
H39	1	0.4683	0.5165	0.7204	Biso	1	H	0.12524
C77	1	0.45762	0.40561	0.71922	Biso	1	C	-0.00481
C78	1	0.48998	0.3416	0.74214	Biso	1	C	-0.243323
H40	1	0.4683	0.2965	0.7319	Biso	1	H	0.150103
C79	1	0.5549	0.34369	0.78052	Biso	1	C	0.331466
C80	1	0.38855	0.40398	0.67518	Biso	1	C	0.61838
Mn11	1	0.72371	0.69334	0.41062	Biso	1	Mn	1.026431
Mn12	1	0.72053	0.4914	0.40583	Biso	1	Mn	1.082289
O51	1	0.73449	0.38399	0.36509	Biso	1	O	-0.57805

O52	1	0.81773	0.52377	0.35421	Biso	1	O	-0.55334
O53	1	0.72958	0.50278	0.01212	Biso	1	O	-0.491991
O54	1	0.14147	0.53542	0.16259	Biso	1	O	-0.553295
O55	1	0.78815	0.4036	0.97891	Biso	1	O	-0.584306
O56	1	0.13283	0.65704	0.15352	Biso	1	O	-0.53376
O57	1	0.77644	0.27736	0.32898	Biso	1	O	-0.569203
O58	1	0.81121	0.64584	0.35187	Biso	1	O	-0.583577
O59	1	0.8162	0.25589	0.20065	Biso	1	O	-0.478784
H41	1	0.8156	0.2476	0.2434	Biso	1	H	0.392396
O60	1	0.9147	0.7213	0.2996	Biso	1	O	-0.490721
H42	1	0.8758	0.7137	0.3199	Biso	1	H	0.385736
C81	1	0.75382	0.34154	0.31726	Biso	1	C	0.637297
C82	1	0.75136	0.36426	0.24097	Biso	1	C	-0.180023
C83	1	0.7167	0.42873	0.22184	Biso	1	C	-0.075794
H43	1	0.6931	0.4565	0.2564	Biso	1	H	0.113779
C84	1	0.7163	0.45305	0.15172	Biso	1	C	-0.134818
H44	1	0.693	0.4969	0.1398	Biso	1	H	0.13202
C85	1	0.7507	0.41174	0.10006	Biso	1	C	-0.006315
C86	1	0.78366	0.34554	0.11779	Biso	1	C	-0.265239
H45	1	0.8058	0.3172	0.0827	Biso	1	H	0.138171
C87	1	0.78382	0.32117	0.18781	Biso	1	C	0.337703
C88	1	0.75542	0.44009	0.02598	Biso	1	C	0.576427
C89	1	0.84118	0.58561	0.33734	Biso	1	C	0.629964
C90	1	0.9122	0.58928	0.29635	Biso	1	C	-0.187845
C91	1	0.9454	0.5247	0.2734	Biso	1	C	-0.07354
H46	1	0.924	0.4795	0.2838	Biso	1	H	0.125262
C92	1	0.0099	0.52706	0.2354	Biso	1	C	-0.150055
H47	1	0.0317	0.4835	0.2204	Biso	1	H	0.125218
C93	1	0.04238	0.59439	0.21922	Biso	1	C	-0.002823
C94	1	0.01002	0.6584	0.24214	Biso	1	C	-0.243897
H48	1	0.0317	0.7035	0.2319	Biso	1	H	0.150181
C95	1	0.9451	0.65631	0.28052	Biso	1	C	0.332149
C96	1	0.11145	0.59602	0.17518	Biso	1	C	0.612614
Mn13	1	0.22371	0.80666	0.58938	Biso	1	Mn	1.026324
Mn14	1	0.22053	0.0086	0.59417	Biso	1	Mn	0.983874
O61	1	0.23449	0.11601	0.63491	Biso	1	O	-0.550736
O62	1	0.31773	0.97623	0.64579	Biso	1	O	-0.524296
O63	1	0.22958	0.99722	0.98788	Biso	1	O	-0.516889
O64	1	0.64147	0.96458	0.83741	Biso	1	O	-0.582408
O65	1	0.28815	0.0964	0.02109	Biso	1	O	-0.611688
O66	1	0.63283	0.84296	0.84648	Biso	1	O	-0.542674
O67	1	0.27644	0.22264	0.67102	Biso	1	O	-0.566426
O68	1	0.31121	0.85416	0.64813	Biso	1	O	-0.58253
O69	1	0.3162	0.24411	0.79935	Biso	1	O	-0.479711
H49	1	0.3156	0.2524	0.7566	Biso	1	H	0.392374
O70	1	0.4147	0.7787	0.7004	Biso	1	O	-0.490961
H50	1	0.3758	0.7863	0.6801	Biso	1	H	0.385927
C97	1	0.25382	0.15846	0.68274	Biso	1	C	0.632194
C98	1	0.25136	0.13574	0.75903	Biso	1	C	-0.180776
C99	1	0.2167	0.07127	0.77816	Biso	1	C	-0.076413
H51	1	0.1931	0.0435	0.7436	Biso	1	H	0.114283
C100	1	0.2163	0.04695	0.84828	Biso	1	C	-0.134662

H52	1	0.193	0.0031	0.8602	Biso	1	H	0.132113			
C101	1	0.2507	0.08826		0.89994		Biso	1	C	-0.004339	
C102	1	0.28366		0.15446		0.88221		Biso	1	C	-0.265522
H53	1	0.3058	0.1828	0.9173	Biso	1	H	0.138177			
C103	1	0.28382		0.17883		0.81219		Biso	1	C	0.337176
C104	1	0.25542		0.05991		0.97402		Biso	1	C	0.582202
C105	1	0.34118		0.91439		0.66266		Biso	1	C	0.625769
C106	1	0.4122	0.91072		0.70365		Biso	1	C	-0.186045	
C107	1	0.4454	0.9753	0.7266	Biso	1	C	-0.075564			
H54	1	0.424	0.0205	0.7162	Biso	1	H	0.125673			
C108	1	0.5099	0.97294		0.7646	Biso	1	C	-0.148854		
H55	1	0.5317	0.0165	0.7796	Biso	1	H	0.125142			
C109	1	0.54238		0.90561		0.78078		Biso	1	C	-0.003501
C110	1	0.51002		0.8416	0.75786		Biso	1	C	-0.243724	
H56	1	0.5317	0.7965	0.7681	Biso	1	H	0.149963			
C111	1	0.4451	0.84369		0.71948		Biso	1	C	0.331515	
C112	1	0.61145		0.90398		0.82482		Biso	1	C	0.618962
Mn15	1	0.27629		0.19334		0.08938		Biso	1	Mn	1.039244
Mn16	1	0.27947		0.9914	0.09417		Biso	1	Mn	1.080731	
O71	1	0.26551		0.88399		0.13491		Biso	1	O	-0.576995
O72	1	0.18227		0.02377		0.14579		Biso	1	O	-0.555337
O73	1	0.27042		0.00278		0.48788		Biso	1	O	-0.49053
O74	1	0.85853		0.03542		0.33741		Biso	1	O	-0.551221
O75	1	0.21185		0.9036	0.52109		Biso	1	O	-0.587114	
O76	1	0.86717		0.15704		0.34648		Biso	1	O	-0.53054
O77	1	0.22356		0.77736		0.17102		Biso	1	O	-0.568202
O78	1	0.18879		0.14584		0.14813		Biso	1	O	-0.597264
O79	1	0.1838	0.75589		0.29935		Biso	1	O	-0.479631	
H57	1	0.1844	0.7476	0.2566	Biso	1	H	0.392688			
O80	1	0.0853	0.2213	0.2004	Biso	1	O	-0.491236			
H58	1	0.1242	0.2137	0.1801	Biso	1	H	0.386274			
C113	1	0.24618		0.84154		0.18274		Biso	1	C	0.636672
C114	1	0.24864		0.86426		0.25903		Biso	1	C	-0.179608
C115	1	0.2833	0.92873		0.27816		Biso	1	C	-0.074957	
H59	1	0.3069	0.9565	0.2436	Biso	1	H	0.114318			
C116	1	0.2837	0.95305		0.34828		Biso	1	C	-0.135131	
H60	1	0.307	0.9969	0.3602	Biso	1	H	0.132048			
C117	1	0.2493	0.91174		0.39994		Biso	1	C	-0.007141	
C118	1	0.21634		0.84554		0.38221		Biso	1	C	-0.266433
H61	1	0.1942	0.8172	0.4173	Biso	1	H	0.137595			
C119	1	0.21618		0.82117		0.31219		Biso	1	C	0.337789
C120	1	0.24458		0.94009		0.47402		Biso	1	C	0.576723
C121	1	0.15882		0.08561		0.16266		Biso	1	C	0.630304
C122	1	0.0878	0.08928		0.20365		Biso	1	C	-0.185851	
C123	1	0.0546	0.0247	0.2266	Biso	1	C	-0.073648			
H62	1	0.076	0.9795	0.2162	Biso	1	H	0.125593			
C124	1	0.9901	0.02706		0.2646	Biso	1	C	-0.149907		
H63	1	0.9683	0.9835	0.2796	Biso	1	H	0.12448			
C125	1	0.95762		0.09439		0.28078		Biso	1	C	-0.005901
C126	1	0.98998		0.1584	0.25786		Biso	1	C	-0.243924	
H64	1	0.9683	0.2035	0.2681	Biso	1	H	0.149532			
C127	1	0.0549	0.15631		0.21948		Biso	1	C	0.332558	

C128 1 0.88855 0.09602 0.32482 Biso 1 C 0.614157

```

data_LIXWAR_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            11.2232
_cell_length_b            11.2232
_cell_length_c            21.2550
_cell_angle_alpha         95.8060
_cell_angle_beta          95.8060
_cell_angle_gamma         106.9850
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1  Mn   0.00036 0.48284 0.1921 0.01267 Uiso  1  0.959748
Mn2  Mn   0.51716 0.99964 0.3079 0.01267 Uiso  1  1.079412
Mn3  Mn   0.99964 0.51716 0.8079 0.01267 Uiso  1  0.950307
Mn4  Mn   0.48284 0.00036 0.6921 0.01267 Uiso  1  0.925324
Mn5  Mn   0.74737 0.25263 0.25  0.01267 Uiso  1  1.124756
Mn6  Mn   0.25263 0.74737 0.75  0.01267 Uiso  1  1.050599
H1   H    0.7565 0.4697 0.4934 0.01267 Uiso  1  0.107285
H2   H    0.8482 0.4522 0.391  0.01267 Uiso  1  0.127601
H3   H    0.7674 0.9804 0.0945 0.01267 Uiso  1  0.111784
H4   H    0.7768 0.844  0.0092 0.01267 Uiso  1  0.119104
H5   H    0.1051 0.2135 0.0769 0.01267 Uiso  1  0.125337
H6   H    0.6706 0.5636 0.9225 0.01267 Uiso  1  0.126319
H7   H    0.7375 0.5089 0.0287 0.01267 Uiso  1  0.130964
H8   H    0.2187 0.5053 0.3976 0.01267 Uiso  1  0.122577
H9   H    0.4826 0.4036 0.1473 0.01267 Uiso  1  0.128718
H10  H    0.5303 0.2435 0.0066 0.01267 Uiso  1  0.10575
H11  H    0.5478 0.1518 0.109  0.01267 Uiso  1  0.126772
H12  H    0.0196 0.2326 0.4055 0.01267 Uiso  1  0.109852
H13  H    0.156  0.2232 0.4908 0.01267 Uiso  1  0.118018
H14  H    0.7865 0.8949 0.4231 0.01267 Uiso  1  0.124067
H15  H    0.4364 0.3294 0.5775 0.01267 Uiso  1  0.12694
H16  H    0.4911 0.2625 0.4713 0.01267 Uiso  1  0.131435
H17  H    0.4947 0.7813 0.1024 0.01267 Uiso  1  0.121779
H18  H    0.5964 0.5174 0.3527 0.01267 Uiso  1  0.128338
H19  H    0.2435 0.5303 0.5066 0.01267 Uiso  1  0.106771
H20  H    0.1518 0.5478 0.609  0.01267 Uiso  1  0.126845

```

H21	H	0.2326	0.0196	0.9055	0.01267	Uiso	1	0.111989
H22	H	0.2232	0.156	0.9908	0.01267	Uiso	1	0.119533
H23	H	0.8949	0.7865	0.9231	0.01267	Uiso	1	0.125308
H24	H	0.3294	0.4364	0.0775	0.01267	Uiso	1	0.126198
H25	H	0.2625	0.4911	0.9713	0.01267	Uiso	1	0.131056
H26	H	0.7813	0.4947	0.6024	0.01267	Uiso	1	0.122456
H27	H	0.5174	0.5964	0.8527	0.01267	Uiso	1	0.128718
H28	H	0.4697	0.7565	0.9934	0.01267	Uiso	1	0.105468
H29	H	0.4522	0.8482	0.891	0.01267	Uiso	1	0.125596
H30	H	0.9804	0.7674	0.5945	0.01267	Uiso	1	0.109748
H31	H	0.844	0.7768	0.5092	0.01267	Uiso	1	0.117901
H32	H	0.2135	0.1051	0.5769	0.01267	Uiso	1	0.125198
H33	H	0.5636	0.6706	0.4225	0.01267	Uiso	1	0.125709
H34	H	0.5089	0.7375	0.5287	0.01267	Uiso	1	0.131268
H35	H	0.5053	0.2187	0.8976	0.01267	Uiso	1	0.121435
H36	H	0.4036	0.4826	0.6473	0.01267	Uiso	1	0.128203
C1	C	0.9395	0.4881	0.48252	0.01267	Uiso	1	0.085226
C2	C	0.9505	0.9445	0.98965	0.01267	Uiso	1	0.082361
C3	C	0.0162	0.4648	0.31263	0.01267	Uiso	1	0.588671
C4	C	0.8358	0.4836	0.5161	0.01267	Uiso	1	-0.136921
C5	C	0.9272	0.4698	0.41459	0.01267	Uiso	1	-0.154561
C6	C	0.8376	0.9994	0.0731	0.01267	Uiso	1	-0.111277
C7	C	0.0283	0.4773	0.38374	0.01267	Uiso	1	-0.014626
C8	C	0.843	0.9174	0.0224	0.01267	Uiso	1	-0.149937
C9	C	0.7229	0.4219	0.1395	0.01267	Uiso	1	0.597631
C10	C	0.9243	0.2041	0.1481	0.01267	Uiso	1	0.614866
C11	C	0.0399	0.1393	0.063	0.01267	Uiso	1	-0.178659
C12	C	0.9348	0.1116	0.09377	0.01267	Uiso	1	-0.02335
C13	C	0.5898	0.5506	0.9332	0.01267	Uiso	1	-0.147026
C14	C	0.6554	0.4926	0.0378	0.01267	Uiso	1	-0.174293
C15	C	0.1495	0.5007	0.4189	0.01267	Uiso	1	-0.118364
C16	C	0.5617	0.5113	0.9924	0.01267	Uiso	1	0.082748
C17	C	0.6263	0.4513	0.0941	0.01267	Uiso	1	-0.019619
C18	C	0.5022	0.4306	0.1086	0.01267	Uiso	1	-0.109595
C19	C	0.5119	0.0605	0.01748	0.01267	Uiso	1	0.081711
C20	C	0.0555	0.0495	0.51035	0.01267	Uiso	1	0.082582
C21	C	0.5352	0.9838	0.18737	0.01267	Uiso	1	0.592249
C22	C	0.5164	0.1642	0.9839	0.01267	Uiso	1	-0.140865
C23	C	0.5302	0.0728	0.08541	0.01267	Uiso	1	-0.156438
C24	C	0.0006	0.1624	0.4269	0.01267	Uiso	1	-0.112586
C25	C	0.5227	0.9717	0.11626	0.01267	Uiso	1	-0.01847
C26	C	0.0826	0.157	0.4776	0.01267	Uiso	1	-0.153567
C27	C	0.5781	0.2771	0.3605	0.01267	Uiso	1	0.601682
C28	C	0.7959	0.0757	0.3519	0.01267	Uiso	1	0.619973
C29	C	0.8607	0.9601	0.437	0.01267	Uiso	1	-0.178638
C30	C	0.8884	0.0652	0.40623	0.01267	Uiso	1	-0.029452
C31	C	0.4494	0.4102	0.5668	0.01267	Uiso	1	-0.14753
C32	C	0.5074	0.3446	0.4622	0.01267	Uiso	1	-0.172964
C33	C	0.4993	0.8505	0.0811	0.01267	Uiso	1	-0.119313
C34	C	0.4887	0.4383	0.5076	0.01267	Uiso	1	0.081168
C35	C	0.5487	0.3737	0.4059	0.01267	Uiso	1	-0.022286
C36	C	0.5694	0.4978	0.3914	0.01267	Uiso	1	-0.110894

C37	C	0.0605	0.5119	0.51748	0.01267	Uiso	1	0.083556
C38	C	0.0495	0.0555	0.01035	0.01267	Uiso	1	0.082118
C39	C	0.9838	0.5352	0.68737	0.01267	Uiso	1	0.589758
C40	C	0.1642	0.5164	0.4839	0.01267	Uiso	1	-0.137717
C41	C	0.0728	0.5302	0.58541	0.01267	Uiso	1	-0.153285
C42	C	0.1624	0.0006	0.9269	0.01267	Uiso	1	-0.113435
C43	C	0.9717	0.5227	0.61626	0.01267	Uiso	1	-0.019432
C44	C	0.157	0.0826	0.9776	0.01267	Uiso	1	-0.147973
C45	C	0.2771	0.5781	0.8605	0.01267	Uiso	1	0.595592
C46	C	0.0757	0.7959	0.8519	0.01267	Uiso	1	0.609926
C47	C	0.9601	0.8607	0.937	0.01267	Uiso	1	-0.17712
C48	C	0.0652	0.8884	0.90623	0.01267	Uiso	1	-0.025688
C49	C	0.4102	0.4494	0.0668	0.01267	Uiso	1	-0.148976
C50	C	0.3446	0.5074	0.9622	0.01267	Uiso	1	-0.172206
C51	C	0.8505	0.4993	0.5811	0.01267	Uiso	1	-0.118187
C52	C	0.4383	0.4887	0.0076	0.01267	Uiso	1	0.082365
C53	C	0.3737	0.5487	0.9059	0.01267	Uiso	1	-0.021686
C54	C	0.4978	0.5694	0.8914	0.01267	Uiso	1	-0.112572
C55	C	0.4881	0.9395	0.98252	0.01267	Uiso	1	0.084226
C56	C	0.9445	0.9505	0.48965	0.01267	Uiso	1	0.08023
C57	C	0.4648	0.0162	0.81263	0.01267	Uiso	1	0.581714
C58	C	0.4836	0.8358	0.0161	0.01267	Uiso	1	-0.142792
C59	C	0.4698	0.9272	0.91459	0.01267	Uiso	1	-0.162688
C60	C	0.9994	0.8376	0.5731	0.01267	Uiso	1	-0.117578
C61	C	0.4773	0.0283	0.88374	0.01267	Uiso	1	-0.015857
C62	C	0.9174	0.843	0.5224	0.01267	Uiso	1	-0.150489
C63	C	0.4219	0.7229	0.6395	0.01267	Uiso	1	0.59112
C64	C	0.2041	0.9243	0.6481	0.01267	Uiso	1	0.602057
C65	C	0.1393	0.0399	0.563	0.01267	Uiso	1	-0.181879
C66	C	0.1116	0.9348	0.59377	0.01267	Uiso	1	-0.022735
C67	C	0.5506	0.5898	0.4332	0.01267	Uiso	1	-0.150429
C68	C	0.4926	0.6554	0.5378	0.01267	Uiso	1	-0.174506
C69	C	0.5007	0.1495	0.9189	0.01267	Uiso	1	-0.120507
C70	C	0.5113	0.5617	0.4924	0.01267	Uiso	1	0.082344
C71	C	0.4513	0.6263	0.5941	0.01267	Uiso	1	-0.021453
C72	C	0.4306	0.5022	0.6086	0.01267	Uiso	1	-0.114368
O1	O	0.90812	0.42148	0.27969	0.01267	Uiso	1	-0.569319
O2	O	0.0105	0.3069	0.15941	0.01267	Uiso	1	-0.55831
O3	O	0.83236	0.17064	0.17776	0.01267	Uiso	1	-0.561033
O4	O	0.112	0.5052	0.28674	0.01267	Uiso	1	-0.520801
O5	O	0.8355	0.4579	0.12953	0.01267	Uiso	1	-0.558645
O6	O	0.6821	0.3605	0.18351	0.01267	Uiso	1	-0.551533
O7	O	0.57852	0.09188	0.22031	0.01267	Uiso	1	-0.59785
O8	O	0.6931	0.9895	0.34059	0.01267	Uiso	1	-0.595183
O9	O	0.82936	0.16764	0.32224	0.01267	Uiso	1	-0.568318
O10	O	0.4948	0.888	0.21326	0.01267	Uiso	1	-0.541835
O11	O	0.5421	0.1645	0.37047	0.01267	Uiso	1	-0.586751
O12	O	0.6395	0.3179	0.31649	0.01267	Uiso	1	-0.555111
O13	O	0.09188	0.57852	0.72031	0.01267	Uiso	1	-0.553994
O14	O	0.9895	0.6931	0.84059	0.01267	Uiso	1	-0.548306
O15	O	0.16764	0.82936	0.82224	0.01267	Uiso	1	-0.52066
O16	O	0.888	0.4948	0.71326	0.01267	Uiso	1	-0.512109

O17	O	0.1645	0.5421	0.87047	0.01267	Uiso	1	-0.555578
O18	O	0.3179	0.6395	0.81649	0.01267	Uiso	1	-0.515193
O19	O	0.42148	0.90812	0.77969	0.01267	Uiso	1	-0.572732
O20	O	0.3069	0.0105	0.65941	0.01267	Uiso	1	-0.560512
O21	O	0.17064	0.83236	0.67776	0.01267	Uiso	1	-0.530104
O22	O	0.5052	0.112	0.78674	0.01267	Uiso	1	-0.520345
O23	O	0.4579	0.8355	0.62953	0.01267	Uiso	1	-0.548873
O24	O	0.3605	0.6821	0.68351	0.01267	Uiso	1	-0.520174

data_ZEFIV_CLEAN

_cell_length_a 22.839
_cell_length_b 22.839
_cell_length_c 33.078
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Zn1	1	0.42361	0.041	0.60736	Biso	1	Zn	0.9261389999999999
Na1	1	0.46916	0.93363	0.55716	Biso	1	Na	0.844583
Na2	1	0.46039	0.89118	0.4572	Biso	1	Na	0.842158
C1	1	0.8064	0.2693	0.34576	Biso	1	C	0.010946
C2	1	0.774	0.272	0.38337	Biso	1	C	-0.214167
H1	1	0.7387	0.2524	0.3866	Biso	1	H	0.138074
C3	1	0.7983	0.3055	0.41451	Biso	1	C	0.278736
C4	1	0.8515	0.3338	0.40965	Biso	1	C	-0.213962
H2	1	0.8667	0.3562	0.4307	Biso	1	H	0.12112
C5	1	0.8827	0.3291	0.3734	Biso	1	C	0.016832
C6	1	0.8589	0.2987	0.34205	Biso	1	C	-0.13027
H3	1	0.8786	0.2978	0.3175	Biso	1	H	0.142754
C7	1	0.51093	0.08855	0.50124	Biso	1	C	0.017076
C8	1	0.5529	0.1309	0.49456	Biso	1	C	-0.210313
H4	1	0.5641	0.1558	0.5154	Biso	1	H	0.133072
C9	1	0.5782	0.1364	0.4572	Biso	1	C	0.267799
C10	1	0.5609	0.0965	0.42599	Biso	1	C	-0.188695
H5	1	0.5789	0.0984	0.4008	Biso	1	H	0.147318
C11	1	0.51774	0.05533	0.43282	Biso	1	C	0.012062
C12	1	0.49352	0.05167	0.47017	Biso	1	C	-0.126217
H6	1	0.4646	0.0239	0.475	Biso	1	H	0.119278
C13	1	0.50164	0.01575	0.39858	Biso	1	C	0.58995
C14	1	0.48526	0.0851	0.544	Biso	1	C	0.581781
C15	1	0.93992	0.3619	0.36769	Biso	1	C	0.607516
C16	1	0.779	0.2365	0.31096	Biso	1	C	0.551987
C17	1	0.7259	0.2811	0.46992	Biso	1	C	0.539697
C18	1	0.6556	0.2133	0.46964	Biso	1	C	0.553218

C19	1	0.6772	0.2613	0.52704	Biso	1	C	0.554937	
C20	1	0.8303	0.3905	0.61522	Biso	1	C	0.605622	
C21	1	0.7683	0.3654	0.61989	Biso	1	C	0.013854	
C22	1	0.7328	0.3825	0.65429	Biso	1	C	-0.139596	
H7	1	0.7491	0.4053	0.6747	Biso	1	H	0.154563	
C23	1	0.6783	0.3661	0.6567	Biso	1	C	-0.007911	
C24	1	0.7434	0.3315	0.59094	Biso	1	C	-0.220319	
H8	1	0.7657	0.3228	0.5682	Biso	1	H	0.133777	
C25	1	0.6551	0.3318	0.6236	Biso	1	C	-0.20958	
H9	1	0.615	0.3249	0.6233	Biso	1	H	0.131118	
C26	1	0.6873	0.3088	0.59284	Biso	1	C	0.288064	
C27	1	0.6346	0.3845	0.6884	Biso	1	C	0.479101	
N1	1	0.7729	0.3102	0.4532	Biso	1	N	-0.367965	
H10	1	0.7894	0.3352	0.4689	Biso	1	H	0.310021	
N2	1	0.718	0.2934	0.50997	Biso	1	N	-0.5074	
N3	1	0.6984	0.2404	0.44836	Biso	1	N	-0.50524	
N4	1	0.6211	0.1795	0.44574	Biso	1	N	-0.370333	
H11	1	0.6255	0.1845	0.4202	Biso	1	H	0.320591	
N5	1	0.64059	0.2236	0.5075	Biso	1	N	-0.516802	
N6	1	0.6629	0.2713	0.56602	Biso	1	N	-0.359173	
H12	1	0.6341	0.2508	0.5751	Biso	1	H	0.319496	
O1	1	0.52638	0.0224	0.3658	Biso	1	O	-0.53778	
O2	1	0.5383	0.91672	0.50575	Biso	1	O	-0.304652	
O3	1	0.46519	0.97558	0.40521	Biso	1	O	-0.602438	
O4	1	0.4947	0.8414	0.5882	Biso	1	O	-0.573317	
H13	1	0.4883	0.8146	0.5722	Biso	1	H	0.368724	
O5	1	0.49266	0.12199	0.569	Biso	1	O	-0.440496	
O6	1	0.3918	0.93392	0.50197	Biso	1	O	-0.285519	
O7	1	0.45387	0.03953	0.55013	Biso	1	O	-0.594422	
O8	1	0.96894	0.35395	0.33573	Biso	1	O	-0.590408	
O9	1	0.95904	0.38938	0.39758	Biso	1	O	-0.589887	
O10	1	0.85295	0.41121	0.64639	Biso	1	O	-0.527616	
O11	1	0.85262	0.39018	0.58153	Biso	1	O	-0.602538	
O12	1	0.737	0.2086	0.31607	Biso	1	O	-0.355935	
O13	1	0.8082	0.239	0.28002	Biso	1	O	-0.307107	
O14	1	0.5875	0.3614	0.69406	Biso	1	O	-0.339713	
O15	1	0.6619	0.4141	0.7178	Biso	1	O	-0.186142	
Zn2	1	0.57639	0.959	0.10736	Biso	1	Zn	0.926395	
Na3	1	0.53084	0.06637	0.05716	Biso	1	Na	0.845235	
Na4	1	0.53961	0.10882	0.9572	Biso	1	Na	0.841621	
C28	1	0.1936	0.7307	0.84576	Biso	1	C	0.012245	
C29	1	0.226	0.728	0.88337	Biso	1	C	-0.211305	
H14	1	0.2613	0.7476	0.8866	Biso	1	H	0.13877	
C30	1	0.2017	0.6945	0.91451	Biso	1	C	0.276226	
C31	1	0.1485	0.6662	0.90965	Biso	1	C	-0.211915	
H15	1	0.1333	0.6438	0.9307	Biso	1	H	0.122251	
C32	1	0.1173	0.6709	0.8734	Biso	1	C	0.018766	
C33	1	0.1411	0.7013	0.84205	Biso	1	C	-0.123085	
H16	1	0.1214	0.7022	0.8175	Biso	1	H	0.140998	
C34	1	0.48907	0.91145	0.00124	Biso	1	C	0.014575	
C35	1	0.4471	0.8691	0.99456	Biso	1	C	-0.208628	
H17	1	0.4359	0.8442	0.0154	Biso	1	H	0.132827	

C36	1	0.4218	0.8636	0.9572	Biso	1	C	0.26799	
C37	1	0.4391	0.9035	0.92599	Biso	1	C	-0.189813	
H18	1	0.4211	0.9016	0.9008	Biso	1	H	0.147649	
C38	1	0.48226		0.94467	0.93282	Biso	1	C	0.012559
C39	1	0.50648		0.94833	0.97017	Biso	1	C	-0.1277
H19	1	0.5354	0.9761	0.975	Biso	1	H	0.119965	
C40	1	0.49836		0.98425	0.89858	Biso	1	C	0.592458
C41	1	0.51474		0.9149	0.044	Biso	1	C	0.584817
C42	1	0.06008		0.6381	0.86769	Biso	1	C	0.6058
C43	1	0.221	0.7635	0.81096	Biso	1	C	0.555082	
C44	1	0.2741	0.7189	0.96992	Biso	1	C	0.537993	
C45	1	0.3444	0.7867	0.96964	Biso	1	C	0.55558	
C46	1	0.3228	0.7387	0.02704	Biso	1	C	0.555476	
C47	1	0.1697	0.6095	0.11522	Biso	1	C	0.604194	
C48	1	0.2317	0.6346	0.11989	Biso	1	C	0.016248	
C49	1	0.2672	0.6175	0.15429	Biso	1	C	-0.123579	
H20	1	0.2509	0.5947	0.1747	Biso	1	H	0.140168	
C50	1	0.3217	0.6339	0.1567	Biso	1	C	-0.00876	
C51	1	0.2566	0.6685	0.09094	Biso	1	C	-0.213506	
H21	1	0.2343	0.6772	0.0682	Biso	1	H	0.124618	
C52	1	0.3449	0.6682	0.1236	Biso	1	C	-0.20822	
H22	1	0.385	0.6751	0.1233	Biso	1	H	0.131447	
C53	1	0.3127	0.6912	0.09284	Biso	1	C	0.290126	
C54	1	0.3654	0.6155	0.1884	Biso	1	C	0.477684	
N7	1	0.2271	0.6898	0.9532	Biso	1	N	-0.358211	
H23	1	0.2106	0.6648	0.9689	Biso	1	H	0.310161	
N8	1	0.282	0.7066	0.00997	Biso	1	N	-0.50942	
N9	1	0.3016	0.7596	0.94836	Biso	1	N	-0.504469	
N10	1	0.3789	0.8205	0.94574	Biso	1	N	-0.37024	
H24	1	0.3745	0.8155	0.9202	Biso	1	H	0.320599	
N11	1	0.35941		0.7764	0.0075	Biso	1	N	-0.52367
N12	1	0.3371	0.7287	0.06602	Biso	1	N	-0.356048	
H25	1	0.3659	0.7492	0.0751	Biso	1	H	0.320238	
O16	1	0.47362		0.9776	0.8658	Biso	1	O	-0.539057
O17	1	0.4617	0.08328		0.00575	Biso	1	O	-0.302065
O18	1	0.53481		0.02442	0.90521	Biso	1	O	-0.604648
O19	1	0.5053	0.1586	0.0882	Biso	1	O	-0.572611	
H26	1	0.5117	0.1854	0.0722	Biso	1	H	0.368432	
O20	1	0.50734		0.87801	0.069	Biso	1	O	-0.441575
O21	1	0.6082	0.06608		0.00197	Biso	1	O	-0.283837
O22	1	0.54613		0.96047	0.05013	Biso	1	O	-0.596988
O23	1	0.03106		0.64605	0.83573	Biso	1	O	-0.591556
O24	1	0.04096		0.61062	0.89758	Biso	1	O	-0.587786
O25	1	0.14705		0.58879	0.14639	Biso	1	O	-0.524516
O26	1	0.14738		0.60982	0.08153	Biso	1	O	-0.600134
O27	1	0.263	0.7914	0.81607	Biso	1	O	-0.364663	
O28	1	0.1918	0.761	0.78002	Biso	1	O	-0.31118	
O29	1	0.4125	0.6386	0.19406	Biso	1	O	-0.337317	
O30	1	0.3381	0.5859	0.2178	Biso	1	O	-0.188461	
Zn3	1	0.459	0.92361		0.35736	Biso	1	Zn	0.929997
Na5	1	0.56637		0.96916	0.30716	Biso	1	Na	0.84374
Na6	1	0.60882		0.96039	0.2072	Biso	1	Na	0.841842

C55	1	0.2307	0.3064	0.09576	Biso	1	C	0.015003	
C56	1	0.228	0.274	0.13337	Biso	1	C	-0.216153	
H27	1	0.2476	0.2387	0.1366	Biso	1	H	0.138616	
C57	1	0.1945	0.2983	0.16451	Biso	1	C	0.279045	
C58	1	0.1662	0.3515	0.15965	Biso	1	C	-0.21398	
H28	1	0.1438	0.3667	0.1807	Biso	1	H	0.119184	
C59	1	0.1709	0.3827	0.1234	Biso	1	C	0.016325	
C60	1	0.2013	0.3589	0.09205	Biso	1	C	-0.129017	
H29	1	0.2022	0.3786	0.0675	Biso	1	H	0.142082	
C61	1	0.41145		0.01093	0.25124	Biso	1	C	0.0155
C62	1	0.3691	0.0529	0.24456	Biso	1	C	-0.211722	
H30	1	0.3442	0.0641	0.2654	Biso	1	H	0.135017	
C63	1	0.3636	0.0782	0.2072	Biso	1	C	0.270638	
C64	1	0.4035	0.0609	0.17599	Biso	1	C	-0.190307	
H31	1	0.4016	0.0789	0.1508	Biso	1	H	0.14902	
C65	1	0.44467		0.01774	0.18282	Biso	1	C	0.009502
C66	1	0.44833		0.99352	0.22017	Biso	1	C	-0.129238
H32	1	0.4761	0.9646	0.225	Biso	1	H	0.123425	
C67	1	0.48425		0.00164	0.14858	Biso	1	C	0.588062
C68	1	0.4149	0.98526		0.294	Biso	1	C	0.580322
C69	1	0.1381	0.43992		0.11769	Biso	1	C	0.60485
C70	1	0.2635	0.279	0.06096	Biso	1	C	0.556493	
C71	1	0.2189	0.2259	0.21992	Biso	1	C	0.538673	
C72	1	0.2867	0.1556	0.21964	Biso	1	C	0.552494	
C73	1	0.2387	0.1772	0.27704	Biso	1	C	0.551253	
C74	1	0.1095	0.3303	0.36522	Biso	1	C	0.605957	
C75	1	0.1346	0.2683	0.36989	Biso	1	C	0.014931	
C76	1	0.1175	0.2328	0.40429	Biso	1	C	-0.139275	
H33	1	0.0947	0.2491	0.4247	Biso	1	H	0.15462	
C77	1	0.1339	0.1783	0.4067	Biso	1	C	-0.008978	
C78	1	0.1685	0.2434	0.34094	Biso	1	C	-0.214829	
H34	1	0.1772	0.2657	0.3182	Biso	1	H	0.124706	
C79	1	0.1682	0.1551	0.3736	Biso	1	C	-0.208304	
H35	1	0.1751	0.115	0.3733	Biso	1	H	0.130595	
C80	1	0.1912	0.1873	0.34284	Biso	1	C	0.288447	
C81	1	0.1155	0.1346	0.4384	Biso	1	C	0.478914	
N13	1	0.1898	0.2729	0.2032	Biso	1	N	-0.3643	
H36	1	0.1648	0.2894	0.2189	Biso	1	H	0.307995	
N14	1	0.2066	0.218	0.25997	Biso	1	N	-0.50453	
N15	1	0.2596	0.1984	0.19836	Biso	1	N	-0.504182	
N16	1	0.3205	0.1211	0.19574	Biso	1	N	-0.371843	
H37	1	0.3155	0.1255	0.1702	Biso	1	H	0.321517	
N17	1	0.2764	0.14059		0.2575	Biso	1	N	-0.51563
N18	1	0.2287	0.1629	0.31602	Biso	1	N	-0.358061	
H38	1	0.2492	0.1341	0.3251	Biso	1	H	0.318904	
O31	1	0.4776	0.02638		0.1158	Biso	1	O	-0.542686
O32	1	0.58328		0.0383	0.25575	Biso	1	O	-0.291373
O33	1	0.52442		0.96519	0.15521	Biso	1	O	-0.600261
O34	1	0.6586	0.9947	0.3382	Biso	1	O	-0.580962	
H39	1	0.6854	0.9883	0.3222	Biso	1	H	0.369282	
O35	1	0.37801		0.99266	0.319	Biso	1	O	-0.436684
O36	1	0.56608		0.8918	0.25197	Biso	1	O	-0.283124

O37	1	0.46047	0.95387	0.30013	Biso	1	O	-0.597792
O38	1	0.14605	0.46894	0.08573	Biso	1	O	-0.585608
O39	1	0.11062	0.45904	0.14758	Biso	1	O	-0.583112
O40	1	0.08879	0.35295	0.39639	Biso	1	O	-0.528455
O41	1	0.10982	0.35262	0.33153	Biso	1	O	-0.599354
O42	1	0.2914	0.237	0.06607	Biso	1	O	-0.365377
O43	1	0.261	0.3082	0.03002	Biso	1	O	-0.312692
O44	1	0.1386	0.0875	0.44406	Biso	1	O	-0.339094
O45	1	0.0859	0.1619	0.4678	Biso	1	O	-0.190184
Zn4	1	0.541	0.07639	0.85736	Biso	1	Zn	0.930079
Na7	1	0.43363	0.03084	0.80716	Biso	1	Na	0.843676
Na8	1	0.39118	0.03961	0.7072	Biso	1	Na	0.841693
C82	1	0.7693	0.6936	0.59576	Biso	1	C	0.014733
C83	1	0.772	0.726	0.63337	Biso	1	C	-0.212368
H40	1	0.7524	0.7613	0.6366	Biso	1	H	0.138345
C84	1	0.8055	0.7017	0.66451	Biso	1	C	0.280198
C85	1	0.8338	0.6485	0.65965	Biso	1	C	-0.215614
H41	1	0.8562	0.6333	0.6807	Biso	1	H	0.121301
C86	1	0.8291	0.6173	0.6234	Biso	1	C	0.01723
C87	1	0.7987	0.6411	0.59205	Biso	1	C	-0.131703
H42	1	0.7978	0.6214	0.5675	Biso	1	H	0.143999
C88	1	0.58855	0.98907	0.75124	Biso	1	C	0.017766
C89	1	0.6309	0.9471	0.74456	Biso	1	C	-0.212386
H43	1	0.6558	0.9359	0.7654	Biso	1	H	0.134443
C90	1	0.6364	0.9218	0.7072	Biso	1	C	0.270546
C91	1	0.5965	0.9391	0.67599	Biso	1	C	-0.191573
H44	1	0.5984	0.9211	0.6508	Biso	1	H	0.149477
C92	1	0.55533	0.98226	0.68282	Biso	1	C	0.008989
C93	1	0.55167	0.00648	0.72017	Biso	1	C	-0.131232
H45	1	0.5239	0.0354	0.725	Biso	1	H	0.123586
C94	1	0.51575	0.99836	0.64858	Biso	1	C	0.589546
C95	1	0.5851	0.01474	0.794	Biso	1	C	0.578309
C96	1	0.8619	0.56008	0.61769	Biso	1	C	0.60631
C97	1	0.7365	0.721	0.56096	Biso	1	C	0.555746
C98	1	0.7811	0.7741	0.71992	Biso	1	C	0.538122
C99	1	0.7133	0.8444	0.71964	Biso	1	C	0.553131
C100	1	0.7613	0.8228	0.77704	Biso	1	C	0.552665
C101	1	0.8905	0.6697	0.86522	Biso	1	C	0.605168
C102	1	0.8654	0.7317	0.86989	Biso	1	C	0.014383
C103	1	0.8825	0.7672	0.90429	Biso	1	C	-0.140648
H46	1	0.9053	0.7509	0.9247	Biso	1	H	0.154689
C104	1	0.8661	0.8217	0.9067	Biso	1	C	-0.004521
C105	1	0.8315	0.7566	0.84094	Biso	1	C	-0.211348
H47	1	0.8228	0.7343	0.8182	Biso	1	H	0.123817
C106	1	0.8318	0.8449	0.8736	Biso	1	C	-0.208498
H48	1	0.8249	0.885	0.8733	Biso	1	H	0.130289
C107	1	0.8088	0.8127	0.84284	Biso	1	C	0.285828
C108	1	0.8845	0.8654	0.9384	Biso	1	C	0.478301
N19	1	0.8102	0.7271	0.7032	Biso	1	N	-0.364156
H49	1	0.8352	0.7106	0.7189	Biso	1	H	0.308061
N20	1	0.7934	0.782	0.75997	Biso	1	N	-0.504814
N21	1	0.7404	0.8016	0.69836	Biso	1	N	-0.504951

N22	1	0.6795	0.8789	0.69574	Biso	1	N	-0.372429	
H50	1	0.6845	0.8745	0.6702	Biso	1	H	0.320805	
N23	1	0.7236	0.85941	0.7575	Biso	1	N	-0.516903	
N24	1	0.7713	0.8371	0.81602	Biso	1	N	-0.354852	
H51	1	0.7508	0.8659	0.8251	Biso	1	H	0.318312	
O46	1	0.5224	0.97362	0.6158	Biso	1	O	-0.543425	
O47	1	0.41672	0.9617	0.75575	Biso	1	O	-0.290193	
O48	1	0.47558	0.03481	0.65521	Biso	1	O	-0.601792	
O49	1	0.3414	0.0053	0.8382	Biso	1	O	-0.577611	
H52	1	0.3146	0.0117	0.8222	Biso	1	H	0.370447	
O50	1	0.62199	0.00734	0.819	Biso	1	O	-0.436219	
O51	1	0.43392	0.1082	0.75197	Biso	1	O	-0.284193	
O52	1	0.53953	0.04613	0.80013	Biso	1	O	-0.597192	
O53	1	0.85395	0.53106	0.58573	Biso	1	O	-0.586069	
O54	1	0.88938	0.54096	0.64758	Biso	1	O	-0.586204	
O55	1	0.91121	0.64705	0.89639	Biso	1	O	-0.526436	
O56	1	0.89018	0.64738	0.83153	Biso	1	O	-0.602438	
O57	1	0.7086	0.763	0.56607	Biso	1	O	-0.364259	
O58	1	0.739	0.6918	0.53002	Biso	1	O	-0.313129	
O59	1	0.8614	0.9125	0.94406	Biso	1	O	-0.340774	
O60	1	0.9141	0.8381	0.9678	Biso	1	O	-0.187611	
Zn5	1	0.07639	0.541	0.14264	Biso	1	Zn	0.930943	
Na9	1	0.03084	0.43363	0.19284	Biso	1	Na	0.844224	
Na10	1	0.03961	0.39118	0.2928	Biso	1	Na	0.840602	
C109	1	0.6936	0.7693	0.40424	Biso	1	C	0.014328	
C110	1	0.726	0.772	0.36663	Biso	1	C	-0.214186	
H53	1	0.7613	0.7524	0.3634	Biso	1	H	0.138021	
C111	1	0.7017	0.8055	0.33549	Biso	1	C	0.281827	
C112	1	0.6485	0.8338	0.34035	Biso	1	C	-0.216752	
H54	1	0.6333	0.8562	0.3193	Biso	1	H	0.121522	
C113	1	0.6173	0.8291	0.3766	Biso	1	C	0.018432	
C114	1	0.6411	0.7987	0.40795	Biso	1	C	-0.133259	
H55	1	0.6214	0.7978	0.4325	Biso	1	H	0.143882	
C115	1	0.98907	0.58855	0.24876	Biso	1	C	0.01884	
C116	1	0.9471	0.6309	0.25544	Biso	1	C	-0.210541	
H56	1	0.9359	0.6558	0.2346	Biso	1	H	0.13495	
C117	1	0.9218	0.6364	0.2928	Biso	1	C	0.271397	
C118	1	0.9391	0.5965	0.32401	Biso	1	C	-0.191625	
H57	1	0.9211	0.5984	0.3492	Biso	1	H	0.149144	
C119	1	0.98226	0.55533	0.31718	Biso	1	C	0.009295	
C120	1	0.00648	0.55167	0.27983	Biso	1	C	-0.12819	
H58	1	0.0354	0.5239	0.275	Biso	1	H	0.123353	
C121	1	0.99836	0.51575	0.35142	Biso	1	C	0.589968	
C122	1	0.01474	0.5851	0.206	Biso	1	C	0.579813	
C123	1	0.56008	0.8619	0.38231	Biso	1	C	0.607356	
C124	1	0.721	0.7365	0.43904	Biso	1	C	0.556337	
C125	1	0.7741	0.7811	0.28008	Biso	1	C	0.538633	
C126	1	0.8444	0.7133	0.28036	Biso	1	C	0.552321	
C127	1	0.8228	0.7613	0.22296	Biso	1	C	0.552589	
C128	1	0.6697	0.8905	0.13478	Biso	1	C	0.605287	
C129	1	0.7317	0.8654	0.13011	Biso	1	C	0.013906	
C130	1	0.7672	0.8825	0.09571	Biso	1	C	-0.141578	

H59	1	0.7509	0.9053	0.0753	Biso	1	H	0.154644	
C131	1	0.8217	0.8661	0.0933	Biso	1	C	-0.004512	
C132	1	0.7566	0.8315	0.15906	Biso	1	C	-0.21098	
H60	1	0.7343	0.8228	0.1818	Biso	1	H	0.123646	
C133	1	0.8449	0.8318	0.1264	Biso	1	C	-0.209214	
H61	1	0.885	0.8249	0.1267	Biso	1	H	0.13022	
C134	1	0.8127	0.8088	0.15716	Biso	1	C	0.28569	
C135	1	0.8654	0.8845	0.0616	Biso	1	C	0.47774	
N25	1	0.7271	0.8102	0.2968	Biso	1	N	-0.366376	
H62	1	0.7106	0.8352	0.2811	Biso	1	H	0.308173	
N26	1	0.782	0.7934	0.24003	Biso	1	N	-0.504842	
N27	1	0.8016	0.7404	0.30164	Biso	1	N	-0.50517	
N28	1	0.8789	0.6795	0.30426	Biso	1	N	-0.36793	
H63	1	0.8745	0.6845	0.3298	Biso	1	H	0.320727	
N29	1	0.85941	0.7236	0.2425	Biso	1	N	-0.515905	
N30	1	0.8371	0.7713	0.18398	Biso	1	N	-0.355075	
H64	1	0.8659	0.7508	0.1749	Biso	1	H	0.318537	
O61	1	0.97362	0.5224	0.3842	Biso	1	O	-0.546153	
O62	1	0.9617	0.41672	0.24425	Biso	1	O	-0.285378	
O63	1	0.03481	0.47558	0.34479	Biso	1	O	-0.602922	
O64	1	0.0053	0.3414	0.1618	Biso	1	O	-0.582202	
H65	1	0.0117	0.3146	0.1778	Biso	1	H	0.369778	
O65	1	0.00734	0.62199	0.181	Biso	1	O	-0.450605	
O66	1	0.1082	0.43392	0.24803	Biso	1	O	-0.285686	
O67	1	0.04613	0.53953	0.19987	Biso	1	O	-0.60417	
O68	1	0.53106	0.85395	0.41427	Biso	1	O	-0.593313	
O69	1	0.54096	0.88938	0.35242	Biso	1	O	-0.590439	
O70	1	0.64705	0.91121	0.10361	Biso	1	O	-0.526014	
O71	1	0.64738	0.89018	0.16847	Biso	1	O	-0.606812	
O72	1	0.763	0.7086	0.43393	Biso	1	O	-0.363166	
O73	1	0.6918	0.739	0.46998	Biso	1	O	-0.312546	
O74	1	0.9125	0.8614	0.05594	Biso	1	O	-0.339658	
O75	1	0.8381	0.9141	0.0322	Biso	1	O	-0.185837	
Zn6	1	0.92361	0.459	0.64264	Biso	1	Zn	0.930204	
Na11	1	0.96916	0.56637	0.69284	Biso	1	Na	0.84401	
Na12	1	0.96039	0.60882	0.7928	Biso	1	Na	0.841204	
C136	1	0.3064	0.2307	0.90424	Biso	1	C	0.014991	
C137	1	0.274	0.228	0.86663	Biso	1	C	-0.215865	
H66	1	0.2387	0.2476	0.8634	Biso	1	H	0.13869	
C138	1	0.2983	0.1945	0.83549	Biso	1	C	0.278694	
C139	1	0.3515	0.1662	0.84035	Biso	1	C	-0.215402	
H67	1	0.3667	0.1438	0.8193	Biso	1	H	0.121007	
C140	1	0.3827	0.1709	0.8766	Biso	1	C	0.017387	
C141	1	0.3589	0.2013	0.90795	Biso	1	C	-0.129358	
H68	1	0.3786	0.2022	0.9325	Biso	1	H	0.14155	
C142	1	0.01093	0.41145	0.74876	Biso	1	C	0.016332	
C143	1	0.0529	0.3691	0.75544	Biso	1	C	-0.21209	
H69	1	0.0641	0.3442	0.7346	Biso	1	H	0.134983	
C144	1	0.0782	0.3636	0.7928	Biso	1	C	0.270301	
C145	1	0.0609	0.4035	0.82401	Biso	1	C	-0.18773	
H70	1	0.0789	0.4016	0.8492	Biso	1	H	0.149574	
C146	1	0.01774	0.44467	0.81718	Biso	1	C	0.009556	

C147	1	0.99352	0.44833	0.77983	Biso	1	C	-0.12819
H71	1	0.9646	0.4761	0.775	Biso	1	H	0.123645
C148	1	0.00164	0.48425	0.85142	Biso	1	C	0.587313
C149	1	0.98526	0.4149	0.706	Biso	1	C	0.579932
C150	1	0.43992	0.1381	0.88231	Biso	1	C	0.606155
C151	1	0.279	0.2635	0.93904	Biso	1	C	0.556188
C152	1	0.2259	0.2189	0.78008	Biso	1	C	0.540691
C153	1	0.1556	0.2867	0.78036	Biso	1	C	0.552783
C154	1	0.1772	0.2387	0.72296	Biso	1	C	0.553631
C155	1	0.3303	0.1095	0.63478	Biso	1	C	0.605713
C156	1	0.2683	0.1346	0.63011	Biso	1	C	0.014732
C157	1	0.2328	0.1175	0.59571	Biso	1	C	-0.136217
H72	1	0.2491	0.0947	0.5753	Biso	1	H	0.154813
C158	1	0.1783	0.1339	0.5933	Biso	1	C	-0.009351
C159	1	0.2434	0.1685	0.65906	Biso	1	C	-0.213748
H73	1	0.2657	0.1772	0.6818	Biso	1	H	0.125364
C160	1	0.1551	0.1682	0.6264	Biso	1	C	-0.206382
H74	1	0.115	0.1751	0.6267	Biso	1	H	0.130845
C161	1	0.1873	0.1912	0.65716	Biso	1	C	0.290703
C162	1	0.1346	0.1155	0.5616	Biso	1	C	0.477944
N31	1	0.2729	0.1898	0.7968	Biso	1	N	-0.36456
H75	1	0.2894	0.1648	0.7811	Biso	1	H	0.307943
N32	1	0.218	0.2066	0.74003	Biso	1	N	-0.515453
N33	1	0.1984	0.2596	0.80164	Biso	1	N	-0.507176
N34	1	0.1211	0.3205	0.80426	Biso	1	N	-0.369464
H76	1	0.1255	0.3155	0.8298	Biso	1	H	0.321868
N35	1	0.14059	0.2764	0.7425	Biso	1	N	-0.512066
N36	1	0.1629	0.2287	0.68398	Biso	1	N	-0.356224
H77	1	0.1341	0.2492	0.6749	Biso	1	H	0.318821
O76	1	0.02638	0.4776	0.8842	Biso	1	O	-0.536497
O77	1	0.0383	0.58328	0.74425	Biso	1	O	-0.290492
O78	1	0.96519	0.52442	0.84479	Biso	1	O	-0.599905
O79	1	0.9947	0.6586	0.6618	Biso	1	O	-0.578825
H78	1	0.9883	0.6854	0.6778	Biso	1	H	0.369123
O80	1	0.99266	0.37801	0.681	Biso	1	O	-0.435283
O81	1	0.8918	0.56608	0.74803	Biso	1	O	-0.285249
O82	1	0.95387	0.46047	0.69987	Biso	1	O	-0.597705
O83	1	0.46894	0.14605	0.91427	Biso	1	O	-0.594348
O84	1	0.45904	0.11062	0.85242	Biso	1	O	-0.588899
O85	1	0.35295	0.08879	0.60361	Biso	1	O	-0.526375
O86	1	0.35262	0.10982	0.66847	Biso	1	O	-0.603243
O87	1	0.237	0.2914	0.93393	Biso	1	O	-0.361996
O88	1	0.3082	0.261	0.96998	Biso	1	O	-0.313148
O89	1	0.0875	0.1386	0.55594	Biso	1	O	-0.336822
O90	1	0.1619	0.0859	0.5322	Biso	1	O	-0.188242
Zn7	1	0.041	0.42361	0.39264	Biso	1	Zn	0.926471
Na13	1	0.93363	0.46916	0.44284	Biso	1	Na	0.845753
Na14	1	0.89118	0.46039	0.5428	Biso	1	Na	0.842127
C163	1	0.2693	0.8064	0.65424	Biso	1	C	0.014767
C164	1	0.272	0.774	0.61663	Biso	1	C	-0.212085
H79	1	0.2524	0.7387	0.6134	Biso	1	H	0.1384
C165	1	0.3055	0.7983	0.58549	Biso	1	C	0.278618

C166	1	0.3338	0.8515	0.59035	Biso	1	C	-0.214608	
H80	1	0.3562	0.8667	0.5693	Biso	1	H	0.121232	
C167	1	0.3291	0.8827	0.6266	Biso	1	C	0.016923	
C168	1	0.2987	0.8589	0.65795	Biso	1	C	-0.131494	
H81	1	0.2978	0.8786	0.6825	Biso	1	H	0.143035	
C169	1	0.08855		0.51093	0.49876	Biso	1	C	0.017112
C170	1	0.1309	0.5529	0.50544	Biso	1	C	-0.211118	
H82	1	0.1558	0.5641	0.4846	Biso	1	H	0.133022	
C171	1	0.1364	0.5782	0.5428	Biso	1	C	0.267663	
C172	1	0.0965	0.5609	0.57401	Biso	1	C	-0.188499	
H83	1	0.0984	0.5789	0.5992	Biso	1	H	0.147028	
C173	1	0.05533		0.51774	0.56718	Biso	1	C	0.011975
C174	1	0.05167		0.49352	0.52983	Biso	1	C	-0.12765
H84	1	0.0239	0.4646	0.525	Biso	1	H	0.119016	
C175	1	0.01575		0.50164	0.60142	Biso	1	C	0.590532
C176	1	0.0851	0.48526		0.456	Biso	1	C	0.58117
C177	1	0.3619	0.93992		0.63231	Biso	1	C	0.60636
C178	1	0.2365	0.779	0.68904	Biso	1	C	0.554175	
C179	1	0.2811	0.7259	0.53008	Biso	1	C	0.539316	
C180	1	0.2133	0.6556	0.53036	Biso	1	C	0.553643	
C181	1	0.2613	0.6772	0.47296	Biso	1	C	0.554593	
C182	1	0.3905	0.8303	0.38478	Biso	1	C	0.604877	
C183	1	0.3654	0.7683	0.38011	Biso	1	C	0.014908	
C184	1	0.3825	0.7328	0.34571	Biso	1	C	-0.137416	
H85	1	0.4053	0.7491	0.3253	Biso	1	H	0.154793	
C185	1	0.3661	0.6783	0.3433	Biso	1	C	-0.010605	
C186	1	0.3315	0.7434	0.40906	Biso	1	C	-0.221052	
H86	1	0.3228	0.7657	0.4318	Biso	1	H	0.133648	
C187	1	0.3318	0.6551	0.3764	Biso	1	C	-0.207092	
H87	1	0.3249	0.615	0.3767	Biso	1	H	0.131011	
C188	1	0.3088	0.6873	0.40716	Biso	1	C	0.288232	
C189	1	0.3845	0.6346	0.3116	Biso	1	C	0.477828	
N37	1	0.3102	0.7729	0.5468	Biso	1	N	-0.368644	
H88	1	0.3352	0.7894	0.5311	Biso	1	H	0.310313	
N38	1	0.2934	0.718	0.49003	Biso	1	N	-0.505983	
N39	1	0.2404	0.6984	0.55164	Biso	1	N	-0.504251	
N40	1	0.1795	0.6211	0.55426	Biso	1	N	-0.371796	
H89	1	0.1845	0.6255	0.5798	Biso	1	H	0.320244	
N41	1	0.2236	0.64059		0.4925	Biso	1	N	-0.516933
N42	1	0.2713	0.6629	0.43398	Biso	1	N	-0.35727	
H90	1	0.2508	0.6341	0.4249	Biso	1	H	0.319821	
O91	1	0.0224	0.52638		0.6342	Biso	1	O	-0.542176
O92	1	0.91672		0.5383	0.49425	Biso	1	O	-0.302407
O93	1	0.97558		0.46519	0.59479	Biso	1	O	-0.603784
O94	1	0.8414	0.4947	0.4118	Biso	1	O	-0.572738	
H91	1	0.8146	0.4883	0.4278	Biso	1	H	0.368295	
O95	1	0.12199		0.49266	0.431	Biso	1	O	-0.438965
O96	1	0.93392		0.3918	0.49803	Biso	1	O	-0.281864
O97	1	0.03953		0.45387	0.44987	Biso	1	O	-0.593567
O98	1	0.35395		0.96894	0.66427	Biso	1	O	-0.583644
O99	1	0.38938		0.95904	0.60242	Biso	1	O	-0.584955
O100	1	0.41121		0.85295	0.35361	Biso	1	O	-0.525634

O101	1	0.39018	0.85262	0.41847	Biso	1	O	-0.59748
O102	1	0.2086	0.737	0.68393	Biso	1	O	-0.363026
O103	1	0.239	0.8082	0.71998	Biso	1	O	-0.312084
O104	1	0.3614	0.5875	0.30594	Biso	1	O	-0.336465
O105	1	0.4141	0.6619	0.2822	Biso	1	O	-0.188183
Zn8	1	0.959	0.57639	0.89264	Biso	1	Zn	0.926199
Na15	1	0.06637	0.53084	0.94284	Biso	1	Na	0.847015
Na16	1	0.10882	0.53961	0.0428	Biso	1	Na	0.842669
C190	1	0.7307	0.1936	0.15424	Biso	1	C	0.010483
C191	1	0.728	0.226	0.11663	Biso	1	C	-0.211896
H92	1	0.7476	0.2613	0.1134	Biso	1	H	0.138708
C192	1	0.6945	0.2017	0.08549	Biso	1	C	0.276972
C193	1	0.6662	0.1485	0.09035	Biso	1	C	-0.213998
H93	1	0.6438	0.1333	0.0693	Biso	1	H	0.121344
C194	1	0.6709	0.1173	0.1266	Biso	1	C	0.016791
C195	1	0.7013	0.1411	0.15795	Biso	1	C	-0.125194
H94	1	0.7022	0.1214	0.1825	Biso	1	H	0.140546
C196	1	0.91145	0.48907	0.99876	Biso	1	C	0.015501
C197	1	0.8691	0.4471	0.00544	Biso	1	C	-0.210309
H95	1	0.8442	0.4359	0.9846	Biso	1	H	0.132999
C198	1	0.8636	0.4218	0.0428	Biso	1	C	0.267972
C199	1	0.9035	0.4391	0.07401	Biso	1	C	-0.187815
H96	1	0.9016	0.4211	0.0992	Biso	1	H	0.147531
C200	1	0.94467	0.48226	0.06718	Biso	1	C	0.012431
C201	1	0.94833	0.50648	0.02983	Biso	1	C	-0.126299
H97	1	0.9761	0.5354	0.025	Biso	1	H	0.119852
C202	1	0.98425	0.49836	0.10142	Biso	1	C	0.592519
C203	1	0.9149	0.51474	0.956	Biso	1	C	0.584005
C204	1	0.6381	0.06008	0.13231	Biso	1	C	0.604167
C205	1	0.7635	0.221	0.18904	Biso	1	C	0.553517
C206	1	0.7189	0.2741	0.03008	Biso	1	C	0.537765
C207	1	0.7867	0.3444	0.03036	Biso	1	C	0.555279
C208	1	0.7387	0.3228	0.97296	Biso	1	C	0.554761
C209	1	0.6095	0.1697	0.88478	Biso	1	C	0.604718
C210	1	0.6346	0.2317	0.88011	Biso	1	C	0.015323
C211	1	0.6175	0.2672	0.84571	Biso	1	C	-0.126725
H98	1	0.5947	0.2509	0.8253	Biso	1	H	0.140254
C212	1	0.6339	0.3217	0.8433	Biso	1	C	-0.005548
C213	1	0.6685	0.2566	0.90906	Biso	1	C	-0.213602
H99	1	0.6772	0.2343	0.9318	Biso	1	H	0.124188
C214	1	0.6682	0.3449	0.8764	Biso	1	C	-0.211429
H100	1	0.6751	0.385	0.8767	Biso	1	H	0.131548
C215	1	0.6912	0.3127	0.90716	Biso	1	C	0.289175
C216	1	0.6155	0.3654	0.8116	Biso	1	C	0.478968
N43	1	0.6898	0.2271	0.0468	Biso	1	N	-0.362598
H101	1	0.6648	0.2106	0.0311	Biso	1	H	0.309663
N44	1	0.7066	0.282	0.99003	Biso	1	N	-0.503522
N45	1	0.7596	0.3016	0.05164	Biso	1	N	-0.507664
N46	1	0.8205	0.3789	0.05426	Biso	1	N	-0.371324
H102	1	0.8155	0.3745	0.0798	Biso	1	H	0.320278
N47	1	0.7764	0.35941	0.9925	Biso	1	N	-0.518794
N48	1	0.7287	0.3371	0.93398	Biso	1	N	-0.360719

H103	1	0.7492	0.3659	0.9249	Biso	1	H	0.32038
O106	1	0.9776	0.47362	0.1342	Biso	1	O	-0.539725
O107	1	0.08328	0.4617	0.99425	Biso	1	O	-0.319436
O108	1	0.02442	0.53481	0.09479	Biso	1	O	-0.603887
O109	1	0.1586	0.5053	0.9118	Biso	1	O	-0.596151
H104	1	0.1854	0.5117	0.9278	Biso	1	H	0.36737
O110	1	0.87801	0.50734	0.931	Biso	1	O	-0.438803
O111	1	0.06608	0.6082	0.99803	Biso	1	O	-0.277004
O112	1	0.96047	0.54613	0.94987	Biso	1	O	-0.594525
O113	1	0.64605	0.03106	0.16427	Biso	1	O	-0.583447
O114	1	0.61062	0.04096	0.10242	Biso	1	O	-0.585035
O115	1	0.58879	0.14705	0.85361	Biso	1	O	-0.525854
O116	1	0.60982	0.14738	0.91847	Biso	1	O	-0.598464
O117	1	0.7914	0.263	0.18393	Biso	1	O	-0.359193
O118	1	0.761	0.1918	0.21998	Biso	1	O	-0.309034
O119	1	0.6386	0.4125	0.80594	Biso	1	O	-0.340683
O120	1	0.5859	0.3381	0.7822	Biso	1	O	-0.185695

data_AGOF EJ_clean

_cell_length_a 19.4251
_cell_length_b 36.589
_cell_length_c 37.762
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 114.202
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Cu1	1	0.09641	0.18928	0.24703	Biso	1	Cu	0.712361
C1	1	0.67548	0.98846	0.30985	Biso	1	C	-0.054347
H1	1	0.7157	0.9707	0.3242	Biso	1	H	0.121944
H2	1	0.6476	0.9941	0.326	Biso	1	H	0.108619
C2	1	0.67134	0.3559	0.3309	Biso	1	C	-0.052015
H3	1	0.6924	0.3436	0.3565	Biso	1	H	0.130442
H4	1	0.6701	0.3825	0.3355	Biso	1	H	0.115315
C3	1	0.4879	0.43387	0.17947	Biso	1	C	-0.05769
H5	1	0.4498	0.4476	0.1577	Biso	1	H	0.115293
H6	1	0.4649	0.4269	0.1975	Biso	1	H	0.104754
C4	1	0.39284	0.41904	0.71849	Biso	1	C	-0.059237
H7	1	0.3831	0.4453	0.7209	Biso	1	H	0.104729
H8	1	0.3435	0.4067	0.7052	Biso	1	H	0.126926
Cu2	1	0.16201	0.18876	0.32339	Biso	1	Cu	0.734216
Cu3	1	0.40693	0.20514	0.94716	Biso	1	Cu	0.737459
Cu4	1	0.55494	0.2009	0.97309	Biso	1	Cu	0.702809
Cu5	1	0.54789	0.45667	0.76222	Biso	1	Cu	0.222332
Cu6	1	0.60501	0.39218	0.24922	Biso	1	Cu	0.213004
N1	1	0.62448	0.97255	0.27348	Biso	1	N	0.070785
N2	1	0.71992	0.34895	0.31097	Biso	1	N	0.088308
N3	1	0.55249	0.4568	0.19941	Biso	1	N	0.095674
N4	1	0.43649	0.41518	0.69499	Biso	1	N	0.077867
N5	1	0.55492	0.98856	0.25407	Biso	1	N	-0.291973
N6	1	0.71141	0.37026	0.27979	Biso	1	N	-0.278931
N7	1	0.60507	0.44531	0.23428	Biso	1	N	-0.266063
N8	1	0.50256	0.43409	0.70614	Biso	1	N	-0.266286

C5	1	0.52233	0.97049	0.22025	Biso	1	C	0.241723
C6	1	0.76589	0.35971	0.26914	Biso	1	C	0.228756
C7	1	0.65978	0.47052	0.24542	Biso	1	C	0.229535
C8	1	0.5248	0.4286	0.67735	Biso	1	C	0.229261
C9	1	0.5731	0.9435	0.21741	Biso	1	C	-0.177344
C10	1	0.81045	0.33187	0.29355	Biso	1	C	-0.181892
C11	1	0.64122	0.49848	0.21701	Biso	1	C	-0.194722
C12	1	0.4731	0.40692	0.648	Biso	1	C	-0.1879
C13	1	0.63699	0.94562	0.25216	Biso	1	C	0.152307
C14	1	0.77864	0.32532	0.32007	Biso	1	C	0.154468
C15	1	0.57171	0.48877	0.18807	Biso	1	C	0.156814
C16	1	0.4162	0.39865	0.65998	Biso	1	C	0.166771
C17	1	0.44489	0.98003	0.19222	Biso	1	C	-0.522176
H9	1	0.4098	0.9607	0.1921	Biso	1	H	0.162001
H10	1	0.444	0.9825	0.1662	Biso	1	H	0.183308
H11	1	0.4297	0.0032	0.1999	Biso	1	H	0.158954
C18	1	0.7745	0.37881	0.23553	Biso	1	C	-0.520535
H12	1	0.7545	0.3631	0.2125	Biso	1	H	0.168043
H13	1	0.8281	0.3837	0.2424	Biso	1	H	0.178521
H14	1	0.7466	0.4019	0.23	Biso	1	H	0.172416
C19	1	0.72755	0.46606	0.28259	Biso	1	C	-0.520561
H15	1	0.7239	0.4826	0.3022	Biso	1	H	0.167458
H16	1	0.773	0.4719	0.2785	Biso	1	H	0.181717
H17	1	0.7304	0.4408	0.2916	Biso	1	H	0.161646
C20	1	0.5966	0.44713	0.68002	Biso	1	C	-0.518246
H18	1	0.6088	0.4674	0.6986	Biso	1	H	0.166786
H19	1	0.5892	0.4566	0.6544	Biso	1	H	0.180714
H20	1	0.6381	0.4294	0.6888	Biso	1	H	0.165498
C21	1	0.70785	0.92371	0.26809	Biso	1	C	-0.522352
H21	1	0.7478	0.9368	0.2638	Biso	1	H	0.175447
H22	1	0.6991	0.8999	0.255	Biso	1	H	0.192722
H23	1	0.7233	0.92	0.296	Biso	1	H	0.162868
C22	1	0.7973	0.2981	0.35213	Biso	1	C	-0.519486
H24	1	0.8208	0.3106	0.3772	Biso	1	H	0.174365
H25	1	0.8324	0.2799	0.35	Biso	1	H	0.190232
H26	1	0.751	0.2859	0.3502	Biso	1	H	0.168136
C23	1	0.52192	0.5075	0.15197	Biso	1	C	-0.523996
H27	1	0.5326	0.4986	0.1303	Biso	1	H	0.174376
H28	1	0.531	0.5339	0.1549	Biso	1	H	0.187019
H29	1	0.4691	0.5025	0.1468	Biso	1	H	0.154793
C24	1	0.3493	0.3759	0.64266	Biso	1	C	-0.518791
H30	1	0.3502	0.3569	0.6612	Biso	1	H	0.172295
H31	1	0.3484	0.3644	0.619	Biso	1	H	0.188594
H32	1	0.3041	0.391	0.6361	Biso	1	H	0.171789
C25	1	0.56124	0.91899	0.18433	Biso	1	C	0.102586
C26	1	0.8751	0.31242	0.29181	Biso	1	C	0.099212
C27	1	0.68487	0.53176	0.21739	Biso	1	C	0.099797
C28	1	0.4774	0.39432	0.61162	Biso	1	C	0.099738
C29	1	0.48989	0.90603	0.16002	Biso	1	C	-0.164086
H33	1	0.4473	0.9132	0.1647	Biso	1	H	0.098366
C30	1	0.8746	0.30152	0.25619	Biso	1	C	-0.172796
H34	1	0.8342	0.3088	0.2328	Biso	1	H	0.110544

C31	1	0.73195	0.54855	0.25242	Biso	1	C	-0.184052
H35	1	0.7375	0.538	0.2764	Biso	1	H	0.106159
C32	1	0.5446	0.38167	0.6116	Biso	1	C	-0.169685
H36	1	0.5895	0.3831	0.6347	Biso	1	H	0.112926
C33	1	0.47983	0.88297	0.12916	Biso	1	C	-0.119665
H37	1	0.4306	0.8749	0.1126	Biso	1	H	0.118152
C34	1	0.9325	0.28015	0.25455	Biso	1	C	-0.103989
H38	1	0.9317	0.2731	0.2302	Biso	1	H	0.128523
C35	1	0.77046	0.58043	0.25224	Biso	1	C	-0.116908
H39	1	0.803	0.5913	0.2761	Biso	1	H	0.122265
C36	1	0.5474	0.36679	0.5779	Biso	1	C	-0.102098
H40	1	0.5942	0.3589	0.5782	Biso	1	H	0.128502
C37	1	0.54162	0.87158	0.12247	Biso	1	C	-0.00159
C38	1	0.992	0.26901	0.28901	Biso	1	C	-0.003715
C39	1	0.7615	0.59656	0.21696	Biso	1	C	-0.001088
C40	1	0.4819	0.36368	0.54427	Biso	1	C	-0.003548
C41	1	0.61378	0.8845	0.14631	Biso	1	C	-0.092017
H41	1	0.6564	0.8769	0.1419	Biso	1	H	0.132509
C42	1	0.99425	0.28129	0.3242	Biso	1	C	-0.101242
H42	1	0.0353	0.2747	0.3477	Biso	1	H	0.128245
C43	1	0.71709	0.58	0.18292	Biso	1	C	-0.099788
H43	1	0.7114	0.5909	0.1591	Biso	1	H	0.126435
C44	1	0.4136	0.37732	0.54383	Biso	1	C	-0.101481
H44	1	0.3686	0.3758	0.5208	Biso	1	H	0.127453
C45	1	0.62252	0.90833	0.17613	Biso	1	C	-0.16573
H45	1	0.6713	0.9178	0.1915	Biso	1	H	0.112136
C46	1	0.9374	0.30302	0.32518	Biso	1	C	-0.171417
H46	1	0.9409	0.3119	0.3495	Biso	1	H	0.110014
C47	1	0.67984	0.5473	0.18237	Biso	1	C	-0.169985
H47	1	0.6511	0.5355	0.1584	Biso	1	H	0.115985
C48	1	0.4123	0.39276	0.57679	Biso	1	C	-0.174382
H48	1	0.3664	0.4026	0.5759	Biso	1	H	0.110633
C49	1	0.5321	0.84464	0.09034	Biso	1	C	0.559964
C50	1	0.04892	0.2421	0.2878	Biso	1	C	0.563434
C51	1	0.80073	0.63192	0.21677	Biso	1	C	0.554054
C52	1	0.4822	0.34252	0.51022	Biso	1	C	0.557472
O1	1	0.59285	0.83066	0.09121	Biso	1	O	-0.544674
O2	1	0.04701	0.23367	0.25443	Biso	1	O	-0.56193
O3	1	0.84841	0.64355	0.2492	Biso	1	O	-0.557653
O4	1	0.41746	0.33386	0.48423	Biso	1	O	-0.550952
O5	1	0.46588	0.83741	0.0666	Biso	1	O	-0.553723
O6	1	0.09249	0.22863	0.31989	Biso	1	O	-0.542734
O7	1	0.78212	0.64733	0.18433	Biso	1	O	-0.547216
O8	1	0.5464	0.334	0.51092	Biso	1	O	-0.54721
N9	1	0.70903	0.02159	0.30306	Biso	1	N	0.088294
N10	1	0.59535	0.34297	0.30875	Biso	1	N	0.087479
N11	1	0.50933	0.40101	0.16458	Biso	1	N	0.080715
N12	1	0.43162	0.40364	0.75682	Biso	1	N	0.091777
N13	1	0.66275	0.05072	0.28787	Biso	1	N	-0.271084
N14	1	0.55302	0.36013	0.27506	Biso	1	N	-0.283076
N15	1	0.55641	0.377	0.19136	Biso	1	N	-0.260729
N16	1	0.49398	0.4213	0.78295	Biso	1	N	-0.287392

C53	1	0.7067	0.07672	0.28325	Biso	1	C	0.230344
C54	1	0.48584	0.34372	0.26175	Biso	1	C	0.232576
C55	1	0.5638	0.34925	0.17023	Biso	1	C	0.232583
C56	1	0.51864	0.40078	0.81537	Biso	1	C	0.2267
C57	1	0.78127	0.06403	0.29559	Biso	1	C	-0.180966
C58	1	0.48524	0.31646	0.28778	Biso	1	C	-0.172674
C59	1	0.5228	0.35567	0.13074	Biso	1	C	-0.184713
C60	1	0.46996	0.37034	0.80966	Biso	1	C	-0.179811
C61	1	0.78031	0.02858	0.30793	Biso	1	C	0.147772
C62	1	0.55559	0.31654	0.31748	Biso	1	C	0.160568
C63	1	0.4877	0.38924	0.12772	Biso	1	C	0.151533
C64	1	0.41625	0.3725	0.77193	Biso	1	C	0.171978
C65	1	0.6743	0.11404	0.26824	Biso	1	C	-0.528597
H49	1	0.663	0.1157	0.2405	Biso	1	H	0.176823
H50	1	0.711	0.1329	0.2824	Biso	1	H	0.178965
H51	1	0.6278	0.1176	0.2721	Biso	1	H	0.176365
C66	1	0.4229	0.35572	0.22434	Biso	1	C	-0.521855
H52	1	0.4227	0.3824	0.2226	Biso	1	H	0.150874
H53	1	0.3745	0.3474	0.2237	Biso	1	H	0.172398
H54	1	0.4305	0.3451	0.2024	Biso	1	H	0.171717
C67	1	0.6108	0.31663	0.19032	Biso	1	C	-0.519337
H55	1	0.6621	0.3196	0.1917	Biso	1	H	0.167229
H56	1	0.5881	0.2944	0.1757	Biso	1	H	0.180237
H57	1	0.6129	0.3147	0.2166	Biso	1	H	0.171859
C68	1	0.58699	0.41098	0.84996	Biso	1	C	-0.5231
H58	1	0.6297	0.396	0.851	Biso	1	H	0.17562
H59	1	0.5782	0.4068	0.8734	Biso	1	H	0.176551
H60	1	0.5984	0.4369	0.8484	Biso	1	H	0.15069
C69	1	0.8427	0.00078	0.32427	Biso	1	C	-0.514529
H61	1	0.8574	0.9983	0.3523	Biso	1	H	0.168962
H62	1	0.8864	0.0088	0.3196	Biso	1	H	0.191128
H63	1	0.825	0.9771	0.3116	Biso	1	H	0.160347
C70	1	0.59029	0.29332	0.35381	Biso	1	C	-0.51665
H64	1	0.6392	0.2839	0.3562	Biso	1	H	0.157824
H65	1	0.5566	0.2728	0.3521	Biso	1	H	0.189673
H66	1	0.5975	0.3082	0.3766	Biso	1	H	0.182966
C71	1	0.4375	0.41076	0.09335	Biso	1	C	-0.516258
H67	1	0.3858	0.4102	0.0916	Biso	1	H	0.168028
H68	1	0.4385	0.4002	0.0697	Biso	1	H	0.192199
H69	1	0.4551	0.4361	0.0961	Biso	1	H	0.164461
C72	1	0.35382	0.34727	0.74899	Biso	1	C	-0.51631
H70	1	0.3059	0.3607	0.7389	Biso	1	H	0.171465
H71	1	0.3513	0.3273	0.7657	Biso	1	H	0.192192
H72	1	0.3631	0.3373	0.7273	Biso	1	H	0.167484
C73	1	0.84557	0.08452	0.29434	Biso	1	C	0.096653
C74	1	0.42	0.29377	0.28551	Biso	1	C	0.098986
C75	1	0.5148	0.33058	0.09808	Biso	1	C	0.097975
C76	1	0.47532	0.34178	0.83836	Biso	1	C	0.097371
C77	1	0.9134	0.0887	0.32674	Biso	1	C	-0.175034
H73	1	0.92	0.0771	0.3504	Biso	1	H	0.10925
C78	1	0.40277	0.29056	0.31797	Biso	1	C	-0.151946
H74	1	0.4329	0.303	0.3413	Biso	1	H	0.11496

C79	1	0.5775	0.31542	0.09555	Biso	1	C	-0.169325
H75	1	0.6262	0.3225	0.1137	Biso	1	H	0.110808
C80	1	0.54283	0.32349	0.85938	Biso	1	C	-0.179418
H76	1	0.5874	0.3301	0.8563	Biso	1	H	0.110684
C81	1	0.9711	0.10941	0.32504	Biso	1	C	-0.105444
H77	1	0.0161	0.1129	0.3478	Biso	1	H	0.125286
C82	1	0.34277	0.26955	0.31661	Biso	1	C	-0.088032
H78	1	0.3329	0.2673	0.3392	Biso	1	H	0.130974
C83	1	0.5711	0.28965	0.06671	Biso	1	C	-0.105589
H79	1	0.615	0.2791	0.0657	Biso	1	H	0.130217
C84	1	0.54499	0.2955	0.88501	Biso	1	C	-0.11716
H80	1	0.5912	0.2833	0.8995	Biso	1	H	0.117895
C85	1	0.96417	0.12517	0.29028	Biso	1	C	0.000146
C86	1	0.29735	0.25193	0.28324	Biso	1	C	-0.012747
C87	1	0.5007	0.27985	0.03997	Biso	1	C	0.000968
C88	1	0.48017	0.28538	0.88939	Biso	1	C	-0.017268
C89	1	0.8985	0.12072	0.25771	Biso	1	C	-0.10156
H81	1	0.8935	0.131	0.2337	Biso	1	H	0.130015
C90	1	0.3121	0.25513	0.24998	Biso	1	C	-0.118332
H82	1	0.2807	0.2431	0.2266	Biso	1	H	0.120477
C91	1	0.4363	0.29569	0.04125	Biso	1	C	-0.103786
H83	1	0.3874	0.2896	0.0224	Biso	1	H	0.131175
C92	1	0.41243	0.30395	0.86905	Biso	1	C	-0.085538
H84	1	0.3681	0.2973	0.8724	Biso	1	H	0.133036
C93	1	0.839	0.10101	0.26005	Biso	1	C	-0.166521
H85	1	0.793	0.0988	0.2376	Biso	1	H	0.110175
C94	1	0.37316	0.27603	0.2515	Biso	1	C	-0.180539
H86	1	0.3831	0.2782	0.2289	Biso	1	H	0.109714
C95	1	0.4453	0.32069	0.07082	Biso	1	C	-0.175148
H87	1	0.4016	0.3312	0.0721	Biso	1	H	0.105492
C96	1	0.41035	0.33211	0.84398	Biso	1	C	-0.155364
H88	1	0.3645	0.345	0.8305	Biso	1	H	0.117554
C97	1	0.0269	0.1486	0.2889	Biso	1	C	0.564614
C98	1	0.23355	0.22886	0.28268	Biso	1	C	0.566393
C99	1	0.4928	0.25146	0.01005	Biso	1	C	0.561962
C100	1	0.48107	0.25393	0.91528	Biso	1	C	0.570397
O9	1	0.08276	0.15452	0.32052	Biso	1	O	-0.552813
O10	1	0.23122	0.22291	0.31526	Biso	1	O	-0.544691
O11	1	0.5536	0.24022	0.00845	Biso	1	O	-0.554707
O12	1	0.41871	0.24507	0.9158	Biso	1	O	-0.542802
O13	1	0.01854	0.16079	0.25605	Biso	1	O	-0.555271
O14	1	0.18595	0.21714	0.25018	Biso	1	O	-0.564333
O15	1	0.42705	0.24032	0.98942	Biso	1	O	-0.544701
O16	1	0.54324	0.23855	0.93385	Biso	1	O	-0.561344
Cu7	1	0.90359	0.68928	0.25297	Biso	1	Cu	0.717012
C101	1	0.32452	0.48846	0.19015	Biso	1	C	-0.055644
H89	1	0.2843	0.4707	0.1758	Biso	1	H	0.122185
H90	1	0.3524	0.4941	0.174	Biso	1	H	0.109111
C102	1	0.32866	0.8559	0.1691	Biso	1	C	-0.051915
H91	1	0.3076	0.8436	0.1435	Biso	1	H	0.130759
H92	1	0.3299	0.8825	0.1645	Biso	1	H	0.115077
C103	1	0.5121	0.93387	0.32053	Biso	1	C	-0.057697

H93	1	0.5502	0.9476	0.3423	Biso	1	H	0.115153		
H94	1	0.5351	0.9269	0.3025	Biso	1	H	0.105373		
C104	1	0.60716		0.91904		0.78151	Biso	1	C	-0.059275
H95	1	0.6169	0.9453	0.7791	Biso	1	H	0.104739		
H96	1	0.6565	0.9067	0.7948	Biso	1	H	0.126808		
Cu8	1	0.83799		0.68876		0.17661	Biso	1	Cu	0.725964
Cu9	1	0.59307		0.70514		0.55284	Biso	1	Cu	0.746249
Cu10	1	0.44506		0.7009	0.52691		Biso	1	Cu	0.697306
Cu11	1	0.45211		0.95667		0.73778	Biso	1	Cu	0.221652
Cu12	1	0.39499		0.89218		0.25078	Biso	1	Cu	0.21322
N17	1	0.37552		0.47255		0.22652	Biso	1	N	0.071542
N18	1	0.28008		0.84895		0.18903	Biso	1	N	0.088309
N19	1	0.44751		0.9568	0.30059		Biso	1	N	0.096023
N20	1	0.56351		0.91518		0.80501	Biso	1	N	0.077408
N21	1	0.44508		0.48856		0.24593	Biso	1	N	-0.290757
N22	1	0.28859		0.87026		0.22021	Biso	1	N	-0.280049
N23	1	0.39493		0.94531		0.26572	Biso	1	N	-0.264364
N24	1	0.49744		0.93409		0.79386	Biso	1	N	-0.265912
C105	1	0.47767		0.47049		0.27975	Biso	1	C	0.241225
C106	1	0.23411		0.85971		0.23086	Biso	1	C	0.228439
C107	1	0.34022		0.97052		0.25458	Biso	1	C	0.229829
C108	1	0.4752	0.9286	0.82265			Biso	1	C	0.229083
C109	1	0.4269	0.4435	0.28259			Biso	1	C	-0.178259
C110	1	0.18955		0.83187		0.20645	Biso	1	C	-0.181371
C111	1	0.35878		0.99848		0.28299	Biso	1	C	-0.195331
C112	1	0.5269	0.90692		0.852		Biso	1	C	-0.187272
C113	1	0.36301		0.44562		0.24784	Biso	1	C	0.152269
C114	1	0.22136		0.82532		0.17993	Biso	1	C	0.154556
C115	1	0.42829		0.98877		0.31193	Biso	1	C	0.158008
C116	1	0.5838	0.89865		0.84002		Biso	1	C	0.166854
C117	1	0.55511		0.48003		0.30778	Biso	1	C	-0.52214
H97	1	0.5902	0.4607	0.3079	Biso	1	H	0.161965		
H98	1	0.556	0.4825	0.3338	Biso	1	H	0.182824		
H99	1	0.5703	0.5032	0.3001	Biso	1	H	0.159403		
C118	1	0.2255	0.87881		0.26447		Biso	1	C	-0.520402
H100	1	0.2455	0.8631	0.2875	Biso	1	H	0.167706		
H101	1	0.1719	0.8837	0.2576	Biso	1	H	0.178543		
H102	1	0.2534	0.9019	0.27	Biso	1	H	0.171547		
C119	1	0.27245		0.96606		0.21741	Biso	1	C	-0.520484
H103	1	0.2761	0.9826	0.1978	Biso	1	H	0.167745		
H104	1	0.227	0.9719	0.2215	Biso	1	H	0.18161		
H105	1	0.2696	0.9408	0.2084	Biso	1	H	0.162485		
C120	1	0.4034	0.94713		0.81998		Biso	1	C	-0.519155
H106	1	0.3912	0.9674	0.8014	Biso	1	H	0.167657		
H107	1	0.4108	0.9566	0.8456	Biso	1	H	0.180247		
H108	1	0.3619	0.9294	0.8112	Biso	1	H	0.165501		
C121	1	0.29215		0.42371		0.23191	Biso	1	C	-0.522436
H109	1	0.2522	0.4368	0.2362	Biso	1	H	0.175552		
H110	1	0.3009	0.3999	0.245	Biso	1	H	0.192216		
H111	1	0.2767	0.42	0.204	Biso	1	H	0.163318		
C122	1	0.2027	0.7981	0.14787			Biso	1	C	-0.519245
H112	1	0.1792	0.8106	0.1228	Biso	1	H	0.17436		

H113	1	0.1676	0.7799	0.15	Biso	1	H	0.190466		
H114	1	0.249	0.7859	0.1498	Biso	1	H	0.168139		
C123	1	0.47808		0.0075	0.34803		Biso	1	C	-0.524205
H115	1	0.4674	0.9986	0.3697	Biso	1	H	0.174513		
H116	1	0.469	0.0339	0.3451	Biso	1	H	0.186942		
H117	1	0.5309	0.0025	0.3532	Biso	1	H	0.155237		
C124	1	0.6507	0.8759	0.85734		Biso	1	C	-0.518847	
H118	1	0.6498	0.8569	0.8388	Biso	1	H	0.172608		
H119	1	0.6516	0.8644	0.881	Biso	1	H	0.188301		
H120	1	0.6959	0.891	0.8639	Biso	1	H	0.171664		
C125	1	0.43876		0.41899	0.31567		Biso	1	C	0.104079
C126	1	0.1249	0.81242		0.20819		Biso	1	C	0.0981
C127	1	0.31513		0.03176	0.28261		Biso	1	C	0.102337
C128	1	0.5226	0.89432		0.88838		Biso	1	C	0.09897
C129	1	0.51011		0.40603	0.33998		Biso	1	C	-0.163949
H121	1	0.5527	0.4132	0.3353	Biso	1	H	0.098741		
C130	1	0.1254	0.80152		0.24381		Biso	1	C	-0.173785
H122	1	0.1658	0.8088	0.2672	Biso	1	H	0.109826		
C131	1	0.26805		0.04855	0.24758		Biso	1	C	-0.182941
H123	1	0.2625	0.038	0.2236	Biso	1	H	0.107078		
C132	1	0.4554	0.88167		0.8884		Biso	1	C	-0.169431
H124	1	0.4105	0.8831	0.8653	Biso	1	H	0.112802		
C133	1	0.52017		0.38297	0.37084		Biso	1	C	-0.119191
H125	1	0.5694	0.3749	0.3874	Biso	1	H	0.118152		
C134	1	0.0675	0.78015		0.24545		Biso	1	C	-0.104679
H126	1	0.0683	0.7731	0.2698	Biso	1	H	0.128071		
C135	1	0.22954		0.08043	0.24776		Biso	1	C	-0.115005
H127	1	0.197	0.0913	0.2239	Biso	1	H	0.123178		
C136	1	0.4526	0.86679		0.9221		Biso	1	C	-0.102739
H128	1	0.4058	0.8589	0.9218	Biso	1	H	0.128357		
C137	1	0.45838		0.37158	0.37753		Biso	1	C	-0.002399
C138	1	0.008	0.76901		0.21099		Biso	1	C	-0.003438
C139	1	0.2385	0.09656		0.28304		Biso	1	C	-8.5E-05
C140	1	0.5181	0.86368		0.95573		Biso	1	C	-0.002984
C141	1	0.38622		0.3845	0.35369		Biso	1	C	-0.092084
H129	1	0.3436	0.3769	0.3581	Biso	1	H	0.132325		
C142	1	0.00575		0.78129	0.1758		Biso	1	C	-0.101096
H130	1	0.9647	0.7747	0.1523	Biso	1	H	0.128428		
C143	1	0.28291		0.08	0.31708		Biso	1	C	-0.099404
H131	1	0.2886	0.0909	0.3409	Biso	1	H	0.1265		
C144	1	0.5864	0.87732		0.95617		Biso	1	C	-0.101494
H132	1	0.6314	0.8758	0.9792	Biso	1	H	0.127246		
C145	1	0.37748		0.40833	0.32387		Biso	1	C	-0.165464
H133	1	0.3287	0.4178	0.3085	Biso	1	H	0.112601		
C146	1	0.0626	0.80302		0.17482		Biso	1	C	-0.17174
H134	1	0.0591	0.8119	0.1505	Biso	1	H	0.109848		
C147	1	0.32016		0.0473	0.31763		Biso	1	C	-0.168525
H135	1	0.3489	0.0355	0.3416	Biso	1	H	0.11641		
C148	1	0.5877	0.89276		0.92321		Biso	1	C	-0.174652
H136	1	0.6336	0.9026	0.9241	Biso	1	H	0.110586		
C149	1	0.4679	0.34464		0.40966		Biso	1	C	0.560941
C150	1	0.95108		0.7421	0.2122		Biso	1	C	0.562799

C151	1	0.19927	0.13192	0.28323	Biso	1	C	0.555003
C152	1	0.5178	0.84252	0.98978	Biso	1	C	0.556985
O17	1	0.40715	0.33066	0.40879	Biso	1	O	-0.544851
O18	1	0.95299	0.73367	0.24557	Biso	1	O	-0.563801
O19	1	0.15159	0.14355	0.2508	Biso	1	O	-0.555118
O20	1	0.58254	0.83386	0.01577	Biso	1	O	-0.551036
O21	1	0.53412	0.33741	0.4334	Biso	1	O	-0.553374
O22	1	0.90751	0.72863	0.18011	Biso	1	O	-0.543116
O23	1	0.21788	0.14733	0.31567	Biso	1	O	-0.546326
O24	1	0.4536	0.834	0.98908	Biso	1	O	-0.548327
N25	1	0.29097	0.52159	0.19694	Biso	1	N	0.090995
N26	1	0.40465	0.84297	0.19125	Biso	1	N	0.087478
N27	1	0.49067	0.90101	0.33542	Biso	1	N	0.080378
N28	1	0.56838	0.90364	0.74318	Biso	1	N	0.091394
N29	1	0.33725	0.55072	0.21213	Biso	1	N	-0.272661
N30	1	0.44698	0.86013	0.22494	Biso	1	N	-0.284005
N31	1	0.44359	0.877	0.30864	Biso	1	N	-0.259655
N32	1	0.50602	0.9213	0.71705	Biso	1	N	-0.287128
C153	1	0.2933	0.57672	0.21675	Biso	1	C	0.230632
C154	1	0.51416	0.84372	0.23825	Biso	1	C	0.232561
C155	1	0.4362	0.84925	0.32977	Biso	1	C	0.232858
C156	1	0.48136	0.90078	0.68463	Biso	1	C	0.226542
C157	1	0.21873	0.56403	0.20441	Biso	1	C	-0.180266
C158	1	0.51476	0.81646	0.21222	Biso	1	C	-0.171425
C159	1	0.4772	0.85567	0.36926	Biso	1	C	-0.184802
C160	1	0.53004	0.87034	0.69034	Biso	1	C	-0.179853
C161	1	0.21969	0.52858	0.19207	Biso	1	C	0.146429
C162	1	0.44441	0.81654	0.18252	Biso	1	C	0.160683
C163	1	0.5123	0.88924	0.37228	Biso	1	C	0.151032
C164	1	0.58375	0.8725	0.72807	Biso	1	C	0.172017
C165	1	0.3257	0.61404	0.23176	Biso	1	C	-0.528402
H137	1	0.337	0.6157	0.2595	Biso	1	H	0.176374
H138	1	0.289	0.6329	0.2176	Biso	1	H	0.179305
H139	1	0.3722	0.6176	0.2279	Biso	1	H	0.176389
C166	1	0.5771	0.85572	0.27566	Biso	1	C	-0.521922
H140	1	0.5773	0.8824	0.2774	Biso	1	H	0.150437
H141	1	0.6255	0.8474	0.2763	Biso	1	H	0.172573
H142	1	0.5695	0.8451	0.2976	Biso	1	H	0.171232
C167	1	0.3892	0.81663	0.30968	Biso	1	C	-0.519421
H143	1	0.3379	0.8196	0.3083	Biso	1	H	0.167513
H144	1	0.4119	0.7944	0.3243	Biso	1	H	0.180267
H145	1	0.3871	0.8147	0.2834	Biso	1	H	0.172557
C168	1	0.41301	0.91098	0.65004	Biso	1	C	-0.523136
H146	1	0.3703	0.896	0.649	Biso	1	H	0.17563
H147	1	0.4218	0.9068	0.6266	Biso	1	H	0.176997
H148	1	0.4016	0.9369	0.6516	Biso	1	H	0.15065
C169	1	0.1573	0.50078	0.17573	Biso	1	C	-0.51431
H149	1	0.1426	0.4983	0.1477	Biso	1	H	0.169225
H150	1	0.1136	0.5088	0.1804	Biso	1	H	0.191255
H151	1	0.175	0.4771	0.1884	Biso	1	H	0.15986
C170	1	0.40971	0.79332	0.14619	Biso	1	C	-0.520875
H152	1	0.3608	0.7839	0.1438	Biso	1	H	0.157564

H153	1	0.4434	0.7728	0.1479	Biso	1	H	0.195314	
H154	1	0.4025	0.8082	0.1234	Biso	1	H	0.183129	
C171	1	0.5625	0.91076	0.40665	Biso	1	C	-0.516103	
H155	1	0.6142	0.9102	0.4084	Biso	1	H	0.168074	
H156	1	0.5615	0.9002	0.4303	Biso	1	H	0.191827	
H157	1	0.5449	0.9361	0.4039	Biso	1	H	0.164178	
C172	1	0.64618	0.84727	0.75101	Biso	1	C	-0.516342	
H158	1	0.6941	0.8607	0.7611	Biso	1	H	0.171206	
H159	1	0.6487	0.8273	0.7343	Biso	1	H	0.192412	
H160	1	0.6369	0.8373	0.7727	Biso	1	H	0.167264	
C173	1	0.15443	0.58452	0.20566	Biso	1	C	0.095698	
C174	1	0.58	0.79377	0.21449	Biso	1	C	0.095618	
C175	1	0.4852	0.83058	0.40192	Biso	1	C	0.098536	
C176	1	0.52468	0.84178	0.66164	Biso	1	C	0.097899	
C177	1	0.0866	0.5887	0.17326	Biso	1	C	-0.175472	
H161	1	0.08	0.5771	0.1496	Biso	1	H	0.109281	
C178	1	0.59723	0.79056	0.18203	Biso	1	C	-0.151636	
H162	1	0.5671	0.803	0.1587	Biso	1	H	0.115011	
C179	1	0.4225	0.81542	0.40445	Biso	1	C	-0.169136	
H163	1	0.3738	0.8225	0.3863	Biso	1	H	0.111246	
C180	1	0.45717	0.82349	0.64062	Biso	1	C	-0.179345	
H164	1	0.4126	0.8301	0.6437	Biso	1	H	0.110608	
C181	1	0.0289	0.60941	0.17496	Biso	1	C	-0.105154	
H165	1	0.9839	0.6129	0.1522	Biso	1	H	0.12542	
C182	1	0.65723	0.76955	0.18339	Biso	1	C	-0.087628	
H166	1	0.6671	0.7673	0.1608	Biso	1	H	0.131385	
C183	1	0.4289	0.78965	0.43329	Biso	1	C	-0.10486	
H167	1	0.385	0.7791	0.4343	Biso	1	H	0.130463	
C184	1	0.45501	0.7955	0.61499	Biso	1	C	-0.116266	
H168	1	0.4088	0.7833	0.6005	Biso	1	H	0.118111	
C185	1	0.03583	0.62517	0.20972	Biso	1	C	0.000156	
C186	1	0.70265	0.75193	0.21676	Biso	1	C	-0.012763	
C187	1	0.4993	0.77985	0.46003	Biso	1	C	0.000197	
C188	1	0.51983	0.78538	0.61061	Biso	1	C	-0.017626	
C189	1	0.1015	0.62072	0.24229	Biso	1	C	-0.101776	
H169	1	0.1065	0.631	0.2663	Biso	1	H	0.129457	
C190	1	0.6879	0.75513	0.25002	Biso	1	C	-0.119066	
H170	1	0.7193	0.7431	0.2734	Biso	1	H	0.120044	
C191	1	0.5637	0.79569	0.45875	Biso	1	C	-0.103801	
H171	1	0.6126	0.7896	0.4776	Biso	1	H	0.131033	
C192	1	0.58757	0.80395	0.63095	Biso	1	C	-0.085636	
H172	1	0.6319	0.7973	0.6276	Biso	1	H	0.13329	
C193	1	0.161	0.60101	0.23995	Biso	1	C	-0.167271	
H173	1	0.207	0.5988	0.2624	Biso	1	H	0.109511	
C194	1	0.62684	0.77603	0.2485	Biso	1	C	-0.180492	
H174	1	0.6169	0.7782	0.2711	Biso	1	H	0.10894	
C195	1	0.5547	0.82069	0.42918	Biso	1	C	-0.174793	
H175	1	0.5984	0.8312	0.4279	Biso	1	H	0.105657	
C196	1	0.58965	0.83211	0.65602	Biso	1	C	-0.15587	
H176	1	0.6355	0.845	0.6695	Biso	1	H	0.117368	
C197	1	0.9731	0.6486	0.2111	Biso	1	C	0.564587	
C198	1	0.76645	0.72886	0.21732	Biso	1	C	0.566406	

C199	1	0.5072	0.75146	0.48995	Biso	1	C	0.562379
C200	1	0.51893	0.75393	0.58472	Biso	1	C	0.570294
O25	1	0.91724	0.65452	0.17948	Biso	1	O	-0.552722
O26	1	0.76878	0.72291	0.18474	Biso	1	O	-0.545289
O27	1	0.4464	0.74022	0.49155	Biso	1	O	-0.553825
O28	1	0.58129	0.74507	0.5842	Biso	1	O	-0.542091
O29	1	0.98146	0.66079	0.24395	Biso	1	O	-0.556453
O30	1	0.81405	0.71714	0.24982	Biso	1	O	-0.566465
O31	1	0.57295	0.74032	0.51058	Biso	1	O	-0.543997
O32	1	0.45676	0.73855	0.56615	Biso	1	O	-0.560484
Cu13	1	0.90359	0.81072	0.75297	Biso	1	Cu	0.716212
C201	1	0.32452	0.01154	0.69015	Biso	1	C	-0.055783
H177	1	0.2843	0.0293	0.6758	Biso	1	H	0.122274
H178	1	0.3524	0.0059	0.674	Biso	1	H	0.109084
C202	1	0.32866	0.6441	0.6691	Biso	1	C	-0.051768
H179	1	0.3076	0.6564	0.6435	Biso	1	H	0.130946
H180	1	0.3299	0.6175	0.6645	Biso	1	H	0.11541
C203	1	0.5121	0.56613	0.82053	Biso	1	C	-0.057921
H181	1	0.5502	0.5524	0.8423	Biso	1	H	0.115081
H182	1	0.5351	0.5731	0.8025	Biso	1	H	0.105294
C204	1	0.60716	0.58096	0.28151	Biso	1	C	-0.059279
H183	1	0.6169	0.5547	0.2791	Biso	1	H	0.104902
H184	1	0.6565	0.5933	0.2948	Biso	1	H	0.12693
Cu14	1	0.83799	0.81124	0.67661	Biso	1	Cu	0.735182
Cu15	1	0.59307	0.79486	0.05284	Biso	1	Cu	0.736934
Cu16	1	0.44506	0.7991	0.02691	Biso	1	Cu	0.708521
Cu17	1	0.45211	0.54333	0.23778	Biso	1	Cu	0.222511
Cu18	1	0.39499	0.60782	0.75078	Biso	1	Cu	0.213274
N33	1	0.37552	0.02745	0.72652	Biso	1	N	0.071011
N34	1	0.28008	0.65105	0.68903	Biso	1	N	0.088357
N35	1	0.44751	0.5432	0.80059	Biso	1	N	0.095823
N36	1	0.56351	0.58482	0.30501	Biso	1	N	0.0777
N37	1	0.44508	0.01144	0.74593	Biso	1	N	-0.291465
N38	1	0.28859	0.62974	0.72021	Biso	1	N	-0.279209
N39	1	0.39493	0.55469	0.76572	Biso	1	N	-0.265307
N40	1	0.49744	0.56591	0.29386	Biso	1	N	-0.265882
C205	1	0.47767	0.02951	0.77975	Biso	1	C	0.24112
C206	1	0.23411	0.64029	0.73086	Biso	1	C	0.228704
C207	1	0.34022	0.52948	0.75458	Biso	1	C	0.229448
C208	1	0.4752	0.5714	0.32265	Biso	1	C	0.228897
C209	1	0.4269	0.0565	0.78259	Biso	1	C	-0.17742
C210	1	0.18955	0.66813	0.70645	Biso	1	C	-0.182146
C211	1	0.35878	0.50152	0.78299	Biso	1	C	-0.194858
C212	1	0.5269	0.59308	0.352	Biso	1	C	-0.187849
C213	1	0.36301	0.05438	0.74784	Biso	1	C	0.151819
C214	1	0.22136	0.67468	0.67993	Biso	1	C	0.154378
C215	1	0.42829	0.51123	0.81193	Biso	1	C	0.15681
C216	1	0.5838	0.60135	0.34002	Biso	1	C	0.166968
C217	1	0.55511	0.01997	0.80778	Biso	1	C	-0.52221
H185	1	0.5902	0.0393	0.8079	Biso	1	H	0.162045
H186	1	0.556	0.0175	0.8338	Biso	1	H	0.182924
H187	1	0.5703	0.9968	0.8001	Biso	1	H	0.159123

C218	1	0.2255	0.62119	0.76447	Biso	1	C	-0.520472
H188	1	0.2455	0.6369	0.7875	Biso	1	H	0.167637
H189	1	0.1719	0.6163	0.7576	Biso	1	H	0.178442
H190	1	0.2534	0.5981	0.77	Biso	1	H	0.172199
C219	1	0.27245	0.53394	0.71741	Biso	1	C	-0.5204
H191	1	0.2761	0.5174	0.6978	Biso	1	H	0.167769
H192	1	0.227	0.5281	0.7215	Biso	1	H	0.181338
H193	1	0.2696	0.5592	0.7084	Biso	1	H	0.162128
C220	1	0.4034	0.55287	0.31998	Biso	1	C	-0.519142
H194	1	0.3912	0.5326	0.3014	Biso	1	H	0.167537
H195	1	0.4108	0.5434	0.3456	Biso	1	H	0.180162
H196	1	0.3619	0.5706	0.3112	Biso	1	H	0.165697
C221	1	0.29215	0.07629	0.73191	Biso	1	C	-0.522368
H197	1	0.2522	0.0632	0.7362	Biso	1	H	0.175279
H198	1	0.3009	0.1001	0.745	Biso	1	H	0.192452
H199	1	0.2767	0.08	0.704	Biso	1	H	0.16315
C222	1	0.2027	0.7019	0.64787	Biso	1	C	-0.519215
H200	1	0.1792	0.6894	0.6228	Biso	1	H	0.174723
H201	1	0.1676	0.7201	0.65	Biso	1	H	0.190102
H202	1	0.249	0.7141	0.6498	Biso	1	H	0.168271
C223	1	0.47808	0.4925	0.84803	Biso	1	C	-0.523768
H203	1	0.4674	0.5014	0.8697	Biso	1	H	0.174011
H204	1	0.469	0.4661	0.8451	Biso	1	H	0.186982
H205	1	0.5309	0.4975	0.8532	Biso	1	H	0.155021
C224	1	0.6507	0.6241	0.35734	Biso	1	C	-0.518895
H206	1	0.6498	0.6431	0.3388	Biso	1	H	0.17268
H207	1	0.6516	0.6356	0.381	Biso	1	H	0.188245
H208	1	0.6959	0.609	0.3639	Biso	1	H	0.171816
C225	1	0.43876	0.08101	0.81567	Biso	1	C	0.102597
C226	1	0.1249	0.68758	0.70819	Biso	1	C	0.099145
C227	1	0.31513	0.46824	0.78261	Biso	1	C	0.101171
C228	1	0.5226	0.60568	0.38838	Biso	1	C	0.099547
C229	1	0.51011	0.09397	0.83998	Biso	1	C	-0.164496
H209	1	0.5527	0.0868	0.8353	Biso	1	H	0.098329
C230	1	0.1254	0.69848	0.74381	Biso	1	C	-0.17288
H210	1	0.1658	0.6912	0.7672	Biso	1	H	0.110239
C231	1	0.26805	0.45145	0.74758	Biso	1	C	-0.183748
H211	1	0.2625	0.462	0.7236	Biso	1	H	0.10693
C232	1	0.4554	0.61833	0.3884	Biso	1	C	-0.169357
H212	1	0.4105	0.6169	0.3653	Biso	1	H	0.11315
C233	1	0.52017	0.11703	0.87084	Biso	1	C	-0.119824
H213	1	0.5694	0.1251	0.8874	Biso	1	H	0.118028
C234	1	0.0675	0.71985	0.74545	Biso	1	C	-0.104612
H214	1	0.0683	0.7269	0.7698	Biso	1	H	0.128176
C235	1	0.22954	0.41957	0.74776	Biso	1	C	-0.116079
H215	1	0.197	0.4087	0.7239	Biso	1	H	0.122859
C236	1	0.4526	0.63321	0.4221	Biso	1	C	-0.102389
H216	1	0.4058	0.6411	0.4218	Biso	1	H	0.128472
C237	1	0.45838	0.12842	0.87753	Biso	1	C	-0.001654
C238	1	0.008	0.73099	0.71099	Biso	1	C	-0.003323
C239	1	0.2385	0.40344	0.78304	Biso	1	C	-0.000451
C240	1	0.5181	0.63632	0.45573	Biso	1	C	-0.003429

C241	1	0.38622	0.1155	0.85369	Biso	1	C	-0.092176
H217	1	0.3436	0.1231	0.8581	Biso	1	H	0.132172
C242	1	0.00575	0.71871	0.6758	Biso	1	C	-0.101282
H218	1	0.9647	0.7253	0.6523	Biso	1	H	0.128688
C243	1	0.28291	0.42	0.81708	Biso	1	C	-0.099503
H219	1	0.2886	0.4091	0.8409	Biso	1	H	0.126303
C244	1	0.5864	0.62268	0.45617	Biso	1	C	-0.102015
H220	1	0.6314	0.6242	0.4792	Biso	1	H	0.127121
C245	1	0.37748	0.09167	0.82387	Biso	1	C	-0.166389
H221	1	0.3287	0.0822	0.8085	Biso	1	H	0.112167
C246	1	0.0626	0.69698	0.67482	Biso	1	C	-0.171286
H222	1	0.0591	0.6881	0.6505	Biso	1	H	0.110568
C247	1	0.32016	0.4527	0.81763	Biso	1	C	-0.169189
H223	1	0.3489	0.4645	0.8416	Biso	1	H	0.116109
C248	1	0.5877	0.60724	0.42321	Biso	1	C	-0.174614
H224	1	0.6336	0.5974	0.4241	Biso	1	H	0.110588
C249	1	0.4679	0.15536	0.90966	Biso	1	C	0.559933
C250	1	0.95108	0.7579	0.7122	Biso	1	C	0.563585
C251	1	0.19927	0.36808	0.78323	Biso	1	C	0.554452
C252	1	0.5178	0.65748	0.48978	Biso	1	C	0.557461
O33	1	0.40715	0.16934	0.90879	Biso	1	O	-0.545478
O34	1	0.95299	0.76633	0.74557	Biso	1	O	-0.562746
O35	1	0.15159	0.35645	0.7508	Biso	1	O	-0.555781
O36	1	0.58254	0.66614	0.51577	Biso	1	O	-0.551003
O37	1	0.53412	0.16259	0.9334	Biso	1	O	-0.554293
O38	1	0.90751	0.77137	0.68011	Biso	1	O	-0.541998
O39	1	0.21788	0.35267	0.81567	Biso	1	O	-0.546255
O40	1	0.4536	0.666	0.48908	Biso	1	O	-0.547211
N41	1	0.29097	0.97841	0.69694	Biso	1	N	0.091587
N42	1	0.40465	0.65703	0.69125	Biso	1	N	0.087455
N43	1	0.49067	0.59899	0.83542	Biso	1	N	0.080391
N44	1	0.56838	0.59636	0.24318	Biso	1	N	0.091759
N45	1	0.33725	0.94928	0.71213	Biso	1	N	-0.27234
N46	1	0.44698	0.63987	0.72494	Biso	1	N	-0.283282
N47	1	0.44359	0.623	0.80864	Biso	1	N	-0.259678
N48	1	0.50602	0.5787	0.21705	Biso	1	N	-0.287343
C253	1	0.2933	0.92328	0.71675	Biso	1	C	0.23058
C254	1	0.51416	0.65628	0.73825	Biso	1	C	0.232345
C255	1	0.4362	0.65075	0.82977	Biso	1	C	0.232383
C256	1	0.48136	0.59922	0.18463	Biso	1	C	0.226618
C257	1	0.21873	0.93597	0.70441	Biso	1	C	-0.180811
C258	1	0.51476	0.68354	0.71222	Biso	1	C	-0.172041
C259	1	0.4772	0.64433	0.86926	Biso	1	C	-0.1848
C260	1	0.53004	0.62966	0.19034	Biso	1	C	-0.179596
C261	1	0.21969	0.97142	0.69207	Biso	1	C	0.146607
C262	1	0.44441	0.68346	0.68252	Biso	1	C	0.160703
C263	1	0.5123	0.61076	0.87228	Biso	1	C	0.151137
C264	1	0.58375	0.6275	0.22807	Biso	1	C	0.172422
C265	1	0.3257	0.88596	0.73176	Biso	1	C	-0.528349
H225	1	0.337	0.8843	0.7595	Biso	1	H	0.176275
H226	1	0.289	0.8671	0.7176	Biso	1	H	0.179262
H227	1	0.3722	0.8824	0.7279	Biso	1	H	0.176613

C266	1	0.5771	0.64428	0.77566	Biso	1	C	-0.521983
H228	1	0.5773	0.6176	0.7774	Biso	1	H	0.150888
H229	1	0.6255	0.6526	0.7763	Biso	1	H	0.17262
H230	1	0.5695	0.6549	0.7976	Biso	1	H	0.171117
C267	1	0.3892	0.68337	0.80968	Biso	1	C	-0.5199
H231	1	0.3379	0.6804	0.8083	Biso	1	H	0.167262
H232	1	0.4119	0.7056	0.8243	Biso	1	H	0.180173
H233	1	0.3871	0.6853	0.7834	Biso	1	H	0.172559
C268	1	0.41301	0.58902	0.15004	Biso	1	C	-0.523109
H234	1	0.3703	0.604	0.149	Biso	1	H	0.17553
H235	1	0.4218	0.5932	0.1266	Biso	1	H	0.176831
H236	1	0.4016	0.5631	0.1516	Biso	1	H	0.150685
C269	1	0.1573	0.99922	0.67573	Biso	1	C	-0.514277
H237	1	0.1426	0.0017	0.6477	Biso	1	H	0.169538
H238	1	0.1136	0.9912	0.6804	Biso	1	H	0.190905
H239	1	0.175	0.0229	0.6884	Biso	1	H	0.160049
C270	1	0.40971	0.70668	0.64619	Biso	1	C	-0.520737
H240	1	0.3608	0.7161	0.6438	Biso	1	H	0.157466
H241	1	0.4434	0.7272	0.6479	Biso	1	H	0.195051
H242	1	0.4025	0.6918	0.6234	Biso	1	H	0.18353
C271	1	0.5625	0.58924	0.90665	Biso	1	C	-0.515872
H243	1	0.6142	0.5898	0.9084	Biso	1	H	0.168111
H244	1	0.5615	0.5998	0.9303	Biso	1	H	0.19179
H245	1	0.5449	0.5639	0.9039	Biso	1	H	0.164354
C272	1	0.64618	0.65273	0.25101	Biso	1	C	-0.516333
H246	1	0.6941	0.6393	0.2611	Biso	1	H	0.171699
H247	1	0.6487	0.6727	0.2343	Biso	1	H	0.192561
H248	1	0.6369	0.6627	0.2727	Biso	1	H	0.167091
C273	1	0.15443	0.91548	0.70566	Biso	1	C	0.096913
C274	1	0.58	0.70623	0.71449	Biso	1	C	0.096737
C275	1	0.4852	0.66942	0.90192	Biso	1	C	0.098302
C276	1	0.52468	0.65822	0.16164	Biso	1	C	0.097962
C277	1	0.0866	0.9113	0.67326	Biso	1	C	-0.174765
H249	1	0.08	0.9229	0.6496	Biso	1	H	0.109752
C278	1	0.59723	0.70944	0.68203	Biso	1	C	-0.150992
H250	1	0.5671	0.697	0.6587	Biso	1	H	0.115654
C279	1	0.4225	0.68458	0.90445	Biso	1	C	-0.16948
H251	1	0.3738	0.6775	0.8863	Biso	1	H	0.111077
C280	1	0.45717	0.67651	0.14062	Biso	1	C	-0.179647
H252	1	0.4126	0.6699	0.1437	Biso	1	H	0.11068
C281	1	0.0289	0.89059	0.67496	Biso	1	C	-0.105324
H253	1	0.9839	0.8871	0.6522	Biso	1	H	0.125567
C282	1	0.65723	0.73045	0.68339	Biso	1	C	-0.087652
H254	1	0.6671	0.7327	0.6608	Biso	1	H	0.131666
C283	1	0.4289	0.71035	0.93329	Biso	1	C	-0.105253
H255	1	0.385	0.7209	0.9343	Biso	1	H	0.1301
C284	1	0.45501	0.7045	0.11499	Biso	1	C	-0.116911
H256	1	0.4088	0.7167	0.1005	Biso	1	H	0.117833
C285	1	0.03583	0.87483	0.70972	Biso	1	C	0.000352
C286	1	0.70265	0.74807	0.71676	Biso	1	C	-0.012548
C287	1	0.4993	0.72015	0.96003	Biso	1	C	0.000506
C288	1	0.51983	0.71462	0.11061	Biso	1	C	-0.017921

C289	1	0.1015	0.87928	0.74229	Biso	1	C	-0.10164
H257	1	0.1065	0.869	0.7663	Biso	1	H	0.129596
C290	1	0.6879	0.74487	0.75002	Biso	1	C	-0.118868
H258	1	0.7193	0.7569	0.7734	Biso	1	H	0.120151
C291	1	0.5637	0.70431	0.95875	Biso	1	C	-0.10353
H259	1	0.6126	0.7104	0.9776	Biso	1	H	0.131265
C292	1	0.58757	0.69605	0.13095	Biso	1	C	-0.084596
H260	1	0.6319	0.7027	0.1276	Biso	1	H	0.133429
C293	1	0.161	0.89899	0.73995	Biso	1	C	-0.166819
H261	1	0.207	0.9012	0.7624	Biso	1	H	0.109946
C294	1	0.62684	0.72397	0.7485	Biso	1	C	-0.179997
H262	1	0.6169	0.7218	0.7711	Biso	1	H	0.109365
C295	1	0.5547	0.67931	0.92918	Biso	1	C	-0.174716
H263	1	0.5984	0.6688	0.9279	Biso	1	H	0.105749
C296	1	0.58965	0.66789	0.15602	Biso	1	C	-0.154979
H264	1	0.6355	0.655	0.1695	Biso	1	H	0.11796
C297	1	0.9731	0.8514	0.7111	Biso	1	C	0.565127
C298	1	0.76645	0.77114	0.71732	Biso	1	C	0.566575
C299	1	0.5072	0.74854	0.98995	Biso	1	C	0.562405
C300	1	0.51893	0.74607	0.08472	Biso	1	C	0.570669
O41	1	0.91724	0.84548	0.67948	Biso	1	O	-0.552251
O42	1	0.76878	0.77709	0.68474	Biso	1	O	-0.543518
O43	1	0.4464	0.75978	0.99155	Biso	1	O	-0.554633
O44	1	0.58129	0.75493	0.0842	Biso	1	O	-0.541763
O45	1	0.98146	0.83921	0.74395	Biso	1	O	-0.555912
O46	1	0.81405	0.78286	0.74982	Biso	1	O	-0.565029
O47	1	0.57295	0.75968	0.01058	Biso	1	O	-0.544052
O48	1	0.45676	0.76145	0.06615	Biso	1	O	-0.561072
Cu19	1	0.09641	0.31072	0.74703	Biso	1	Cu	0.717185
C301	1	0.67548	0.51154	0.80985	Biso	1	C	-0.054444
H265	1	0.7157	0.5293	0.8242	Biso	1	H	0.121914
H266	1	0.6476	0.5059	0.826	Biso	1	H	0.108733
C302	1	0.67134	0.1441	0.8309	Biso	1	C	-0.051713
H267	1	0.6924	0.1564	0.8565	Biso	1	H	0.130455
H268	1	0.6701	0.1175	0.8355	Biso	1	H	0.115224
C303	1	0.4879	0.06613	0.67947	Biso	1	C	-0.057645
H269	1	0.4498	0.0524	0.6577	Biso	1	H	0.115453
H270	1	0.4649	0.0731	0.6975	Biso	1	H	0.104925
C304	1	0.39284	0.08096	0.21849	Biso	1	C	-0.059175
H271	1	0.3831	0.0547	0.2209	Biso	1	H	0.104716
H272	1	0.3435	0.0933	0.2052	Biso	1	H	0.126881
Cu20	1	0.16201	0.31124	0.82339	Biso	1	Cu	0.730218
Cu21	1	0.40693	0.29486	0.44716	Biso	1	Cu	0.74669
Cu22	1	0.55494	0.2991	0.47309	Biso	1	Cu	0.704704
Cu23	1	0.54789	0.04333	0.26222	Biso	1	Cu	0.221752
Cu24	1	0.60501	0.10782	0.74922	Biso	1	Cu	0.213141
N49	1	0.62448	0.52745	0.77348	Biso	1	N	0.070898
N50	1	0.71992	0.15105	0.81097	Biso	1	N	0.088297
N51	1	0.55249	0.0432	0.69941	Biso	1	N	0.096255
N52	1	0.43649	0.08482	0.19499	Biso	1	N	0.077257
N53	1	0.55492	0.51144	0.75407	Biso	1	N	-0.29172
N54	1	0.71141	0.12974	0.77979	Biso	1	N	-0.279496

N55	1	0.60507	0.05469	0.73428	Biso	1	N	-0.265242
N56	1	0.50256	0.06591	0.20614	Biso	1	N	-0.266485
C305	1	0.52233	0.52951	0.72025	Biso	1	C	0.241856
C306	1	0.76589	0.14029	0.76914	Biso	1	C	0.228675
C307	1	0.65978	0.02948	0.74542	Biso	1	C	0.229687
C308	1	0.5248	0.0714	0.17735	Biso	1	C	0.229159
C309	1	0.5731	0.5565	0.71741	Biso	1	C	-0.17779
C310	1	0.81045	0.16813	0.79355	Biso	1	C	-0.181785
C311	1	0.64122	0.00152	0.71701	Biso	1	C	-0.195429
C312	1	0.4731	0.09308	0.148	Biso	1	C	-0.187161
C313	1	0.63699	0.55438	0.75216	Biso	1	C	0.152252
C314	1	0.77864	0.17468	0.82007	Biso	1	C	0.154925
C315	1	0.57171	0.01123	0.68807	Biso	1	C	0.157797
C316	1	0.4162	0.10135	0.15998	Biso	1	C	0.166687
C317	1	0.44489	0.51997	0.69222	Biso	1	C	-0.521985
H273	1	0.4098	0.5393	0.6921	Biso	1	H	0.161767
H274	1	0.444	0.5175	0.6662	Biso	1	H	0.183334
H275	1	0.4297	0.4968	0.6999	Biso	1	H	0.159036
C318	1	0.7745	0.12119	0.73553	Biso	1	C	-0.520601
H276	1	0.7545	0.1369	0.7125	Biso	1	H	0.167928
H277	1	0.8281	0.1163	0.7424	Biso	1	H	0.178647
H278	1	0.7466	0.0981	0.73	Biso	1	H	0.172001
C319	1	0.72755	0.03394	0.78259	Biso	1	C	-0.520743
H279	1	0.7239	0.0174	0.8022	Biso	1	H	0.167554
H280	1	0.773	0.0281	0.7785	Biso	1	H	0.18186
H281	1	0.7304	0.0592	0.7916	Biso	1	H	0.162231
C320	1	0.5966	0.05287	0.18002	Biso	1	C	-0.519138
H282	1	0.6088	0.0326	0.1986	Biso	1	H	0.167418
H283	1	0.5892	0.0434	0.1544	Biso	1	H	0.180594
H284	1	0.6381	0.0706	0.1888	Biso	1	H	0.165503
C321	1	0.70785	0.57629	0.76809	Biso	1	C	-0.522222
H285	1	0.7478	0.5632	0.7638	Biso	1	H	0.175557
H286	1	0.6991	0.6001	0.755	Biso	1	H	0.192376
H287	1	0.7233	0.58	0.796	Biso	1	H	0.16267
C322	1	0.7973	0.2019	0.85213	Biso	1	C	-0.519473
H288	1	0.8208	0.1894	0.8772	Biso	1	H	0.174406
H289	1	0.8324	0.2201	0.85	Biso	1	H	0.190395
H290	1	0.751	0.2141	0.8502	Biso	1	H	0.168259
C323	1	0.52192	0.9925	0.65197	Biso	1	C	-0.524192
H291	1	0.5326	0.0014	0.6303	Biso	1	H	0.174834
H292	1	0.531	0.9661	0.6549	Biso	1	H	0.186996
H293	1	0.4691	0.9975	0.6468	Biso	1	H	0.155166
C324	1	0.3493	0.1241	0.14266	Biso	1	C	-0.518898
H294	1	0.3502	0.1431	0.1612	Biso	1	H	0.172221
H295	1	0.3484	0.1356	0.119	Biso	1	H	0.188711
H296	1	0.3041	0.109	0.1361	Biso	1	H	0.171636
C325	1	0.56124	0.58101	0.68433	Biso	1	C	0.103163
C326	1	0.8751	0.18758	0.79181	Biso	1	C	0.098978
C327	1	0.68487	0.96824	0.71739	Biso	1	C	0.102099
C328	1	0.4774	0.10568	0.11162	Biso	1	C	0.098566
C329	1	0.48989	0.59397	0.66002	Biso	1	C	-0.164511
H297	1	0.4473	0.5868	0.6647	Biso	1	H	0.098376

C330	1	0.8746	0.19848	0.75619	Biso	1	C	-0.173298
H298	1	0.8342	0.1912	0.7328	Biso	1	H	0.110435
C331	1	0.73195	0.95145	0.75242	Biso	1	C	-0.18307
H299	1	0.7375	0.962	0.7764	Biso	1	H	0.10672
C332	1	0.5446	0.11833	0.1116	Biso	1	C	-0.169897
H300	1	0.5895	0.1169	0.1347	Biso	1	H	0.112609
C333	1	0.47983	0.61703	0.62916	Biso	1	C	-0.118772
H301	1	0.4306	0.6251	0.6126	Biso	1	H	0.11821
C334	1	0.9325	0.21985	0.75455	Biso	1	C	-0.104351
H302	1	0.9317	0.2269	0.7302	Biso	1	H	0.128602
C335	1	0.77046	0.91957	0.75224	Biso	1	C	-0.114011
H303	1	0.803	0.9087	0.7761	Biso	1	H	0.122904
C336	1	0.5474	0.13321	0.0779	Biso	1	C	-0.102602
H304	1	0.5942	0.1411	0.0782	Biso	1	H	0.128377
C337	1	0.54162	0.62842	0.62247	Biso	1	C	-0.002343
C338	1	0.992	0.23099	0.78901	Biso	1	C	-0.003081
C339	1	0.7615	0.90344	0.71696	Biso	1	C	-0.004711
C340	1	0.4819	0.13632	0.04427	Biso	1	C	-0.00277
C341	1	0.61378	0.6155	0.64631	Biso	1	C	-0.092351
H305	1	0.6564	0.6231	0.6419	Biso	1	H	0.132432
C342	1	0.99425	0.21871	0.8242	Biso	1	C	-0.101088
H306	1	0.0353	0.2253	0.8477	Biso	1	H	0.128447
C343	1	0.71709	0.92	0.68292	Biso	1	C	-0.098029
H307	1	0.7114	0.9091	0.6591	Biso	1	H	0.127121
C344	1	0.4136	0.12268	0.04383	Biso	1	C	-0.101657
H308	1	0.3686	0.1242	0.0208	Biso	1	H	0.127267
C345	1	0.62252	0.59167	0.67613	Biso	1	C	-0.165929
H309	1	0.6713	0.5822	0.6915	Biso	1	H	0.112201
C346	1	0.9374	0.19698	0.82518	Biso	1	C	-0.171112
H310	1	0.9409	0.1881	0.8495	Biso	1	H	0.109893
C347	1	0.67984	0.9527	0.68237	Biso	1	C	-0.16838
H311	1	0.6511	0.9645	0.6584	Biso	1	H	0.116777
C348	1	0.4123	0.10724	0.07679	Biso	1	C	-0.174901
H312	1	0.3664	0.0974	0.0759	Biso	1	H	0.110385
C349	1	0.5321	0.65536	0.59034	Biso	1	C	0.560006
C350	1	0.04892	0.2579	0.7878	Biso	1	C	0.563615
C351	1	0.80073	0.86808	0.71677	Biso	1	C	0.556096
C352	1	0.4822	0.15748	0.01022	Biso	1	C	0.556589
O49	1	0.59285	0.66934	0.59121	Biso	1	O	-0.545013
O50	1	0.04701	0.26633	0.75443	Biso	1	O	-0.56249
O51	1	0.84841	0.85645	0.7492	Biso	1	O	-0.555518
O52	1	0.41746	0.16614	0.98423	Biso	1	O	-0.551495
O53	1	0.46588	0.66259	0.5666	Biso	1	O	-0.553263
O54	1	0.09249	0.27137	0.81989	Biso	1	O	-0.542682
O55	1	0.78212	0.85267	0.68433	Biso	1	O	-0.545228
O56	1	0.5464	0.166	0.01092	Biso	1	O	-0.548373
N57	1	0.70903	0.47841	0.80306	Biso	1	N	0.088363
N58	1	0.59535	0.15703	0.80875	Biso	1	N	0.087594
N59	1	0.50933	0.09899	0.66458	Biso	1	N	0.080729
N60	1	0.43162	0.09636	0.25682	Biso	1	N	0.091877
N61	1	0.66275	0.44928	0.78787	Biso	1	N	-0.270965
N62	1	0.55302	0.13987	0.77506	Biso	1	N	-0.283541

N63	1	0.55641	0.123	0.69136	Biso	1	N	-0.260678
N64	1	0.49398	0.0787	0.28295	Biso	1	N	-0.287075
C353	1	0.7067	0.42328	0.78325	Biso	1	C	0.230656
C354	1	0.48584	0.15628	0.76175	Biso	1	C	0.232755
C355	1	0.5638	0.15075	0.67023	Biso	1	C	0.232641
C356	1	0.51864	0.09922	0.31537	Biso	1	C	0.226413
C357	1	0.78127	0.43597	0.79559	Biso	1	C	-0.180786
C358	1	0.48524	0.18354	0.78778	Biso	1	C	-0.171599
C359	1	0.5228	0.14433	0.63074	Biso	1	C	-0.184697
C360	1	0.46996	0.12966	0.30966	Biso	1	C	-0.180359
C361	1	0.78031	0.47142	0.80793	Biso	1	C	0.148128
C362	1	0.55559	0.18346	0.81748	Biso	1	C	0.160764
C363	1	0.4877	0.11076	0.62772	Biso	1	C	0.151562
C364	1	0.41625	0.1275	0.27193	Biso	1	C	0.171904
C365	1	0.6743	0.38596	0.76824	Biso	1	C	-0.528298
H313	1	0.663	0.3843	0.7405	Biso	1	H	0.176696
H314	1	0.711	0.3671	0.7824	Biso	1	H	0.178988
H315	1	0.6278	0.3824	0.7721	Biso	1	H	0.17627
C366	1	0.4229	0.14428	0.72434	Biso	1	C	-0.52213
H316	1	0.4227	0.1176	0.7226	Biso	1	H	0.150744
H317	1	0.3745	0.1526	0.7237	Biso	1	H	0.172527
H318	1	0.4305	0.1549	0.7024	Biso	1	H	0.171625
C367	1	0.6108	0.18337	0.69032	Biso	1	C	-0.520334
H319	1	0.6621	0.1804	0.6917	Biso	1	H	0.167455
H320	1	0.5881	0.2056	0.6757	Biso	1	H	0.180373
H321	1	0.6129	0.1853	0.7166	Biso	1	H	0.172688
C368	1	0.58699	0.08902	0.34996	Biso	1	C	-0.52319
H322	1	0.6297	0.104	0.351	Biso	1	H	0.175629
H323	1	0.5782	0.0932	0.3734	Biso	1	H	0.176451
H324	1	0.5984	0.0631	0.3484	Biso	1	H	0.150818
C369	1	0.8427	0.49922	0.82427	Biso	1	C	-0.514511
H325	1	0.8574	0.5017	0.8523	Biso	1	H	0.168965
H326	1	0.8864	0.4912	0.8196	Biso	1	H	0.191366
H327	1	0.825	0.5229	0.8116	Biso	1	H	0.160294
C370	1	0.59029	0.20668	0.85381	Biso	1	C	-0.521013
H328	1	0.6392	0.2161	0.8562	Biso	1	H	0.157754
H329	1	0.5566	0.2272	0.8521	Biso	1	H	0.195381
H330	1	0.5975	0.1918	0.8766	Biso	1	H	0.183054
C371	1	0.4375	0.08924	0.59335	Biso	1	C	-0.516318
H331	1	0.3858	0.0898	0.5916	Biso	1	H	0.168108
H332	1	0.4385	0.0998	0.5697	Biso	1	H	0.192257
H333	1	0.4551	0.0639	0.5961	Biso	1	H	0.164427
C372	1	0.35382	0.15273	0.24899	Biso	1	C	-0.516179
H334	1	0.3059	0.1393	0.2389	Biso	1	H	0.171431
H335	1	0.3513	0.1727	0.2657	Biso	1	H	0.192089
H336	1	0.3631	0.1627	0.2273	Biso	1	H	0.167675
C373	1	0.84557	0.41548	0.79434	Biso	1	C	0.096196
C374	1	0.42	0.20623	0.78551	Biso	1	C	0.096188
C375	1	0.5148	0.16942	0.59808	Biso	1	C	0.09889
C376	1	0.47532	0.15822	0.33836	Biso	1	C	0.098581
C377	1	0.9134	0.4113	0.82674	Biso	1	C	-0.174997
H337	1	0.92	0.4229	0.8504	Biso	1	H	0.109229

C378	1	0.40277	0.20944	0.81797	Biso	1	C	-0.150641
H338	1	0.4329	0.197	0.8413	Biso	1	H	0.115153
C379	1	0.5775	0.18458	0.59555	Biso	1	C	-0.168828
H339	1	0.6262	0.1775	0.6137	Biso	1	H	0.111083
C380	1	0.54283	0.17651	0.35938	Biso	1	C	-0.179105
H340	1	0.5874	0.1699	0.3563	Biso	1	H	0.11102
C381	1	0.9711	0.39059	0.82504	Biso	1	C	-0.105208
H341	1	0.0161	0.3871	0.8478	Biso	1	H	0.125427
C382	1	0.34277	0.23045	0.81661	Biso	1	C	-0.087361
H342	1	0.3329	0.2327	0.8392	Biso	1	H	0.131314
C383	1	0.5711	0.21035	0.56671	Biso	1	C	-0.105256
H343	1	0.615	0.2209	0.5657	Biso	1	H	0.130484
C384	1	0.54499	0.2045	0.38501	Biso	1	C	-0.116296
H344	1	0.5912	0.2167	0.3995	Biso	1	H	0.118034
C385	1	0.96417	0.37483	0.79028	Biso	1	C	0.000659
C386	1	0.29735	0.24807	0.78324	Biso	1	C	-0.012681
C387	1	0.5007	0.22015	0.53997	Biso	1	C	0.000489
C388	1	0.48017	0.21462	0.38939	Biso	1	C	-0.018158
C389	1	0.8985	0.37928	0.75771	Biso	1	C	-0.101955
H345	1	0.8935	0.369	0.7337	Biso	1	H	0.130121
C390	1	0.3121	0.24487	0.74998	Biso	1	C	-0.118603
H346	1	0.2807	0.2569	0.7266	Biso	1	H	0.120361
C391	1	0.4363	0.20431	0.54125	Biso	1	C	-0.103611
H347	1	0.3874	0.2104	0.5224	Biso	1	H	0.131365
C392	1	0.41243	0.19605	0.36905	Biso	1	C	-0.08503
H348	1	0.3681	0.2027	0.3724	Biso	1	H	0.132983
C393	1	0.839	0.39899	0.76005	Biso	1	C	-0.166864
H349	1	0.793	0.4012	0.7376	Biso	1	H	0.110102
C394	1	0.37316	0.22397	0.7515	Biso	1	C	-0.180307
H350	1	0.3831	0.2218	0.7289	Biso	1	H	0.109599
C395	1	0.4453	0.17931	0.57082	Biso	1	C	-0.174746
H351	1	0.4016	0.1688	0.5721	Biso	1	H	0.105759
C396	1	0.41035	0.16789	0.34398	Biso	1	C	-0.15543
H352	1	0.3645	0.155	0.3305	Biso	1	H	0.11774
C397	1	0.0269	0.3514	0.7889	Biso	1	C	0.564342
C398	1	0.23355	0.27114	0.78268	Biso	1	C	0.566396
C399	1	0.4928	0.24854	0.51005	Biso	1	C	0.562598
C400	1	0.48107	0.24607	0.41528	Biso	1	C	0.571209
O57	1	0.08276	0.34548	0.82052	Biso	1	O	-0.552721
O58	1	0.23122	0.27709	0.81526	Biso	1	O	-0.544623
O59	1	0.5536	0.25978	0.50845	Biso	1	O	-0.554006
O60	1	0.41871	0.25493	0.4158	Biso	1	O	-0.541776
O61	1	0.01854	0.33921	0.75605	Biso	1	O	-0.55581
O62	1	0.18595	0.28286	0.75018	Biso	1	O	-0.564789
O63	1	0.42705	0.25968	0.48942	Biso	1	O	-0.543653
O64	1	0.54324	0.26145	0.43385	Biso	1	O	-0.560657

data_BEWCUD_CLEAN

_cell_length_a 30.701

_cell_length_b 30.701

_cell_length_c 28.957

_cell_angle_alpha 90

_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x, y, z'

loop_

_atom_site_label

_atom_site_occupancy

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv

_atom_site_type_symbol

_atom_site_charge

O1	1	0.30158	0.13417	0.04806	Biso	1	O	-0.596831
O2	1	0.35413	0.08234	0.04844	Biso	1	O	-0.551321
C1	1	0.3205	0.0986	0.0623	Biso	1	C	0.609936
C2	1	0.2945	0.0785	0.1006	Biso	1	C	-0.035503
C3	1	0.2566	0.0954	0.118	Biso	1	C	-0.088236
H1	1	0.2456	0.1208	0.105	Biso	1	H	0.12209
C4	1	0.2342	0.0765	0.1535	Biso	1	C	-0.158787
H2	1	0.2079	0.0879	0.1638	Biso	1	H	0.126439
C5	1	0.2526	0.0383	0.1746	Biso	1	C	0.072923
C6	1	0.2907	0.0208	0.1571	Biso	1	C	-0.160249
H3	1	0.302	0.9954	0.17	Biso	1	H	0.12181
C7	1	0.3123	0.0406	0.1205	Biso	1	C	-0.110326
H4	1	0.3382	0.029	0.1093	Biso	1	H	0.123192
C8	1	0.2273	0.0165	0.2138	Biso	1	C	0.09473
C9	1	0.1839	0.0165	0.2143	Biso	1	C	-0.21553
H5	1	0.1692	0.0282	0.1892	Biso	1	H	0.122794
C10	1	0.09058	0.96111	0.25069	Biso	1	C	0.182399
C11	1	0.11263	0.91887	0.2502	Biso	1	C	-0.205554
H6	1	0.1426	0.9143	0.2502	Biso	1	H	0.1369
O3	1	0.80158	0.63417	0.54806	Biso	1	O	-0.596783
O4	1	0.85413	0.58234	0.54844	Biso	1	O	-0.551245
C12	1	0.8205	0.5986	0.5623	Biso	1	C	0.60983
C13	1	0.7945	0.5785	0.6006	Biso	1	C	-0.035413
C14	1	0.7566	0.5954	0.618	Biso	1	C	-0.088226
H7	1	0.7456	0.6208	0.605	Biso	1	H	0.122038
C15	1	0.7342	0.5765	0.6535	Biso	1	C	-0.158789

H8	1	0.7079	0.5879	0.6638	Biso	1	H	0.126436	
C16	1	0.7526	0.5383	0.6746	Biso	1	C	0.072881	
C17	1	0.7907	0.5208	0.6571	Biso	1	C	-0.160419	
H9	1	0.802	0.4954	0.67	Biso	1	H	0.121918	
C18	1	0.8123	0.5406	0.6205	Biso	1	C	-0.110306	
H10	1	0.8382	0.529	0.6093	Biso	1	H	0.123196	
C19	1	0.7273	0.5165	0.7138	Biso	1	C	0.094728	
C20	1	0.6839	0.5165	0.7143	Biso	1	C	-0.215481	
H11	1	0.6692	0.5282	0.6892	Biso	1	H	0.122883	
C21	1	0.59058	0.46111	0.75069	Biso	1	C	0.18277	
C22	1	0.61263	0.41887	0.7502	Biso	1	C	-0.205642	
H12	1	0.6426	0.4143	0.7502	Biso	1	H	0.136754	
O5	1	0.69842	0.86583	0.04806	Biso	1	O	-0.596681	
O6	1	0.64587	0.91766	0.04844	Biso	1	O	-0.551158	
C23	1	0.6795	0.9014	0.0623	Biso	1	C	0.609595	
C24	1	0.7055	0.9215	0.1006	Biso	1	C	-0.035306	
C25	1	0.7434	0.9046	0.118	Biso	1	C	-0.08838	
H13	1	0.7544	0.8792	0.105	Biso	1	H	0.122255	
C26	1	0.7658	0.9235	0.1535	Biso	1	C	-0.158871	
H14	1	0.7921	0.9121	0.1638	Biso	1	H	0.126433	
C27	1	0.7474	0.9617	0.1746	Biso	1	C	0.072942	
C28	1	0.7093	0.9792	0.1571	Biso	1	C	-0.160267	
H15	1	0.698	0.0046	0.17	Biso	1	H	0.121722	
C29	1	0.6877	0.9594	0.1205	Biso	1	C	-0.110525	
H16	1	0.6618	0.971	0.1093	Biso	1	H	0.123377	
C30	1	0.7727	0.9835	0.2138	Biso	1	C	0.094532	
C31	1	0.8161	0.9835	0.2143	Biso	1	C	-0.215417	
H17	1	0.8308	0.9718	0.1892	Biso	1	H	0.122647	
C32	1	0.90942	0.03889	0.25069	Biso	1	C	0.182521	
C33	1	0.88737	0.08113	0.2502	Biso	1	C	-0.205346	
H18	1	0.8574	0.0857	0.2502	Biso	1	H	0.137051	
O7	1	0.19842	0.36583	0.54806	Biso	1	O	-0.596667	
O8	1	0.14587	0.41766	0.54844	Biso	1	O	-0.551219	
C34	1	0.1795	0.4014	0.5623	Biso	1	C	0.609654	
C35	1	0.2055	0.4215	0.6006	Biso	1	C	-0.035267	
C36	1	0.2434	0.4046	0.618	Biso	1	C	-0.088411	
H19	1	0.2544	0.3792	0.605	Biso	1	H	0.122228	
C37	1	0.2658	0.4235	0.6535	Biso	1	C	-0.158842	
H20	1	0.2921	0.4121	0.6638	Biso	1	H	0.12644	
C38	1	0.2474	0.4617	0.6746	Biso	1	C	0.07285	
C39	1	0.2093	0.4792	0.6571	Biso	1	C	-0.160222	
H21	1	0.198	0.5046	0.67	Biso	1	H	0.121711	
C40	1	0.1877	0.4594	0.6205	Biso	1	C	-0.110512	
H22	1	0.1618	0.471	0.6093	Biso	1	H	0.123382	
C41	1	0.2727	0.4835	0.7138	Biso	1	C	0.094714	
C42	1	0.3161	0.4835	0.7143	Biso	1	C	-0.215366	
H23	1	0.3308	0.4718	0.6892	Biso	1	H	0.122768	
C43	1	0.40942	0.53889	0.75069	Biso	1	C	0.182399	
C44	1	0.38737	0.58113	0.7502	Biso	1	C	-0.205346	
H24	1	0.3574	0.5857	0.7502	Biso	1	H	0.136934	
O9	1	0.86583	0.30158	0.04806	Biso	1	O	-0.596419	
O10	1	0.91766	0.35413	0.04844	Biso	1	O	-0.551364	

C45	1	0.9014	0.3205	0.0623	Biso	1	C	0.609562		
C46	1	0.9215	0.2945	0.1006	Biso	1	C	-0.03537		
C47	1	0.9046	0.2566	0.118	Biso	1	C	-0.088346		
H25	1	0.8792	0.2456	0.105	Biso	1	H	0.122357		
C48	1	0.9235	0.2342	0.1535	Biso	1	C	-0.158844		
H26	1	0.9121	0.2079	0.1638	Biso	1	H	0.126666		
C49	1	0.9617	0.2526	0.1746	Biso	1	C	0.072919		
C50	1	0.9792	0.2907	0.1571	Biso	1	C	-0.160437		
H27	1	0.0046	0.302	0.17	Biso	1	H	0.121748		
C51	1	0.9594	0.3123	0.1205	Biso	1	C	-0.110408		
H28	1	0.971	0.3382	0.1093	Biso	1	H	0.123124		
C52	1	0.9835	0.2273	0.2138	Biso	1	C	0.094579		
C53	1	0.9835	0.1839	0.2143	Biso	1	C	-0.215509		
H29	1	0.9718	0.1692	0.1892	Biso	1	H	0.122812		
C54	1	0.03889		0.09058		0.25069	Biso	1	C	0.182425
C55	1	0.08113		0.11263		0.2502	Biso	1	C	-0.205478
H30	1	0.0857	0.1426	0.2502	Biso	1	H	0.136876		
O11	1	0.36583		0.80158		0.54806	Biso	1	O	-0.596319
O12	1	0.41766		0.85413		0.54844	Biso	1	O	-0.551441
C56	1	0.4014	0.8205	0.5623	Biso	1	C	0.609572		
C57	1	0.4215	0.7945	0.6006	Biso	1	C	-0.035401		
C58	1	0.4046	0.7566	0.618	Biso	1	C	-0.088301		
H31	1	0.3792	0.7456	0.605	Biso	1	H	0.122347		
C59	1	0.4235	0.7342	0.6535	Biso	1	C	-0.158824		
H32	1	0.4121	0.7079	0.6638	Biso	1	H	0.126612		
C60	1	0.4617	0.7526	0.6746	Biso	1	C	0.072907		
C61	1	0.4792	0.7907	0.6571	Biso	1	C	-0.160402		
H33	1	0.5046	0.802	0.67	Biso	1	H	0.121703		
C62	1	0.4594	0.8123	0.6205	Biso	1	C	-0.110477		
H34	1	0.471	0.8382	0.6093	Biso	1	H	0.123149		
C63	1	0.4835	0.7273	0.7138	Biso	1	C	0.094814		
C64	1	0.4835	0.6839	0.7143	Biso	1	C	-0.215581		
H35	1	0.4718	0.6692	0.6892	Biso	1	H	0.122992		
C65	1	0.53889		0.59058		0.75069	Biso	1	C	0.182498
C66	1	0.58113		0.61263		0.7502	Biso	1	C	-0.205535
H36	1	0.5857	0.6426	0.7502	Biso	1	H	0.136713		
O13	1	0.13417		0.69842		0.04806	Biso	1	O	-0.597047
O14	1	0.08234		0.64587		0.04844	Biso	1	O	-0.551127
C67	1	0.0986	0.6795	0.0623	Biso	1	C	0.609884		
C68	1	0.0785	0.7055	0.1006	Biso	1	C	-0.035223		
C69	1	0.0954	0.7434	0.118	Biso	1	C	-0.088401		
H37	1	0.1208	0.7544	0.105	Biso	1	H	0.121982		
C70	1	0.0765	0.7658	0.1535	Biso	1	C	-0.158923		
H38	1	0.0879	0.7921	0.1638	Biso	1	H	0.126315		
C71	1	0.0383	0.7474	0.1746	Biso	1	C	0.073123		
C72	1	0.0208	0.7093	0.1571	Biso	1	C	-0.160473		
H39	1	0.9954	0.698	0.17	Biso	1	H	0.121991		
C73	1	0.0406	0.6877	0.1205	Biso	1	C	-0.110353		
H40	1	0.029	0.6618	0.1093	Biso	1	H	0.123403		
C74	1	0.0165	0.7727	0.2138	Biso	1	C	0.094526		
C75	1	0.0165	0.8161	0.2143	Biso	1	C	-0.215345		
H41	1	0.0282	0.8308	0.1892	Biso	1	H	0.122608		

C76	1	0.96111	0.90942	0.25069	Biso	1	C	0.182401
C77	1	0.91887	0.88737	0.2502	Biso	1	C	-0.205306
H42	1	0.9143	0.8574	0.2502	Biso	1	H	0.137092
O15	1	0.63417	0.19842	0.54806	Biso	1	O	-0.597032
O16	1	0.58234	0.14587	0.54844	Biso	1	O	-0.551105
C78	1	0.5986	0.1795	0.5623	Biso	1	C	0.609879
C79	1	0.5785	0.2055	0.6006	Biso	1	C	-0.035362
C80	1	0.5954	0.2434	0.618	Biso	1	C	-0.08831
H43	1	0.6208	0.2544	0.605	Biso	1	H	0.121925
C81	1	0.5765	0.2658	0.6535	Biso	1	C	-0.158811
H44	1	0.5879	0.2921	0.6638	Biso	1	H	0.126237
C82	1	0.5383	0.2474	0.6746	Biso	1	C	0.072992
C83	1	0.5208	0.2093	0.6571	Biso	1	C	-0.16045
H45	1	0.4954	0.198	0.67	Biso	1	H	0.12197
C84	1	0.5406	0.1877	0.6205	Biso	1	C	-0.110195
H46	1	0.529	0.1618	0.6093	Biso	1	H	0.123361
C85	1	0.5165	0.2727	0.7138	Biso	1	C	0.094724
C86	1	0.5165	0.3161	0.7143	Biso	1	C	-0.215454
H47	1	0.5282	0.3308	0.6892	Biso	1	H	0.122749
C87	1	0.46111	0.40942	0.75069	Biso	1	C	0.182527
C88	1	0.41887	0.38737	0.7502	Biso	1	C	-0.205467
H48	1	0.4143	0.3574	0.7502	Biso	1	H	0.137014
O17	1	0.69842	0.13417	0.45194	Biso	1	O	-0.597088
O18	1	0.64587	0.08234	0.45156	Biso	1	O	-0.551214
C89	1	0.6795	0.0986	0.4377	Biso	1	C	0.610069
C90	1	0.7055	0.0785	0.3994	Biso	1	C	-0.035433
C91	1	0.7434	0.0954	0.382	Biso	1	C	-0.088349
H49	1	0.7544	0.1208	0.395	Biso	1	H	0.121944
C92	1	0.7658	0.0765	0.3465	Biso	1	C	-0.158853
H50	1	0.7921	0.0879	0.3362	Biso	1	H	0.126311
C93	1	0.7474	0.0383	0.3254	Biso	1	C	0.073137
C94	1	0.7093	0.0208	0.3429	Biso	1	C	-0.160473
H51	1	0.698	0.9954	0.33	Biso	1	H	0.12207
C95	1	0.6877	0.0406	0.3795	Biso	1	C	-0.110428
H52	1	0.6618	0.029	0.3907	Biso	1	H	0.123409
C96	1	0.7727	0.0165	0.2862	Biso	1	C	0.094444
C97	1	0.8161	0.0165	0.2857	Biso	1	C	-0.215375
H53	1	0.8308	0.0282	0.3108	Biso	1	H	0.122494
C98	1	0.90942	0.96111	0.24931	Biso	1	C	0.18243
C99	1	0.88737	0.91887	0.2498	Biso	1	C	-0.205469
H54	1	0.8574	0.9143	0.2498	Biso	1	H	0.137132
O19	1	0.19842	0.63417	0.95194	Biso	1	O	-0.597231
O20	1	0.14587	0.58234	0.95156	Biso	1	O	-0.551346
C100	1	0.1795	0.5986	0.9377	Biso	1	C	0.610373
C101	1	0.2055	0.5785	0.8994	Biso	1	C	-0.035768
C102	1	0.2434	0.5954	0.882	Biso	1	C	-0.088299
H55	1	0.2544	0.6208	0.895	Biso	1	H	0.121866
C103	1	0.2658	0.5765	0.8465	Biso	1	C	-0.158852
H56	1	0.2921	0.5879	0.8362	Biso	1	H	0.126374
C104	1	0.2474	0.5383	0.8254	Biso	1	C	0.07216
C105	1	0.2093	0.5208	0.8429	Biso	1	C	-0.160234
H57	1	0.198	0.4954	0.83	Biso	1	H	0.122029

C106	1	0.1877	0.5406	0.8795	Biso	1	C	-0.11034	
H58	1	0.1618	0.529	0.8907	Biso	1	H	0.123234	
C107	1	0.2727	0.5165	0.7862	Biso	1	C	0.097855	
C108	1	0.3161	0.5165	0.7857	Biso	1	C	-0.216685	
H59	1	0.3308	0.5282	0.8108	Biso	1	H	0.122434	
C109	1	0.40942	0.46111	0.74931	Biso	1	C	0.182634	
C110	1	0.38737	0.41887	0.7498	Biso	1	C	-0.205571	
H60	1	0.3574	0.4143	0.7498	Biso	1	H	0.137042	
O21	1	0.30158	0.86583	0.45194	Biso	1	O	-0.596424	
O22	1	0.35413	0.91766	0.45156	Biso	1	O	-0.551439	
C111	1	0.3205	0.9014	0.4377	Biso	1	C	0.609656	
C112	1	0.2945	0.9215	0.3994	Biso	1	C	-0.035521	
C113	1	0.2566	0.9046	0.382	Biso	1	C	-0.08817	
H61	1	0.2456	0.8792	0.395	Biso	1	H	0.122221	
C114	1	0.2342	0.9235	0.3465	Biso	1	C	-0.158837	
H62	1	0.2079	0.9121	0.3362	Biso	1	H	0.126639	
C115	1	0.2526	0.9617	0.3254	Biso	1	C	0.073019	
C116	1	0.2907	0.9792	0.3429	Biso	1	C	-0.160328	
H63	1	0.302	0.0046	0.33	Biso	1	H	0.12171	
C117	1	0.3123	0.9594	0.3795	Biso	1	C	-0.110446	
H64	1	0.3382	0.971	0.3907	Biso	1	H	0.123115	
C118	1	0.2273	0.9835	0.2862	Biso	1	C	0.094533	
C119	1	0.1839	0.9835	0.2857	Biso	1	C	-0.21546	
H65	1	0.1692	0.9718	0.3108	Biso	1	H	0.122657	
C120	1	0.09058	0.03889	0.24931	Biso	1	C	0.182507	
C121	1	0.11263	0.08113	0.2498	Biso	1	C	-0.205567	
H66	1	0.1426	0.0857	0.2498	Biso	1	H	0.136869	
O23	1	0.80158	0.36583	0.95194	Biso	1	O	-0.596615	
O24	1	0.85413	0.41766	0.95156	Biso	1	O	-0.551555	
C122	1	0.8205	0.4014	0.9377	Biso	1	C	0.609941	
C123	1	0.7945	0.4215	0.8994	Biso	1	C	-0.035745	
C124	1	0.7566	0.4046	0.882	Biso	1	C	-0.088049	
H67	1	0.7456	0.3792	0.895	Biso	1	H	0.122054	
C125	1	0.7342	0.4235	0.8465	Biso	1	C	-0.158876	
H68	1	0.7079	0.4121	0.8362	Biso	1	H	0.126751	
C126	1	0.7526	0.4617	0.8254	Biso	1	C	0.073159	
C127	1	0.7907	0.4792	0.8429	Biso	1	C	-0.160321	
H69	1	0.802	0.5046	0.83	Biso	1	H	0.121748	
C128	1	0.8123	0.4594	0.8795	Biso	1	C	-0.110382	
H70	1	0.8382	0.471	0.8907	Biso	1	H	0.123006	
C129	1	0.7273	0.4835	0.7862	Biso	1	C	0.094519	
C130	1	0.6839	0.4835	0.7857	Biso	1	C	-0.215691	
H71	1	0.6692	0.4718	0.8108	Biso	1	H	0.122632	
C131	1	0.59058	0.53889	0.74931	Biso	1	C	0.182539	
C132	1	0.61263	0.58113	0.7498	Biso	1	C	-0.205666	
H72	1	0.6426	0.5857	0.7498	Biso	1	H	0.136752	
O25	1	0.13417	0.30158	0.45194	Biso	1	O	-0.596872	
O26	1	0.08234	0.35413	0.45156	Biso	1	O	-0.551384	
C133	1	0.0986	0.3205	0.4377	Biso	1	C	0.610049	
C134	1	0.0785	0.2945	0.3994	Biso	1	C	-0.035534	
C135	1	0.0954	0.2566	0.382	Biso	1	C	-0.088275	
H73	1	0.1208	0.2456	0.395	Biso	1	H	0.122039	

C136	1	0.0765	0.2342	0.3465	Biso	1	C	-0.158813		
H74	1	0.0879	0.2079	0.3362	Biso	1	H	0.126525		
C137	1	0.0383	0.2526	0.3254	Biso	1	C	0.07313		
C138	1	0.0208	0.2907	0.3429	Biso	1	C	-0.160337		
H75	1	0.9954	0.302	0.33	Biso	1	H	0.12189		
C139	1	0.0406	0.3123	0.3795	Biso	1	C	-0.110433		
H76	1	0.029	0.3382	0.3907	Biso	1	H	0.123177		
C140	1	0.0165	0.2273	0.2862	Biso	1	C	0.09453		
C141	1	0.0165	0.1839	0.2857	Biso	1	C	-0.215444		
H77	1	0.0282	0.1692	0.3108	Biso	1	H	0.122606		
C142	1	0.96111		0.09058		0.24931	Biso	1	C	0.18235
C143	1	0.91887		0.11263		0.2498	Biso	1	C	-0.205478
H78	1	0.9143	0.1426	0.2498	Biso	1	H	0.136901		
O27	1	0.63417		0.80158		0.95194	Biso	1	O	-0.596937
O28	1	0.58234		0.85413		0.95156	Biso	1	O	-0.551536
C144	1	0.5986	0.8205	0.9377	Biso	1	C	0.610318		
C145	1	0.5785	0.7945	0.8994	Biso	1	C	-0.035868		
C146	1	0.5954	0.7566	0.882	Biso	1	C	-0.088102		
H79	1	0.6208	0.7456	0.895	Biso	1	H	0.121932		
C147	1	0.5765	0.7342	0.8465	Biso	1	C	-0.158828		
H80	1	0.5879	0.7079	0.8362	Biso	1	H	0.126572		
C148	1	0.5383	0.7526	0.8254	Biso	1	C	0.073079		
C149	1	0.5208	0.7907	0.8429	Biso	1	C	-0.160105		
H81	1	0.4954	0.802	0.83	Biso	1	H	0.121898		
C150	1	0.5406	0.8123	0.8795	Biso	1	C	-0.110426		
H82	1	0.529	0.8382	0.8907	Biso	1	H	0.123057		
C151	1	0.5165	0.7273	0.7862	Biso	1	C	0.094731		
C152	1	0.5165	0.6839	0.7857	Biso	1	C	-0.215797		
H83	1	0.5282	0.6692	0.8108	Biso	1	H	0.12259		
C153	1	0.46111		0.59058		0.74931	Biso	1	C	0.182732
C154	1	0.41887		0.61263		0.7498	Biso	1	C	-0.205779
H84	1	0.4143	0.6426	0.7498	Biso	1	H	0.136856		
O29	1	0.86583		0.69842		0.45194	Biso	1	O	-0.596751
O30	1	0.91766		0.64587		0.45156	Biso	1	O	-0.55132
C155	1	0.9014	0.6795	0.4377	Biso	1	C	0.609791		
C156	1	0.9215	0.7055	0.3994	Biso	1	C	-0.035349		
C157	1	0.9046	0.7434	0.382	Biso	1	C	-0.088308		
H85	1	0.8792	0.7544	0.395	Biso	1	H	0.122136		
C158	1	0.9235	0.7658	0.3465	Biso	1	C	-0.158838		
H86	1	0.9121	0.7921	0.3362	Biso	1	H	0.12646		
C159	1	0.9617	0.7474	0.3254	Biso	1	C	0.072955		
C160	1	0.9792	0.7093	0.3429	Biso	1	C	-0.160214		
H87	1	0.0046	0.698	0.33	Biso	1	H	0.121758		
C161	1	0.9594	0.6877	0.3795	Biso	1	C	-0.110511		
H88	1	0.971	0.6618	0.3907	Biso	1	H	0.123329		
C162	1	0.9835	0.7727	0.2862	Biso	1	C	0.094454		
C163	1	0.9835	0.8161	0.2857	Biso	1	C	-0.21548		
H89	1	0.9718	0.8308	0.3108	Biso	1	H	0.122583		
C164	1	0.03889		0.90942		0.24931	Biso	1	C	0.18254
C165	1	0.08113		0.88737		0.2498	Biso	1	C	-0.205364
H90	1	0.0857	0.8574	0.2498	Biso	1	H	0.137065		
O31	1	0.36583		0.19842		0.95194	Biso	1	O	-0.596871

O32	1	0.41766	0.14587	0.95156	Biso	1	O	-0.551429
C166	1	0.4014	0.1795	0.9377	Biso	1	C	0.609997
C167	1	0.4215	0.2055	0.8994	Biso	1	C	-0.035575
C168	1	0.4046	0.2434	0.882	Biso	1	C	-0.08823
H91	1	0.3792	0.2544	0.895	Biso	1	H	0.12204
C169	1	0.4235	0.2658	0.8465	Biso	1	C	-0.158971
H92	1	0.4121	0.2921	0.8362	Biso	1	H	0.126548
C170	1	0.4617	0.2474	0.8254	Biso	1	C	0.072234
C171	1	0.4792	0.2093	0.8429	Biso	1	C	-0.160292
H93	1	0.5046	0.198	0.83	Biso	1	H	0.121812
C172	1	0.4594	0.1877	0.8795	Biso	1	C	-0.110442
H94	1	0.471	0.1618	0.8907	Biso	1	H	0.123192
C173	1	0.4835	0.2727	0.7862	Biso	1	C	0.097769
C174	1	0.4835	0.3161	0.7857	Biso	1	C	-0.216672
H95	1	0.4718	0.3308	0.8108	Biso	1	H	0.122494
C175	1	0.53889	0.40942	0.74931	Biso	1	C	0.182417
C176	1	0.58113	0.38737	0.7498	Biso	1	C	-0.205389
H96	1	0.5857	0.3574	0.7498	Biso	1	H	0.136967
O33	1	0.69842	0.86583	0.95194	Biso	1	O	-0.59681
O34	1	0.64587	0.91766	0.95156	Biso	1	O	-0.551386
C177	1	0.6795	0.9014	0.9377	Biso	1	C	0.609792
C178	1	0.7055	0.9215	0.8994	Biso	1	C	-0.035413
C179	1	0.7434	0.9046	0.882	Biso	1	C	-0.088344
H97	1	0.7544	0.8792	0.895	Biso	1	H	0.12213
C180	1	0.7658	0.9235	0.8465	Biso	1	C	-0.158849
H98	1	0.7921	0.9121	0.8362	Biso	1	H	0.126499
C181	1	0.7474	0.9617	0.8254	Biso	1	C	0.073157
C182	1	0.7093	0.9792	0.8429	Biso	1	C	-0.160363
H99	1	0.698	0.0046	0.83	Biso	1	H	0.121862
C183	1	0.6877	0.9594	0.8795	Biso	1	C	-0.110528
H100	1	0.6618	0.971	0.8907	Biso	1	H	0.123317
C184	1	0.7727	0.9835	0.7862	Biso	1	C	0.094441
C185	1	0.8161	0.9835	0.7857	Biso	1	C	-0.215676
H101	1	0.8308	0.9718	0.8108	Biso	1	H	0.12245
C186	1	0.90942	0.03889	0.74931	Biso	1	C	0.182626
C187	1	0.88737	0.08113	0.7498	Biso	1	C	-0.205401
H102	1	0.8574	0.0857	0.7498	Biso	1	H	0.137064
O35	1	0.19842	0.36583	0.45194	Biso	1	O	-0.596816
O36	1	0.14587	0.41766	0.45156	Biso	1	O	-0.551331
C188	1	0.1795	0.4014	0.4377	Biso	1	C	0.609931
C189	1	0.2055	0.4215	0.3994	Biso	1	C	-0.03545
C190	1	0.2434	0.4046	0.382	Biso	1	C	-0.088348
H103	1	0.2544	0.3792	0.395	Biso	1	H	0.122121
C191	1	0.2658	0.4235	0.3465	Biso	1	C	-0.158821
H104	1	0.2921	0.4121	0.3362	Biso	1	H	0.126474
C192	1	0.2474	0.4617	0.3254	Biso	1	C	0.073008
C193	1	0.2093	0.4792	0.3429	Biso	1	C	-0.160245
H105	1	0.198	0.5046	0.33	Biso	1	H	0.121768
C194	1	0.1877	0.4594	0.3795	Biso	1	C	-0.110428
H106	1	0.1618	0.471	0.3907	Biso	1	H	0.123259
C195	1	0.2727	0.4835	0.2862	Biso	1	C	0.094642
C196	1	0.3161	0.4835	0.2857	Biso	1	C	-0.215452

H107	1	0.3308	0.4718	0.3108	Biso	1	H	0.122592		
C197	1	0.40942		0.53889		0.24931	Biso	1	C	0.182475
C198	1	0.38737		0.58113		0.2498	Biso	1	C	-0.205341
H108	1	0.3574	0.5857	0.2498	Biso	1	H	0.136949		
O37	1	0.30158		0.13417		0.95194	Biso	1	O	-0.596968
O38	1	0.35413		0.08234		0.95156	Biso	1	O	-0.551503
C199	1	0.3205	0.0986	0.9377	Biso	1	C	0.610228		
C200	1	0.2945	0.0785	0.8994	Biso	1	C	-0.035694		
C201	1	0.2566	0.0954	0.882	Biso	1	C	-0.088173		
H109	1	0.2456	0.1208	0.895	Biso	1	H	0.121955		
C202	1	0.2342	0.0765	0.8465	Biso	1	C	-0.158841		
H110	1	0.2079	0.0879	0.8362	Biso	1	H	0.126577		
C203	1	0.2526	0.0383	0.8254	Biso	1	C	0.073165		
C204	1	0.2907	0.0208	0.8429	Biso	1	C	-0.160287		
H111	1	0.302	0.9954	0.83	Biso	1	H	0.121925		
C205	1	0.3123	0.0406	0.8795	Biso	1	C	-0.110399		
H112	1	0.3382	0.029	0.8907	Biso	1	H	0.123099		
C206	1	0.2273	0.0165	0.7862	Biso	1	C	0.094553		
C207	1	0.1839	0.0165	0.7857	Biso	1	C	-0.215721		
H113	1	0.1692	0.0282	0.8108	Biso	1	H	0.122562		
C208	1	0.09058		0.96111		0.74931	Biso	1	C	0.182375
C209	1	0.11263		0.91887		0.7498	Biso	1	C	-0.205552
H114	1	0.1426	0.9143	0.7498	Biso	1	H	0.136921		
O39	1	0.80158		0.63417		0.45194	Biso	1	O	-0.596864
O40	1	0.85413		0.58234		0.45156	Biso	1	O	-0.551458
C210	1	0.8205	0.5986	0.4377	Biso	1	C	0.610174		
C211	1	0.7945	0.5785	0.3994	Biso	1	C	-0.035699		
C212	1	0.7566	0.5954	0.382	Biso	1	C	-0.088116		
H115	1	0.7456	0.6208	0.395	Biso	1	H	0.121915		
C213	1	0.7342	0.5765	0.3465	Biso	1	C	-0.158786		
H116	1	0.7079	0.5879	0.3362	Biso	1	H	0.126512		
C214	1	0.7526	0.5383	0.3254	Biso	1	C	0.073168		
C215	1	0.7907	0.5208	0.3429	Biso	1	C	-0.160277		
H117	1	0.802	0.4954	0.33	Biso	1	H	0.121888		
C216	1	0.8123	0.5406	0.3795	Biso	1	C	-0.110385		
H118	1	0.8382	0.529	0.3907	Biso	1	H	0.123128		
C217	1	0.7273	0.5165	0.2862	Biso	1	C	0.09458		
C218	1	0.6839	0.5165	0.2857	Biso	1	C	-0.215649		
H119	1	0.6692	0.5282	0.3108	Biso	1	H	0.122675		
C219	1	0.59058		0.46111		0.24931	Biso	1	C	0.182798
C220	1	0.61263		0.41887		0.2498	Biso	1	C	-0.205685
H120	1	0.6426	0.4143	0.2498	Biso	1	H	0.136791		
O41	1	0.13417		0.69842		0.95194	Biso	1	O	-0.597165
O42	1	0.08234		0.64587		0.95156	Biso	1	O	-0.551279
C221	1	0.0986	0.6795	0.9377	Biso	1	C	0.610118		
C222	1	0.0785	0.7055	0.8994	Biso	1	C	-0.035502		
C223	1	0.0954	0.7434	0.882	Biso	1	C	-0.088335		
H121	1	0.1208	0.7544	0.895	Biso	1	H	0.121875		
C224	1	0.0765	0.7658	0.8465	Biso	1	C	-0.158775		
H122	1	0.0879	0.7921	0.8362	Biso	1	H	0.126273		
C225	1	0.0383	0.7474	0.8254	Biso	1	C	0.072233		
C226	1	0.0208	0.7093	0.8429	Biso	1	C	-0.160429		

H123	1	0.9954	0.698	0.83	Biso	1	H	0.122071		
C227	1	0.0406	0.6877	0.8795	Biso	1	C	-0.110437		
H124	1	0.029	0.6618	0.8907	Biso	1	H	0.123328		
C228	1	0.0165	0.7727	0.7862	Biso	1	C	0.097754		
C229	1	0.0165	0.8161	0.7857	Biso	1	C	-0.216603		
H125	1	0.0282	0.8308	0.8108	Biso	1	H	0.122378		
C230	1	0.96111		0.90942		0.74931	Biso	1	C	0.182394
C231	1	0.91887		0.88737		0.7498	Biso	1	C	-0.2055
H126	1	0.9143	0.8574	0.7498	Biso	1	H	0.137154		
O43	1	0.63417		0.19842		0.45194	Biso	1	O	-0.597143
O44	1	0.58234		0.14587		0.45156	Biso	1	O	-0.551256
C232	1	0.5986	0.1795	0.4377	Biso	1	C	0.610219		
C233	1	0.5785	0.2055	0.3994	Biso	1	C	-0.035616		
C234	1	0.5954	0.2434	0.382	Biso	1	C	-0.088134		
H127	1	0.6208	0.2544	0.395	Biso	1	H	0.121838		
C235	1	0.5765	0.2658	0.3465	Biso	1	C	-0.158934		
H128	1	0.5879	0.2921	0.3362	Biso	1	H	0.12634		
C236	1	0.5383	0.2474	0.3254	Biso	1	C	0.073214		
C237	1	0.5208	0.2093	0.3429	Biso	1	C	-0.160316		
H129	1	0.4954	0.198	0.33	Biso	1	H	0.122025		
C238	1	0.5406	0.1877	0.3795	Biso	1	C	-0.110388		
H130	1	0.529	0.1618	0.3907	Biso	1	H	0.123315		
C239	1	0.5165	0.2727	0.2862	Biso	1	C	0.094408		
C240	1	0.5165	0.3161	0.2857	Biso	1	C	-0.215448		
H131	1	0.5282	0.3308	0.3108	Biso	1	H	0.122534		
C241	1	0.46111		0.40942		0.24931	Biso	1	C	0.182686
C242	1	0.41887		0.38737		0.2498	Biso	1	C	-0.205554
H132	1	0.4143	0.3574	0.2498	Biso	1	H	0.136994		
O45	1	0.86583		0.30158		0.95194	Biso	1	O	-0.596553
O46	1	0.91766		0.35413		0.95156	Biso	1	O	-0.551565
C243	1	0.9014	0.3205	0.9377	Biso	1	C	0.60984		
C244	1	0.9215	0.2945	0.8994	Biso	1	C	-0.035518		
C245	1	0.9046	0.2566	0.882	Biso	1	C	-0.088155		
H133	1	0.8792	0.2456	0.895	Biso	1	H	0.12214		
C246	1	0.9235	0.2342	0.8465	Biso	1	C	-0.158951		
H134	1	0.9121	0.2079	0.8362	Biso	1	H	0.126723		
C247	1	0.9617	0.2526	0.8254	Biso	1	C	0.073072		
C248	1	0.9792	0.2907	0.8429	Biso	1	C	-0.160182		
H135	1	0.0046	0.302	0.83	Biso	1	H	0.12172		
C249	1	0.9594	0.3123	0.8795	Biso	1	C	-0.11061		
H136	1	0.971	0.3382	0.8907	Biso	1	H	0.123123		
C250	1	0.9835	0.2273	0.7862	Biso	1	C	0.094539		
C251	1	0.9835	0.1839	0.7857	Biso	1	C	-0.215736		
H137	1	0.9718	0.1692	0.8108	Biso	1	H	0.122653		
C252	1	0.03889		0.09058		0.74931	Biso	1	C	0.182582
C253	1	0.08113		0.11263		0.7498	Biso	1	C	-0.205581
H138	1	0.0857	0.1426	0.7498	Biso	1	H	0.136876		
O47	1	0.36583		0.80158		0.45194	Biso	1	O	-0.596571
O48	1	0.41766		0.85413		0.45156	Biso	1	O	-0.551484
C254	1	0.4014	0.8205	0.4377	Biso	1	C	0.609855		
C255	1	0.4215	0.7945	0.3994	Biso	1	C	-0.03565		
C256	1	0.4046	0.7566	0.382	Biso	1	C	-0.088101		

H139	1	0.3792	0.7456	0.395	Biso	1	H	0.122149		
C257	1	0.4235	0.7342	0.3465	Biso	1	C	-0.158843		
H140	1	0.4121	0.7079	0.3362	Biso	1	H	0.126682		
C258	1	0.4617	0.7526	0.3254	Biso	1	C	0.073052		
C259	1	0.4792	0.7907	0.3429	Biso	1	C	-0.160299		
H141	1	0.5046	0.802	0.33	Biso	1	H	0.121747		
C260	1	0.4594	0.8123	0.3795	Biso	1	C	-0.11045		
H142	1	0.471	0.8382	0.3907	Biso	1	H	0.123089		
C261	1	0.4835	0.7273	0.2862	Biso	1	C	0.094573		
C262	1	0.4835	0.6839	0.2857	Biso	1	C	-0.215485		
H143	1	0.4718	0.6692	0.3108	Biso	1	H	0.122689		
C263	1	0.53889		0.59058		0.24931	Biso	1	C	0.182417
C264	1	0.58113		0.61263		0.2498	Biso	1	C	-0.205662
H144	1	0.5857	0.6426	0.2498	Biso	1	H	0.136782		
O49	1	0.30158		0.86583		0.54806	Biso	1	O	-0.596335
O50	1	0.35413		0.91766		0.54844	Biso	1	O	-0.551309
C265	1	0.3205	0.9014	0.5623	Biso	1	C	0.609445		
C266	1	0.2945	0.9215	0.6006	Biso	1	C	-0.035347		
C267	1	0.2566	0.9046	0.618	Biso	1	C	-0.088306		
H145	1	0.2456	0.8792	0.605	Biso	1	H	0.122396		
C268	1	0.2342	0.9235	0.6535	Biso	1	C	-0.158912		
H146	1	0.2079	0.9121	0.6638	Biso	1	H	0.126608		
C269	1	0.2526	0.9617	0.6746	Biso	1	C	0.072955		
C270	1	0.2907	0.9792	0.6571	Biso	1	C	-0.160435		
H147	1	0.302	0.0046	0.67	Biso	1	H	0.121707		
C271	1	0.3123	0.9594	0.6205	Biso	1	C	-0.110549		
H148	1	0.3382	0.971	0.6093	Biso	1	H	0.123265		
C272	1	0.2273	0.9835	0.7138	Biso	1	C	0.094752		
C273	1	0.1839	0.9835	0.7143	Biso	1	C	-0.215499		
H149	1	0.1692	0.9718	0.6892	Biso	1	H	0.122911		
C274	1	0.09058		0.03889		0.75069	Biso	1	C	0.182512
C275	1	0.11263		0.08113		0.7502	Biso	1	C	-0.205507
H150	1	0.1426	0.0857	0.7502	Biso	1	H	0.136877		
O51	1	0.80158		0.36583		0.04806	Biso	1	O	-0.596387
O52	1	0.85413		0.41766		0.04844	Biso	1	O	-0.551369
C276	1	0.8205	0.4014	0.0623	Biso	1	C	0.609562		
C277	1	0.7945	0.4215	0.1006	Biso	1	C	-0.035463		
C278	1	0.7566	0.4046	0.118	Biso	1	C	-0.088173		
H151	1	0.7456	0.3792	0.105	Biso	1	H	0.122221		
C279	1	0.7342	0.4235	0.1535	Biso	1	C	-0.158833		
H152	1	0.7079	0.4121	0.1638	Biso	1	H	0.126649		
C280	1	0.7526	0.4617	0.1746	Biso	1	C	0.072908		
C281	1	0.7907	0.4792	0.1571	Biso	1	C	-0.160402		
H153	1	0.802	0.5046	0.17	Biso	1	H	0.121721		
C282	1	0.8123	0.4594	0.1205	Biso	1	C	-0.11039		
H154	1	0.8382	0.471	0.1093	Biso	1	H	0.123101		
C283	1	0.7273	0.4835	0.2138	Biso	1	C	0.094756		
C284	1	0.6839	0.4835	0.2143	Biso	1	C	-0.21544		
H155	1	0.6692	0.4718	0.1892	Biso	1	H	0.122799		
C285	1	0.59058		0.53889		0.25069	Biso	1	C	0.182441
C286	1	0.61263		0.58113		0.2502	Biso	1	C	-0.205468
H156	1	0.6426	0.5857	0.2502	Biso	1	H	0.136677		

O53	1	0.69842	0.13417	0.54806	Biso	1	O	-0.59698
O54	1	0.64587	0.08234	0.54844	Biso	1	O	-0.551074
C287	1	0.6795	0.0986	0.5623	Biso	1	C	0.609782
C288	1	0.7055	0.0785	0.6006	Biso	1	C	-0.035282
C289	1	0.7434	0.0954	0.618	Biso	1	C	-0.088385
H157	1	0.7544	0.1208	0.605	Biso	1	H	0.122024
C290	1	0.7658	0.0765	0.6535	Biso	1	C	-0.158859
H158	1	0.7921	0.0879	0.6638	Biso	1	H	0.12625
C291	1	0.7474	0.0383	0.6746	Biso	1	C	0.073025
C292	1	0.7093	0.0208	0.6571	Biso	1	C	-0.160362
H159	1	0.698	0.9954	0.67	Biso	1	H	0.121893
C293	1	0.6877	0.0406	0.6205	Biso	1	C	-0.110368
H160	1	0.6618	0.029	0.6093	Biso	1	H	0.123462
C294	1	0.7727	0.0165	0.7138	Biso	1	C	0.094698
C295	1	0.8161	0.0165	0.7143	Biso	1	C	-0.215297
H161	1	0.8308	0.0282	0.6892	Biso	1	H	0.122731
C296	1	0.90942	0.96111	0.75069	Biso	1	C	0.182454
C297	1	0.88737	0.91887	0.7502	Biso	1	C	-0.205314
H162	1	0.8574	0.9143	0.7502	Biso	1	H	0.137071
O55	1	0.19842	0.63417	0.04806	Biso	1	O	-0.597089
O56	1	0.14587	0.58234	0.04844	Biso	1	O	-0.55112
C298	1	0.1795	0.5986	0.0623	Biso	1	C	0.609987
C299	1	0.2055	0.5785	0.1006	Biso	1	C	-0.035362
C300	1	0.2434	0.5954	0.118	Biso	1	C	-0.088236
H163	1	0.2544	0.6208	0.105	Biso	1	H	0.121874
C301	1	0.2658	0.5765	0.1535	Biso	1	C	-0.158949
H164	1	0.2921	0.5879	0.1638	Biso	1	H	0.126289
C302	1	0.2474	0.5383	0.1746	Biso	1	C	0.073129
C303	1	0.2093	0.5208	0.1571	Biso	1	C	-0.160336
H165	1	0.198	0.4954	0.17	Biso	1	H	0.121923
C304	1	0.1877	0.5406	0.1205	Biso	1	C	-0.110287
H166	1	0.1618	0.529	0.1093	Biso	1	H	0.123325
C305	1	0.2727	0.5165	0.2138	Biso	1	C	0.094674
C306	1	0.3161	0.5165	0.2143	Biso	1	C	-0.215441
H167	1	0.3308	0.5282	0.1892	Biso	1	H	0.122665
C307	1	0.40942	0.46111	0.25069	Biso	1	C	0.182595
C308	1	0.38737	0.41887	0.2502	Biso	1	C	-0.205322
H168	1	0.3574	0.4143	0.2502	Biso	1	H	0.136956
O57	1	0.86583	0.69842	0.54806	Biso	1	O	-0.596628
O58	1	0.91766	0.64587	0.54844	Biso	1	O	-0.551207
C309	1	0.9014	0.6795	0.5623	Biso	1	C	0.609556
C310	1	0.9215	0.7055	0.6006	Biso	1	C	-0.035255
C311	1	0.9046	0.7434	0.618	Biso	1	C	-0.088342
H169	1	0.8792	0.7544	0.605	Biso	1	H	0.122307
C312	1	0.9235	0.7658	0.6535	Biso	1	C	-0.158994
H170	1	0.9121	0.7921	0.6638	Biso	1	H	0.126434
C313	1	0.9617	0.7474	0.6746	Biso	1	C	0.072858
C314	1	0.9792	0.7093	0.6571	Biso	1	C	-0.160393
H171	1	0.0046	0.698	0.67	Biso	1	H	0.121755
C315	1	0.9594	0.6877	0.6205	Biso	1	C	-0.110396
H172	1	0.971	0.6618	0.6093	Biso	1	H	0.123377
C316	1	0.9835	0.7727	0.7138	Biso	1	C	0.094592

C317	1	0.9835	0.8161	0.7143	Biso	1	C	-0.215243		
H173	1	0.9718	0.8308	0.6892	Biso	1	H	0.122768		
C318	1	0.03889		0.90942		0.75069	Biso	1	C	0.182566
C319	1	0.08113		0.88737		0.7502	Biso	1	C	-0.205288
H174	1	0.0857	0.8574	0.7502	Biso	1	H	0.13702		
O59	1	0.36583		0.19842		0.04806	Biso	1	O	-0.596704
O60	1	0.41766		0.14587		0.04844	Biso	1	O	-0.551266
C320	1	0.4014	0.1795	0.0623	Biso	1	C	0.609757		
C321	1	0.4215	0.2055	0.1006	Biso	1	C	-0.035342		
C322	1	0.4046	0.2434	0.118	Biso	1	C	-0.088381		
H175	1	0.3792	0.2544	0.105	Biso	1	H	0.122129		
C323	1	0.4235	0.2658	0.1535	Biso	1	C	-0.158819		
H176	1	0.4121	0.2921	0.1638	Biso	1	H	0.126503		
C324	1	0.4617	0.2474	0.1746	Biso	1	C	0.07294		
C325	1	0.4792	0.2093	0.1571	Biso	1	C	-0.160277		
H177	1	0.5046	0.198	0.17	Biso	1	H	0.121754		
C326	1	0.4594	0.1877	0.1205	Biso	1	C	-0.110425		
H178	1	0.471	0.1618	0.1093	Biso	1	H	0.123303		
C327	1	0.4835	0.2727	0.2138	Biso	1	C	0.094621		
C328	1	0.4835	0.3161	0.2143	Biso	1	C	-0.215428		
H179	1	0.4718	0.3308	0.1892	Biso	1	H	0.122691		
C329	1	0.53889		0.40942		0.25069	Biso	1	C	0.182532
C330	1	0.58113		0.38737		0.2502	Biso	1	C	-0.205351
H180	1	0.5857	0.3574	0.2502	Biso	1	H	0.136909		
O61	1	0.13417		0.30158		0.54806	Biso	1	O	-0.596711
O62	1	0.08234		0.35413		0.54844	Biso	1	O	-0.551253
C331	1	0.0986	0.3205	0.5623	Biso	1	C	0.609769		
C332	1	0.0785	0.2945	0.6006	Biso	1	C	-0.035371		
C333	1	0.0954	0.2566	0.618	Biso	1	C	-0.088291		
H181	1	0.1208	0.2456	0.605	Biso	1	H	0.1221		
C334	1	0.0765	0.2342	0.6535	Biso	1	C	-0.158828		
H182	1	0.0879	0.2079	0.6638	Biso	1	H	0.126443		
C335	1	0.0383	0.2526	0.6746	Biso	1	C	0.072904		
C336	1	0.0208	0.2907	0.6571	Biso	1	C	-0.160373		
H183	1	0.9954	0.302	0.67	Biso	1	H	0.121862		
C337	1	0.0406	0.3123	0.6205	Biso	1	C	-0.110422		
H184	1	0.029	0.3382	0.6093	Biso	1	H	0.1233		
C338	1	0.0165	0.2273	0.7138	Biso	1	C	0.09475		
C339	1	0.0165	0.1839	0.7143	Biso	1	C	-0.215305		
H185	1	0.0282	0.1692	0.6892	Biso	1	H	0.122811		
C340	1	0.96111		0.09058		0.75069	Biso	1	C	0.182386
C341	1	0.91887		0.11263		0.7502	Biso	1	C	-0.205515
H186	1	0.9143	0.1426	0.7502	Biso	1	H	0.13691		
O63	1	0.63417		0.80158		0.04806	Biso	1	O	-0.596856
O64	1	0.58234		0.85413		0.04844	Biso	1	O	-0.551369
C342	1	0.5986	0.8205	0.0623	Biso	1	C	0.610079		
C343	1	0.5785	0.7945	0.1006	Biso	1	C	-0.035594		
C344	1	0.5954	0.7566	0.118	Biso	1	C	-0.088052		
H187	1	0.6208	0.7456	0.105	Biso	1	H	0.121938		
C345	1	0.5765	0.7342	0.1535	Biso	1	C	-0.158894		
H188	1	0.5879	0.7079	0.1638	Biso	1	H	0.126483		
C346	1	0.5383	0.7526	0.1746	Biso	1	C	0.073093		

C347	1	0.5208	0.7907	0.1571	Biso	1	C	-0.160385		
H189	1	0.4954	0.802	0.17	Biso	1	H	0.121897		
C348	1	0.5406	0.8123	0.1205	Biso	1	C	-0.110298		
H190	1	0.529	0.8382	0.1093	Biso	1	H	0.123134		
C349	1	0.5165	0.7273	0.2138	Biso	1	C	0.094666		
C350	1	0.5165	0.6839	0.2143	Biso	1	C	-0.215489		
H191	1	0.5282	0.6692	0.1892	Biso	1	H	0.122752		
C351	1	0.46111		0.59058		0.25069	Biso	1	C	0.182806
C352	1	0.41887		0.61263		0.2502	Biso	1	C	-0.205741
H192	1	0.4143	0.6426	0.2502	Biso	1	H	0.136794		
Zn1	1	0.32512		0.17488		0	Biso	1	Zn	1.030416
Zn2	1	0.3935	0.1065	0	Biso	1	Zn	1.072536		
Zn3	1	0.67488		0.82512		0	Biso	1	Zn	1.030402
Zn4	1	0.6065	0.8935	0	Biso	1	Zn	1.072529		
Zn5	1	0.17488		0.32512		0.5	Biso	1	Zn	1.030506
Zn6	1	0.1065	0.3935	0.5	Biso	1	Zn	1.072687		
Zn7	1	0.82512		0.32512		0	Biso	1	Zn	1.030346
Zn8	1	0.8935	0.3935	0	Biso	1	Zn	1.07241		
Zn9	1	0.17488		0.67488		0	Biso	1	Zn	1.030484
Zn10	1	0.1065	0.6065	0	Biso	1	Zn	1.072592		
Zn11	1	0.67488		0.17488		0.5	Biso	1	Zn	1.030561
Zn12	1	0.6065	0.1065	0.5	Biso	1	Zn	1.072794		
Zn13	1	0.32512		0.82512		0.5	Biso	1	Zn	1.030459
Zn14	1	0.3935	0.8935	0.5	Biso	1	Zn	1.072597		
Zn15	1	0.82512		0.67488		0.5	Biso	1	Zn	1.030513
Zn16	1	0.8935	0.6065	0.5	Biso	1	Zn	1.072732		
Zn17	1	0	0	0.23781			Biso	1	Zn	0.21765
Zn18	1	0.5	0.5	0.73781			Biso	1	Zn	0.210692
Zn19	1	0	0	0.26219			Biso	1	Zn	0.224108
Zn20	1	0.5	0.5	0.76219			Biso	1	Zn	0.229807
Zn21	1	0	0	0.76219			Biso	1	Zn	0.232654
Zn22	1	0.5	0.5	0.26219			Biso	1	Zn	0.225057
Zn23	1	0	0	0.73781			Biso	1	Zn	0.20674
Zn24	1	0.5	0.5	0.23781			Biso	1	Zn	0.215851
N1	1	0.04779		0.95221		0.25	Biso	1	N	-0.317443
N2	1	0.54779		0.45221		0.75	Biso	1	N	-0.316963
N3	1	0.95221		0.04779		0.25	Biso	1	N	-0.317448
N4	1	0.45221		0.54779		0.75	Biso	1	N	-0.316909
N5	1	0.04779		0.04779		0.25	Biso	1	N	-0.317178
N6	1	0.54779		0.54779		0.75	Biso	1	N	-0.31671
N7	1	0.95221		0.95221		0.25	Biso	1	N	-0.317789
N8	1	0.45221		0.45221		0.75	Biso	1	N	-0.316992
N9	1	0.95221		0.04779		0.75	Biso	1	N	-0.316961
N10	1	0.45221		0.54779		0.25	Biso	1	N	-0.317139
N11	1	0.04779		0.95221		0.75	Biso	1	N	-0.316945
N12	1	0.54779		0.45221		0.25	Biso	1	N	-0.317122
N13	1	0.95221		0.95221		0.75	Biso	1	N	-0.317267
N14	1	0.45221		0.45221		0.25	Biso	1	N	-0.317087
N15	1	0.04779		0.04779		0.75	Biso	1	N	-0.316612
N16	1	0.54779		0.54779		0.25	Biso	1	N	-0.316776
C353	1	0.2498	0	0.25	Biso	1	C	-0.212592		
H193	1	0.2801	0	0.25	Biso	1	H	0.124586		

C354	1	0.1601	0	0.25	Biso	1	C	0.135434
C355	1	0.1133	0	0.25	Biso	1	C	-0.074083
C356	1	0.7498	0.5	0.75	Biso	1	C	-0.212395
H194	1	0.7801	0.5	0.75	Biso	1	H	0.124394
C357	1	0.6601	0.5	0.75	Biso	1	C	0.135639
C358	1	0.6133	0.5	0.75	Biso	1	C	-0.07401
C359	1	0.7502	0	0.25	Biso	1	C	-0.212488
H195	1	0.7199	0	0.25	Biso	1	H	0.125016
C360	1	0.8399	0	0.25	Biso	1	C	0.135335
C361	1	0.8867	0	0.25	Biso	1	C	-0.074011
C362	1	0.2502	0.5	0.75	Biso	1	C	-0.213644
H196	1	0.2199	0.5	0.75	Biso	1	H	0.124838
C363	1	0.3399	0.5	0.75	Biso	1	C	0.135455
C364	1	0.3867	0.5	0.75	Biso	1	C	-0.073895
C365	1	0	0.2498	0.25	Biso	1	C	-0.212488
H197	1	0	0.2801	0.25	Biso	1	H	0.124569
C366	1	0	0.1601	0.25	Biso	1	C	0.135458
C367	1	0	0.1133	0.25	Biso	1	C	-0.07406
C368	1	0.5	0.7498	0.75	Biso	1	C	-0.212483
H198	1	0.5	0.7801	0.75	Biso	1	H	0.1244
C369	1	0.5	0.6601	0.75	Biso	1	C	0.135646
C370	1	0.5	0.6133	0.75	Biso	1	C	-0.073948
C371	1	0	0.7502	0.25	Biso	1	C	-0.212518
H199	1	0	0.7199	0.25	Biso	1	H	0.125034
C372	1	0	0.8399	0.25	Biso	1	C	0.13533
C373	1	0	0.8867	0.25	Biso	1	C	-0.073981
C374	1	0.5	0.2502	0.75	Biso	1	C	-0.213641
H200	1	0.5	0.2199	0.75	Biso	1	H	0.124854
C375	1	0.5	0.3399	0.75	Biso	1	C	0.135527
C376	1	0.5	0.3867	0.75	Biso	1	C	-0.073904
C377	1	0.7502	0	0.75	Biso	1	C	-0.212592
H201	1	0.7199	0	0.75	Biso	1	H	0.12499
C378	1	0.8399	0	0.75	Biso	1	C	0.13536
C379	1	0.8867	0	0.75	Biso	1	C	-0.074076
C380	1	0.2502	0.5	0.25	Biso	1	C	-0.212691
H202	1	0.2199	0.5	0.25	Biso	1	H	0.12495
C381	1	0.3399	0.5	0.25	Biso	1	C	0.135415
C382	1	0.3867	0.5	0.25	Biso	1	C	-0.073972
C383	1	0.2498	0	0.75	Biso	1	C	-0.212583
H203	1	0.2801	0	0.75	Biso	1	H	0.124548
C384	1	0.1601	0	0.75	Biso	1	C	0.135569
C385	1	0.1133	0	0.75	Biso	1	C	-0.07397
C386	1	0.7498	0.5	0.25	Biso	1	C	-0.212425
H204	1	0.7801	0.5	0.25	Biso	1	H	0.124352
C387	1	0.6601	0.5	0.25	Biso	1	C	0.13557
C388	1	0.6133	0.5	0.25	Biso	1	C	-0.07396
C389	1	0	0.7502	0.75	Biso	1	C	-0.213562
H205	1	0	0.7199	0.75	Biso	1	H	0.124952
C390	1	0	0.8399	0.75	Biso	1	C	0.1352
C391	1	0	0.8867	0.75	Biso	1	C	-0.073962
C392	1	0.5	0.2502	0.25	Biso	1	C	-0.212538
H206	1	0.5	0.2199	0.25	Biso	1	H	0.124924

C393	1	0.5	0.3399	0.25	Biso	1	C	0.135501
C394	1	0.5	0.3867	0.25	Biso	1	C	-0.074039
C395	1	0	0.2498	0.75	Biso	1	C	-0.21253
H207	1	0	0.2801	0.75	Biso	1	H	0.124533
C396	1	0	0.1601	0.75	Biso	1	C	0.13545
C397	1	0	0.1133	0.75	Biso	1	C	-0.07406
C398	1	0.5	0.7498	0.25	Biso	1	C	-0.212374
H208	1	0.5	0.7801	0.25	Biso	1	H	0.124345
C399	1	0.5	0.6601	0.25	Biso	1	C	0.135508
C400	1	0.5	0.6133	0.25	Biso	1	C	-0.073879

data_DOMKEX_CLEAN
_cell_length_a 6.4059
_cell_length_b 16.3502
_cell_length_c 17.8196
_cell_angle_alpha 98.109
_cell_angle_beta 94.056
_cell_angle_gamma 95.651

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Na1	1	0.57075	0.3964	0.51929	Biso	1	Na	0.890963
Na2	1	0.87431	0.50879	0.41351	Biso	1	Na	0.895857
Na3	1	0.8496	0.41205	0.72859	Biso	1	Na	0.914598
Na4	1	0.2734	0.311	0.64102	Biso	1	Na	0.855225
O1	1	0.2193	0.51455	0.3742	Biso	1	O	-0.755972
O2	1	0.5123	0.46547	0.41404	Biso	1	O	-0.731206
O3	1	0.9061	0.39056	0.46913	Biso	1	O	-0.765239
O4	1	0.2011	0.35814	0.52434	Biso	1	O	-0.786792
O5	1	0.1956	0.45561	0.70761	Biso	1	O	-0.787183
O6	1	0.491	0.40385	0.73876	Biso	1	O	-0.725407
O7	1	0.9202	0.2791	0.67965	Biso	1	O	-0.765536
O8	1	0.1485	0.1894	0.6973	Biso	1	O	-0.609464
O9	1	0.5782	0.27503	0.5786	Biso	1	O	-0.919031
H1	1	0.6921	0.2798	0.6121	Biso	1	H	0.441008
H2	1	0.5456	0.2271	0.5466	Biso	1	H	0.452704
N1	1	0.1333	0.95369	0.90141	Biso	1	N	-0.29419
H3	1	0.0757	0.9737	0.9427	Biso	1	H	0.287252
N2	1	0.2346	0.09506	0.02316	Biso	1	N	-0.4273
C1	1	0.3437	0.45905	0.37258	Biso	1	C	0.605788
C2	1	0.2869	0.38064	0.31548	Biso	1	C	-0.036026
C3	1	0.036	0.34001	0.47952	Biso	1	C	0.75611
C4	1	0.4249	0.32026	0.30693	Biso	1	C	-0.109341
H4	1	0.5534	0.327	0.3383	Biso	1	H	0.112712
C5	1	0.0469	0.2984	0.2168	Biso	1	C	-0.150515
H5	1	0.9159	0.2907	0.1868	Biso	1	H	0.116999
C6	1	0.187	0.2389	0.2064	Biso	1	C	0.105399

C7	1	0.2982	0.9952	0.8719	Biso	1	C	0.202644
C8	1	0.0968	0.3693	0.2709	Biso	1	C	-0.123171
H6	1	0.0005	0.4098	0.2773	Biso	1	H	0.103992
C9	1	0.364	0.4569	0.7489	Biso	1	C	0.745978
C10	1	0.3895	0.1137	0.977	Biso	1	C	0.197048
C11	1	0.4181	0.0687	0.9063	Biso	1	C	-0.067686
C12	1	0.0458	0.8877	0.8484	Biso	1	C	0.190367
C13	1	0.1338	0.1657	0.1451	Biso	1	C	-0.095902
C14	1	0.3756	0.2503	0.2528	Biso	1	C	-0.150421
H7	1	0.4713	0.2094	0.2472	Biso	1	H	0.115193
C15	1	0.165	0.8863	0.784	Biso	1	C	-0.199158
H8	1	0.1415	0.8466	0.739	Biso	1	H	0.133817
C16	1	0.2643	0.1572	0.0847	Biso	1	C	0.188488
C17	1	0.5724	0.1077	0.8585	Biso	1	C	0.088209
C18	1	0.3191	0.9518	0.7977	Biso	1	C	-0.176309
H9	1	0.4213	0.9659	0.7642	Biso	1	H	0.146176
C19	1	0.9803	0.2187	0.7093	Biso	1	C	0.586405
C20	1	0.8401	0.1799	0.7623	Biso	1	C	-0.037212
C21	1	0.5211	0.1878	0.0109	Biso	1	C	-0.182505
H10	1	0.6403	0.2127	0.9904	Biso	1	H	0.133262
C22	1	0.4444	0.2153	0.0768	Biso	1	C	-0.205807
H11	1	0.498	0.2635	0.1116	Biso	1	H	0.124199
C23	1	0.9947	0.2535	0.4358	Biso	1	C	-0.632607
H12	1	0.8442	0.2344	0.4333	Biso	1	H	0.174393
H13	1	0.0753	0.2159	0.4615	Biso	1	H	0.17498
H14	1	0.0379	0.2537	0.3841	Biso	1	H	0.183864
C24	1	0.4114	0.5267	0.8154	Biso	1	C	-0.637631
H15	1	0.3229	0.5155	0.8562	Biso	1	H	0.185444
H16	1	0.382	0.5793	0.7987	Biso	1	H	0.178459
H17	1	0.5601	0.5304	0.8342	Biso	1	H	0.16962
C25	1	0.7637	0.0778	0.8446	Biso	1	C	-0.150793
H18	1	0.8042	0.0323	0.8678	Biso	1	H	0.105292
C26	1	0.8959	0.1137	0.7971	Biso	1	C	-0.109871
H19	1	0.0264	0.0926	0.7883	Biso	1	H	0.109466
C27	1	0.6516	0.2113	0.7779	Biso	1	C	-0.117216
H20	1	0.613	0.2582	0.7564	Biso	1	H	0.095359
C28	1	0.5202	0.1745	0.8247	Biso	1	C	-0.135413
H21	1	0.3901	0.1959	0.8338	Biso	1	H	0.117537
Na5	1	0.42925	0.6036	0.48071	Biso	1	Na	0.890947
Na6	1	0.12569	0.49121	0.58649	Biso	1	Na	0.895841
Na7	1	0.1504	0.58795	0.27141	Biso	1	Na	0.914605
Na8	1	0.7266	0.689	0.35898	Biso	1	Na	0.855235
O10	1	0.7807	0.48545	0.6258	Biso	1	O	-0.75574
O11	1	0.4877	0.53453	0.58596	Biso	1	O	-0.731189
O12	1	0.0939	0.60944	0.53087	Biso	1	O	-0.765014
O13	1	0.7989	0.64186	0.47566	Biso	1	O	-0.786728
O14	1	0.8044	0.54439	0.29239	Biso	1	O	-0.787083
O15	1	0.509	0.59615	0.26124	Biso	1	O	-0.725709
O16	1	0.0798	0.7209	0.32035	Biso	1	O	-0.765306
O17	1	0.8515	0.8106	0.3027	Biso	1	O	-0.609598
O18	1	0.4218	0.72497	0.4214	Biso	1	O	-0.918946
H22	1	0.3079	0.7202	0.3879	Biso	1	H	0.441009

H23	1	0.4544	0.7729	0.4534	Biso	1	H	0.452562	
N3	1	0.8667	0.04631	0.09859	Biso	1	N		-0.294056
H24	1	0.9243	0.0263	0.0573	Biso	1	H	0.28729	
N4	1	0.7654	0.90494	0.97684	Biso	1	N		-0.427488
C29	1	0.6563	0.54095	0.62742	Biso	1	C		0.605752
C30	1	0.7131	0.61936	0.68452	Biso	1	C		-0.036003
C31	1	0.964	0.65999	0.52048	Biso	1	C		0.755953
C32	1	0.5751	0.67974	0.69307	Biso	1	C		-0.109371
H25	1	0.4466	0.673	0.6617	Biso	1	H	0.112715	
C33	1	0.9531	0.7016	0.7832	Biso	1	C	-0.150406	
H26	1	0.0841	0.7093	0.8132	Biso	1	H	0.117029	
C34	1	0.813	0.7611	0.7936	Biso	1	C	0.105284	
C35	1	0.7018	0.0048	0.1281	Biso	1	C	0.202516	
C36	1	0.9032	0.6307	0.7291	Biso	1	C	-0.123206	
H27	1	0.9995	0.5902	0.7227	Biso	1	H	0.104156	
C37	1	0.636	0.5431	0.2511	Biso	1	C	0.745951	
C38	1	0.6105	0.8863	0.023	Biso	1	C	0.197103	
C39	1	0.5819	0.9313	0.0937	Biso	1	C	-0.067684	
C40	1	0.9542	0.1123	0.1516	Biso	1	C	0.190345	
C41	1	0.8662	0.8343	0.8549	Biso	1	C	-0.095843	
C42	1	0.6244	0.7497	0.7472	Biso	1	C	-0.150304	
H28	1	0.5287	0.7906	0.7528	Biso	1	H	0.114926	
C43	1	0.835	0.1137	0.216	Biso	1	C	-0.199083	
H29	1	0.8585	0.1534	0.261	Biso	1	H	0.133622	
C44	1	0.7357	0.8428	0.9153	Biso	1	C	0.188493	
C45	1	0.4276	0.8923	0.1415	Biso	1	C	0.088275	
C46	1	0.6809	0.0482	0.2023	Biso	1	C	-0.176242	
H30	1	0.5787	0.0341	0.2358	Biso	1	H	0.146172	
C47	1	0.0197	0.7813	0.2907	Biso	1	C	0.586255	
C48	1	0.1599	0.8201	0.2377	Biso	1	C	-0.037201	
C49	1	0.4789	0.8122	0.9891	Biso	1	C	-0.18253	
H31	1	0.3597	0.7873	0.0096	Biso	1	H	0.133319	
C50	1	0.5556	0.7847	0.9232	Biso	1	C	-0.205772	
H32	1	0.502	0.7365	0.8884	Biso	1	H	0.12432	
C51	1	0.0053	0.7465	0.5642	Biso	1	C	-0.632735	
H33	1	0.1558	0.7656	0.5667	Biso	1	H	0.174492	
H34	1	0.9247	0.7841	0.5385	Biso	1	H	0.174875	
H35	1	0.9621	0.7463	0.6159	Biso	1	H	0.183805	
C52	1	0.5886	0.4733	0.1846	Biso	1	C	-0.637451	
H36	1	0.6771	0.4845	0.1438	Biso	1	H	0.185483	
H37	1	0.618	0.4207	0.2013	Biso	1	H	0.178539	
H38	1	0.4399	0.4696	0.1658	Biso	1	H	0.169586	
C53	1	0.2363	0.9222	0.1554	Biso	1	C	-0.150944	
H39	1	0.1958	0.9677	0.1322	Biso	1	H	0.105214	
C54	1	0.1041	0.8863	0.2029	Biso	1	C	-0.109931	
H40	1	0.9736	0.9074	0.2117	Biso	1	H	0.10938	
C55	1	0.3484	0.7887	0.2221	Biso	1	C	-0.116969	
H41	1	0.387	0.7418	0.2436	Biso	1	H	0.095412	
C56	1	0.4798	0.8255	0.1753	Biso	1	C	-0.135489	
H42	1	0.6099	0.8041	0.1662	Biso	1	H	0.117657	

```

data_DUBWON_clean
_audit_creation_date 2014-07-02
_audit_creation_method 'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number 1
_symmetry_cell_setting triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
    x,y,z
_cell_length_a 9.119
_cell_length_b 14.4711
_cell_length_c 14.7355
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 107.752
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1 Zn 0.27724 0.36437 0.34906 0.01267 Uiso 1 1.008904
Zn2 Zn 0.18311 0.13419 0.25261 0.01267 Uiso 1 0.979919
Zn3 Zn 0.22276 0.13563 0.84906 0.01267 Uiso 1 1.008588
Zn4 Zn 0.31689 0.36581 0.75261 0.01267 Uiso 1 0.979618
Zn5 Zn 0.72276 0.63563 0.65094 0.01267 Uiso 1 1.008876
Zn6 Zn 0.81689 0.86581 0.74739 0.01267 Uiso 1 0.979869
Zn7 Zn 0.77724 0.86437 0.15094 0.01267 Uiso 1 1.008506
Zn8 Zn 0.68311 0.63419 0.24739 0.01267 Uiso 1 0.97963
H1 H 0.8581 0.3945 0.298 0.01267 Uiso 1 0.126534
H2 H 0.7013 0.1024 0.2779 0.01267 Uiso 1 0.124682
H3 H 0.4505 0.1067 0.2861 0.01267 Uiso 1 0.131976
H4 H 0.2611 0.4107 0.5533 0.01267 Uiso 1 0.011622
H5 H 0.6419 0.1055 0.798 0.01267 Uiso 1 0.126299
H6 H 0.7987 0.3976 0.7779 0.01267 Uiso 1 0.124581
H7 H 0.0495 0.3933 0.7861 0.01267 Uiso 1 0.130905
H8 H 0.2389 0.0893 0.0533 0.01267 Uiso 1 0.01148
H9 H 0.1419 0.6055 0.702 0.01267 Uiso 1 0.126737
H10 H 0.2987 0.8976 0.7221 0.01267 Uiso 1 0.124619
H11 H 0.5495 0.8933 0.7139 0.01267 Uiso 1 0.131801
H12 H 0.7389 0.5893 0.4467 0.01267 Uiso 1 0.01164
H13 H 0.3581 0.8945 0.202 0.01267 Uiso 1 0.126222
H14 H 0.2013 0.6024 0.2221 0.01267 Uiso 1 0.124702
H15 H 0.9505 0.6067 0.2139 0.01267 Uiso 1 0.131268
H16 H 0.7611 0.9107 0.9467 0.01267 Uiso 1 0.011453
C1 C 0.4978 0.2546 0.2954 0.01267 Uiso 1 0.357903
C2 C 0.6243 0.3416 0.2985 0.01267 Uiso 1 -0.192768

```

C3	C	0.7746	0.3361	0.2952	0.01267	Uiso	1	-0.088737
C4	C	0.806	0.2484	0.2879	0.01267	Uiso	1	-0.081198
C5	C	0.6822	0.163	0.2837	0.01267	Uiso	1	-0.048244
C6	C	0.5325	0.1658	0.288	0.01267	Uiso	1	-0.247222
C7	C	0.6063	0.4413	0.3012	0.01267	Uiso	1	0.614837
C8	C	0.9675	0.2449	0.2844	0.01267	Uiso	1	0.628803
C9	C	0.2782	0.3493	0.5499	0.01267	Uiso	1	0.504272
C10	C	0.0022	0.2454	0.7954	0.01267	Uiso	1	0.357719
C11	C	0.8757	0.1584	0.7985	0.01267	Uiso	1	-0.194891
C12	C	0.7254	0.1639	0.7952	0.01267	Uiso	1	-0.088299
C13	C	0.694	0.2516	0.7879	0.01267	Uiso	1	-0.080294
C14	C	0.8178	0.337	0.7837	0.01267	Uiso	1	-0.048147
C15	C	0.9675	0.3342	0.788	0.01267	Uiso	1	-0.245868
C16	C	0.8937	0.0587	0.8012	0.01267	Uiso	1	0.616516
C17	C	0.5325	0.2551	0.7844	0.01267	Uiso	1	0.627156
C18	C	0.2218	0.1507	0.0499	0.01267	Uiso	1	0.50407
C19	C	0.5022	0.7454	0.7046	0.01267	Uiso	1	0.35816
C20	C	0.3757	0.6584	0.7015	0.01267	Uiso	1	-0.192939
C21	C	0.2254	0.6639	0.7048	0.01267	Uiso	1	-0.088616
C22	C	0.194	0.7516	0.7121	0.01267	Uiso	1	-0.081358
C23	C	0.3178	0.837	0.7163	0.01267	Uiso	1	-0.048067
C24	C	0.4675	0.8342	0.712	0.01267	Uiso	1	-0.247468
C25	C	0.3937	0.5587	0.6988	0.01267	Uiso	1	0.614946
C26	C	0.0325	0.7551	0.7156	0.01267	Uiso	1	0.628816
C27	C	0.7218	0.6507	0.4501	0.01267	Uiso	1	0.504465
C28	C	0.9978	0.7546	0.2046	0.01267	Uiso	1	0.357633
C29	C	0.1243	0.8416	0.2015	0.01267	Uiso	1	-0.194816
C30	C	0.2746	0.8361	0.2048	0.01267	Uiso	1	-0.08859
C31	C	0.306	0.7484	0.2121	0.01267	Uiso	1	-0.080028
C32	C	0.1822	0.663	0.2163	0.01267	Uiso	1	-0.048338
C33	C	0.0325	0.6658	0.212	0.01267	Uiso	1	-0.245979
C34	C	0.1063	0.9413	0.1988	0.01267	Uiso	1	0.616559
C35	C	0.4675	0.7449	0.2156	0.01267	Uiso	1	0.627032
C36	C	0.7782	0.8493	0.9501	0.01267	Uiso	1	0.50404
O1	O	0.3518	0.25264	0.29676	0.01267	Uiso	1	-0.569429
O2	O	0.4761	0.45465	0.30958	0.01267	Uiso	1	-0.576306
O3	O	0.7262	0.51226	0.2935	0.01267	Uiso	1	-0.531957
O4	O	0.0743	0.32437	0.2909	0.01267	Uiso	1	-0.578796
O5	O	0.9875	0.16245	0.276	0.01267	Uiso	1	-0.553649
O6	O	0.2804	0.3126	0.473	0.01267	Uiso	1	-0.52543
O7	O	0.2971	0.3096	0.622	0.01267	Uiso	1	-0.49554
O8	O	0.1482	0.24736	0.79676	0.01267	Uiso	1	-0.568844
O9	O	0.0239	0.04535	0.80958	0.01267	Uiso	1	-0.576554
O10	O	0.7738	0.98774	0.7935	0.01267	Uiso	1	-0.532704
O11	O	0.4257	0.17563	0.7909	0.01267	Uiso	1	-0.577934
O12	O	0.5125	0.33755	0.776	0.01267	Uiso	1	-0.552978
O13	O	0.2196	0.1874	0.973	0.01267	Uiso	1	-0.525433
O14	O	0.2029	0.1904	0.122	0.01267	Uiso	1	-0.49513
O15	O	0.6482	0.74736	0.70324	0.01267	Uiso	1	-0.569622
O16	O	0.5239	0.54535	0.69042	0.01267	Uiso	1	-0.576417
O17	O	0.2738	0.48774	0.7065	0.01267	Uiso	1	-0.531775
O18	O	0.9257	0.67563	0.7091	0.01267	Uiso	1	-0.578519

O19	O	0.0125	0.83755	0.724	0.01267	Uiso	1	-0.553852
O20	O	0.7196	0.6874	0.527	0.01267	Uiso	1	-0.525452
O21	O	0.7029	0.6904	0.378	0.01267	Uiso	1	-0.495772
O22	O	0.8518	0.75264	0.20324	0.01267	Uiso	1	-0.56873
O23	O	0.9761	0.95465	0.19042	0.01267	Uiso	1	-0.576451
O24	O	0.2262	0.01226	0.2065	0.01267	Uiso	1	-0.532943
O25	O	0.5743	0.82437	0.2091	0.01267	Uiso	1	-0.578087
O26	O	0.4875	0.66245	0.224	0.01267	Uiso	1	-0.55278
O27	O	0.7804	0.8126	0.027	0.01267	Uiso	1	-0.525298
O28	O	0.7971	0.8096	0.878	0.01267	Uiso	1	-0.495114

```

data_EZOFEF_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.8049
_cell_length_b            18.8049
_cell_length_c            18.8049
_cell_angle_alpha        60.0000
_cell_angle_beta         60.0000
_cell_angle_gamma        60.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Ni1  Ni    0.92786    0.5    0.07214    0.01267    Uiso  1    0.827572
Ni2  Ni    0.5    0.92786    0.5    0.01267    Uiso  1    0.887054
Ni3  Ni    0.07214    0.5    0.92786    0.01267    Uiso  1    0.777325
Ni4  Ni    0.5    0.07214    0.5    0.01267    Uiso  1    0.88676
Ni5  Ni    0.92786    0.07214    0.5    0.01267    Uiso  1    0.749269
Ni6  Ni    0.5    0.5    0.07214    0.01267    Uiso  1    0.748493
Ni7  Ni    0.07214    0.92786    0.5    0.01267    Uiso  1    0.74954
Ni8  Ni    0.5    0.5    0.92786    0.01267    Uiso  1    0.7505519999999997
Ni9  Ni    0.92786    0.5    0.5    0.01267    Uiso  1    0.886939
Ni10 Ni    0.5    0.07214    0.92786    0.01267    Uiso  1    0.748862
Ni11 Ni    0.07214    0.5    0.5    0.01267    Uiso  1    0.887252
Ni12 Ni    0.5    0.92786    0.07214    0.01267    Uiso  1    0.748757
H1   H     0.7388 0.5242 0.1298 0.01267    Uiso  1    0.164247
H2   H     0.5242 0.7388 0.6072 0.01267    Uiso  1    0.168422
H3   H     0.1298 0.6072 0.7388 0.01267    Uiso  1    0.162365
H4   H     0.6072 0.1298 0.5242 0.01267    Uiso  1    0.16694
H5   H     0.7388 0.1298 0.6072 0.01267    Uiso  1    0.161487
H6   H     0.5242 0.6072 0.1298 0.01267    Uiso  1    0.161754
H7   H     0.1298 0.7388 0.5242 0.01267    Uiso  1    0.161095
H8   H     0.6072 0.5242 0.7388 0.01267    Uiso  1    0.162317
H9   H     0.7388 0.6072 0.5242 0.01267    Uiso  1    0.166331
H10  H     0.5242 0.1298 0.7388 0.01267    Uiso  1    0.160022
H11  H     0.1298 0.5242 0.6072 0.01267    Uiso  1    0.166565
H12  H     0.6072 0.7388 0.1298 0.01267    Uiso  1    0.161069
H13  H     0.4758 0.2612 0.8702 0.01267    Uiso  1    0.161266
H14  H     0.2612 0.4758 0.3928 0.01267    Uiso  1    0.1685

```

H15	H	0.3928	0.8702	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.166935
H16	H	0.8702	0.3928	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.167022
H17	H	0.8702	0.2612	0.3928	0.01267	Uiso	1	0.161325
H18	H	0.3928	0.4758	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.161601
H19	H	0.2612	0.8702	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.160983
H20	H	0.4758	0.3928	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.162394
H21	H	0.3928	0.2612	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.166286
H22	H	0.8702	0.4758	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.163327
H23	H	0.4758	0.8702	0.3928	0.01267	Uiso	1	0.166817
H24	H	0.2612	0.3928	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.162165
H25	H	0.2612	0.4758	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.16162
H26	H	0.4758	0.2612	0.3928	0.01267	Uiso	1	0.166793
H27	H	0.8702	0.3928	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.169451
H28	H	0.3928	0.8702	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.167223
H29	H	0.2612	0.8702	0.3928	0.01267	Uiso	1	0.161589
H30	H	0.4758	0.3928	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.161626
H31	H	0.8702	0.2612	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.161051
H32	H	0.3928	0.4758	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.162632
H33	H	0.2612	0.3928	0.4758	0.01267	Uiso	1	0.167801
H34	H	0.4758	0.8702	0.2612	0.01267	Uiso	1	0.160326
H35	H	0.8702	0.4758	0.3928	0.01267	Uiso	1	0.166679
H36	H	0.3928	0.2612	0.8702	0.01267	Uiso	1	0.161306
H37	H	0.5242	0.7388	0.1298	0.01267	Uiso	1	0.161385
H38	H	0.7388	0.5242	0.6072	0.01267	Uiso	1	0.168574
H39	H	0.6072	0.1298	0.7388	0.01267	Uiso	1	0.171913
H40	H	0.1298	0.6072	0.5242	0.01267	Uiso	1	0.167267
H41	H	0.1298	0.7388	0.6072	0.01267	Uiso	1	0.161463
H42	H	0.6072	0.5242	0.1298	0.01267	Uiso	1	0.161506
H43	H	0.7388	0.1298	0.5242	0.01267	Uiso	1	0.160964
H44	H	0.5242	0.6072	0.7388	0.01267	Uiso	1	0.162788
H45	H	0.6072	0.7388	0.5242	0.01267	Uiso	1	0.167783
H46	H	0.1298	0.5242	0.7388	0.01267	Uiso	1	0.161147
H47	H	0.5242	0.1298	0.6072	0.01267	Uiso	1	0.166799
H48	H	0.7388	0.6072	0.1298	0.01267	Uiso	1	0.164243
H49	H	0.776	0.5	0.224	0.01267	Uiso	1	0.418955
H50	H	0.5	0.776	0.5	0.01267	Uiso	1	0.423129
H51	H	0.224	0.5	0.776	0.01267	Uiso	1	0.414689
H52	H	0.5	0.224	0.5	0.01267	Uiso	1	0.423225
H53	H	0.776	0.224	0.5	0.01267	Uiso	1	0.413664
H54	H	0.5	0.5	0.224	0.01267	Uiso	1	0.413458
H55	H	0.224	0.776	0.5	0.01267	Uiso	1	0.413173
H56	H	0.5	0.5	0.776	0.01267	Uiso	1	0.413731
H57	H	0.776	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1	0.423175
H58	H	0.5	0.224	0.776	0.01267	Uiso	1	0.413877
H59	H	0.224	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1	0.422918
H60	H	0.5	0.776	0.224	0.01267	Uiso	1	0.413342
H61	H	0.0142	0.2268	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.126876
H62	H	0.2268	0.0142	0.5322	0.01267	Uiso	1	0.125577
H63	H	0.2268	0.5322	0.0142	0.01267	Uiso	1	0.126168
H64	H	0.5322	0.2268	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.125817
H65	H	0.0142	0.2268	0.5322	0.01267	Uiso	1	0.125688
H66	H	0.2268	0.5322	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.12572

H67	H	0.2268	0.0142	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.126974		
H68	H	0.5322	0.2268	0.0142	0.01267	Uiso	1	0.126681		
H69	H	0.0142	0.5322	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.12594		
H70	H	0.2268	0.2268	0.0142	0.01267	Uiso	1	0.126892		
H71	H	0.2268	0.2268	0.5322	0.01267	Uiso	1	0.124867		
H72	H	0.5322	0.0142	0.2268	0.01267	Uiso	1	0.126108		
H73	H	0.7732	0.9858	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.127247		
H74	H	0.9858	0.7732	0.4678	0.01267	Uiso	1	0.125507		
H75	H	0.4678	0.7732	0.9858	0.01267	Uiso	1	0.126448		
H76	H	0.7732	0.4678	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.125849		
H77	H	0.7732	0.9858	0.4678	0.01267	Uiso	1	0.125754		
H78	H	0.4678	0.7732	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.125728		
H79	H	0.9858	0.7732	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.126573		
H80	H	0.7732	0.4678	0.9858	0.01267	Uiso	1	0.126437		
H81	H	0.4678	0.9858	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.126216		
H82	H	0.7732	0.7732	0.9858	0.01267	Uiso	1	0.12689		
H83	H	0.7732	0.7732	0.4678	0.01267	Uiso	1	0.124895		
H84	H	0.9858	0.4678	0.7732	0.01267	Uiso	1	0.125596		
H85	H	0.6963	0.543	0.2177	0.01267	Uiso	1	0.118402		
H86	H	0.543	0.6963	0.543	0.01267	Uiso	1	0.121757		
H87	H	0.2177	0.543	0.6963	0.01267	Uiso	1	0.115679		
H88	H	0.543	0.2177	0.543	0.01267	Uiso	1	0.122319		
H89	H	0.6963	0.2177	0.543	0.01267	Uiso	1	0.11446		
H90	H	0.543	0.543	0.2177	0.01267	Uiso	1	0.114036		
H91	H	0.2177	0.6963	0.543	0.01267	Uiso	1	0.113985		
H92	H	0.543	0.543	0.6963	0.01267	Uiso	1	0.113521		
H93	H	0.6963	0.543	0.543	0.01267	Uiso	1	0.121901		
H94	H	0.543	0.2177	0.6963	0.01267	Uiso	1	0.113745		
H95	H	0.2177	0.543	0.543	0.01267	Uiso	1	0.122061		
H96	H	0.543	0.6963	0.2177	0.01267	Uiso	1	0.114253		
H97	H	0.457	0.3037	0.7823	0.01267	Uiso	1	0.114625		
H98	H	0.3037	0.457	0.457	0.01267	Uiso	1	0.121681		
H99	H	0.457	0.7823	0.3037	0.01267	Uiso	1	0.113742		
H100	H	0.7823	0.457	0.457	0.01267	Uiso	1	0.122056		
H101	H	0.7823	0.3037	0.457	0.01267	Uiso	1	0.114224		
H102	H	0.457	0.457	0.7823	0.01267	Uiso	1	0.114363		
H103	H	0.3037	0.7823	0.457	0.01267	Uiso	1	0.1141		
H104	H	0.457	0.457	0.3037	0.01267	Uiso	1	0.113314		
H105	H	0.457	0.3037	0.457	0.01267	Uiso	1	0.122003		
H106	H	0.7823	0.457	0.3037	0.01267	Uiso	1	0.117696		
H107	H	0.457	0.7823	0.457	0.01267	Uiso	1	0.122178		
H108	H	0.3037	0.457	0.7823	0.01267	Uiso	1	0.116129		
C1	C	0.0694	0.33476		0.0694	0.01267	Uiso	1	0.583615	
C2	C	0.1136	0.24194		0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.010026	
C3	C	0.33476		0.0694	0.52644		0.01267	Uiso	1	0.591091
C4	C	0.24194		0.1136	0.53086		0.01267	Uiso	1	-0.012266
C5	C	0.0694	0.52644		0.0694	0.01267	Uiso	1	0.583965	
C6	C	0.1136	0.53086		0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.012381	
C7	C	0.52644		0.0694	0.33476		0.01267	Uiso	1	0.590849
C8	C	0.53086		0.1136	0.24194		0.01267	Uiso	1	-0.010941
C9	C	0.0694	0.0694	0.52644		0.01267	Uiso	1	0.580261	
C10	C	0.1136	0.1136	0.53086		0.01267	Uiso	1	-0.011623	

C11	C	0.33476	0.52644	0.0694	0.01267	Uiso	1	0.579358
C12	C	0.24194	0.53086	0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.01007
C13	C	0.0694	0.0694	0.33476	0.01267	Uiso	1	0.579478
C14	C	0.1136	0.1136	0.24194	0.01267	Uiso	1	-0.009346
C15	C	0.52644	0.33476	0.0694	0.01267	Uiso	1	0.579615
C16	C	0.53086	0.24194	0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.010064
C17	C	0.0694	0.52644	0.33476	0.01267	Uiso	1	0.591178
C18	C	0.1136	0.53086	0.24194	0.01267	Uiso	1	-0.011731
C19	C	0.33476	0.0694	0.0694	0.01267	Uiso	1	0.579002
C20	C	0.24194	0.1136	0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.009143
C21	C	0.0694	0.33476	0.52644	0.01267	Uiso	1	0.591316
C22	C	0.1136	0.24194	0.53086	0.01267	Uiso	1	-0.012572
C23	C	0.52644	0.0694	0.0694	0.01267	Uiso	1	0.579145
C24	C	0.53086	0.1136	0.1136	0.01267	Uiso	1	-0.009891
C25	C	0.66524	0.9306	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.579116
C26	C	0.75806	0.8864	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.009465
C27	C	0.9306	0.66524	0.47356	0.01267	Uiso	1	0.591118
C28	C	0.8864	0.75806	0.46914	0.01267	Uiso	1	-0.012338
C29	C	0.47356	0.9306	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.579402
C30	C	0.46914	0.8864	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.010357
C31	C	0.9306	0.47356	0.66524	0.01267	Uiso	1	0.590927
C32	C	0.8864	0.46914	0.75806	0.01267	Uiso	1	-0.011156
C33	C	0.9306	0.9306	0.47356	0.01267	Uiso	1	0.580174
C34	C	0.8864	0.8864	0.46914	0.01267	Uiso	1	-0.011558
C35	C	0.47356	0.66524	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.579593
C36	C	0.46914	0.75806	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.010267
C37	C	0.9306	0.9306	0.66524	0.01267	Uiso	1	0.579414
C38	C	0.8864	0.8864	0.75806	0.01267	Uiso	1	-0.009228
C39	C	0.66524	0.47356	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.579717
C40	C	0.75806	0.46914	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.010758
C41	C	0.47356	0.9306	0.66524	0.01267	Uiso	1	0.590821
C42	C	0.46914	0.8864	0.75806	0.01267	Uiso	1	-0.011141
C43	C	0.9306	0.66524	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.583559
C44	C	0.8864	0.75806	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.010007
C45	C	0.66524	0.9306	0.47356	0.01267	Uiso	1	0.591096
C46	C	0.75806	0.8864	0.46914	0.01267	Uiso	1	-0.012513
C47	C	0.9306	0.47356	0.9306	0.01267	Uiso	1	0.583833
C48	C	0.8864	0.46914	0.8864	0.01267	Uiso	1	-0.012029
C49	C	0.07154	0.1985	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.119587
C50	C	0.1985	0.07154	0.53146	0.01267	Uiso	1	-0.121225
C51	C	0.1985	0.53146	0.07154	0.01267	Uiso	1	-0.123116
C52	C	0.53146	0.1985	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.119778
C53	C	0.07154	0.1985	0.53146	0.01267	Uiso	1	-0.121105
C54	C	0.1985	0.53146	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.119513
C55	C	0.1985	0.07154	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.121043
C56	C	0.53146	0.1985	0.07154	0.01267	Uiso	1	-0.121424
C57	C	0.07154	0.53146	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.117355
C58	C	0.1985	0.1985	0.07154	0.01267	Uiso	1	-0.121144
C59	C	0.1985	0.1985	0.53146	0.01267	Uiso	1	-0.119158
C60	C	0.53146	0.07154	0.1985	0.01267	Uiso	1	-0.119761
C61	C	0.8015	0.92846	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.120835
C62	C	0.92846	0.8015	0.46854	0.01267	Uiso	1	-0.121288

C63	C	0.46854	0.8015	0.92846	0.01267	Uiso	1	-0.121579
C64	C	0.8015	0.46854	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.119724
C65	C	0.8015	0.92846	0.46854	0.01267	Uiso	1	-0.12108
C66	C	0.46854	0.8015	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.118955
C67	C	0.92846	0.8015	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.121113
C68	C	0.8015	0.46854	0.92846	0.01267	Uiso	1	-0.119199
C69	C	0.46854	0.92846	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.119422
C70	C	0.8015	0.8015	0.92846	0.01267	Uiso	1	-0.119497
C71	C	0.8015	0.8015	0.46854	0.01267	Uiso	1	-0.118975
C72	C	0.92846	0.46854	0.8015	0.01267	Uiso	1	-0.121405
C73	C	0.743	0.547	0.163	0.01267	Uiso	1	-0.332464
C74	C	0.547	0.743	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.338811
C75	C	0.163	0.547	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.331604
C76	C	0.547	0.163	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.334537
C77	C	0.743	0.163	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.331415
C78	C	0.547	0.547	0.163	0.01267	Uiso	1	-0.330583
C79	C	0.163	0.743	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.331405
C80	C	0.547	0.547	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.335397
C81	C	0.743	0.547	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.336297
C82	C	0.547	0.163	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.339837
C83	C	0.163	0.547	0.547	0.01267	Uiso	1	-0.334025
C84	C	0.547	0.743	0.163	0.01267	Uiso	1	-0.331096
C85	C	0.453	0.257	0.837	0.01267	Uiso	1	-0.330707
C86	C	0.257	0.453	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.338587
C87	C	0.453	0.837	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.334853
C88	C	0.837	0.453	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.334408
C89	C	0.837	0.257	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.331516
C90	C	0.453	0.453	0.837	0.01267	Uiso	1	-0.330492
C91	C	0.257	0.837	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.331369
C92	C	0.453	0.453	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.335246
C93	C	0.453	0.257	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.334248
C94	C	0.837	0.453	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.336549
C95	C	0.453	0.837	0.453	0.01267	Uiso	1	-0.333942
C96	C	0.257	0.453	0.837	0.01267	Uiso	1	-0.331574
N1	N	0.823	0.5	0.177	0.01267	Uiso	1	-0.477963
N2	N	0.5	0.823	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.475647
N3	N	0.177	0.5	0.823	0.01267	Uiso	1	-0.480675
N4	N	0.5	0.177	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.475682
N5	N	0.823	0.177	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.477059
N6	N	0.5	0.5	0.177	0.01267	Uiso	1	-0.477358
N7	N	0.177	0.823	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.4765
N8	N	0.5	0.5	0.823	0.01267	Uiso	1	-0.477352
N9	N	0.823	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.475504
N10	N	0.5	0.177	0.823	0.01267	Uiso	1	-0.47912
N11	N	0.177	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1	-0.475381
N12	N	0.5	0.823	0.177	0.01267	Uiso	1	-0.477899
O1	O	0.99401	0.37205	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.540409
O2	O	0.37205	0.99401	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.558108
O3	O	0.11249	0.52145	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.50616
O4	O	0.52145	0.11249	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.557682
O5	O	0.99401	0.11249	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.514491
O6	O	0.37205	0.52145	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.515848

O7	O	0.11249	0.99401	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.514403
O8	O	0.52145	0.37205	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.517092
O9	O	0.99401	0.52145	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.557448
O10	O	0.37205	0.11249	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.514241
O11	O	0.11249	0.37205	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.558558
O12	O	0.52145	0.99401	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.514527
O13	O	0.62795	0.00599	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.514712
O14	O	0.00599	0.62795	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.557812
O15	O	0.47855	0.88751	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.51413
O16	O	0.88751	0.47855	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.557723
O17	O	0.88751	0.00599	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.514271
O18	O	0.47855	0.62795	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.517094
O19	O	0.00599	0.88751	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.514663
O20	O	0.62795	0.47855	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.515995
O21	O	0.47855	0.00599	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.557195
O22	O	0.88751	0.62795	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.539997
O23	O	0.62795	0.88751	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.558657
O24	O	0.00599	0.47855	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.506685
O25	O	0.00599	0.62795	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.523982
O26	O	0.62795	0.00599	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.556961
O27	O	0.88751	0.47855	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.546819
O28	O	0.47855	0.88751	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.557201
O29	O	0.00599	0.88751	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.514602
O30	O	0.62795	0.47855	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.513262
O31	O	0.88751	0.00599	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.513916
O32	O	0.47855	0.62795	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.511574
O33	O	0.00599	0.47855	0.62795	0.01267	Uiso	1	-0.557566
O34	O	0.62795	0.88751	0.00599	0.01267	Uiso	1	-0.514026
O35	O	0.88751	0.62795	0.47855	0.01267	Uiso	1	-0.55802
O36	O	0.47855	0.00599	0.88751	0.01267	Uiso	1	-0.513485
O37	O	0.37205	0.99401	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.514196
O38	O	0.99401	0.37205	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.55764
O39	O	0.52145	0.11249	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.512838
O40	O	0.11249	0.52145	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.557766
O41	O	0.11249	0.99401	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.515026
O42	O	0.52145	0.37205	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.511691
O43	O	0.99401	0.11249	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.514236
O44	O	0.37205	0.52145	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.512922
O45	O	0.52145	0.99401	0.37205	0.01267	Uiso	1	-0.556972
O46	O	0.11249	0.37205	0.99401	0.01267	Uiso	1	-0.524167
O47	O	0.37205	0.11249	0.52145	0.01267	Uiso	1	-0.557877
O48	O	0.99401	0.52145	0.11249	0.01267	Uiso	1	-0.547296

```

data_QOHTUD_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            9.4044
_cell_length_b            13.1257
_cell_length_c            19.8899
_cell_angle_alpha         109.2660
_cell_angle_beta          102.4660
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Co1  Co   0.17572    0.1429 0.72502    0.01267    Uiso  1    0.70791
Co2  Co   0.32428    0.41788  0.27498    0.01267    Uiso  1    0.705697
Co3  Co   0.82428    0.8571 0.27498    0.01267    Uiso  1    0.707728
Co4  Co   0.67572    0.58212  0.72502    0.01267    Uiso  1    0.705725
H1   H    0.8593 0.1754 0.7424 0.01267    Uiso  1    0.096291
H2   H    0.6235 0.1322 0.6758 0.01267    Uiso  1    0.145626
H3   H    0.7798 0.9795 0.4978 0.01267    Uiso  1    0.131894
H4   H    0.0103 0.0268 0.5696 0.01267    Uiso  1    0.09818
H5   H    0.1504 0.2303 0.887  0.01267    Uiso  1    0.109011
H6   H    0.0876 0.1739 0.9746 0.01267    Uiso  1    0.138697
H7   H    0.0213 0.8723 0.8318 0.01267    Uiso  1    0.145605
H8   H    0.0786 0.9373 0.7468 0.01267    Uiso  1    0.108589
H9   H    0.4468 0.0437 0.5618 0.01267    Uiso  1    0.120499
H10  H    0.9809 0.8969 0.9508 0.01267    Uiso  1    0.119432
H11  H    0.4415 0.3097 0.5816 0.01267    Uiso  1    0.135834
H12  H    0.1606 0.212  0.5208 0.01267    Uiso  1    0.105552
H13  H    0.0598 0.2122 0.3946 0.01267    Uiso  1    0.136268
H14  H    0.3459 0.2978 0.453  0.01267    Uiso  1    0.103679
H15  H    0.6407 0.433  0.2576 0.01267    Uiso  1    0.096104
H16  H    0.8765 0.4564 0.3242 0.01267    Uiso  1    0.144728
H17  H    0.7202 0.4817 0.5022 0.01267    Uiso  1    0.13108
H18  H    0.4897 0.4572 0.4304 0.01267    Uiso  1    0.098892
H19  H    0.3496 0.3433 0.113  0.01267    Uiso  1    0.104155
H20  H    0.4124 0.1993 0.0254 0.01267    Uiso  1    0.125697
H21  H    0.4787 0.0405 0.1682 0.01267    Uiso  1    0.145349
H22  H    0.4214 0.1905 0.2532 0.01267    Uiso  1    0.108811

```

H23	H	0.0532	0.4819	0.4382	0.01267	Uiso	1	0.120206	
H24	H	0.5191	0.9461	0.0492	0.01267	Uiso	1	0.119952	
H25	H	0.0585	0.7281	0.4184	0.01267	Uiso	1	0.136549	
H26	H	0.3394	0.6912	0.4792	0.01267	Uiso	1	0.105162	
H27	H	0.4402	0.8176	0.6054	0.01267	Uiso	1	0.135666	
H28	H	0.1541	0.8448	0.547	0.01267	Uiso	1	0.103049	
H29	H	0.1407	0.8246	0.2576	0.01267	Uiso	1	0.096351	
H30	H	0.3765	0.8678	0.3242	0.01267	Uiso	1	0.145685	
H31	H	0.2202	0.0205	0.5022	0.01267	Uiso	1	0.131854	
H32	H	0.9897	0.9732	0.4304	0.01267	Uiso	1	0.0981	
H33	H	0.8496	0.7697	0.113	0.01267	Uiso	1	0.109195	
H34	H	0.9124	0.8261	0.0254	0.01267	Uiso	1	0.138767	
H35	H	0.9787	0.1277	0.1682	0.01267	Uiso	1	0.145425	
H36	H	0.9214	0.0627	0.2532	0.01267	Uiso	1	0.108541	
H37	H	0.5532	0.9563	0.4382	0.01267	Uiso	1	0.12069	
H38	H	0.0191	0.1031	0.0492	0.01267	Uiso	1	0.119245	
H39	H	0.5585	0.6903	0.4184	0.01267	Uiso	1	0.135805	
H40	H	0.8394	0.788	0.4792	0.01267	Uiso	1	0.10542	
H41	H	0.9402	0.7878	0.6054	0.01267	Uiso	1	0.136265	
H42	H	0.6541	0.7022	0.547	0.01267	Uiso	1	0.103685	
H43	H	0.3593	0.567	0.7424	0.01267	Uiso	1	0.096223	
H44	H	0.1235	0.5436	0.6758	0.01267	Uiso	1	0.144697	
H45	H	0.2798	0.5183	0.4978	0.01267	Uiso	1	0.131048	
H46	H	0.5103	0.5428	0.5696	0.01267	Uiso	1	0.098986	
H47	H	0.6504	0.6567	0.887	0.01267	Uiso	1	0.104262	
H48	H	0.5876	0.8007	0.9746	0.01267	Uiso	1	0.12569	
H49	H	0.5213	0.9595	0.8318	0.01267	Uiso	1	0.145045	
H50	H	0.5786	0.8095	0.7468	0.01267	Uiso	1	0.108705	
H51	H	0.9468	0.5181	0.5618	0.01267	Uiso	1	0.120048	
H52	H	0.4809	0.0539	0.9508	0.01267	Uiso	1	0.119798	
H53	H	0.9415	0.2719	0.5816	0.01267	Uiso	1	0.136655	
H54	H	0.6606	0.3088	0.5208	0.01267	Uiso	1	0.104966	
H55	H	0.5598	0.1824	0.3946	0.01267	Uiso	1	0.135572	
H56	H	0.8459	0.1552	0.453	0.01267	Uiso	1	0.103261	
C1	C	0.8424	0.13534		0.69228	0.01267	Uiso	1	0.071521
C2	C	0.7008	0.10973		0.65266	0.01267	Uiso	1	-0.159152
C3	C	0.6712	0.0504	0.57814		0.01267	Uiso	1	0.163615
C4	C	0.7931	0.01966		0.54772	0.01267	Uiso	1	-0.18829
C5	C	0.9306	0.04846		0.59112	0.01267	Uiso	1	0.082967
C6	C	0.1226	0.15651		0.87522	0.01267	Uiso	1	0.043812
C7	C	0.0857	0.12323		0.92826	0.01267	Uiso	1	-0.212931
C8	C	0.0459	0.01562		0.91364	0.01267	Uiso	1	0.155004
C9	C	0.046	0.94665		0.8445	0.01267	Uiso	1	-0.170522
C10	C	0.0819	0.98616		0.79392	0.01267	Uiso	1	0.114812
C11	C	0.5208	0.02434		0.53588	0.01267	Uiso	1	-0.1255
C12	C	0.0041	0.97208		0.96656	0.01267	Uiso	1	-0.13834
C13	C	0.3392	0.25281		0.64806	0.01267	Uiso	1	0.610968
C14	C	0.3538	0.27492		0.58112	0.01267	Uiso	1	-0.237772
C15	C	0.2473	0.24738		0.52052	0.01267	Uiso	1	-0.060481
C16	C	0.1565	0.28292		0.33284	0.01267	Uiso	1	0.608749
C17	C	0.1468	0.24897		0.39614	0.01267	Uiso	1	-0.243313
C18	C	0.2562	0.26828		0.4546	0.01267	Uiso	1	-0.051063

C19	C	0.6576	0.44306	0.30772	0.01267	Uiso	1	0.070431
C20	C	0.7992	0.45707	0.34734	0.01267	Uiso	1	-0.157889
C21	C	0.8288	0.47226	0.42186	0.01267	Uiso	1	0.164072
C22	C	0.7069	0.47194	0.45228	0.01267	Uiso	1	-0.187834
C23	C	0.5694	0.45734	0.40888	0.01267	Uiso	1	0.081883
C24	C	0.3774	0.28129	0.12478	0.01267	Uiso	1	0.04822
C25	C	0.4143	0.19497	0.07174	0.01267	Uiso	1	-0.199917
C26	C	0.4541	0.10198	0.08636	0.01267	Uiso	1	0.155511
C27	C	0.454	0.10215	0.1555	0.01267	Uiso	1	-0.171594
C28	C	0.4181	0.19224	0.20608	0.01267	Uiso	1	0.114226
C29	C	0.9792	0.48846	0.46412	0.01267	Uiso	1	-0.125442
C30	C	0.4959	0.00552	0.03344	0.01267	Uiso	1	-0.138069
C31	C	0.1608	0.60475	0.35194	0.01267	Uiso	1	0.61088
C32	C	0.1462	0.6938	0.41888	0.01267	Uiso	1	-0.238471
C33	C	0.2527	0.72686	0.47948	0.01267	Uiso	1	-0.060946
C34	C	0.3435	0.95008	0.66716	0.01267	Uiso	1	0.608383
C35	C	0.3532	0.85283	0.60386	0.01267	Uiso	1	-0.242053
C36	C	0.2438	0.81368	0.5454	0.01267	Uiso	1	-0.049981
C37	C	0.1576	0.86466	0.30772	0.01267	Uiso	1	0.071355
C38	C	0.2992	0.89027	0.34734	0.01267	Uiso	1	-0.158945
C39	C	0.3288	0.9496	0.42186	0.01267	Uiso	1	0.163463
C40	C	0.2069	0.98034	0.45228	0.01267	Uiso	1	-0.188168
C41	C	0.0694	0.95154	0.40888	0.01267	Uiso	1	0.083002
C42	C	0.8774	0.84349	0.12478	0.01267	Uiso	1	0.043746
C43	C	0.9143	0.87677	0.07174	0.01267	Uiso	1	-0.212831
C44	C	0.9541	0.98438	0.08636	0.01267	Uiso	1	0.154811
C45	C	0.954	0.05335	0.1555	0.01267	Uiso	1	-0.170576
C46	C	0.9181	0.01384	0.20608	0.01267	Uiso	1	0.114811
C47	C	0.4792	0.97566	0.46412	0.01267	Uiso	1	-0.125588
C48	C	0.9959	0.02792	0.03344	0.01267	Uiso	1	-0.138167
C49	C	0.6608	0.74719	0.35194	0.01267	Uiso	1	0.611015
C50	C	0.6462	0.72508	0.41888	0.01267	Uiso	1	-0.237788
C51	C	0.7527	0.75262	0.47948	0.01267	Uiso	1	-0.060217
C52	C	0.8435	0.71708	0.66716	0.01267	Uiso	1	0.608622
C53	C	0.8532	0.75103	0.60386	0.01267	Uiso	1	-0.243211
C54	C	0.7438	0.73172	0.5454	0.01267	Uiso	1	-0.051216
C55	C	0.3424	0.55694	0.69228	0.01267	Uiso	1	0.070341
C56	C	0.2008	0.54293	0.65266	0.01267	Uiso	1	-0.157918
C57	C	0.1712	0.52774	0.57814	0.01267	Uiso	1	0.164075
C58	C	0.2931	0.52806	0.54772	0.01267	Uiso	1	-0.1879
C59	C	0.4306	0.54266	0.59112	0.01267	Uiso	1	0.081931
C60	C	0.6226	0.71871	0.87522	0.01267	Uiso	1	0.048472
C61	C	0.5857	0.80503	0.92826	0.01267	Uiso	1	-0.199734
C62	C	0.5459	0.89802	0.91364	0.01267	Uiso	1	0.155286
C63	C	0.546	0.89785	0.8445	0.01267	Uiso	1	-0.171352
C64	C	0.5819	0.80776	0.79392	0.01267	Uiso	1	0.113977
C65	C	0.0208	0.51154	0.53588	0.01267	Uiso	1	-0.125125
C66	C	0.5041	0.99448	0.96656	0.01267	Uiso	1	-0.138094
C67	C	0.8392	0.39525	0.64806	0.01267	Uiso	1	0.610831
C68	C	0.8538	0.3062	0.58112	0.01267	Uiso	1	-0.238305
C69	C	0.7473	0.27314	0.52052	0.01267	Uiso	1	-0.060921
C70	C	0.6565	0.04992	0.33284	0.01267	Uiso	1	0.608372

C71	C	0.6468	0.14717	0.39614	0.01267	Uiso	1	-0.242092
C72	C	0.7562	0.18632	0.4546	0.01267	Uiso	1	-0.050105
N1	N	0.9582	0.10592	0.66276	0.01267	Uiso	1	-0.195401
N2	N	0.1211	0.09006	0.8081	0.01267	Uiso	1	-0.220458
N3	N	0.5418	0.44316	0.33724	0.01267	Uiso	1	-0.194517
N4	N	0.3789	0.28196	0.1919	0.01267	Uiso	1	-0.218971
N5	N	0.0418	0.89408	0.33724	0.01267	Uiso	1	-0.195332
N6	N	0.8789	0.90994	0.1919	0.01267	Uiso	1	-0.220417
N7	N	0.4582	0.55684	0.66276	0.01267	Uiso	1	-0.194521
N8	N	0.6211	0.71804	0.8081	0.01267	Uiso	1	-0.218883
O1	O	0.2312	0.19241	0.64374	0.01267	Uiso	1	-0.528122
O2	O	0.4385	0.29466	0.7052	0.01267	Uiso	1	-0.592306
O3	O	0.2794	0.32141	0.33264	0.01267	Uiso	1	-0.542479
O4	O	0.0402	0.2751	0.28526	0.01267	Uiso	1	-0.587089
O5	O	0.2688	0.54867	0.35626	0.01267	Uiso	1	-0.527365
O6	O	0.0615	0.58946	0.2948	0.01267	Uiso	1	-0.592308
O7	O	0.2206	0.98877	0.66736	0.01267	Uiso	1	-0.543401
O8	O	0.4598	0.98984	0.71474	0.01267	Uiso	1	-0.587315
O9	O	0.7688	0.80759	0.35626	0.01267	Uiso	1	-0.528027
O10	O	0.5615	0.70534	0.2948	0.01267	Uiso	1	-0.592452
O11	O	0.7206	0.67859	0.66736	0.01267	Uiso	1	-0.542265
O12	O	0.9598	0.7249	0.71474	0.01267	Uiso	1	-0.586957
O13	O	0.7312	0.45133	0.64374	0.01267	Uiso	1	-0.527468
O14	O	0.9385	0.41054	0.7052	0.01267	Uiso	1	-0.592249
O15	O	0.7794	0.01123	0.33264	0.01267	Uiso	1	-0.54321
O16	O	0.5402	0.01016	0.28526	0.01267	Uiso	1	-0.587439

```

data_XILVIZ_clean
_audit_creation_date 2014-07-02
_audit_creation_method 'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number 1
_symmetry_cell_setting triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
    x,y,z
_cell_length_a 13.372
_cell_length_b 14.164
_cell_length_c 16.713
_cell_angle_alpha 69.626
_cell_angle_beta 68.786
_cell_angle_gamma 73.544
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Mn1 Mn 0.5 0 0.5 0.01267 Uiso 1 0.747511
Zn1 Zn 0.08223 0.5671 0.95932 0.01267 Uiso 1 0.84185
Zn2 Zn 0.91777 0.4329 0.04068 0.01267 Uiso 1 0.842176
H1 H 0.9585 0.7741 0.743 0.01267 Uiso 1 0.130874
H2 H 0.854 0.8734 0.632 0.01267 Uiso 1 0.12804
H3 H 0.6155 0.7219 0.7879 0.01267 Uiso 1 0.119626
H4 H 0.7154 0.6239 0.8815 0.01267 Uiso 1 0.120876
H5 H 0.5944 0.9509 0.7812 0.01267 Uiso 1 0.134197
H6 H 0.4435 0.0971 0.7818 0.01267 Uiso 1 0.144741
H7 H 0.188 0.293 0.5731 0.01267 Uiso 1 0.147345
H8 H 0.1805 0.2831 0.4346 0.01267 Uiso 1 0.149143
H9 H 0.3964 0.3265 0.6413 0.01267 Uiso 1 0.109557
H10 H 0.3101 0.4238 0.7526 0.01267 Uiso 1 0.143081
H11 H 0.0837 0.2346 0.8741 0.01267 Uiso 1 0.145317
H12 H 0.1842 0.1455 0.7621 0.01267 Uiso 1 0.118911
H13 H 0.1769 0.5988 0.0814 0.01267 Uiso 1 0.122257
H14 H 0.2908 0.6967 0.0757 0.01267 Uiso 1 0.143765
H15 H 0.3112 0.8303 0.8126 0.01267 Uiso 1 0.157803
H16 H 0.2132 0.7249 0.8316 0.01267 Uiso 1 0.068316
H17 H 0.2633 0.1331 0.9541 0.01267 Uiso 1 0.124709
H18 H 0.6552 0.7598 0.0278 0.01267 Uiso 1 0.127277
H19 H 0.0415 0.2259 0.257 0.01267 Uiso 1 0.130597
H20 H 0.146 0.1266 0.368 0.01267 Uiso 1 0.127729
H21 H 0.3845 0.2781 0.2121 0.01267 Uiso 1 0.119761
H22 H 0.2846 0.3761 0.1185 0.01267 Uiso 1 0.121095
H23 H 0.4056 0.0491 0.2188 0.01267 Uiso 1 0.134269

```

H24	H	0.5565	0.9029	0.2182	0.01267	Uiso	1	0.14479
H25	H	0.812	0.707	0.4269	0.01267	Uiso	1	0.147273
H26	H	0.8195	0.7169	0.5654	0.01267	Uiso	1	0.149106
H27	H	0.6036	0.6735	0.3587	0.01267	Uiso	1	0.109375
H28	H	0.6899	0.5762	0.2474	0.01267	Uiso	1	0.142819
H29	H	0.9163	0.7654	0.1259	0.01267	Uiso	1	0.145471
H30	H	0.8158	0.8545	0.2379	0.01267	Uiso	1	0.119249
H31	H	0.8231	0.4012	0.9186	0.01267	Uiso	1	0.122421
H32	H	0.7092	0.3033	0.9243	0.01267	Uiso	1	0.1438
H33	H	0.6888	0.1697	0.1874	0.01267	Uiso	1	0.157561
H34	H	0.7868	0.2751	0.1684	0.01267	Uiso	1	0.068279
H35	H	0.7367	0.8669	0.0459	0.01267	Uiso	1	0.124714
H36	H	0.3448	0.2402	0.9722	0.01267	Uiso	1	0.127415
C1	C	0.9141	0.6328	0.884	0.01267	Uiso	1	0.55852
C2	C	0.8418	0.6905	0.8205	0.01267	Uiso	1	-0.008096
C3	C	0.8901	0.7629	0.7503	0.01267	Uiso	1	-0.130741
C4	C	0.826	0.8247	0.684	0.01267	Uiso	1	-0.183694
C5	C	0.7229	0.8031	0.707	0.01267	Uiso	1	0.108793
C6	C	0.6852	0.7332	0.7763	0.01267	Uiso	1	-0.156586
C7	C	0.7444	0.6754	0.8328	0.01267	Uiso	1	-0.080339
C8	C	0.6566	0.8651	0.641	0.01267	Uiso	1	-0.086588
C9	C	0.5809	0.9465	0.6601	0.01267	Uiso	1	0.1673
C10	C	0.5575	0.9802	0.7382	0.01267	Uiso	1	-0.172248
C11	C	0.4744	0.0604	0.7395	0.01267	Uiso	1	-0.177106
C12	C	0.4442	0.0765	0.6615	0.01267	Uiso	1	0.187264
C13	C	0.3532	0.1542	0.64	0.01267	Uiso	1	-0.070738
C14	C	0.3294	0.1717	0.5624	0.01267	Uiso	1	0.172977
C15	C	0.2353	0.2487	0.5399	0.01267	Uiso	1	-0.157825
C16	C	0.2308	0.2431	0.4652	0.01267	Uiso	1	-0.162205
C17	C	0.3202	0.1618	0.4385	0.01267	Uiso	1	0.165429
C18	C	0.2992	0.2188	0.6987	0.01267	Uiso	1	0.090091
C19	C	0.3364	0.3072	0.6891	0.01267	Uiso	1	-0.155406
C20	C	0.2822	0.3701	0.7535	0.01267	Uiso	1	-0.136148
C21	C	0.1872	0.3415	0.8144	0.01267	Uiso	1	-0.024103
C22	C	0.1449	0.2548	0.8282	0.01267	Uiso	1	-0.114679
C23	C	0.211	0.2006	0.7602	0.01267	Uiso	1	-0.156657
C24	C	0.1193	0.4083	0.8888	0.01267	Uiso	1	0.540081
C25	C	0.2032	0.6457	0.0274	0.01267	Uiso	1	0.048217
C26	C	0.2713	0.7116	0.024	0.01267	Uiso	1	-0.216091
C27	C	0.3109	0.7915	0.9572	0.01267	Uiso	1	0.25924
C28	C	0.285	0.7881	0.8694	0.01267	Uiso	1	-0.251416
C29	C	0.2208	0.7172	0.8868	0.01267	Uiso	1	0.145494
C30	C	0.327	0.9523	0.9525	0.01267	Uiso	1	0.41061
C31	C	0.467	0.802	0.9831	0.01267	Uiso	1	0.388524
C32	C	0.3296	0.1061	0.9667	0.01267	Uiso	1	-0.070675
C33	C	0.369	0.008	0.9712	0.01267	Uiso	1	-0.080115
C34	C	0.4772	0.9639	0.9928	0.01267	Uiso	1	0.012525
C35	C	0.522	0.8616	0.998	0.01267	Uiso	1	-0.068166
C36	C	0.6218	0.8281	0.0209	0.01267	Uiso	1	-0.079941
C37	C	0.0859	0.3672	0.116	0.01267	Uiso	1	0.55846
C38	C	0.1582	0.3095	0.1795	0.01267	Uiso	1	-0.007952
C39	C	0.1099	0.2371	0.2497	0.01267	Uiso	1	-0.130627

C40	C	0.174	0.1753	0.316	0.01267	Uiso	1	-0.183616
C41	C	0.2771	0.1969	0.293	0.01267	Uiso	1	0.108544
C42	C	0.3148	0.2668	0.2237	0.01267	Uiso	1	-0.156495
C43	C	0.2556	0.3246	0.1672	0.01267	Uiso	1	-0.080333
C44	C	0.3434	0.1349	0.359	0.01267	Uiso	1	-0.086358
C45	C	0.4191	0.0535	0.3399	0.01267	Uiso	1	0.167287
C46	C	0.4425	0.0198	0.2618	0.01267	Uiso	1	-0.172149
C47	C	0.5256	0.9396	0.2605	0.01267	Uiso	1	-0.177382
C48	C	0.5558	0.9235	0.3385	0.01267	Uiso	1	0.187431
C49	C	0.6468	0.8458	0.36	0.01267	Uiso	1	-0.070634
C50	C	0.6706	0.8283	0.4376	0.01267	Uiso	1	0.172877
C51	C	0.7647	0.7513	0.4601	0.01267	Uiso	1	-0.157821
C52	C	0.7692	0.7569	0.5348	0.01267	Uiso	1	-0.162252
C53	C	0.6798	0.8382	0.5615	0.01267	Uiso	1	0.165522
C54	C	0.7008	0.7812	0.3013	0.01267	Uiso	1	0.089947
C55	C	0.6636	0.6928	0.3109	0.01267	Uiso	1	-0.155385
C56	C	0.7178	0.6299	0.2465	0.01267	Uiso	1	-0.13607
C57	C	0.8128	0.6585	0.1856	0.01267	Uiso	1	-0.024229
C58	C	0.8551	0.7452	0.1718	0.01267	Uiso	1	-0.114555
C59	C	0.789	0.7994	0.2398	0.01267	Uiso	1	-0.156688
C60	C	0.8807	0.5917	0.1112	0.01267	Uiso	1	0.540101
C61	C	0.7968	0.3543	0.9726	0.01267	Uiso	1	0.048348
C62	C	0.7287	0.2884	0.976	0.01267	Uiso	1	-0.215987
C63	C	0.6891	0.2085	0.0428	0.01267	Uiso	1	0.259153
C64	C	0.715	0.2119	0.1306	0.01267	Uiso	1	-0.251339
C65	C	0.7792	0.2828	0.1132	0.01267	Uiso	1	0.145308
C66	C	0.673	0.0477	0.0475	0.01267	Uiso	1	0.410501
C67	C	0.533	0.198	0.0169	0.01267	Uiso	1	0.388522
C68	C	0.6704	0.8939	0.0333	0.01267	Uiso	1	-0.070718
C69	C	0.631	0.992	0.0288	0.01267	Uiso	1	-0.080056
C70	C	0.5228	0.0361	0.0072	0.01267	Uiso	1	0.012555
C71	C	0.478	0.1384	0.002	0.01267	Uiso	1	-0.068145
C72	C	0.3782	0.1719	0.9791	0.01267	Uiso	1	-0.07996
N1	N	0.5055	0.0106	0.6119	0.01267	Uiso	1	-0.360085
N2	N	0.3752	0.1119	0.5046	0.01267	Uiso	1	-0.34709
N3	N	0.1696	0.6501	0.9379	0.01267	Uiso	1	-0.190614
N4	N	0.3645	0.8529	0.9594	0.01267	Uiso	1	-0.152184
N5	N	0.4945	0.9894	0.3881	0.01267	Uiso	1	-0.360068
N6	N	0.6248	0.8881	0.4954	0.01267	Uiso	1	-0.346895
N7	N	0.8304	0.3499	0.0621	0.01267	Uiso	1	-0.190599
N8	N	0.6355	0.1471	0.0406	0.01267	Uiso	1	-0.1522
O1	O	0.9985	0.6589	0.8749	0.01267	Uiso	1	-0.490202
O2	O	0.8684	0.5545	0.9415	0.01267	Uiso	1	-0.588499
O3	O	0.0331	0.3755	0.94	0.01267	Uiso	1	-0.532206
O4	O	0.1618	0.4838	0.874	0.01267	Uiso	1	-0.503482
O5	O	0.237	0.9788	0.9327	0.01267	Uiso	1	-0.481585
O6	O	0.5033	0.7082	0.9884	0.01267	Uiso	1	-0.421504
O7	O	0.0015	0.3411	0.1251	0.01267	Uiso	1	-0.490491
O8	O	0.1316	0.4455	0.0585	0.01267	Uiso	1	-0.588162
O9	O	0.9669	0.6245	0.06	0.01267	Uiso	1	-0.53199
O10	O	0.8382	0.5162	0.126	0.01267	Uiso	1	-0.503713
O11	O	0.763	0.0212	0.0673	0.01267	Uiso	1	-0.481598

O12	O	0.4967	0.2918	0.0116	0.01267	Uiso	1	-0.421237
data_BEDYEQ_clean								
_audit_creation_date		2014-07-02						
_audit_creation_method		'Materials Studio'						
_symmetry_space_group_name_H-M		'P1'						
_symmetry_Int_Tables_number		1						
_symmetry_cell_setting		triclinic						
loop_								
_symmetry_equiv_pos_as_xyz		x,y,z						
_cell_length_a		17.1430						
_cell_length_b		41.9680						
_cell_length_c		41.9680						
_cell_angle_alpha		120.0000						
_cell_angle_beta		90.0000						
_cell_angle_gamma		90.0000						
loop_								
_atom_site_label								
_atom_site_type_symbol								
_atom_site_fract_x								
_atom_site_fract_y								
_atom_site_fract_z								
_atom_site_charge								
_atom_site_U_iso_or_equiv								
_atom_site_adp_type								
_atom_site_occupancy								
Zr1	Zr	0.89734	0.54203	0.54203	2.282158	0.01267	Uiso	1
Zr2	Zr	0.89734	0.00000	0.45797	2.281823	0.01267	Uiso	1
Zr3	Zr	0.89734	0.45797	0.00000	2.282760	0.01267	Uiso	1
Zr4	Zr	0.89734	0.45797	0.45797	2.282281	0.01267	Uiso	1
Zr5	Zr	0.89734	0.00000	0.54203	2.282464	0.01267	Uiso	1
Zr6	Zr	0.89734	0.54203	0.00000	2.282288	0.01267	Uiso	1
Zr7	Zr	0.10266	0.00000	0.45797	2.281822	0.01267	Uiso	1
Zr8	Zr	0.10266	0.54203	0.54203	2.282215	0.01267	Uiso	1
Zr9	Zr	0.10266	0.45797	0.00000	2.282801	0.01267	Uiso	1
Zr10	Zr	0.10266	0.00000	0.54203	2.282403	0.01267	Uiso	1
Zr11	Zr	0.10266	0.45797	0.45797	2.282299	0.01267	Uiso	1
Zr12	Zr	0.10266	0.54203	0.00000	2.282493	0.01267	Uiso	1
Zr13	Zr	0.00000	0.46618	0.53382	2.404926	0.01267	Uiso	1
Zr14	Zr	0.00000	0.06764	0.53382	2.405164	0.01267	Uiso	1
Zr15	Zr	0.00000	0.46618	0.93236	2.404685	0.01267	Uiso	1
Zr16	Zr	0.00000	0.53382	0.46618	2.404994	0.01267	Uiso	1
Zr17	Zr	0.00000	0.93236	0.46618	2.405230	0.01267	Uiso	1
Zr18	Zr	0.00000	0.53382	0.06764	2.404933	0.01267	Uiso	1
Fe1	Fe	0.50000	0.48800	0.74400	0.540530	0.01267	Uiso	1
Fe2	Fe	0.50000	0.25600	0.51200	0.540536	0.01267	Uiso	1
Fe3	Fe	0.50000	0.25600	0.74400	0.541852	0.01267	Uiso	1
Fe4	Fe	0.50000	0.51200	0.25600	0.540233	0.01267	Uiso	1
Fe5	Fe	0.50000	0.74400	0.48800	0.540852	0.01267	Uiso	1
Fe6	Fe	0.50000	0.74400	0.25600	0.541236	0.01267	Uiso	1
H1	H	0.84230	0.45320	0.60960	0.123376	0.01267	Uiso	1
H2	H	0.79110	0.50190	0.72200	0.136479	0.01267	Uiso	1

H3	H	0.76370	0.55450	0.63870	0.117704	0.01267	Uiso	1
H4	H	0.67550	0.55040	0.67870	0.115530	0.01267	Uiso	1
H5	H	0.75060	0.45030	0.64980	0.122599	0.01267	Uiso	1
H6	H	0.57200	0.49690	0.63010	0.137833	0.01267	Uiso	1
H7	H	0.84230	0.15640	0.54680	0.123492	0.01267	Uiso	1
H8	H	0.79110	0.22010	0.49810	0.136810	0.01267	Uiso	1
H9	H	0.76370	0.08420	0.44550	0.118214	0.01267	Uiso	1
H10	H	0.67550	0.12830	0.44960	0.115418	0.01267	Uiso	1
H11	H	0.75060	0.19950	0.54970	0.122629	0.01267	Uiso	1
H12	H	0.57200	0.13320	0.50310	0.138177	0.01267	Uiso	1
H13	H	0.84230	0.39040	0.84360	0.122831	0.01267	Uiso	1
H14	H	0.79110	0.27800	0.77990	0.137090	0.01267	Uiso	1
H15	H	0.76370	0.36130	0.91580	0.118591	0.01267	Uiso	1
H16	H	0.67550	0.32130	0.87170	0.116041	0.01267	Uiso	1
H17	H	0.75060	0.35020	0.80050	0.121695	0.01267	Uiso	1
H18	H	0.57200	0.36990	0.86680	0.138424	0.01267	Uiso	1
H19	H	0.84230	0.54680	0.39040	0.123194	0.01267	Uiso	1
H20	H	0.79110	0.49810	0.27800	0.136778	0.01267	Uiso	1
H21	H	0.76370	0.44550	0.36130	0.118132	0.01267	Uiso	1
H22	H	0.67550	0.44960	0.32130	0.115718	0.01267	Uiso	1
H23	H	0.75060	0.54970	0.35020	0.122004	0.01267	Uiso	1
H24	H	0.57200	0.50310	0.36990	0.138223	0.01267	Uiso	1
H25	H	0.84230	0.84360	0.45320	0.123126	0.01267	Uiso	1
H26	H	0.79110	0.77990	0.50190	0.136555	0.01267	Uiso	1
H27	H	0.76370	0.91580	0.55450	0.118195	0.01267	Uiso	1
H28	H	0.67550	0.87170	0.55040	0.115912	0.01267	Uiso	1
H29	H	0.75060	0.80050	0.45030	0.122596	0.01267	Uiso	1
H30	H	0.57200	0.86680	0.49690	0.137802	0.01267	Uiso	1
H31	H	0.84230	0.60960	0.15640	0.123238	0.01267	Uiso	1
H32	H	0.79110	0.72200	0.22010	0.136792	0.01267	Uiso	1
H33	H	0.76370	0.63870	0.08420	0.117879	0.01267	Uiso	1
H34	H	0.67550	0.67870	0.12830	0.115374	0.01267	Uiso	1
H35	H	0.75060	0.64980	0.19950	0.122518	0.01267	Uiso	1
H36	H	0.57200	0.63010	0.13320	0.138140	0.01267	Uiso	1
H37	H	0.15770	0.84360	0.39040	0.123358	0.01267	Uiso	1
H38	H	0.20890	0.77990	0.27800	0.136777	0.01267	Uiso	1
H39	H	0.23630	0.91580	0.36130	0.117672	0.01267	Uiso	1
H40	H	0.32450	0.87170	0.32130	0.115224	0.01267	Uiso	1
H41	H	0.24940	0.80050	0.35020	0.122528	0.01267	Uiso	1
H42	H	0.42800	0.86680	0.36990	0.138031	0.01267	Uiso	1
H43	H	0.15770	0.60960	0.45320	0.123231	0.01267	Uiso	1
H44	H	0.20890	0.72200	0.50190	0.136893	0.01267	Uiso	1
H45	H	0.23630	0.63870	0.55450	0.118291	0.01267	Uiso	1
H46	H	0.32450	0.67870	0.55040	0.115873	0.01267	Uiso	1
H47	H	0.24940	0.64980	0.45030	0.121936	0.01267	Uiso	1
H48	H	0.42800	0.63010	0.49690	0.138211	0.01267	Uiso	1
H49	H	0.15770	0.54680	0.15640	0.123108	0.01267	Uiso	1
H50	H	0.20890	0.49810	0.22010	0.136554	0.01267	Uiso	1
H51	H	0.23630	0.44550	0.08420	0.118123	0.01267	Uiso	1
H52	H	0.32450	0.44960	0.12830	0.115698	0.01267	Uiso	1
H53	H	0.24940	0.54970	0.19950	0.122554	0.01267	Uiso	1
H54	H	0.42800	0.50310	0.13320	0.137900	0.01267	Uiso	1

H55	H	0.15770	0.15640	0.60960	0.122989	0.01267	Uiso	1
H56	H	0.20890	0.22010	0.72200	0.136909	0.01267	Uiso	1
H57	H	0.23630	0.08420	0.63870	0.118261	0.01267	Uiso	1
H58	H	0.32450	0.12830	0.67870	0.115965	0.01267	Uiso	1
H59	H	0.24940	0.19950	0.64980	0.121919	0.01267	Uiso	1
H60	H	0.42800	0.13320	0.63010	0.138221	0.01267	Uiso	1
H61	H	0.15770	0.39040	0.54680	0.123337	0.01267	Uiso	1
H62	H	0.20890	0.27800	0.49810	0.136480	0.01267	Uiso	1
H63	H	0.23630	0.36130	0.44550	0.117752	0.01267	Uiso	1
H64	H	0.32450	0.32130	0.44960	0.115570	0.01267	Uiso	1
H65	H	0.24940	0.35020	0.54970	0.122607	0.01267	Uiso	1
H66	H	0.42800	0.36990	0.50310	0.137887	0.01267	Uiso	1
H67	H	0.15770	0.45320	0.84360	0.123496	0.01267	Uiso	1
H68	H	0.20890	0.50190	0.77990	0.136744	0.01267	Uiso	1
H69	H	0.23630	0.55450	0.91580	0.118471	0.01267	Uiso	1
H70	H	0.32450	0.55040	0.87170	0.115340	0.01267	Uiso	1
H71	H	0.24940	0.45030	0.80050	0.122330	0.01267	Uiso	1
H72	H	0.42800	0.49690	0.86680	0.138521	0.01267	Uiso	1
H73	H	0.15770	0.54680	0.39040	0.123182	0.01267	Uiso	1
H74	H	0.20890	0.49810	0.27800	0.136639	0.01267	Uiso	1
H75	H	0.23630	0.44550	0.36130	0.118141	0.01267	Uiso	1
H76	H	0.32450	0.44960	0.32130	0.115766	0.01267	Uiso	1
H77	H	0.24940	0.54970	0.35020	0.121967	0.01267	Uiso	1
H78	H	0.42800	0.50310	0.36990	0.138120	0.01267	Uiso	1
H79	H	0.15770	0.84360	0.45320	0.123075	0.01267	Uiso	1
H80	H	0.20890	0.77990	0.50190	0.136502	0.01267	Uiso	1
H81	H	0.23630	0.91580	0.55450	0.118166	0.01267	Uiso	1
H82	H	0.32450	0.87170	0.55040	0.115927	0.01267	Uiso	1
H83	H	0.24940	0.80050	0.45030	0.122594	0.01267	Uiso	1
H84	H	0.42800	0.86680	0.49690	0.137726	0.01267	Uiso	1
H85	H	0.15770	0.60960	0.15640	0.123233	0.01267	Uiso	1
H86	H	0.20890	0.72200	0.22010	0.136766	0.01267	Uiso	1
H87	H	0.23630	0.63870	0.08420	0.117829	0.01267	Uiso	1
H88	H	0.32450	0.67870	0.12830	0.115416	0.01267	Uiso	1
H89	H	0.24940	0.64980	0.19950	0.122509	0.01267	Uiso	1
H90	H	0.42800	0.63010	0.13320	0.138097	0.01267	Uiso	1
H91	H	0.15770	0.45320	0.60960	0.123303	0.01267	Uiso	1
H92	H	0.20890	0.50190	0.72200	0.136471	0.01267	Uiso	1
H93	H	0.23630	0.55450	0.63870	0.117667	0.01267	Uiso	1
H94	H	0.32450	0.55040	0.67870	0.115591	0.01267	Uiso	1
H95	H	0.24940	0.45030	0.64980	0.122592	0.01267	Uiso	1
H96	H	0.42800	0.49690	0.63010	0.137878	0.01267	Uiso	1
H97	H	0.15770	0.15640	0.54680	0.123367	0.01267	Uiso	1
H98	H	0.20890	0.22010	0.49810	0.136702	0.01267	Uiso	1
H99	H	0.23630	0.08420	0.44550	0.118222	0.01267	Uiso	1
H100	H	0.32450	0.12830	0.44960	0.115452	0.01267	Uiso	1
H101	H	0.24940	0.19950	0.54970	0.122629	0.01267	Uiso	1
H102	H	0.42800	0.13320	0.50310	0.138074	0.01267	Uiso	1
H103	H	0.15770	0.39040	0.84360	0.122863	0.01267	Uiso	1
H104	H	0.20890	0.27800	0.77990	0.136937	0.01267	Uiso	1
H105	H	0.23630	0.36130	0.91580	0.118573	0.01267	Uiso	1
H106	H	0.32450	0.32130	0.87170	0.116064	0.01267	Uiso	1

H107	H	0.24940	0.35020	0.80050	0.121757	0.01267	Uiso	1
H108	H	0.42800	0.36990	0.86680	0.138263	0.01267	Uiso	1
H109	H	0.84230	0.15640	0.60960	0.122994	0.01267	Uiso	1
H110	H	0.79110	0.22010	0.72200	0.136919	0.01267	Uiso	1
H111	H	0.76370	0.08420	0.63870	0.118309	0.01267	Uiso	1
H112	H	0.67550	0.12830	0.67870	0.115949	0.01267	Uiso	1
H113	H	0.75060	0.19950	0.64980	0.121868	0.01267	Uiso	1
H114	H	0.57200	0.13320	0.63010	0.138154	0.01267	Uiso	1
H115	H	0.84230	0.39040	0.54680	0.123398	0.01267	Uiso	1
H116	H	0.79110	0.27800	0.49810	0.136574	0.01267	Uiso	1
H117	H	0.76370	0.36130	0.44550	0.117762	0.01267	Uiso	1
H118	H	0.67550	0.32130	0.44960	0.115537	0.01267	Uiso	1
H119	H	0.75060	0.35020	0.54970	0.122574	0.01267	Uiso	1
H120	H	0.57200	0.36990	0.50310	0.137799	0.01267	Uiso	1
H121	H	0.84230	0.45320	0.84360	0.123588	0.01267	Uiso	1
H122	H	0.79110	0.50190	0.77990	0.136870	0.01267	Uiso	1
H123	H	0.76370	0.55450	0.91580	0.118459	0.01267	Uiso	1
H124	H	0.67550	0.55040	0.87170	0.115318	0.01267	Uiso	1
H125	H	0.75060	0.45030	0.80050	0.122345	0.01267	Uiso	1
H126	H	0.57200	0.49690	0.86680	0.138604	0.01267	Uiso	1
H127	H	0.84230	0.84360	0.39040	0.123429	0.01267	Uiso	1
H128	H	0.79110	0.77990	0.27800	0.136760	0.01267	Uiso	1
H129	H	0.76370	0.91580	0.36130	0.117698	0.01267	Uiso	1
H130	H	0.67550	0.87170	0.32130	0.115214	0.01267	Uiso	1
H131	H	0.75060	0.80050	0.35020	0.122534	0.01267	Uiso	1
H132	H	0.57200	0.86680	0.36990	0.138035	0.01267	Uiso	1
H133	H	0.84230	0.60960	0.45320	0.123246	0.01267	Uiso	1
H134	H	0.79110	0.72200	0.50190	0.136849	0.01267	Uiso	1
H135	H	0.76370	0.63870	0.55450	0.118313	0.01267	Uiso	1
H136	H	0.67550	0.67870	0.55040	0.115852	0.01267	Uiso	1
H137	H	0.75060	0.64980	0.45030	0.121897	0.01267	Uiso	1
H138	H	0.57200	0.63010	0.49690	0.138200	0.01267	Uiso	1
H139	H	0.84230	0.54680	0.15640	0.123142	0.01267	Uiso	1
H140	H	0.79110	0.49810	0.22010	0.136539	0.01267	Uiso	1
H141	H	0.76370	0.44550	0.08420	0.118199	0.01267	Uiso	1
H142	H	0.67550	0.44960	0.12830	0.115681	0.01267	Uiso	1
H143	H	0.75060	0.54970	0.19950	0.122561	0.01267	Uiso	1
H144	H	0.57200	0.50310	0.13320	0.137858	0.01267	Uiso	1
C1	C	0.64190	0.49774	0.69122	-0.061574	0.01267	Uiso	1
C2	C	0.56460	0.49713	0.68105	0.174345	0.01267	Uiso	1
C3	C	0.80810	0.47335	0.62354	-0.098486	0.01267	Uiso	1
C4	C	0.74640	0.50031	0.73446	-0.179185	0.01267	Uiso	1
C5	C	0.81240	0.50408	0.62070	-0.043231	0.01267	Uiso	1
C6	C	0.86860	0.50640	0.59408	0.666990	0.01267	Uiso	1
C7	C	0.76190	0.53299	0.64078	-0.112133	0.01267	Uiso	1
C8	C	0.66660	0.49742	0.72229	0.176287	0.01267	Uiso	1
C9	C	0.70870	0.53009	0.66405	-0.150691	0.01267	Uiso	1
C10	C	0.70250	0.49952	0.66653	0.106399	0.01267	Uiso	1
C11	C	0.75280	0.47152	0.64721	-0.146887	0.01267	Uiso	1
C12	C	0.53930	0.49700	0.64841	-0.182118	0.01267	Uiso	1
C13	C	0.64190	0.19348	0.50226	-0.062833	0.01267	Uiso	1
C14	C	0.56460	0.18392	0.50287	0.176673	0.01267	Uiso	1

C15	C	0.80810	0.15019	0.52665	-0.098695	0.01267	Uiso	1
C16	C	0.74640	0.23415	0.49969	-0.180658	0.01267	Uiso	1
C17	C	0.81240	0.11662	0.49592	-0.042684	0.01267	Uiso	1
C18	C	0.86860	0.08768	0.49360	0.665783	0.01267	Uiso	1
C19	C	0.76190	0.10779	0.46701	-0.112411	0.01267	Uiso	1
C20	C	0.66660	0.22487	0.50258	0.178082	0.01267	Uiso	1
C21	C	0.70870	0.13396	0.46991	-0.150826	0.01267	Uiso	1
C22	C	0.70250	0.16701	0.50048	0.106914	0.01267	Uiso	1
C23	C	0.75280	0.17569	0.52848	-0.147488	0.01267	Uiso	1
C24	C	0.53930	0.15141	0.50300	-0.184117	0.01267	Uiso	1
C25	C	0.64190	0.30878	0.80652	-0.062285	0.01267	Uiso	1
C26	C	0.56460	0.31895	0.81608	0.175585	0.01267	Uiso	1
C27	C	0.80810	0.37646	0.84981	-0.098769	0.01267	Uiso	1
C28	C	0.74640	0.26554	0.76585	-0.180465	0.01267	Uiso	1
C29	C	0.81240	0.37930	0.88338	-0.042640	0.01267	Uiso	1
C30	C	0.86860	0.40592	0.91232	0.665477	0.01267	Uiso	1
C31	C	0.76190	0.35922	0.89221	-0.111861	0.01267	Uiso	1
C32	C	0.66660	0.27771	0.77513	0.177783	0.01267	Uiso	1
C33	C	0.70870	0.33595	0.86604	-0.150908	0.01267	Uiso	1
C34	C	0.70250	0.33347	0.83299	0.106548	0.01267	Uiso	1
C35	C	0.75280	0.35279	0.82431	-0.146902	0.01267	Uiso	1
C36	C	0.53930	0.35159	0.84859	-0.183312	0.01267	Uiso	1
C37	C	0.64190	0.50226	0.30878	-0.062831	0.01267	Uiso	1
C38	C	0.56460	0.50287	0.31895	0.176008	0.01267	Uiso	1
C39	C	0.80810	0.52665	0.37646	-0.098804	0.01267	Uiso	1
C40	C	0.74640	0.49969	0.26554	-0.180849	0.01267	Uiso	1
C41	C	0.81240	0.49592	0.37930	-0.043041	0.01267	Uiso	1
C42	C	0.86860	0.49360	0.40592	0.666712	0.01267	Uiso	1
C43	C	0.76190	0.46701	0.35922	-0.112179	0.01267	Uiso	1
C44	C	0.66660	0.50258	0.27771	0.177928	0.01267	Uiso	1
C45	C	0.70870	0.46991	0.33595	-0.150903	0.01267	Uiso	1
C46	C	0.70250	0.50048	0.33347	0.106911	0.01267	Uiso	1
C47	C	0.75280	0.52848	0.35279	-0.146874	0.01267	Uiso	1
C48	C	0.53930	0.50300	0.35159	-0.183923	0.01267	Uiso	1
C49	C	0.64190	0.80652	0.49774	-0.062426	0.01267	Uiso	1
C50	C	0.56460	0.81608	0.49713	0.175766	0.01267	Uiso	1
C51	C	0.80810	0.84981	0.47335	-0.098545	0.01267	Uiso	1
C52	C	0.74640	0.76585	0.50031	-0.179787	0.01267	Uiso	1
C53	C	0.81240	0.88338	0.50408	-0.042968	0.01267	Uiso	1
C54	C	0.86860	0.91232	0.50640	0.665946	0.01267	Uiso	1
C55	C	0.76190	0.89221	0.53299	-0.112284	0.01267	Uiso	1
C56	C	0.66660	0.77513	0.49742	0.177022	0.01267	Uiso	1
C57	C	0.70870	0.86604	0.53009	-0.151042	0.01267	Uiso	1
C58	C	0.70250	0.83299	0.49952	0.106958	0.01267	Uiso	1
C59	C	0.75280	0.82431	0.47152	-0.147309	0.01267	Uiso	1
C60	C	0.53930	0.84859	0.49700	-0.183605	0.01267	Uiso	1
C61	C	0.64190	0.69122	0.19348	-0.062565	0.01267	Uiso	1
C62	C	0.56460	0.68105	0.18392	0.175588	0.01267	Uiso	1
C63	C	0.80810	0.62354	0.15019	-0.098368	0.01267	Uiso	1
C64	C	0.74640	0.73446	0.23415	-0.180120	0.01267	Uiso	1
C65	C	0.81240	0.62070	0.11662	-0.042843	0.01267	Uiso	1
C66	C	0.86860	0.59408	0.08768	0.665628	0.01267	Uiso	1

C67	C	0.76190	0.64078	0.10779	-0.112379	0.01267	Uiso	1
C68	C	0.66660	0.72229	0.22487	0.177213	0.01267	Uiso	1
C69	C	0.70870	0.66405	0.13396	-0.150818	0.01267	Uiso	1
C70	C	0.70250	0.66653	0.16701	0.106997	0.01267	Uiso	1
C71	C	0.75280	0.64721	0.17569	-0.147098	0.01267	Uiso	1
C72	C	0.53930	0.64841	0.15141	-0.183648	0.01267	Uiso	1
C73	C	0.35810	0.80652	0.30878	-0.062477	0.01267	Uiso	1
C74	C	0.43540	0.81608	0.31895	0.175605	0.01267	Uiso	1
C75	C	0.19190	0.84981	0.37646	-0.098544	0.01267	Uiso	1
C76	C	0.25360	0.76585	0.26554	-0.180199	0.01267	Uiso	1
C77	C	0.18760	0.88338	0.37930	-0.043020	0.01267	Uiso	1
C78	C	0.13140	0.91232	0.40592	0.665976	0.01267	Uiso	1
C79	C	0.23810	0.89221	0.35922	-0.112385	0.01267	Uiso	1
C80	C	0.33340	0.77513	0.27771	0.177178	0.01267	Uiso	1
C81	C	0.29130	0.86604	0.33595	-0.150383	0.01267	Uiso	1
C82	C	0.29750	0.83299	0.33347	0.106659	0.01267	Uiso	1
C83	C	0.24720	0.82431	0.35279	-0.146769	0.01267	Uiso	1
C84	C	0.46070	0.84859	0.35159	-0.183685	0.01267	Uiso	1
C85	C	0.35810	0.69122	0.49774	-0.062367	0.01267	Uiso	1
C86	C	0.43540	0.68105	0.49713	0.175918	0.01267	Uiso	1
C87	C	0.19190	0.62354	0.47335	-0.098718	0.01267	Uiso	1
C88	C	0.25360	0.73446	0.50031	-0.179758	0.01267	Uiso	1
C89	C	0.18760	0.62070	0.50408	-0.042891	0.01267	Uiso	1
C90	C	0.13140	0.59408	0.50640	0.665783	0.01267	Uiso	1
C91	C	0.23810	0.64078	0.53299	-0.111976	0.01267	Uiso	1
C92	C	0.33340	0.72229	0.49742	0.177314	0.01267	Uiso	1
C93	C	0.29130	0.66405	0.53009	-0.151002	0.01267	Uiso	1
C94	C	0.29750	0.66653	0.49952	0.106653	0.01267	Uiso	1
C95	C	0.24720	0.64721	0.47152	-0.146867	0.01267	Uiso	1
C96	C	0.46070	0.64841	0.49700	-0.183581	0.01267	Uiso	1
C97	C	0.35810	0.50226	0.19348	-0.062820	0.01267	Uiso	1
C98	C	0.43540	0.50287	0.18392	0.175861	0.01267	Uiso	1
C99	C	0.19190	0.52665	0.15019	-0.098658	0.01267	Uiso	1
C100	C	0.25360	0.49969	0.23415	-0.180830	0.01267	Uiso	1
C101	C	0.18760	0.49592	0.11662	-0.042994	0.01267	Uiso	1
C102	C	0.13140	0.49360	0.08768	0.665866	0.01267	Uiso	1
C103	C	0.23810	0.46701	0.10779	-0.112320	0.01267	Uiso	1
C104	C	0.33340	0.50258	0.22487	0.177830	0.01267	Uiso	1
C105	C	0.29130	0.46991	0.13396	-0.150951	0.01267	Uiso	1
C106	C	0.29750	0.50048	0.16701	0.107139	0.01267	Uiso	1
C107	C	0.24720	0.52848	0.17569	-0.147157	0.01267	Uiso	1
C108	C	0.46070	0.50300	0.15141	-0.183987	0.01267	Uiso	1
C109	C	0.35810	0.19348	0.69122	-0.062216	0.01267	Uiso	1
C110	C	0.43540	0.18392	0.68105	0.175534	0.01267	Uiso	1
C111	C	0.19190	0.15019	0.62354	-0.098727	0.01267	Uiso	1
C112	C	0.25360	0.23415	0.73446	-0.180482	0.01267	Uiso	1
C113	C	0.18760	0.11662	0.62070	-0.042867	0.01267	Uiso	1
C114	C	0.13140	0.08768	0.59408	0.665658	0.01267	Uiso	1
C115	C	0.23810	0.10779	0.64078	-0.111763	0.01267	Uiso	1
C116	C	0.33340	0.22487	0.72229	0.177724	0.01267	Uiso	1
C117	C	0.29130	0.13396	0.66405	-0.150829	0.01267	Uiso	1
C118	C	0.29750	0.16701	0.66653	0.106454	0.01267	Uiso	1

C119	C	0.24720	0.17569	0.64721	-0.146833	0.01267	Uiso	1
C120	C	0.46070	0.15141	0.64841	-0.183315	0.01267	Uiso	1
C121	C	0.35810	0.30878	0.50226	-0.062497	0.01267	Uiso	1
C122	C	0.43540	0.31895	0.50287	0.176451	0.01267	Uiso	1
C123	C	0.19190	0.37646	0.52665	-0.098675	0.01267	Uiso	1
C124	C	0.25360	0.26554	0.49969	-0.180539	0.01267	Uiso	1
C125	C	0.18760	0.37930	0.49592	-0.043393	0.01267	Uiso	1
C126	C	0.13140	0.40592	0.49360	0.667123	0.01267	Uiso	1
C127	C	0.23810	0.35922	0.46701	-0.112148	0.01267	Uiso	1
C128	C	0.33340	0.27771	0.50258	0.177940	0.01267	Uiso	1
C129	C	0.29130	0.33595	0.46991	-0.150634	0.01267	Uiso	1
C130	C	0.29750	0.33347	0.50048	0.106572	0.01267	Uiso	1
C131	C	0.24720	0.35279	0.52848	-0.146877	0.01267	Uiso	1
C132	C	0.46070	0.35159	0.50300	-0.184436	0.01267	Uiso	1
C133	C	0.35810	0.49774	0.80652	-0.061917	0.01267	Uiso	1
C134	C	0.43540	0.49713	0.81608	0.174844	0.01267	Uiso	1
C135	C	0.19190	0.47335	0.84981	-0.098825	0.01267	Uiso	1
C136	C	0.25360	0.50031	0.76585	-0.178883	0.01267	Uiso	1
C137	C	0.18760	0.50408	0.88338	-0.042372	0.01267	Uiso	1
C138	C	0.13140	0.50640	0.91232	0.665667	0.01267	Uiso	1
C139	C	0.23810	0.53299	0.89221	-0.112451	0.01267	Uiso	1
C140	C	0.33340	0.49742	0.77513	0.176660	0.01267	Uiso	1
C141	C	0.29130	0.53009	0.86604	-0.150781	0.01267	Uiso	1
C142	C	0.29750	0.49952	0.83299	0.106571	0.01267	Uiso	1
C143	C	0.24720	0.47152	0.82431	-0.147217	0.01267	Uiso	1
C144	C	0.46070	0.49700	0.84859	-0.182096	0.01267	Uiso	1
C145	C	0.35810	0.50226	0.30878	-0.062120	0.01267	Uiso	1
C146	C	0.43540	0.50287	0.31895	0.174130	0.01267	Uiso	1
C147	C	0.19190	0.52665	0.37646	-0.098841	0.01267	Uiso	1
C148	C	0.25360	0.49969	0.26554	-0.179209	0.01267	Uiso	1
C149	C	0.18760	0.49592	0.37930	-0.043039	0.01267	Uiso	1
C150	C	0.13140	0.49360	0.40592	0.666701	0.01267	Uiso	1
C151	C	0.23810	0.46701	0.35922	-0.112121	0.01267	Uiso	1
C152	C	0.33340	0.50258	0.27771	0.176107	0.01267	Uiso	1
C153	C	0.29130	0.46991	0.33595	-0.150997	0.01267	Uiso	1
C154	C	0.29750	0.50048	0.33347	0.106887	0.01267	Uiso	1
C155	C	0.24720	0.52848	0.35279	-0.146857	0.01267	Uiso	1
C156	C	0.46070	0.50300	0.35159	-0.182209	0.01267	Uiso	1
C157	C	0.35810	0.80652	0.49774	-0.062006	0.01267	Uiso	1
C158	C	0.43540	0.81608	0.49713	0.174766	0.01267	Uiso	1
C159	C	0.19190	0.84981	0.47335	-0.098632	0.01267	Uiso	1
C160	C	0.25360	0.76585	0.50031	-0.179137	0.01267	Uiso	1
C161	C	0.18760	0.88338	0.50408	-0.042901	0.01267	Uiso	1
C162	C	0.13140	0.91232	0.50640	0.665966	0.01267	Uiso	1
C163	C	0.23810	0.89221	0.53299	-0.112252	0.01267	Uiso	1
C164	C	0.33340	0.77513	0.49742	0.176201	0.01267	Uiso	1
C165	C	0.29130	0.86604	0.53009	-0.150993	0.01267	Uiso	1
C166	C	0.29750	0.83299	0.49952	0.106868	0.01267	Uiso	1
C167	C	0.24720	0.82431	0.47152	-0.147228	0.01267	Uiso	1
C168	C	0.46070	0.84859	0.49700	-0.182765	0.01267	Uiso	1
C169	C	0.35810	0.69122	0.19348	-0.062401	0.01267	Uiso	1
C170	C	0.43540	0.68105	0.18392	0.175062	0.01267	Uiso	1

C171	C	0.19190	0.62354	0.15019	-0.098520	0.01267	Uiso	1
C172	C	0.25360	0.73446	0.23415	-0.179759	0.01267	Uiso	1
C173	C	0.18760	0.62070	0.11662	-0.042794	0.01267	Uiso	1
C174	C	0.13140	0.59408	0.08768	0.665728	0.01267	Uiso	1
C175	C	0.23810	0.64078	0.10779	-0.112308	0.01267	Uiso	1
C176	C	0.33340	0.72229	0.22487	0.176673	0.01267	Uiso	1
C177	C	0.29130	0.66405	0.13396	-0.150842	0.01267	Uiso	1
C178	C	0.29750	0.66653	0.16701	0.107018	0.01267	Uiso	1
C179	C	0.24720	0.64721	0.17569	-0.147027	0.01267	Uiso	1
C180	C	0.46070	0.64841	0.15141	-0.183073	0.01267	Uiso	1
C181	C	0.35810	0.49774	0.69122	-0.061895	0.01267	Uiso	1
C182	C	0.43540	0.49713	0.68105	0.175555	0.01267	Uiso	1
C183	C	0.19190	0.47335	0.62354	-0.098435	0.01267	Uiso	1
C184	C	0.25360	0.50031	0.73446	-0.180175	0.01267	Uiso	1
C185	C	0.18760	0.50408	0.62070	-0.043315	0.01267	Uiso	1
C186	C	0.13140	0.50640	0.59408	0.667075	0.01267	Uiso	1
C187	C	0.23810	0.53299	0.64078	-0.112105	0.01267	Uiso	1
C188	C	0.33340	0.49742	0.72229	0.177293	0.01267	Uiso	1
C189	C	0.29130	0.53009	0.66405	-0.150688	0.01267	Uiso	1
C190	C	0.29750	0.49952	0.66653	0.106391	0.01267	Uiso	1
C191	C	0.24720	0.47152	0.64721	-0.146793	0.01267	Uiso	1
C192	C	0.46070	0.49700	0.64841	-0.183329	0.01267	Uiso	1
C193	C	0.35810	0.19348	0.50226	-0.061934	0.01267	Uiso	1
C194	C	0.43540	0.18392	0.50287	0.174128	0.01267	Uiso	1
C195	C	0.19190	0.15019	0.52665	-0.098589	0.01267	Uiso	1
C196	C	0.25360	0.23415	0.49969	-0.178631	0.01267	Uiso	1
C197	C	0.18760	0.11662	0.49592	-0.042675	0.01267	Uiso	1
C198	C	0.13140	0.08768	0.49360	0.665751	0.01267	Uiso	1
C199	C	0.23810	0.10779	0.46701	-0.112392	0.01267	Uiso	1
C200	C	0.33340	0.22487	0.50258	0.175839	0.01267	Uiso	1
C201	C	0.29130	0.13396	0.46991	-0.150848	0.01267	Uiso	1
C202	C	0.29750	0.16701	0.50048	0.106821	0.01267	Uiso	1
C203	C	0.24720	0.17569	0.52848	-0.147524	0.01267	Uiso	1
C204	C	0.46070	0.15141	0.50300	-0.181835	0.01267	Uiso	1
C205	C	0.35810	0.30878	0.80652	-0.061738	0.01267	Uiso	1
C206	C	0.43540	0.31895	0.81608	0.174036	0.01267	Uiso	1
C207	C	0.19190	0.37646	0.84981	-0.098893	0.01267	Uiso	1
C208	C	0.25360	0.26554	0.76585	-0.179172	0.01267	Uiso	1
C209	C	0.18760	0.37930	0.88338	-0.042625	0.01267	Uiso	1
C210	C	0.13140	0.40592	0.91232	0.665540	0.01267	Uiso	1
C211	C	0.23810	0.35922	0.89221	-0.111814	0.01267	Uiso	1
C212	C	0.33340	0.27771	0.77513	0.176474	0.01267	Uiso	1
C213	C	0.29130	0.33595	0.86604	-0.150868	0.01267	Uiso	1
C214	C	0.29750	0.33347	0.83299	0.106435	0.01267	Uiso	1
C215	C	0.24720	0.35279	0.82431	-0.146990	0.01267	Uiso	1
C216	C	0.46070	0.35159	0.84859	-0.181843	0.01267	Uiso	1
C217	C	0.64190	0.19348	0.69122	-0.061723	0.01267	Uiso	1
C218	C	0.56460	0.18392	0.68105	0.174102	0.01267	Uiso	1
C219	C	0.80810	0.15019	0.62354	-0.098639	0.01267	Uiso	1
C220	C	0.74640	0.23415	0.73446	-0.179179	0.01267	Uiso	1
C221	C	0.81240	0.11662	0.62070	-0.042827	0.01267	Uiso	1
C222	C	0.86860	0.08768	0.59408	0.665657	0.01267	Uiso	1

C223	C	0.76190	0.10779	0.64078	-0.111867	0.01267	Uiso	1
C224	C	0.66660	0.22487	0.72229	0.176403	0.01267	Uiso	1
C225	C	0.70870	0.13396	0.66405	-0.150854	0.01267	Uiso	1
C226	C	0.70250	0.16701	0.66653	0.106343	0.01267	Uiso	1
C227	C	0.75280	0.17569	0.64721	-0.146792	0.01267	Uiso	1
C228	C	0.53930	0.15141	0.64841	-0.181633	0.01267	Uiso	1
C229	C	0.64190	0.30878	0.50226	-0.061645	0.01267	Uiso	1
C230	C	0.56460	0.31895	0.50287	0.173893	0.01267	Uiso	1
C231	C	0.80810	0.37646	0.52665	-0.098657	0.01267	Uiso	1
C232	C	0.74640	0.26554	0.49969	-0.178492	0.01267	Uiso	1
C233	C	0.81240	0.37930	0.49592	-0.043253	0.01267	Uiso	1
C234	C	0.86860	0.40592	0.49360	0.666951	0.01267	Uiso	1
C235	C	0.76190	0.35922	0.46701	-0.112195	0.01267	Uiso	1
C236	C	0.66660	0.27771	0.50258	0.175592	0.01267	Uiso	1
C237	C	0.70870	0.33595	0.46991	-0.150657	0.01267	Uiso	1
C238	C	0.70250	0.33347	0.50048	0.106503	0.01267	Uiso	1
C239	C	0.75280	0.35279	0.52848	-0.146966	0.01267	Uiso	1
C240	C	0.53930	0.35159	0.50300	-0.181910	0.01267	Uiso	1
C241	C	0.64190	0.49774	0.80652	-0.062346	0.01267	Uiso	1
C242	C	0.56460	0.49713	0.81608	0.176024	0.01267	Uiso	1
C243	C	0.80810	0.47335	0.84981	-0.098883	0.01267	Uiso	1
C244	C	0.74640	0.50031	0.76585	-0.179825	0.01267	Uiso	1
C245	C	0.81240	0.50408	0.88338	-0.042353	0.01267	Uiso	1
C246	C	0.86860	0.50640	0.91232	0.665634	0.01267	Uiso	1
C247	C	0.76190	0.53299	0.89221	-0.112437	0.01267	Uiso	1
C248	C	0.66660	0.49742	0.77513	0.177711	0.01267	Uiso	1
C249	C	0.70870	0.53009	0.86604	-0.150807	0.01267	Uiso	1
C250	C	0.70250	0.49952	0.83299	0.106628	0.01267	Uiso	1
C251	C	0.75280	0.47152	0.82431	-0.147224	0.01267	Uiso	1
C252	C	0.53930	0.49700	0.84859	-0.183246	0.01267	Uiso	1
C253	C	0.64190	0.80652	0.30878	-0.062255	0.01267	Uiso	1
C254	C	0.56460	0.81608	0.31895	0.174943	0.01267	Uiso	1
C255	C	0.80810	0.84981	0.37646	-0.098637	0.01267	Uiso	1
C256	C	0.74640	0.76585	0.26554	-0.179655	0.01267	Uiso	1
C257	C	0.81240	0.88338	0.37930	-0.042904	0.01267	Uiso	1
C258	C	0.86860	0.91232	0.40592	0.665918	0.01267	Uiso	1
C259	C	0.76190	0.89221	0.35922	-0.112406	0.01267	Uiso	1
C260	C	0.66660	0.77513	0.27771	0.176598	0.01267	Uiso	1
C261	C	0.70870	0.86604	0.33595	-0.150471	0.01267	Uiso	1
C262	C	0.70250	0.83299	0.33347	0.106616	0.01267	Uiso	1
C263	C	0.75280	0.82431	0.35279	-0.146750	0.01267	Uiso	1
C264	C	0.53930	0.84859	0.35159	-0.183040	0.01267	Uiso	1
C265	C	0.64190	0.69122	0.49774	-0.062069	0.01267	Uiso	1
C266	C	0.56460	0.68105	0.49713	0.175020	0.01267	Uiso	1
C267	C	0.80810	0.62354	0.47335	-0.098695	0.01267	Uiso	1
C268	C	0.74640	0.73446	0.50031	-0.178899	0.01267	Uiso	1
C269	C	0.81240	0.62070	0.50408	-0.043098	0.01267	Uiso	1
C270	C	0.86860	0.59408	0.50640	0.666695	0.01267	Uiso	1
C271	C	0.76190	0.64078	0.53299	-0.112052	0.01267	Uiso	1
C272	C	0.66660	0.72229	0.49742	0.176432	0.01267	Uiso	1
C273	C	0.70870	0.66405	0.53009	-0.151050	0.01267	Uiso	1
C274	C	0.70250	0.66653	0.49952	0.106711	0.01267	Uiso	1

C275	C	0.75280	0.64721	0.47152	-0.146881	0.01267	Uiso	1
C276	C	0.53930	0.64841	0.49700	-0.182654	0.01267	Uiso	1
C277	C	0.64190	0.50226	0.19348	-0.062221	0.01267	Uiso	1
C278	C	0.56460	0.50287	0.18392	0.173870	0.01267	Uiso	1
C279	C	0.80810	0.52665	0.15019	-0.098611	0.01267	Uiso	1
C280	C	0.74640	0.49969	0.23415	-0.179164	0.01267	Uiso	1
C281	C	0.81240	0.49592	0.11662	-0.042892	0.01267	Uiso	1
C282	C	0.86860	0.49360	0.08768	0.665810	0.01267	Uiso	1
C283	C	0.76190	0.46701	0.10779	-0.112457	0.01267	Uiso	1
C284	C	0.66660	0.50258	0.22487	0.176030	0.01267	Uiso	1
C285	C	0.70870	0.46991	0.13396	-0.150988	0.01267	Uiso	1
C286	C	0.70250	0.50048	0.16701	0.107110	0.01267	Uiso	1
C287	C	0.75280	0.52848	0.17569	-0.147261	0.01267	Uiso	1
C288	C	0.53930	0.50300	0.15141	-0.181924	0.01267	Uiso	1
N1	N	0.61760	0.49595	0.74798	-0.298803	0.01267	Uiso	1
N2	N	0.61760	0.25203	0.50406	-0.298388	0.01267	Uiso	1
N3	N	0.61760	0.25202	0.74797	-0.299276	0.01267	Uiso	1
N4	N	0.61760	0.50405	0.25202	-0.298898	0.01267	Uiso	1
N5	N	0.61760	0.74797	0.49595	-0.298003	0.01267	Uiso	1
N6	N	0.61760	0.74797	0.25202	-0.298615	0.01267	Uiso	1
N7	N	0.38240	0.74797	0.25202	-0.298565	0.01267	Uiso	1
N8	N	0.38240	0.74797	0.49595	-0.297965	0.01267	Uiso	1
N9	N	0.38240	0.50405	0.25203	-0.298861	0.01267	Uiso	1
N10	N	0.38240	0.25203	0.74798	-0.299182	0.01267	Uiso	1
N11	N	0.38240	0.25202	0.50405	-0.298320	0.01267	Uiso	1
N12	N	0.38240	0.49595	0.74798	-0.298717	0.01267	Uiso	1
N13	N	0.50000	0.49707	0.70139	-0.300848	0.01267	Uiso	1
N14	N	0.50000	0.20432	0.50293	-0.302411	0.01267	Uiso	1
N15	N	0.50000	0.29861	0.79568	-0.301130	0.01267	Uiso	1
N16	N	0.50000	0.50293	0.29861	-0.301357	0.01267	Uiso	1
N17	N	0.50000	0.79568	0.49707	-0.302103	0.01267	Uiso	1
N18	N	0.50000	0.70139	0.20432	-0.302513	0.01267	Uiso	1
N19	N	0.50000	0.79568	0.29861	-0.302479	0.01267	Uiso	1
N20	N	0.50000	0.70139	0.49707	-0.302636	0.01267	Uiso	1
N21	N	0.50000	0.50293	0.20432	-0.301081	0.01267	Uiso	1
N22	N	0.50000	0.20432	0.70139	-0.301020	0.01267	Uiso	1
N23	N	0.50000	0.29861	0.50293	-0.301682	0.01267	Uiso	1
N24	N	0.50000	0.49707	0.79568	-0.302245	0.01267	Uiso	1
Cl1	Cl	0.50000	0.42296	0.71148	-0.307829	0.01267	Uiso	1
Cl2	Cl	0.50000	0.28852	0.57704	-0.308975	0.01267	Uiso	1
Cl3	Cl	0.50000	0.28852	0.71148	-0.308174	0.01267	Uiso	1
Cl4	Cl	0.50000	0.57704	0.28852	-0.309629	0.01267	Uiso	1
Cl5	Cl	0.50000	0.71148	0.42296	-0.308376	0.01267	Uiso	1
Cl6	Cl	0.50000	0.71148	0.28852	-0.309128	0.01267	Uiso	1
O1	O	0.92108	0.48240	0.58113	-0.587981	0.01267	Uiso	1
O2	O	0.85652	0.53095	0.58627	-0.660042	0.01267	Uiso	1
O3	O	0.92108	0.09873	0.51760	-0.587842	0.01267	Uiso	1
O4	O	0.85652	0.05532	0.46905	-0.659372	0.01267	Uiso	1
O5	O	0.92108	0.41887	0.90127	-0.588203	0.01267	Uiso	1
O6	O	0.85652	0.41373	0.94468	-0.658730	0.01267	Uiso	1
O7	O	0.92108	0.51760	0.41887	-0.588374	0.01267	Uiso	1
O8	O	0.85652	0.46905	0.41373	-0.659412	0.01267	Uiso	1

O9	O	0.92108	0.90127	0.48240	-0.587758	0.01267	Uiso	1
O10	O	0.85652	0.94468	0.53095	-0.659649	0.01267	Uiso	1
O11	O	0.92108	0.58113	0.09873	-0.587651	0.01267	Uiso	1
O12	O	0.85652	0.58627	0.05532	-0.659552	0.01267	Uiso	1
O13	O	0.07892	0.90127	0.41887	-0.587680	0.01267	Uiso	1
O14	O	0.14348	0.94468	0.41373	-0.659843	0.01267	Uiso	1
O15	O	0.07892	0.58113	0.48240	-0.588116	0.01267	Uiso	1
O16	O	0.14348	0.58627	0.53095	-0.658979	0.01267	Uiso	1
O17	O	0.07892	0.51760	0.09873	-0.587773	0.01267	Uiso	1
O18	O	0.14348	0.46905	0.05532	-0.659608	0.01267	Uiso	1
O19	O	0.07892	0.09873	0.58113	-0.587982	0.01267	Uiso	1
O20	O	0.14348	0.05532	0.58627	-0.659052	0.01267	Uiso	1
O21	O	0.07892	0.41887	0.51760	-0.588183	0.01267	Uiso	1
O22	O	0.14348	0.41373	0.46905	-0.660054	0.01267	Uiso	1
O23	O	0.07892	0.48240	0.90127	-0.588014	0.01267	Uiso	1
O24	O	0.14348	0.53095	0.94468	-0.659194	0.01267	Uiso	1
O25	O	0.07892	0.51760	0.41887	-0.588434	0.01267	Uiso	1
O26	O	0.14348	0.46905	0.41373	-0.659374	0.01267	Uiso	1
O27	O	0.07892	0.90127	0.48240	-0.587855	0.01267	Uiso	1
O28	O	0.14348	0.94468	0.53095	-0.659614	0.01267	Uiso	1
O29	O	0.07892	0.58113	0.09873	-0.587753	0.01267	Uiso	1
O30	O	0.14348	0.58627	0.05532	-0.659614	0.01267	Uiso	1
O31	O	0.07892	0.48240	0.58113	-0.588127	0.01267	Uiso	1
O32	O	0.14348	0.53095	0.58627	-0.660029	0.01267	Uiso	1
O33	O	0.07892	0.09873	0.51760	-0.587891	0.01267	Uiso	1
O34	O	0.14348	0.05532	0.46905	-0.659335	0.01267	Uiso	1
O35	O	0.07892	0.41887	0.90127	-0.588271	0.01267	Uiso	1
O36	O	0.14348	0.41373	0.94468	-0.658734	0.01267	Uiso	1
O37	O	0.92108	0.09873	0.58113	-0.587886	0.01267	Uiso	1
O38	O	0.85652	0.05532	0.58627	-0.659104	0.01267	Uiso	1
O39	O	0.92108	0.41887	0.51760	-0.588014	0.01267	Uiso	1
O40	O	0.85652	0.41373	0.46905	-0.660027	0.01267	Uiso	1
O41	O	0.92108	0.48240	0.90127	-0.587942	0.01267	Uiso	1
O42	O	0.85652	0.53095	0.94468	-0.659174	0.01267	Uiso	1
O43	O	0.92108	0.90127	0.41887	-0.587602	0.01267	Uiso	1
O44	O	0.85652	0.94468	0.41373	-0.659838	0.01267	Uiso	1
O45	O	0.92108	0.58113	0.48240	-0.588390	0.01267	Uiso	1
O46	O	0.85652	0.58627	0.53095	-0.659291	0.01267	Uiso	1
O47	O	0.92108	0.51760	0.09873	-0.587670	0.01267	Uiso	1
O48	O	0.85652	0.46905	0.05532	-0.659590	0.01267	Uiso	1
O49	O	0.89690	0.48356	0.51645	-1.156419	0.01267	Uiso	1
O50	O	0.89690	0.03289	0.51645	-1.156645	0.01267	Uiso	1
O51	O	0.89690	0.48356	0.96712	-1.156355	0.01267	Uiso	1
O52	O	0.89690	0.51644	0.48355	-1.156613	0.01267	Uiso	1
O53	O	0.89690	0.96711	0.48355	-1.156251	0.01267	Uiso	1
O54	O	0.89690	0.51644	0.03289	-1.156273	0.01267	Uiso	1
O55	O	0.10310	0.96711	0.48355	-1.156221	0.01267	Uiso	1
O56	O	0.10310	0.51644	0.48355	-1.156618	0.01267	Uiso	1
O57	O	0.10310	0.51644	0.03288	-1.156282	0.01267	Uiso	1
O58	O	0.10310	0.03289	0.51645	-1.156537	0.01267	Uiso	1
O59	O	0.10310	0.48356	0.51645	-1.156382	0.01267	Uiso	1
O60	O	0.10310	0.48356	0.96712	-1.156363	0.01267	Uiso	1

O61	O	0.00000	0.52596	0.55981	-1.154028	0.01267	Uiso	1
O62	O	0.00000	0.03385	0.47404	-1.154448	0.01267	Uiso	1
O63	O	0.00000	0.44019	0.96615	-1.153948	0.01267	Uiso	1
O64	O	0.00000	0.47404	0.44019	-1.154169	0.01267	Uiso	1
O65	O	0.00000	0.96615	0.52596	-1.153993	0.01267	Uiso	1
O66	O	0.00000	0.55981	0.03385	-1.154141	0.01267	Uiso	1
O67	O	0.00000	0.96615	0.44019	-1.154195	0.01267	Uiso	1
O68	O	0.00000	0.55981	0.52596	-1.154288	0.01267	Uiso	1
O69	O	0.00000	0.47404	0.03385	-1.154168	0.01267	Uiso	1
O70	O	0.00000	0.03385	0.55981	-1.154072	0.01267	Uiso	1
O71	O	0.00000	0.44019	0.47404	-1.154212	0.01267	Uiso	1
O72	O	0.00000	0.52596	0.96615	-1.154604	0.01267	Uiso	1

data_BIPSUQ_CLEAN

_cell_length_a 33.7831

_cell_length_b 33.7831

_cell_length_c 43.456

_cell_angle_alpha 90

_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x, y, z'

loop_

_atom_site_label

_atom_site_occupancy

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv

_atom_site_type_symbol

_atom_site_charge

O1	1	0.45037	0.46784	0.5384	Biso	1	O	-0.524567
O2	1	0.4865	0.4308	0.52048	Biso	1	O	-0.495966
O3	1	0.4365	0.2773	0.55961	Biso	1	O	-0.537765
O4	1	0.387	0.2498	0.59758	Biso	1	O	-0.571474
C1	1	0.262	0.3826	0.6951	Biso	1	C	-0.097678
C2	1	0.2246	0.384	0.685	Biso	1	C	0.177209
C3	1	0.37911	0.3669	0.60166	Biso	1	C	0.069155
C4	1	0.3817	0.3271	0.60067	Biso	1	C	-0.147816
H1	1	0.3645	0.3032	0.6145	Biso	1	H	0.135058
C5	1	0.4098	0.3228	0.57922	Biso	1	C	-0.011709
C6	1	0.43533	0.3582	0.55877	Biso	1	C	-0.1171
H2	1	0.4543	0.3552	0.5443	Biso	1	H	0.141012
C7	1	0.43271	0.3979	0.55976	Biso	1	C	-0.002744
C8	1	0.4046	0.4023	0.58121	Biso	1	C	-0.150749
H3	1	0.4028	0.4291	0.5819	Biso	1	H	0.134328
C9	1	0.2114	0.3833	0.65244	Biso	1	C	-0.17381
H4	1	0.2278	0.383	0.635	Biso	1	H	0.142104
C10	1	0.3156	0.3828	0.73437	Biso	1	C	-0.186395
H5	1	0.3375	0.3827	0.7212	Biso	1	H	0.144546
C11	1	0.2743	0.383	0.7259	Biso	1	C	0.187222
C12	1	0.4589	0.4355	0.5369	Biso	1	C	0.581495
C13	1	0.4109	0.2825	0.5782	Biso	1	C	0.604338
C14	1	0.2926	0.3788	0.66932	Biso	1	C	0.091375
C15	1	0.3342	0.4164	0.66129	Biso	1	C	-0.14763
H6	1	0.3438	0.4449	0.6707	Biso	1	H	0.122658
C16	1	0.3618	0.412	0.6394	Biso	1	C	-0.146823

H7	1	0.3899	0.4375	0.6339	Biso	1	H	0.122999	
C17	1	0.3476	0.37	0.62547	Biso	1	C	0.065034	
C18	1	0.3059	0.3323	0.63351	Biso	1	C	-0.144272	
H8	1	0.2963	0.3039	0.6241	Biso	1	H	0.125639	
C19	1	0.27839		0.3367	0.65543	Biso	1	C	-0.147118
H9	1	0.2502	0.3112	0.6609	Biso	1	H	0.125424	
O5	1	0.53216		0.98253	0.5384	Biso	1	O	-0.524067
O6	1	0.5692	0.0557	0.52048	Biso	1	O	-0.495523	
O7	1	0.7227	0.1592	0.55961	Biso	1	O	-0.53811	
O8	1	0.7502	0.1372	0.59758	Biso	1	O	-0.572391	
C20	1	0.6174	0.8794	0.6951	Biso	1	C	-0.097789	
C21	1	0.616	0.8406	0.685	Biso	1	C	0.177314	
C22	1	0.6331	0.01221		0.60166	Biso	1	C	0.069091
C23	1	0.6729	0.0546	0.60067	Biso	1	C	-0.151908	
H10	1	0.6968	0.0613	0.6145	Biso	1	H	0.137418	
C24	1	0.6772	0.087	0.57922	Biso	1	C	-0.01165	
C25	1	0.6418	0.07713		0.55877	Biso	1	C	-0.116753
H11	1	0.6448	0.0991	0.5443	Biso	1	H	0.141169	
C26	1	0.6021	0.03481		0.55976	Biso	1	C	-0.002776
C27	1	0.5977	0.0023	0.58121	Biso	1	C	-0.151021	
H12	1	0.5709	0.9737	0.5819	Biso	1	H	0.1348	
C28	1	0.6167	0.8281	0.65244	Biso	1	C	-0.174141	
H13	1	0.617	0.8448	0.635	Biso	1	H	0.142097	
C29	1	0.6172	0.9328	0.73437	Biso	1	C	-0.186223	
H14	1	0.6173	0.9548	0.7212	Biso	1	H	0.144198	
C30	1	0.617	0.8913	0.7259	Biso	1	C	0.18705	
C31	1	0.5645	0.0234	0.5369	Biso	1	C	0.581054	
C32	1	0.7175	0.1284	0.5782	Biso	1	C	0.604883	
C33	1	0.6212	0.9138	0.66932	Biso	1	C	0.091715	
C34	1	0.5836	0.9178	0.66129	Biso	1	C	-0.147546	
H15	1	0.5551	0.8989	0.6707	Biso	1	H	0.122912	
C35	1	0.588	0.9498	0.6394	Biso	1	C	-0.146644	
H16	1	0.5625	0.9524	0.6339	Biso	1	H	0.122945	
C36	1	0.63	0.9776	0.62547	Biso	1	C	0.06499	
C37	1	0.6677	0.9736	0.63351	Biso	1	C	-0.1444	
H17	1	0.6961	0.9924	0.6241	Biso	1	H	0.125537	
C38	1	0.6633	0.94169		0.65543	Biso	1	C	-0.147212
H18	1	0.6888	0.939	0.6609	Biso	1	H	0.125155	
O9	1	0.01747		0.54963	0.5384	Biso	1	O	-0.52464
O10	1	0.9443	0.5135	0.52048	Biso	1	O	-0.495575	
O11	1	0.8408	0.5635	0.55961	Biso	1	O	-0.537749	
O12	1	0.8628	0.613	0.59758	Biso	1	O	-0.572251	
C39	1	0.1206	0.738	0.6951	Biso	1	C	-0.097632	
C40	1	0.1594	0.7754	0.685	Biso	1	C	0.177418	
C41	1	0.98779		0.62089	0.60166	Biso	1	C	0.069095
C42	1	0.9454	0.6183	0.60067	Biso	1	C	-0.15201	
H19	1	0.9387	0.6355	0.6145	Biso	1	H	0.137483	
C43	1	0.913	0.5902	0.57922	Biso	1	C	-0.011709	
C44	1	0.92287		0.56467	0.55877	Biso	1	C	-0.11673
H20	1	0.9009	0.5457	0.5443	Biso	1	H	0.141462	
C45	1	0.96519		0.56729	0.55976	Biso	1	C	-0.002948
C46	1	0.9977	0.5954	0.58121	Biso	1	C	-0.150735	

H21	1	0.0263	0.5972	0.5819	Biso	1	H	0.1342
C47	1	0.1719	0.7886	0.65244	Biso	1	C	-0.173833
H22	1	0.1552	0.7722	0.635	Biso	1	H	0.142276
C48	1	0.0672	0.6844	0.73437	Biso	1	C	-0.186244
H23	1	0.0452	0.6625	0.7212	Biso	1	H	0.144848
C49	1	0.1087	0.7257	0.7259	Biso	1	C	0.187164
C50	1	0.9766	0.5411	0.5369	Biso	1	C	0.581601
C51	1	0.8716	0.5891	0.5782	Biso	1	C	0.604734
C52	1	0.0862	0.7074	0.66932	Biso	1	C	0.091434
C53	1	0.0822	0.6658	0.66129	Biso	1	C	-0.147248
H24	1	0.1011	0.6562	0.6707	Biso	1	H	0.122575
C54	1	0.0502	0.6382	0.6394	Biso	1	C	-0.146918
H25	1	0.0476	0.6101	0.6339	Biso	1	H	0.123327
C55	1	0.0224	0.6524	0.62547	Biso	1	C	0.065491
C56	1	0.0264	0.6941	0.63351	Biso	1	C	-0.144311
H26	1	0.0076	0.7037	0.6241	Biso	1	H	0.125367
C57	1	0.05831	0.72161	0.65543	Biso	1	C	-0.147105
H27	1	0.061	0.7498	0.6609	Biso	1	H	0.124882
O13	1	0.54963	0.53216	0.0384	Biso	1	O	-0.52446
O14	1	0.5135	0.5692	0.02048	Biso	1	O	-0.495992
O15	1	0.5635	0.7227	0.05961	Biso	1	O	-0.537503
O16	1	0.613	0.7502	0.09758	Biso	1	O	-0.571709
C58	1	0.738	0.6174	0.1951	Biso	1	C	-0.097914
C59	1	0.7754	0.616	0.185	Biso	1	C	0.177404
C60	1	0.62089	0.6331	0.10166	Biso	1	C	0.069005
C61	1	0.6183	0.6729	0.10067	Biso	1	C	-0.147683
H28	1	0.6355	0.6968	0.1145	Biso	1	H	0.134546
C62	1	0.5902	0.6772	0.07922	Biso	1	C	-0.011858
C63	1	0.56467	0.6418	0.05877	Biso	1	C	-0.117148
H29	1	0.5457	0.6448	0.0443	Biso	1	H	0.141233
C64	1	0.56729	0.6021	0.05976	Biso	1	C	-0.002744
C65	1	0.5954	0.5977	0.08121	Biso	1	C	-0.150532
H30	1	0.5972	0.5709	0.0819	Biso	1	H	0.13451
C66	1	0.7886	0.6167	0.15244	Biso	1	C	-0.173774
H31	1	0.7722	0.617	0.135	Biso	1	H	0.142291
C67	1	0.6844	0.6172	0.23437	Biso	1	C	-0.186425
H32	1	0.6625	0.6173	0.2212	Biso	1	H	0.144716
C68	1	0.7257	0.617	0.2259	Biso	1	C	0.187395
C69	1	0.5411	0.5645	0.0369	Biso	1	C	0.581403
C70	1	0.5891	0.7175	0.0782	Biso	1	C	0.604683
C71	1	0.7074	0.6212	0.16932	Biso	1	C	0.091619
C72	1	0.6658	0.5836	0.16129	Biso	1	C	-0.147327
H33	1	0.6562	0.5551	0.1707	Biso	1	H	0.122754
C73	1	0.6382	0.588	0.1394	Biso	1	C	-0.147221
H34	1	0.6101	0.5625	0.1339	Biso	1	H	0.123604
C74	1	0.6524	0.63	0.12547	Biso	1	C	0.065268
C75	1	0.6941	0.6677	0.13351	Biso	1	C	-0.144354
H35	1	0.7037	0.6961	0.1241	Biso	1	H	0.125446
C76	1	0.72161	0.6633	0.15543	Biso	1	C	-0.147501
H36	1	0.7498	0.6888	0.1609	Biso	1	H	0.125057
O17	1	0.46784	0.01747	0.0384	Biso	1	O	-0.524819
O18	1	0.4308	0.9443	0.02048	Biso	1	O	-0.495412

O19	1	0.2773	0.8408	0.05961	Biso	1	O	-0.537194	
O20	1	0.2498	0.8628	0.09758	Biso	1	O	-0.57157	
C77	1	0.3826	0.1206	0.1951	Biso	1	C	-0.098078	
C78	1	0.384	0.1594	0.185	Biso	1	C	0.177295	
C79	1	0.3669	0.98779	0.10166	Biso	1	C	0.069569	
C80	1	0.3271	0.9454	0.10067	Biso	1	C	-0.148607	
H37	1	0.3032	0.9387	0.1145	Biso	1	H	0.135218	
C81	1	0.3228	0.913	0.07922	Biso	1	C	-0.012461	
C82	1	0.3582	0.92287	0.05877	Biso	1	C	-0.116872	
H38	1	0.3552	0.9009	0.0443	Biso	1	H	0.141514	
C83	1	0.3979	0.96519	0.05976	Biso	1	C	-0.002587	
C84	1	0.4023	0.9977	0.08121	Biso	1	C	-0.150335	
H39	1	0.4291	0.0263	0.0819	Biso	1	H	0.134429	
C85	1	0.3833	0.1719	0.15244	Biso	1	C	-0.174103	
H40	1	0.383	0.1552	0.135	Biso	1	H	0.142022	
C86	1	0.3828	0.0672	0.23437	Biso	1	C	-0.186716	
H41	1	0.3827	0.0452	0.2212	Biso	1	H	0.14446	
C87	1	0.383	0.1087	0.2259	Biso	1	C	0.187255	
C88	1	0.4355	0.9766	0.0369	Biso	1	C	0.581219	
C89	1	0.2825	0.8716	0.0782	Biso	1	C	0.605166	
C90	1	0.3788	0.0862	0.16932	Biso	1	C	0.091878	
C91	1	0.4164	0.0822	0.16129	Biso	1	C	-0.147522	
H42	1	0.4449	0.1011	0.1707	Biso	1	H	0.122828	
C92	1	0.412	0.0502	0.1394	Biso	1	C	-0.146559	
H43	1	0.4375	0.0476	0.1339	Biso	1	H	0.122741	
C93	1	0.37	0.0224	0.12547	Biso	1	C	0.064439	
C94	1	0.3323	0.0264	0.13351	Biso	1	C	-0.144434	
H44	1	0.3039	0.0076	0.1241	Biso	1	H	0.125647	
C95	1	0.3367	0.05831	0.15543	Biso	1	C	-0.146771	
H45	1	0.3112	0.061	0.1609	Biso	1	H	0.125229	
O21	1	0.98253	0.45037	0.0384	Biso	1	O	-0.524506	
O22	1	0.0557	0.4865	0.02048	Biso	1	O	-0.495994	
O23	1	0.1592	0.4365	0.05961	Biso	1	O	-0.538037	
O24	1	0.1372	0.387	0.09758	Biso	1	O	-0.571651	
C96	1	0.8794	0.262	0.1951	Biso	1	C	-0.097833	
C97	1	0.8406	0.2246	0.185	Biso	1	C	0.177313	
C98	1	0.01221	0.37911	0.10166	Biso	1	C	0.069468	
C99	1	0.0546	0.3817	0.10067	Biso	1	C	-0.14853	
H46	1	0.0613	0.3645	0.1145	Biso	1	H	0.135216	
C100	1	0.087	0.4098	0.07922	Biso	1	C	-0.011913	
C101	1	0.07713	0.43533	0.05877	Biso	1	C	-0.116779	
H47	1	0.0991	0.4543	0.0443	Biso	1	H	0.141106	
C102	1	0.03481	0.43271	0.05976	Biso	1	C	-0.002814	
C103	1	0.0023	0.4046	0.08121	Biso	1	C	-0.151925	
H48	1	0.9737	0.4028	0.0819	Biso	1	H	0.134767	
C104	1	0.8281	0.2114	0.15244	Biso	1	C	-0.174228	
H49	1	0.8448	0.2278	0.135	Biso	1	H	0.142201	
C105	1	0.9328	0.3156	0.23437	Biso	1	C	-0.18651	
H50	1	0.9548	0.3375	0.2212	Biso	1	H	0.14454	
C106	1	0.8913	0.2743	0.2259	Biso	1	C	0.187211	
C107	1	0.0234	0.4589	0.0369	Biso	1	C	0.581301	
C108	1	0.1284	0.4109	0.0782	Biso	1	C	0.604729	

C109	1	0.9138	0.2926	0.16932	Biso	1	C	0.091457
C110	1	0.9178	0.3342	0.16129	Biso	1	C	-0.147342
H51	1	0.8989	0.3438	0.1707	Biso	1	H	0.122666
C111	1	0.9498	0.3618	0.1394	Biso	1	C	-0.14688
H52	1	0.9524	0.3899	0.1339	Biso	1	H	0.123025
C112	1	0.9776	0.3476	0.12547	Biso	1	C	0.065016
C113	1	0.9736	0.3059	0.13351	Biso	1	C	-0.144304
H53	1	0.9924	0.2963	0.1241	Biso	1	H	0.125442
C114	1	0.94169	0.27839	0.15543	Biso	1	C	-0.147001
H54	1	0.939	0.2502	0.1609	Biso	1	H	0.125128
O25	1	0.46784	0.45037	0.4616	Biso	1	O	-0.524542
O26	1	0.4308	0.4865	0.47952	Biso	1	O	-0.495733
O27	1	0.2773	0.4365	0.44039	Biso	1	O	-0.537854
O28	1	0.2498	0.387	0.40242	Biso	1	O	-0.572046
C115	1	0.3826	0.262	0.3049	Biso	1	C	-0.097602
C116	1	0.384	0.2246	0.315	Biso	1	C	0.177396
C117	1	0.3669	0.37911	0.39834	Biso	1	C	0.068945
C118	1	0.3271	0.3817	0.39933	Biso	1	C	-0.147732
H55	1	0.3032	0.3645	0.3855	Biso	1	H	0.134809
C119	1	0.3228	0.4098	0.42078	Biso	1	C	-0.011417
C120	1	0.3582	0.43533	0.44123	Biso	1	C	-0.11737
H56	1	0.3552	0.4543	0.4557	Biso	1	H	0.141332
C121	1	0.3979	0.43271	0.44024	Biso	1	C	-0.002864
C122	1	0.4023	0.4046	0.41879	Biso	1	C	-0.151099
H57	1	0.4291	0.4028	0.4181	Biso	1	H	0.134141
C123	1	0.3833	0.2114	0.34756	Biso	1	C	-0.173715
H58	1	0.383	0.2278	0.365	Biso	1	H	0.142211
C124	1	0.3828	0.3156	0.26563	Biso	1	C	-0.186127
H59	1	0.3827	0.3375	0.2788	Biso	1	H	0.144681
C125	1	0.383	0.2743	0.2741	Biso	1	C	0.187372
C126	1	0.4355	0.4589	0.4631	Biso	1	C	0.581456
C127	1	0.2825	0.4109	0.4218	Biso	1	C	0.604166
C128	1	0.3788	0.2926	0.33068	Biso	1	C	0.09139
C129	1	0.4164	0.3342	0.33871	Biso	1	C	-0.147794
H60	1	0.4449	0.3438	0.3293	Biso	1	H	0.122489
C130	1	0.412	0.3618	0.3606	Biso	1	C	-0.146906
H61	1	0.4375	0.3899	0.3661	Biso	1	H	0.123069
C131	1	0.37	0.3476	0.37453	Biso	1	C	0.065172
C132	1	0.3323	0.3059	0.36649	Biso	1	C	-0.144213
H62	1	0.3039	0.2963	0.3759	Biso	1	H	0.125863
C133	1	0.3367	0.27839	0.34457	Biso	1	C	-0.147411
H63	1	0.3112	0.2502	0.3391	Biso	1	H	0.125386
O29	1	0.98253	0.53216	0.4616	Biso	1	O	-0.524357
O30	1	0.0557	0.5692	0.47952	Biso	1	O	-0.495554
O31	1	0.1592	0.7227	0.44039	Biso	1	O	-0.537675
O32	1	0.1372	0.7502	0.40242	Biso	1	O	-0.572813
C134	1	0.8794	0.6174	0.3049	Biso	1	C	-0.097797
C135	1	0.8406	0.616	0.315	Biso	1	C	0.177346
C136	1	0.01221	0.6331	0.39834	Biso	1	C	0.068913
C137	1	0.0546	0.6729	0.39933	Biso	1	C	-0.152002
H64	1	0.0613	0.6968	0.3855	Biso	1	H	0.137095
C138	1	0.087	0.6772	0.42078	Biso	1	C	-0.011788

C139	1	0.07713	0.6418	0.44123	Biso	1	C	-0.116762
H65	1	0.0991	0.6448	0.4557	Biso	1	H	0.141452
C140	1	0.03481	0.6021	0.44024	Biso	1	C	-0.002767
C141	1	0.0023	0.5977	0.41879	Biso	1	C	-0.150897
H66	1	0.9737	0.5709	0.4181	Biso	1	H	0.134835
C142	1	0.8281	0.6167	0.34756	Biso	1	C	-0.173984
H67	1	0.8448	0.617	0.365	Biso	1	H	0.142331
C143	1	0.9328	0.6172	0.26563	Biso	1	C	-0.186234
H68	1	0.9548	0.6173	0.2788	Biso	1	H	0.14454
C144	1	0.8913	0.617	0.2741	Biso	1	C	0.187326
C145	1	0.0234	0.5645	0.4631	Biso	1	C	0.581136
C146	1	0.1284	0.7175	0.4218	Biso	1	C	0.605006
C147	1	0.9138	0.6212	0.33068	Biso	1	C	0.091476
C148	1	0.9178	0.5836	0.33871	Biso	1	C	-0.1475
H69	1	0.8989	0.5551	0.3293	Biso	1	H	0.122824
C149	1	0.9498	0.588	0.3606	Biso	1	C	-0.146691
H70	1	0.9524	0.5625	0.3661	Biso	1	H	0.123144
C150	1	0.9776	0.63	0.37453	Biso	1	C	0.065173
C151	1	0.9736	0.6677	0.36649	Biso	1	C	-0.144423
H71	1	0.9924	0.6961	0.3759	Biso	1	H	0.125643
C152	1	0.94169	0.6633	0.34457	Biso	1	C	-0.147173
H72	1	0.939	0.6888	0.3391	Biso	1	H	0.124969
O33	1	0.54963	0.01747	0.4616	Biso	1	O	-0.524638
O34	1	0.5135	0.9443	0.47952	Biso	1	O	-0.495043
O35	1	0.5635	0.8408	0.44039	Biso	1	O	-0.537458
O36	1	0.613	0.8628	0.40242	Biso	1	O	-0.57257
C153	1	0.738	0.1206	0.3049	Biso	1	C	-0.097908
C154	1	0.7754	0.1594	0.315	Biso	1	C	0.17761
C155	1	0.62089	0.98779	0.39834	Biso	1	C	0.069132
C156	1	0.6183	0.9454	0.39933	Biso	1	C	-0.151975
H73	1	0.6355	0.9387	0.3855	Biso	1	H	0.13737
C157	1	0.5902	0.913	0.42078	Biso	1	C	-0.011788
C158	1	0.56467	0.92287	0.44123	Biso	1	C	-0.11662
H74	1	0.5457	0.9009	0.4557	Biso	1	H	0.141629
C159	1	0.56729	0.96519	0.44024	Biso	1	C	-0.002857
C160	1	0.5954	0.9977	0.41879	Biso	1	C	-0.15059
H75	1	0.5972	0.0263	0.4181	Biso	1	H	0.134
C161	1	0.7886	0.1719	0.34756	Biso	1	C	-0.173912
H76	1	0.7722	0.1552	0.365	Biso	1	H	0.142485
C162	1	0.6844	0.0672	0.26563	Biso	1	C	-0.186292
H77	1	0.6625	0.0452	0.2788	Biso	1	H	0.144949
C163	1	0.7257	0.1087	0.2741	Biso	1	C	0.187317
C164	1	0.5411	0.9766	0.4631	Biso	1	C	0.581219
C165	1	0.5891	0.8716	0.4218	Biso	1	C	0.604742
C166	1	0.7074	0.0862	0.33068	Biso	1	C	0.091562
C167	1	0.6658	0.0822	0.33871	Biso	1	C	-0.147439
H78	1	0.6562	0.1011	0.3293	Biso	1	H	0.122578
C168	1	0.6382	0.0502	0.3606	Biso	1	C	-0.146973
H79	1	0.6101	0.0476	0.3661	Biso	1	H	0.123341
C169	1	0.6524	0.0224	0.37453	Biso	1	C	0.065249
C170	1	0.6941	0.0264	0.36649	Biso	1	C	-0.144189
H80	1	0.7037	0.0076	0.3759	Biso	1	H	0.125504

C171	1	0.72161	0.05831	0.34457	Biso	1	C	-0.147104
H81	1	0.7498	0.061	0.3391	Biso	1	H	0.124948
O37	1	0.53216	0.54963	0.9616	Biso	1	O	-0.524818
O38	1	0.5692	0.5135	0.97952	Biso	1	O	-0.495678
O39	1	0.7227	0.5635	0.94039	Biso	1	O	-0.537636
O40	1	0.7502	0.613	0.90242	Biso	1	O	-0.572635
C172	1	0.6174	0.738	0.8049	Biso	1	C	-0.097894
C173	1	0.616	0.7754	0.815	Biso	1	C	0.177656
C174	1	0.6331	0.62089	0.89834	Biso	1	C	0.068799
C175	1	0.6729	0.6183	0.89933	Biso	1	C	-0.147682
H82	1	0.6968	0.6355	0.8855	Biso	1	H	0.134403
C176	1	0.6772	0.5902	0.92078	Biso	1	C	-0.011359
C177	1	0.6418	0.56467	0.94123	Biso	1	C	-0.117429
H83	1	0.6448	0.5457	0.9557	Biso	1	H	0.141581
C178	1	0.6021	0.56729	0.94024	Biso	1	C	-0.003072
C179	1	0.5977	0.5954	0.91879	Biso	1	C	-0.151277
H84	1	0.5709	0.5972	0.9181	Biso	1	H	0.134277
C180	1	0.6167	0.7886	0.84756	Biso	1	C	-0.173709
H85	1	0.617	0.7722	0.865	Biso	1	H	0.142611
C181	1	0.6172	0.6844	0.76563	Biso	1	C	-0.186021
H86	1	0.6173	0.6625	0.7788	Biso	1	H	0.145005
C182	1	0.617	0.7257	0.7741	Biso	1	C	0.187696
C183	1	0.5645	0.5411	0.9631	Biso	1	C	0.58165
C184	1	0.7175	0.5891	0.9218	Biso	1	C	0.604334
C185	1	0.6212	0.7074	0.83068	Biso	1	C	0.091415
C186	1	0.5836	0.6658	0.83871	Biso	1	C	-0.147728
H87	1	0.5551	0.6562	0.8293	Biso	1	H	0.122629
C187	1	0.588	0.6382	0.8606	Biso	1	C	-0.147185
H88	1	0.5625	0.6101	0.8661	Biso	1	H	0.123639
C188	1	0.63	0.6524	0.87453	Biso	1	C	0.065485
C189	1	0.6677	0.6941	0.86649	Biso	1	C	-0.144348
H89	1	0.6961	0.7037	0.8759	Biso	1	H	0.125708
C190	1	0.6633	0.72161	0.84457	Biso	1	C	-0.147559
H90	1	0.6888	0.7498	0.8391	Biso	1	H	0.124966
O41	1	0.01747	0.46784	0.9616	Biso	1	O	-0.524848
O42	1	0.9443	0.4308	0.97952	Biso	1	O	-0.495246
O43	1	0.8408	0.2773	0.94039	Biso	1	O	-0.537411
O44	1	0.8628	0.2498	0.90242	Biso	1	O	-0.572478
C191	1	0.1206	0.3826	0.8049	Biso	1	C	-0.097785
C192	1	0.1594	0.384	0.815	Biso	1	C	0.177448
C193	1	0.98779	0.3669	0.89834	Biso	1	C	0.069215
C194	1	0.9454	0.3271	0.89933	Biso	1	C	-0.148552
H91	1	0.9387	0.3032	0.8855	Biso	1	H	0.134863
C195	1	0.913	0.3228	0.92078	Biso	1	C	-0.011876
C196	1	0.92287	0.3582	0.94123	Biso	1	C	-0.116897
H92	1	0.9009	0.3552	0.9557	Biso	1	H	0.141604
C197	1	0.96519	0.3979	0.94024	Biso	1	C	-0.002838
C198	1	0.9977	0.4023	0.91879	Biso	1	C	-0.151048
H93	1	0.0263	0.4291	0.9181	Biso	1	H	0.134232
C199	1	0.1719	0.3833	0.84756	Biso	1	C	-0.17395
H94	1	0.1552	0.383	0.865	Biso	1	H	0.142454
C200	1	0.0672	0.3828	0.76563	Biso	1	C	-0.186013

H95	1	0.0452	0.3827	0.7788	Biso	1	H	0.144714	
C201	1	0.1087	0.383	0.7741	Biso	1	C	0.187251	
C202	1	0.9766	0.4355	0.9631	Biso	1	C	0.581358	
C203	1	0.8716	0.2825	0.9218	Biso	1	C	0.604625	
C204	1	0.0862	0.3788	0.83068	Biso	1	C	0.091509	
C205	1	0.0822	0.4164	0.83871	Biso	1	C	-0.147787	
H96	1	0.1011	0.4449	0.8293	Biso	1	H	0.12257	
C206	1	0.0502	0.412	0.8606	Biso	1	C	-0.146731	
H97	1	0.0476	0.4375	0.8661	Biso	1	H	0.12286	
C207	1	0.0224	0.37	0.87453	Biso	1	C	0.064981	
C208	1	0.0264	0.3323	0.86649	Biso	1	C	-0.144314	
H98	1	0.0076	0.3039	0.8759	Biso	1	H	0.125955	
C209	1	0.05831	0.3367	0.84457	Biso	1	C	-0.14703	
H99	1	0.061	0.3112	0.8391	Biso	1	H	0.125106	
O45	1	0.45037	0.98253	0.9616	Biso	1	O	-0.524239	
O46	1	0.4865	0.0557	0.97952	Biso	1	O	-0.495373	
O47	1	0.4365	0.1592	0.94039	Biso	1	O	-0.537833	
O48	1	0.387	0.1372	0.90242	Biso	1	O	-0.572157	
C210	1	0.262	0.8794	0.8049	Biso	1	C	-0.098092	
C211	1	0.2246	0.8406	0.815	Biso	1	C	0.177556	
C212	1	0.37911	0.01221	0.89834	Biso	1	C	0.069199	
C213	1	0.3817	0.0546	0.89933	Biso	1	C	-0.148369	
H100	1	0.3645	0.0613	0.8855	Biso	1	H	0.134972	
C214	1	0.4098	0.087	0.92078	Biso	1	C	-0.011651	
C215	1	0.43533	0.07713	0.94123	Biso	1	C	-0.117111	
H101	1	0.4543	0.0991	0.9557	Biso	1	H	0.141465	
C216	1	0.43271	0.03481	0.94024	Biso	1	C	-0.002991	
C217	1	0.4046	0.0023	0.91879	Biso	1	C	-0.15099	
H102	1	0.4028	0.9737	0.9181	Biso	1	H	0.134239	
C218	1	0.2114	0.8281	0.84756	Biso	1	C	-0.174457	
H103	1	0.2278	0.8448	0.865	Biso	1	H	0.142341	
C219	1	0.3156	0.9328	0.76563	Biso	1	C	-0.186421	
H104	1	0.3375	0.9548	0.7788	Biso	1	H	0.144632	
C220	1	0.2743	0.8913	0.7741	Biso	1	C	0.187281	
C221	1	0.4589	0.0234	0.9631	Biso	1	C	0.581101	
C222	1	0.4109	0.1284	0.9218	Biso	1	C	0.604777	
C223	1	0.2926	0.9138	0.83068	Biso	1	C	0.091636	
C224	1	0.3342	0.9178	0.83871	Biso	1	C	-0.147254	
H105	1	0.3438	0.8989	0.8293	Biso	1	H	0.122624	
C225	1	0.3618	0.9498	0.8606	Biso	1	C	-0.146952	
H106	1	0.3899	0.9524	0.8661	Biso	1	H	0.123069	
C226	1	0.3476	0.9776	0.87453	Biso	1	C	0.064892	
C227	1	0.3059	0.9736	0.86649	Biso	1	C	-0.144253	
H107	1	0.2963	0.9924	0.8759	Biso	1	H	0.125459	
C228	1	0.27839	0.94169	0.84457	Biso	1	C	-0.147174	
H108	1	0.2502	0.939	0.8391	Biso	1	H	0.125061	
O49	1	0.54963	0.53216	0.4616	Biso	1	O	-0.524353	
O50	1	0.5135	0.5692	0.47952	Biso	1	O	-0.495724	
O51	1	0.5635	0.7227	0.44039	Biso	1	O	-0.53739	
O52	1	0.613	0.7502	0.40242	Biso	1	O	-0.572129	
C229	1	0.738	0.6174	0.3049	Biso	1	C	-0.097909	
C230	1	0.7754	0.616	0.315	Biso	1	C	0.177635	

C231	1	0.62089	0.6331	0.39834	Biso	1	C	0.068884
C232	1	0.6183	0.6729	0.39933	Biso	1	C	-0.147544
H109	1	0.6355	0.6968	0.3855	Biso	1	H	0.134423
C233	1	0.5902	0.6772	0.42078	Biso	1	C	-0.011659
C234	1	0.56467	0.6418	0.44123	Biso	1	C	-0.117234
H110	1	0.5457	0.6448	0.4557	Biso	1	H	0.141446
C235	1	0.56729	0.6021	0.44024	Biso	1	C	-0.002855
C236	1	0.5954	0.5977	0.41879	Biso	1	C	-0.150876
H111	1	0.5972	0.5709	0.4181	Biso	1	H	0.134488
C237	1	0.7886	0.6167	0.34756	Biso	1	C	-0.173812
H112	1	0.7722	0.617	0.365	Biso	1	H	0.142506
C238	1	0.6844	0.6172	0.26563	Biso	1	C	-0.186132
H113	1	0.6625	0.6173	0.2788	Biso	1	H	0.14481
C239	1	0.7257	0.617	0.2741	Biso	1	C	0.187461
C240	1	0.5411	0.5645	0.4631	Biso	1	C	0.58147
C241	1	0.5891	0.7175	0.4218	Biso	1	C	0.60453
C242	1	0.7074	0.6212	0.33068	Biso	1	C	0.091547
C243	1	0.6658	0.5836	0.33871	Biso	1	C	-0.147537
H114	1	0.6562	0.5551	0.3293	Biso	1	H	0.122721
C244	1	0.6382	0.588	0.3606	Biso	1	C	-0.14715
H115	1	0.6101	0.5625	0.3661	Biso	1	H	0.123615
C245	1	0.6524	0.63	0.37453	Biso	1	C	0.065365
C246	1	0.6941	0.6677	0.36649	Biso	1	C	-0.144322
H116	1	0.7037	0.6961	0.3759	Biso	1	H	0.125538
C247	1	0.72161	0.6633	0.34457	Biso	1	C	-0.147523
H117	1	0.7498	0.6888	0.3391	Biso	1	H	0.12503
O53	1	0.46784	0.01747	0.4616	Biso	1	O	-0.524698
O54	1	0.4308	0.9443	0.47952	Biso	1	O	-0.49506
O55	1	0.2773	0.8408	0.44039	Biso	1	O	-0.537635
O56	1	0.2498	0.8628	0.40242	Biso	1	O	-0.572643
C248	1	0.3826	0.1206	0.3049	Biso	1	C	-0.097647
C249	1	0.384	0.1594	0.315	Biso	1	C	0.17737
C250	1	0.3669	0.98779	0.39834	Biso	1	C	0.069089
C251	1	0.3271	0.9454	0.39933	Biso	1	C	-0.152102
H118	1	0.3032	0.9387	0.3855	Biso	1	H	0.137423
C252	1	0.3228	0.913	0.42078	Biso	1	C	-0.011793
C253	1	0.3582	0.92287	0.44123	Biso	1	C	-0.116572
H119	1	0.3552	0.9009	0.4557	Biso	1	H	0.141567
C254	1	0.3979	0.96519	0.44024	Biso	1	C	-0.002816
C255	1	0.4023	0.9977	0.41879	Biso	1	C	-0.150892
H120	1	0.4291	0.0263	0.4181	Biso	1	H	0.134233
C256	1	0.3833	0.1719	0.34756	Biso	1	C	-0.173896
H121	1	0.383	0.1552	0.365	Biso	1	H	0.142271
C257	1	0.3828	0.0672	0.26563	Biso	1	C	-0.1863
H122	1	0.3827	0.0452	0.2788	Biso	1	H	0.144681
C258	1	0.383	0.1087	0.2741	Biso	1	C	0.187227
C259	1	0.4355	0.9766	0.4631	Biso	1	C	0.581278
C260	1	0.2825	0.8716	0.4218	Biso	1	C	0.604711
C261	1	0.3788	0.0862	0.33068	Biso	1	C	0.091445
C262	1	0.4164	0.0822	0.33871	Biso	1	C	-0.147716
H123	1	0.4449	0.1011	0.3293	Biso	1	H	0.122625
C263	1	0.412	0.0502	0.3606	Biso	1	C	-0.146682

H124	1	0.4375	0.0476	0.3661	Biso	1	H	0.122904	
C264	1	0.37	0.0224	0.37453	Biso	1	C	0.064995	
C265	1	0.3323	0.0264	0.36649	Biso	1	C	-0.144425	
H125	1	0.3039	0.0076	0.3759	Biso	1	H	0.125913	
C266	1	0.3367	0.05831	0.34457	Biso	1	C	-0.146899	
H126	1	0.3112	0.061	0.3391	Biso	1	H	0.125117	
O57	1	0.98253	0.45037	0.4616	Biso	1	O	-0.524167	
O58	1	0.0557	0.4865	0.47952	Biso	1	O	-0.49557	
O59	1	0.1592	0.4365	0.44039	Biso	1	O	-0.537862	
O60	1	0.1372	0.387	0.40242	Biso	1	O	-0.57236	
C267	1	0.8794	0.262	0.3049	Biso	1	C	-0.097644	
C268	1	0.8406	0.2246	0.315	Biso	1	C	0.177476	
C269	1	0.01221	0.37911	0.39834	Biso	1	C	0.069041	
C270	1	0.0546	0.3817	0.39933	Biso	1	C	-0.152062	
H127	1	0.0613	0.3645	0.3855	Biso	1	H	0.137436	
C271	1	0.087	0.4098	0.42078	Biso	1	C	-0.011561	
C272	1	0.07713	0.43533	0.44123	Biso	1	C	-0.116826	
H128	1	0.0991	0.4543	0.4557	Biso	1	H	0.141406	
C273	1	0.03481	0.43271	0.44024	Biso	1	C	-0.002897	
C274	1	0.0023	0.4046	0.41879	Biso	1	C	-0.150722	
H129	1	0.9737	0.4028	0.4181	Biso	1	H	0.134237	
C275	1	0.8281	0.2114	0.34756	Biso	1	C	-0.174161	
H130	1	0.8448	0.2278	0.365	Biso	1	H	0.142413	
C276	1	0.9328	0.3156	0.26563	Biso	1	C	-0.186296	
H131	1	0.9548	0.3375	0.2788	Biso	1	H	0.144696	
C277	1	0.8913	0.2743	0.2741	Biso	1	C	0.187274	
C278	1	0.0234	0.4589	0.4631	Biso	1	C	0.58115	
C279	1	0.1284	0.4109	0.4218	Biso	1	C	0.604644	
C280	1	0.9138	0.2926	0.33068	Biso	1	C	0.091372	
C281	1	0.9178	0.3342	0.33871	Biso	1	C	-0.147421	
H132	1	0.8989	0.3438	0.3293	Biso	1	H	0.122546	
C282	1	0.9498	0.3618	0.3606	Biso	1	C	-0.146753	
H133	1	0.9524	0.3899	0.3661	Biso	1	H	0.123067	
C283	1	0.9776	0.3476	0.37453	Biso	1	C	0.065215	
C284	1	0.9736	0.3059	0.36649	Biso	1	C	-0.144195	
H134	1	0.9924	0.2963	0.3759	Biso	1	H	0.125563	
C285	1	0.94169	0.27839	0.34457	Biso	1	C	-0.147155	
H135	1	0.939	0.2502	0.3391	Biso	1	H	0.125071	
O61	1	0.45037	0.46784	0.9616	Biso	1	O	-0.524627	
O62	1	0.4865	0.4308	0.97952	Biso	1	O	-0.495752	
O63	1	0.4365	0.2773	0.94039	Biso	1	O	-0.537516	
O64	1	0.387	0.2498	0.90242	Biso	1	O	-0.572068	
C286	1	0.262	0.3826	0.8049	Biso	1	C	-0.097801	
C287	1	0.2246	0.384	0.815	Biso	1	C	0.177454	
C288	1	0.37911	0.3669	0.89834	Biso	1	C	0.069017	
C289	1	0.3817	0.3271	0.89933	Biso	1	C	-0.147687	
H136	1	0.3645	0.3032	0.8855	Biso	1	H	0.13463	
C290	1	0.4098	0.3228	0.92078	Biso	1	C	-0.011669	
C291	1	0.43533	0.3582	0.94123	Biso	1	C	-0.117325	
H137	1	0.4543	0.3552	0.9557	Biso	1	H	0.141428	
C292	1	0.43271	0.3979	0.94024	Biso	1	C	-0.002652	
C293	1	0.4046	0.4023	0.91879	Biso	1	C	-0.150906	

H138	1	0.4028	0.4291	0.9181	Biso	1	H	0.134183
C294	1	0.2114	0.3833	0.84756	Biso	1	C	-0.173911
H139	1	0.2278	0.383	0.865	Biso	1	H	0.14246
C295	1	0.3156	0.3828	0.76563	Biso	1	C	-0.185981
H140	1	0.3375	0.3827	0.7788	Biso	1	H	0.144714
C296	1	0.2743	0.383	0.7741	Biso	1	C	0.187274
C297	1	0.4589	0.4355	0.9631	Biso	1	C	0.581426
C298	1	0.4109	0.2825	0.9218	Biso	1	C	0.604567
C299	1	0.2926	0.3788	0.83068	Biso	1	C	0.091504
C300	1	0.3342	0.4164	0.83871	Biso	1	C	-0.147686
H141	1	0.3438	0.4449	0.8293	Biso	1	H	0.12247
C301	1	0.3618	0.412	0.8606	Biso	1	C	-0.147047
H142	1	0.3899	0.4375	0.8661	Biso	1	H	0.123159
C302	1	0.3476	0.37	0.87453	Biso	1	C	0.065186
C303	1	0.3059	0.3323	0.86649	Biso	1	C	-0.144259
H143	1	0.2963	0.3039	0.8759	Biso	1	H	0.125864
C304	1	0.27839	0.3367	0.84457	Biso	1	C	-0.147384
H144	1	0.2502	0.3112	0.8391	Biso	1	H	0.125369
O65	1	0.53216	0.98253	0.9616	Biso	1	O	-0.524165
O66	1	0.5692	0.0557	0.97952	Biso	1	O	-0.495201
O67	1	0.7227	0.1592	0.94039	Biso	1	O	-0.537722
O68	1	0.7502	0.1372	0.90242	Biso	1	O	-0.572461
C305	1	0.6174	0.8794	0.8049	Biso	1	C	-0.098092
C306	1	0.616	0.8406	0.815	Biso	1	C	0.177502
C307	1	0.6331	0.01221	0.89834	Biso	1	C	0.069198
C308	1	0.6729	0.0546	0.89933	Biso	1	C	-0.148459
H145	1	0.6968	0.0613	0.8855	Biso	1	H	0.134825
C309	1	0.6772	0.087	0.92078	Biso	1	C	-0.011635
C310	1	0.6418	0.07713	0.94123	Biso	1	C	-0.117041
H146	1	0.6448	0.0991	0.9557	Biso	1	H	0.141518
C311	1	0.6021	0.03481	0.94024	Biso	1	C	-0.003034
C312	1	0.5977	0.0023	0.91879	Biso	1	C	-0.151232
H147	1	0.5709	0.9737	0.9181	Biso	1	H	0.134706
C313	1	0.6167	0.8281	0.84756	Biso	1	C	-0.174179
H148	1	0.617	0.8448	0.865	Biso	1	H	0.142324
C314	1	0.6172	0.9328	0.76563	Biso	1	C	-0.186232
H149	1	0.6173	0.9548	0.7788	Biso	1	H	0.144498
C315	1	0.617	0.8913	0.7741	Biso	1	C	0.187397
C316	1	0.5645	0.0234	0.9631	Biso	1	C	0.58118
C317	1	0.7175	0.1284	0.9218	Biso	1	C	0.60475
C318	1	0.6212	0.9138	0.83068	Biso	1	C	0.091639
C319	1	0.5836	0.9178	0.83871	Biso	1	C	-0.14748
H150	1	0.5551	0.8989	0.8293	Biso	1	H	0.122821
C320	1	0.588	0.9498	0.8606	Biso	1	C	-0.146837
H151	1	0.5625	0.9524	0.8661	Biso	1	H	0.123016
C321	1	0.63	0.9776	0.87453	Biso	1	C	0.064812
C322	1	0.6677	0.9736	0.86649	Biso	1	C	-0.144327
H152	1	0.6961	0.9924	0.8759	Biso	1	H	0.125652
C323	1	0.6633	0.94169	0.84457	Biso	1	C	-0.147129
H153	1	0.6888	0.939	0.8391	Biso	1	H	0.125011
O69	1	0.01747	0.54963	0.9616	Biso	1	O	-0.52498
O70	1	0.9443	0.5135	0.97952	Biso	1	O	-0.495256

O71	1	0.8408	0.5635	0.94039	Biso	1	O	-0.537749	
O72	1	0.8628	0.613	0.90242	Biso	1	O	-0.572437	
C324	1	0.1206	0.738	0.8049	Biso	1	C	-0.097921	
C325	1	0.1594	0.7754	0.815	Biso	1	C	0.177715	
C326	1	0.98779		0.62089	0.89834	Biso	1	C	0.069072
C327	1	0.9454	0.6183	0.89933	Biso	1	C	-0.148542	
H154	1	0.9387	0.6355	0.8855	Biso	1	H	0.1348	
C328	1	0.913	0.5902	0.92078	Biso	1	C	-0.011537	
C329	1	0.92287		0.56467	0.94123	Biso	1	C	-0.116967
H155	1	0.9009	0.5457	0.9557	Biso	1	H	0.141659	
C330	1	0.96519		0.56729	0.94024	Biso	1	C	-0.003102
C331	1	0.9977	0.5954	0.91879	Biso	1	C	-0.151258	
H156	1	0.0263	0.5972	0.9181	Biso	1	H	0.133884	
C332	1	0.1719	0.7886	0.84756	Biso	1	C	-0.174055	
H157	1	0.1552	0.7722	0.865	Biso	1	H	0.142607	
C333	1	0.0672	0.6844	0.76563	Biso	1	C	-0.186243	
H158	1	0.0452	0.6625	0.7788	Biso	1	H	0.145135	
C334	1	0.1087	0.7257	0.7741	Biso	1	C	0.187581	
C335	1	0.9766	0.5411	0.9631	Biso	1	C	0.581415	
C336	1	0.8716	0.5891	0.9218	Biso	1	C	0.604394	
C337	1	0.0862	0.7074	0.83068	Biso	1	C	0.091444	
C338	1	0.0822	0.6658	0.83871	Biso	1	C	-0.147589	
H159	1	0.1011	0.6562	0.8293	Biso	1	H	0.122535	
C339	1	0.0502	0.6382	0.8606	Biso	1	C	-0.14698	
H160	1	0.0476	0.6101	0.8661	Biso	1	H	0.123396	
C340	1	0.0224	0.6524	0.87453	Biso	1	C	0.065383	
C341	1	0.0264	0.6941	0.86649	Biso	1	C	-0.144343	
H161	1	0.0076	0.7037	0.8759	Biso	1	H	0.125609	
C342	1	0.05831		0.72161	0.84457	Biso	1	C	-0.147247
H162	1	0.061	0.7498	0.8391	Biso	1	H	0.124763	
O73	1	0.53216		0.54963	0.5384	Biso	1	O	-0.524542
O74	1	0.5692	0.5135	0.52048	Biso	1	O	-0.495925	
O75	1	0.7227	0.5635	0.55961	Biso	1	O	-0.538021	
O76	1	0.7502	0.613	0.59758	Biso	1	O	-0.571915	
C343	1	0.6174	0.738	0.6951	Biso	1	C	-0.097681	
C344	1	0.616	0.7754	0.685	Biso	1	C	0.177363	
C345	1	0.6331	0.62089		0.60166	Biso	1	C	0.068921
C346	1	0.6729	0.6183	0.60067	Biso	1	C	-0.147285	
H163	1	0.6968	0.6355	0.6145	Biso	1	H	0.134565	
C347	1	0.6772	0.5902	0.57922	Biso	1	C	-0.011897	
C348	1	0.6418	0.56467		0.55877	Biso	1	C	-0.116981
H164	1	0.6448	0.5457	0.5443	Biso	1	H	0.141128	
C349	1	0.6021	0.56729		0.55976	Biso	1	C	-0.002912
C350	1	0.5977	0.5954	0.58121	Biso	1	C	-0.151128	
H165	1	0.5709	0.5972	0.5819	Biso	1	H	0.134394	
C351	1	0.6167	0.7886	0.65244	Biso	1	C	-0.173616	
H166	1	0.617	0.7722	0.635	Biso	1	H	0.142202	
C352	1	0.6172	0.6844	0.73437	Biso	1	C	-0.186074	
H167	1	0.6173	0.6625	0.7212	Biso	1	H	0.144704	
C353	1	0.617	0.7257	0.7259	Biso	1	C	0.187284	
C354	1	0.5645	0.5411	0.5369	Biso	1	C	0.581504	
C355	1	0.7175	0.5891	0.5782	Biso	1	C	0.60458	

C356	1	0.6212	0.7074	0.66932	Biso	1	C	0.091434	
C357	1	0.5836	0.6658	0.66129	Biso	1	C	-0.147404	
H168	1	0.5551	0.6562	0.6707	Biso	1	H	0.122678	
C358	1	0.588	0.6382	0.6394	Biso	1	C	-0.147201	
H169	1	0.5625	0.6101	0.6339	Biso	1	H	0.123542	
C359	1	0.63	0.6524	0.62547	Biso	1	C	0.06542	
C360	1	0.6677	0.6941	0.63351	Biso	1	C	-0.144328	
H170	1	0.6961	0.7037	0.6241	Biso	1	H	0.125445	
C361	1	0.6633	0.72161	0.65543	Biso	1	C	-0.147486	
H171	1	0.6888	0.7498	0.6609	Biso	1	H	0.125084	
O77	1	0.01747	0.46784	0.5384	Biso	1	O	-0.524717	
O78	1	0.9443	0.4308	0.52048	Biso	1	O	-0.495532	
O79	1	0.8408	0.2773	0.55961	Biso	1	O	-0.537776	
O80	1	0.8628	0.2498	0.59758	Biso	1	O	-0.572445	
C362	1	0.1206	0.3826	0.6951	Biso	1	C	-0.097575	
C363	1	0.1594	0.384	0.685	Biso	1	C	0.177201	
C364	1	0.98779	0.3669	0.60166	Biso	1	C	0.069066	
C365	1	0.9454	0.3271	0.60067	Biso	1	C	-0.152135	
H172	1	0.9387	0.3032	0.6145	Biso	1	H	0.137657	
C366	1	0.913	0.3228	0.57922	Biso	1	C	-0.011794	
C367	1	0.92287	0.3582	0.55877	Biso	1	C	-0.116696	
H173	1	0.9009	0.3552	0.5443	Biso	1	H	0.141346	
C368	1	0.96519	0.3979	0.55976	Biso	1	C	-0.002791	
C369	1	0.9977	0.4023	0.58121	Biso	1	C	-0.15085	
H174	1	0.0263	0.4291	0.5819	Biso	1	H	0.134386	
C370	1	0.1719	0.3833	0.65244	Biso	1	C	-0.173775	
H175	1	0.1552	0.383	0.635	Biso	1	H	0.142121	
C371	1	0.0672	0.3828	0.73437	Biso	1	C	-0.186346	
H176	1	0.0452	0.3827	0.7212	Biso	1	H	0.144575	
C372	1	0.1087	0.383	0.7259	Biso	1	C	0.187195	
C373	1	0.9766	0.4355	0.5369	Biso	1	C	0.581483	
C374	1	0.8716	0.2825	0.5782	Biso	1	C	0.604712	
C375	1	0.0862	0.3788	0.66932	Biso	1	C	0.091311	
C376	1	0.0822	0.4164	0.66129	Biso	1	C	-0.147774	
H177	1	0.1011	0.4449	0.6707	Biso	1	H	0.12273	
C377	1	0.0502	0.412	0.6394	Biso	1	C	-0.146433	
H178	1	0.0476	0.4375	0.6339	Biso	1	H	0.122727	
C378	1	0.0224	0.37	0.62547	Biso	1	C	0.065107	
C379	1	0.0264	0.3323	0.63351	Biso	1	C	-0.144376	
H179	1	0.0076	0.3039	0.6241	Biso	1	H	0.125758	
C380	1	0.05831	0.3367	0.65543	Biso	1	C	-0.146753	
H180	1	0.061	0.3112	0.6609	Biso	1	H	0.125148	
O81	1	0.45037	0.98253	0.5384	Biso	1	O	-0.523941	
O82	1	0.4865	0.0557	0.52048	Biso	1	O	-0.495531	
O83	1	0.4365	0.1592	0.55961	Biso	1	O	-0.537978	
O84	1	0.387	0.1372	0.59758	Biso	1	O	-0.571542	
C381	1	0.262	0.8794	0.6951	Biso	1	C	-0.097858	
C382	1	0.2246	0.8406	0.685	Biso	1	C	0.177362	
C383	1	0.37911	0.01221	0.60166	Biso	1	C	0.069434	
C384	1	0.3817	0.0546	0.60067	Biso	1	C	-0.151913	
H181	1	0.3645	0.0613	0.6145	Biso	1	H	0.137707	
C385	1	0.4098	0.087	0.57922	Biso	1	C	-0.011752	

C386	1	0.43533	0.07713	0.55877	Biso	1	C	-0.116415
H182	1	0.4543	0.0991	0.5443	Biso	1	H	0.141085
C387	1	0.43271	0.03481	0.55976	Biso	1	C	-0.002719
C388	1	0.4046	0.0023	0.58121	Biso	1	C	-0.151597
H183	1	0.4028	0.9737	0.5819	Biso	1	H	0.134898
C389	1	0.2114	0.8281	0.65244	Biso	1	C	-0.174398
H184	1	0.2278	0.8448	0.635	Biso	1	H	0.142159
C390	1	0.3156	0.9328	0.73437	Biso	1	C	-0.186475
H185	1	0.3375	0.9548	0.7212	Biso	1	H	0.144314
C391	1	0.2743	0.8913	0.7259	Biso	1	C	0.18697
C392	1	0.4589	0.0234	0.5369	Biso	1	C	0.581216
C393	1	0.4109	0.1284	0.5782	Biso	1	C	0.604821
C394	1	0.2926	0.9138	0.66932	Biso	1	C	0.091799
C395	1	0.3342	0.9178	0.66129	Biso	1	C	-0.147239
H186	1	0.3438	0.8989	0.6707	Biso	1	H	0.122741
C396	1	0.3618	0.9498	0.6394	Biso	1	C	-0.146729
H187	1	0.3899	0.9524	0.6339	Biso	1	H	0.123007
C397	1	0.3476	0.9776	0.62547	Biso	1	C	0.065035
C398	1	0.3059	0.9736	0.63351	Biso	1	C	-0.144283
H188	1	0.2963	0.9924	0.6241	Biso	1	H	0.125332
C399	1	0.27839	0.94169	0.65543	Biso	1	C	-0.147204
H189	1	0.2502	0.939	0.6609	Biso	1	H	0.125228
O85	1	0.46784	0.45037	0.0384	Biso	1	O	-0.52474
O86	1	0.4308	0.4865	0.02048	Biso	1	O	-0.496086
O87	1	0.2773	0.4365	0.05961	Biso	1	O	-0.537801
O88	1	0.2498	0.387	0.09758	Biso	1	O	-0.571639
C400	1	0.3826	0.262	0.1951	Biso	1	C	-0.097689
C401	1	0.384	0.2246	0.185	Biso	1	C	0.177252
C402	1	0.3669	0.37911	0.10166	Biso	1	C	0.069131
C403	1	0.3271	0.3817	0.10067	Biso	1	C	-0.147843
H190	1	0.3032	0.3645	0.1145	Biso	1	H	0.134947
C404	1	0.3228	0.4098	0.07922	Biso	1	C	-0.011794
C405	1	0.3582	0.43533	0.05877	Biso	1	C	-0.117143
H191	1	0.3552	0.4543	0.0443	Biso	1	H	0.141075
C406	1	0.3979	0.43271	0.05976	Biso	1	C	-0.002782
C407	1	0.4023	0.4046	0.08121	Biso	1	C	-0.15086
H192	1	0.4291	0.4028	0.0819	Biso	1	H	0.134315
C408	1	0.3833	0.2114	0.15244	Biso	1	C	-0.173794
H193	1	0.383	0.2278	0.135	Biso	1	H	0.142093
C409	1	0.3828	0.3156	0.23437	Biso	1	C	-0.186358
H194	1	0.3827	0.3375	0.2212	Biso	1	H	0.144548
C410	1	0.383	0.2743	0.2259	Biso	1	C	0.187331
C411	1	0.4355	0.4589	0.0369	Biso	1	C	0.581519
C412	1	0.2825	0.4109	0.0782	Biso	1	C	0.604451
C413	1	0.3788	0.2926	0.16932	Biso	1	C	0.091432
C414	1	0.4164	0.3342	0.16129	Biso	1	C	-0.147626
H195	1	0.4449	0.3438	0.1707	Biso	1	H	0.122578
C415	1	0.412	0.3618	0.1394	Biso	1	C	-0.146852
H196	1	0.4375	0.3899	0.1339	Biso	1	H	0.12301
C416	1	0.37	0.3476	0.12547	Biso	1	C	0.064986
C417	1	0.3323	0.3059	0.13351	Biso	1	C	-0.144219
H197	1	0.3039	0.2963	0.1241	Biso	1	H	0.12567

C418	1	0.3367	0.27839	0.15543	Biso	1	C	-0.147274
H198	1	0.3112	0.2502	0.1609	Biso	1	H	0.125408
O89	1	0.98253	0.53216	0.0384	Biso	1	O	-0.524404
O90	1	0.0557	0.5692	0.02048	Biso	1	O	-0.496028
O91	1	0.1592	0.7227	0.05961	Biso	1	O	-0.537257
O92	1	0.1372	0.7502	0.09758	Biso	1	O	-0.571491
C419	1	0.8794	0.6174	0.1951	Biso	1	C	-0.098063
C420	1	0.8406	0.616	0.185	Biso	1	C	0.177234
C421	1	0.01221	0.6331	0.10166	Biso	1	C	0.069392
C422	1	0.0546	0.6729	0.10067	Biso	1	C	-0.14858
H199	1	0.0613	0.6968	0.1145	Biso	1	H	0.134867
C423	1	0.087	0.6772	0.07922	Biso	1	C	-0.012516
C424	1	0.07713	0.6418	0.05877	Biso	1	C	-0.116681
H200	1	0.0991	0.6448	0.0443	Biso	1	H	0.141217
C425	1	0.03481	0.6021	0.05976	Biso	1	C	-0.002685
C426	1	0.0023	0.5977	0.08121	Biso	1	C	-0.150151
H201	1	0.9737	0.5709	0.0819	Biso	1	H	0.135002
C427	1	0.8281	0.6167	0.15244	Biso	1	C	-0.17421
H202	1	0.8448	0.617	0.135	Biso	1	H	0.142127
C428	1	0.9328	0.6172	0.23437	Biso	1	C	-0.18659
H203	1	0.9548	0.6173	0.2212	Biso	1	H	0.144339
C429	1	0.8913	0.617	0.2259	Biso	1	C	0.187273
C430	1	0.0234	0.5645	0.0369	Biso	1	C	0.581042
C431	1	0.1284	0.7175	0.0782	Biso	1	C	0.605318
C432	1	0.9138	0.6212	0.16932	Biso	1	C	0.091758
C433	1	0.9178	0.5836	0.16129	Biso	1	C	-0.147212
H204	1	0.8989	0.5551	0.1707	Biso	1	H	0.122982
C434	1	0.9498	0.588	0.1394	Biso	1	C	-0.146703
H205	1	0.9524	0.5625	0.1339	Biso	1	H	0.123108
C435	1	0.9776	0.63	0.12547	Biso	1	C	0.064587
C436	1	0.9736	0.6677	0.13351	Biso	1	C	-0.144543
H206	1	0.9924	0.6961	0.1241	Biso	1	H	0.125433
C437	1	0.94169	0.6633	0.15543	Biso	1	C	-0.147055
H207	1	0.939	0.6888	0.1609	Biso	1	H	0.125087
O93	1	0.54963	0.01747	0.0384	Biso	1	O	-0.52466
O94	1	0.5135	0.9443	0.02048	Biso	1	O	-0.495286
O95	1	0.5635	0.8408	0.05961	Biso	1	O	-0.537664
O96	1	0.613	0.8628	0.09758	Biso	1	O	-0.571783
C438	1	0.738	0.1206	0.1951	Biso	1	C	-0.098062
C439	1	0.7754	0.1594	0.185	Biso	1	C	0.177481
C440	1	0.62089	0.98779	0.10166	Biso	1	C	0.069523
C441	1	0.6183	0.9454	0.10067	Biso	1	C	-0.1484
H208	1	0.6355	0.9387	0.1145	Biso	1	H	0.135167
C442	1	0.5902	0.913	0.07922	Biso	1	C	-0.011958
C443	1	0.56467	0.92287	0.05877	Biso	1	C	-0.116897
H209	1	0.5457	0.9009	0.0443	Biso	1	H	0.14155
C444	1	0.56729	0.96519	0.05976	Biso	1	C	-0.002794
C445	1	0.5954	0.9977	0.08121	Biso	1	C	-0.151709
H210	1	0.5972	0.0263	0.0819	Biso	1	H	0.134408
C446	1	0.7886	0.1719	0.15244	Biso	1	C	-0.174088
H211	1	0.7722	0.1552	0.135	Biso	1	H	0.14231
C447	1	0.6844	0.0672	0.23437	Biso	1	C	-0.186711

H212	1	0.6625	0.0452	0.2212	Biso	1	H	0.144811		
C448	1	0.7257	0.1087	0.2259	Biso	1	C	0.187303		
C449	1	0.5411	0.9766	0.0369	Biso	1	C	0.581416		
C450	1	0.5891	0.8716	0.0782	Biso	1	C	0.604803		
C451	1	0.7074	0.0862	0.16932	Biso	1	C	0.091759		
C452	1	0.6658	0.0822	0.16129	Biso	1	C	-0.147274		
H213	1	0.6562	0.1011	0.1707	Biso	1	H	0.122644		
C453	1	0.6382	0.0502	0.1394	Biso	1	C	-0.147029		
H214	1	0.6101	0.0476	0.1339	Biso	1	H	0.123236		
C454	1	0.6524	0.0224	0.12547	Biso	1	C	0.06506		
C455	1	0.6941	0.0264	0.13351	Biso	1	C	-0.144211		
H215	1	0.7037	0.0076	0.1241	Biso	1	H	0.125414		
C456	1	0.72161	0.05831	0.15543	Biso	1	C	-0.147158		
H216	1	0.7498	0.061	0.1609	Biso	1	H	0.125012		
Cu1	1	0.47876	0.52124	0.51088	Biso	1	Cu	0.80084		
Cu2	1	0.47876	0.95752	0.51088	Biso	1	Cu	0.801961		
Cu3	1	0.04248	0.52124	0.51088	Biso	1	Cu	0.801398		
Cu4	1	0.52124	0.47876	0.01088	Biso	1	Cu	0.800982		
Cu5	1	0.52124	0.04248	0.01088	Biso	1	Cu	0.802025		
Cu6	1	0.95752	0.47876	0.01088	Biso	1	Cu	0.801436		
Cu7	1	0.52124	0.47876	0.48912	Biso	1	Cu	0.800934		
Cu8	1	0.95752	0.47876	0.48912	Biso	1	Cu	0.801429		
Cu9	1	0.52124	0.04248	0.48912	Biso	1	Cu	0.801643		
Cu10	1	0.47876	0.52124	0.98912	Biso	1	Cu	0.800791		
Cu11	1	0.04248	0.52124	0.98912	Biso	1	Cu	0.801109		
Cu12	1	0.47876	0.95752	0.98912	Biso	1	Cu	0.801921		
Cu13	1	0.38211	0.19105	0.59988	Biso	1	Cu	0.904639		
Cu14	1	0.4431	0.22155	0.55586	Biso	1	Cu	0.835082		
O97	1	0.4374	0.2187	0.6264	Biso	1	O	-0.529728		
O98	1	0.3905	0.19525	0.5273	Biso	1	O	-0.490962		
C457	1	0.3509	0.17545	0.5366	Biso	1	C	0.502579		
H217	1	0.3271	0.16355	0.522	Biso	1	H	0.070494		
C458	1	0.4789	0.23945	0.6184	Biso	1	C	0.504341		
H218	1	0.5023	0.25115	0.6333	Biso	1	H	0.077239		
O99	1	0.341	0.1705	0.564	Biso	1	O	-0.513741		
O100	1	0.4879	0.24395	0.5911	Biso	1	O	-0.495352		
Cu15	1	0.80895	0.19105	0.59988	Biso	1	Cu	0.904197		
Cu16	1	0.77845	0.22155	0.55586	Biso	1	Cu	0.834552		
O101	1	0.7813	0.2187	0.6264	Biso	1	O	-0.530186		
O102	1	0.80475	0.19525	0.5273	Biso	1	O	-0.490868		
C459	1	0.82455	0.17545	0.5366	Biso	1	C	0.502582		
H219	1	0.83645	0.16355	0.522	Biso	1	H	0.069767		
C460	1	0.76055	0.23945	0.6184	Biso	1	C	0.504744		
H220	1	0.74885	0.25115	0.6333	Biso	1	H	0.076942		
O103	1	0.8295	0.1705	0.564	Biso	1	O	-0.514324		
O104	1	0.75605	0.24395	0.5911	Biso	1	O	-0.495797		
Cu17	1	0.80895	0.61789	0.59988	Biso	1	Cu	0.903725		
Cu18	1	0.77845	0.5569	0.55586	Biso	1	Cu	0.83391		
O105	1	0.7813	0.5626	0.6264	Biso	1	O	-0.530438		
O106	1	0.80475	0.6095	0.5273	Biso	1	O	-0.491083		
C461	1	0.82455	0.6491	0.5366	Biso	1	C	0.502058		
H221	1	0.83645	0.6729	0.522	Biso	1	H	0.069681		

C462	1	0.76055	0.5211	0.6184	Biso	1	C	0.504155	
H222	1	0.74885	0.4977	0.6333	Biso	1	H	0.077054	
O107	1	0.8295	0.659	0.564	Biso	1	O	-0.514413	
O108	1	0.75605	0.5121	0.5911	Biso	1	O	-0.495693	
Cu19	1	0.61789	0.80895	0.09988	Biso	1	Cu	0.904736	
Cu20	1	0.5569	0.77845	0.05586	Biso	1	Cu	0.835071	
O109	1	0.5626	0.7813	0.1264	Biso	1	O	-0.529958	
O110	1	0.6095	0.80475	0.0273	Biso	1	O	-0.490242	
C463	1	0.6491	0.82455	0.0366	Biso	1	C	0.502311	
H223	1	0.6729	0.83645	0.022	Biso	1	H	0.070374	
C464	1	0.5211	0.76055	0.1184	Biso	1	C	0.504293	
H224	1	0.4977	0.74885	0.1333	Biso	1	H	0.077345	
O111	1	0.659	0.8295	0.064	Biso	1	O	-0.513914	
O112	1	0.5121	0.75605	0.0911	Biso	1	O	-0.495054	
Cu21	1	0.19105	0.80894	0.09988	Biso	1	Cu	0.906793	
Cu22	1	0.22155	0.77845	0.05586	Biso	1	Cu	0.837595	
O113	1	0.2187	0.7813	0.1264	Biso	1	O	-0.528939	
O114	1	0.19525	0.80475	0.0273	Biso	1	O	-0.488956	
C465	1	0.17545	0.82455	0.0366	Biso	1	C	0.50301	
H225	1	0.16355	0.83645	0.022	Biso	1	H	0.071222	
C466	1	0.23945	0.76055	0.1184	Biso	1	C	0.505135	
H226	1	0.25115	0.74885	0.1333	Biso	1	H	0.078209	
O115	1	0.1705	0.8295	0.064	Biso	1	O	-0.513122	
O116	1	0.24395	0.75605	0.0911	Biso	1	O	-0.494037	
Cu23	1	0.19106	0.38211	0.09988	Biso	1	Cu	0.904181	
Cu24	1	0.22155	0.4431	0.05586	Biso	1	Cu	0.834765	
O117	1	0.2187	0.4374	0.1264	Biso	1	O	-0.529923	
O118	1	0.19525	0.3905	0.0273	Biso	1	O	-0.490963	
C467	1	0.17545	0.3509	0.0366	Biso	1	C	0.502586	
H227	1	0.16355	0.3271	0.022	Biso	1	H	0.070449	
C468	1	0.23945	0.4789	0.1184	Biso	1	C	0.504015	
H228	1	0.25115	0.5023	0.1333	Biso	1	H	0.076964	
O119	1	0.1705	0.341	0.064	Biso	1	O	-0.514061	
O120	1	0.24395	0.4879	0.0911	Biso	1	O	-0.495353	
Cu25	1	0.19105	0.38211	0.40012	Biso	1	Cu	0.903132	
Cu26	1	0.22155	0.4431	0.44414	Biso	1	Cu	0.833811	
O121	1	0.2187	0.4374	0.3736	Biso	1	O	-0.530786	
O122	1	0.19525	0.3905	0.4727	Biso	1	O	-0.491561	
C469	1	0.17545	0.3509	0.4634	Biso	1	C	0.502498	
H229	1	0.16355	0.3271	0.478	Biso	1	H	0.069944	
C470	1	0.23945	0.4789	0.3816	Biso	1	C	0.503888	
H230	1	0.25115	0.5023	0.3667	Biso	1	H	0.076437	
O123	1	0.1705	0.341	0.436	Biso	1	O	-0.514696	
O124	1	0.24395	0.4879	0.4089	Biso	1	O	-0.495667	
Cu27	1	0.19106	0.80895	0.40012	Biso	1	Cu	0.904024	
Cu28	1	0.22155	0.77845	0.44414	Biso	1	Cu	0.834603	
O125	1	0.2187	0.7813	0.3736	Biso	1	O	-0.530506	
O126	1	0.19525	0.80475	0.4727	Biso	1	O	-0.490466	
C471	1	0.17545	0.82455	0.4634	Biso	1	C	0.502621	
H231	1	0.16355	0.83645	0.478	Biso	1	H	0.06989	
C472	1	0.23945	0.76055	0.3816	Biso	1	C	0.504631	
H232	1	0.25115	0.74885	0.3667	Biso	1	H	0.076671	

O127	1	0.1705	0.8295	0.436	Biso	1	O	-0.514723			
O128	1	0.24395		0.75605		0.4089	Biso	1	O	-0.495352	
Cu29	1	0.61789		0.80894		0.40012		Biso	1	Cu	0.903868
Cu30	1	0.5569	0.77845		0.44414		Biso	1	Cu	0.834571	
O129	1	0.5626	0.7813	0.3736	Biso	1	O	-0.530529			
O130	1	0.6095	0.80475		0.4727	Biso	1	O	-0.490486		
C473	1	0.6491	0.82455		0.4634	Biso	1	C	0.502151		
H233	1	0.6729	0.83645		0.478	Biso	1	H	0.070105		
C474	1	0.5211	0.76055		0.3816	Biso	1	C	0.504162		
H234	1	0.4977	0.74885		0.3667	Biso	1	H	0.076889		
O131	1	0.659	0.8295	0.436	Biso	1	O	-0.514506			
O132	1	0.5121	0.75605		0.4089	Biso	1	O	-0.495095		
Cu31	1	0.80895		0.61789		0.90012		Biso	1	Cu	0.902618
Cu32	1	0.77845		0.5569	0.94414		Biso	1	Cu	0.833201	
O133	1	0.7813	0.5626	0.8736	Biso	1	O	-0.531196			
O134	1	0.80475		0.6095	0.9727	Biso	1	O	-0.491033		
C475	1	0.82455		0.6491	0.9634	Biso	1	C	0.501996		
H235	1	0.83645		0.6729	0.978	Biso	1	H	0.069441		
C476	1	0.76055		0.5211	0.8816	Biso	1	C	0.503914		
H236	1	0.74885		0.4977	0.8667	Biso	1	H	0.076385		
O135	1	0.8295	0.659	0.936	Biso	1	O	-0.515412			
O136	1	0.75605		0.5121	0.9089	Biso	1	O	-0.495608		
Cu33	1	0.80895		0.19105		0.90012		Biso	1	Cu	0.903899
Cu34	1	0.77845		0.22155		0.94414		Biso	1	Cu	0.834859
O137	1	0.7813	0.2187	0.8736	Biso	1	O	-0.530679			
O138	1	0.80475		0.19525		0.9727	Biso	1	O	-0.490483	
C477	1	0.82455		0.17545		0.9634	Biso	1	C	0.502752	
H237	1	0.83645		0.16355		0.978	Biso	1	H	0.070035	
C478	1	0.76055		0.23945		0.8816	Biso	1	C	0.504615	
H238	1	0.74885		0.25115		0.8667	Biso	1	H	0.076849	
O139	1	0.8295	0.1705	0.936	Biso	1	O	-0.51473			
O140	1	0.75605		0.24395		0.9089	Biso	1	O	-0.495068	
Cu35	1	0.38211		0.19105		0.90012		Biso	1	Cu	0.903937
Cu36	1	0.4431	0.22155		0.94414		Biso	1	Cu	0.834663	
O141	1	0.4374	0.2187	0.8736	Biso	1	O	-0.53012			
O142	1	0.3905	0.19525		0.9727	Biso	1	O	-0.49091		
C479	1	0.3509	0.17545		0.9634	Biso	1	C	0.50261		
H239	1	0.3271	0.16355		0.978	Biso	1	H	0.070253		
C480	1	0.4789	0.23945		0.8816	Biso	1	C	0.503841		
H240	1	0.5023	0.25115		0.8667	Biso	1	H	0.076872		
O143	1	0.341	0.1705	0.936	Biso	1	O	-0.514511			
O144	1	0.4879	0.24395		0.9089	Biso	1	O	-0.49528		
N1	1	0.1923	0.3846	0.704	Biso	1	N	-0.355283			
N2	1	0.6154	0.8077	0.704	Biso	1	N	-0.355318			
N3	1	0.1923	0.8077	0.704	Biso	1	N	-0.355574			
N4	1	0.8077	0.6154	0.204	Biso	1	N	-0.355494			
N5	1	0.3846	0.1923	0.204	Biso	1	N	-0.355551			
N6	1	0.8077	0.1923	0.204	Biso	1	N	-0.355806			
N7	1	0.3846	0.1923	0.296	Biso	1	N	-0.355746			
N8	1	0.8077	0.6154	0.296	Biso	1	N	-0.355791			
N9	1	0.8077	0.1923	0.296	Biso	1	N	-0.356013			
N10	1	0.6154	0.8077	0.796	Biso	1	N	-0.356008			

N11	1	0.1923	0.3846	0.796	Biso	1	N	-0.355983		
N12	1	0.1923	0.8077	0.796	Biso	1	N	-0.35628		
N13	1	0.2508	0.3853	0.75	Biso	1	N	-0.341176		
N14	1	0.6147	0.8655	0.75	Biso	1	N	-0.340701		
N15	1	0.1345	0.7492	0.75	Biso	1	N	-0.341677		
N16	1	0.7492	0.6147	0.25	Biso	1	N	-0.341308		
N17	1	0.3853	0.1345	0.25	Biso	1	N	-0.341059		
N18	1	0.8655	0.2508	0.25	Biso	1	N	-0.341085		
N19	1	0.3853	0.2508	0.25	Biso	1	N	-0.341152		
N20	1	0.8655	0.6147	0.25	Biso	1	N	-0.340898		
N21	1	0.7492	0.1345	0.25	Biso	1	N	-0.341389		
N22	1	0.6147	0.7492	0.75	Biso	1	N	-0.34162		
N23	1	0.1345	0.3853	0.75	Biso	1	N	-0.341137		
N24	1	0.2508	0.8655	0.75	Biso	1	N	-0.34083		
Cu37	1	0.19193		0.38385		0.75	Biso	1	Cu	0.604083
Cu38	1	0.61615		0.80807		0.75	Biso	1	Cu	0.60409
Cu39	1	0.19193		0.80807		0.75	Biso	1	Cu	0.6041779999999994
Cu40	1	0.80808		0.61615		0.25	Biso	1	Cu	0.60357
Cu41	1	0.38385		0.19193		0.25	Biso	1	Cu	0.603589
Cu42	1	0.80808		0.19192		0.25	Biso	1	Cu	0.604045

```

data_BEPMIU_clean
_audit_creation_date 2014-07-02
_audit_creation_method 'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_number 1
_symmetry_cell_setting triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x y z
_cell_length_a 10.2652
_cell_length_b 17.5285
_cell_length_c 17.5285
_cell_angle_alpha 120
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1 Zn 0.00685 0.46439 0.92459 0.01267 Uiso 1 0.71023
Zn2 Zn 0.67352 0.4602 0.53561 0.01267 Uiso 1 0.709985
Zn3 Zn 0.34018 0.07541 0.5398 0.01267 Uiso 1 0.709836
Zn4 Zn 0.50685 0.53561 0.07541 0.01267 Uiso 1 0.710118
Zn5 Zn 0.17352 0.5398 0.46439 0.01267 Uiso 1 0.709986
Zn6 Zn 0.84018 0.92459 0.4602 0.01267 Uiso 1 0.709894
H1 H 0.9749 0.4269 0.3219 0.01267 Uiso 1 0.099646
H2 H 0.9305 0.3836 0.1787 0.01267 Uiso 1 0.141503
H3 H 0.2264 0.535 0.1819 0.01267 Uiso 1 0.135822
H4 H 0.2722 0.567 0.3222 0.01267 Uiso 1 0.108996
H5 H 0.1109 0.3909 0.0305 0.01267 Uiso 1 0.13497
H6 H 0.9614 0.3991 0.0513 0.01267 Uiso 1 0.115725
H7 H 0.9252 0.5697 0.1653 0.01267 Uiso 1 0.075823
H8 H 0.0427 0.6823 0.1622 0.01267 Uiso 1 0.159209
H9 H 0.8945 0.6994 0.155 0.01267 Uiso 1 0.180368
H10 H 0.9826 0.6582 0.0707 0.01267 Uiso 1 0.162198
H11 H 0.1142 0.5357 0.0729 0.01267 Uiso 1 0.262469
H12 H 0.64157 0.895 0.5731 0.01267 Uiso 1 0.09992
H13 H 0.59717 0.7951 0.6164 0.01267 Uiso 1 0.141665
H14 H 0.89307 0.6469 0.465 0.01267 Uiso 1 0.13598
H15 H 0.93887 0.7552 0.433 0.01267 Uiso 1 0.108531
H16 H 0.77757 0.6396 0.6091 0.01267 Uiso 1 0.134697
H17 H 0.62807 0.6522 0.6009 0.01267 Uiso 1 0.114891
H18 H 0.59187 0.5956 0.4303 0.01267 Uiso 1 0.07585
H19 H 0.70937 0.4799 0.3177 0.01267 Uiso 1 0.158428
H20 H 0.56117 0.4556 0.3006 0.01267 Uiso 1 0.181094
H21 H 0.64927 0.4125 0.3418 0.01267 Uiso 1 0.162413

```

H22	H	0.78087	0.5372	0.4643	0.01267	Uiso	1	0.262626
H23	H	0.30823	0.6781	0.105	0.01267	Uiso	1	0.099196
H24	H	0.26383	0.8213	0.2049	0.01267	Uiso	1	0.140974
H25	H	0.55973	0.8181	0.3531	0.01267	Uiso	1	0.13577
H26	H	0.60553	0.6778	0.2448	0.01267	Uiso	1	0.107843
H27	H	0.44423	0.9695	0.3604	0.01267	Uiso	1	0.134427
H28	H	0.29473	0.9487	0.3478	0.01267	Uiso	1	0.115109
H29	H	0.25853	0.8347	0.4044	0.01267	Uiso	1	0.075643
H30	H	0.37603	0.8378	0.5201	0.01267	Uiso	1	0.158723
H31	H	0.22783	0.845	0.5444	0.01267	Uiso	1	0.181036
H32	H	0.31593	0.9293	0.5875	0.01267	Uiso	1	0.1624
H33	H	0.44753	0.9271	0.4628	0.01267	Uiso	1	0.263034
H34	H	0.4749	0.5731	0.6781	0.01267	Uiso	1	0.099545
H35	H	0.4305	0.6164	0.8213	0.01267	Uiso	1	0.141512
H36	H	0.7264	0.465	0.8181	0.01267	Uiso	1	0.135906
H37	H	0.7722	0.433	0.6778	0.01267	Uiso	1	0.109007
H38	H	0.6109	0.6091	0.9695	0.01267	Uiso	1	0.135102
H39	H	0.4614	0.6009	0.9487	0.01267	Uiso	1	0.115746
H40	H	0.4252	0.4303	0.8347	0.01267	Uiso	1	0.075475
H41	H	0.5427	0.3177	0.8378	0.01267	Uiso	1	0.159162
H42	H	0.3945	0.3006	0.845	0.01267	Uiso	1	0.180379
H43	H	0.4826	0.3418	0.9293	0.01267	Uiso	1	0.162443
H44	H	0.6142	0.4643	0.9271	0.01267	Uiso	1	0.262495
H45	H	0.14157	0.105	0.4269	0.01267	Uiso	1	0.099917
H46	H	0.09717	0.2049	0.3836	0.01267	Uiso	1	0.14156
H47	H	0.39307	0.3531	0.535	0.01267	Uiso	1	0.136054
H48	H	0.43887	0.2448	0.567	0.01267	Uiso	1	0.108665
H49	H	0.27757	0.3604	0.3909	0.01267	Uiso	1	0.134574
H50	H	0.12807	0.3478	0.3991	0.01267	Uiso	1	0.114844
H51	H	0.09187	0.4044	0.5697	0.01267	Uiso	1	0.075886
H52	H	0.20937	0.5201	0.6823	0.01267	Uiso	1	0.158672
H53	H	0.06117	0.5444	0.6994	0.01267	Uiso	1	0.181302
H54	H	0.14927	0.5875	0.6582	0.01267	Uiso	1	0.162453
H55	H	0.28087	0.4628	0.5357	0.01267	Uiso	1	0.262761
H56	H	0.80823	0.3219	0.895	0.01267	Uiso	1	0.099344
H57	H	0.76383	0.1787	0.7951	0.01267	Uiso	1	0.141005
H58	H	0.05973	0.1819	0.6469	0.01267	Uiso	1	0.135642
H59	H	0.10553	0.3222	0.7552	0.01267	Uiso	1	0.10777
H60	H	0.94423	0.0305	0.6396	0.01267	Uiso	1	0.134461
H61	H	0.79473	0.0513	0.6522	0.01267	Uiso	1	0.115114
H62	H	0.75853	0.1653	0.5956	0.01267	Uiso	1	0.075796
H63	H	0.87603	0.1622	0.4799	0.01267	Uiso	1	0.158844
H64	H	0.72783	0.155	0.4556	0.01267	Uiso	1	0.180967
H65	H	0.81593	0.0707	0.4125	0.01267	Uiso	1	0.162246
H66	H	0.94753	0.0729	0.5372	0.01267	Uiso	1	0.262922
C1	C	0.0274	0.4474	0.2927	0.01267	Uiso	1	0.073104
C2	C	0.9991	0.4222	0.2073	0.01267	Uiso	1	-0.206273
C3	C	0.0734	0.4543	0.163	0.01267	Uiso	1	0.161409
C4	C	0.1758	0.5109	0.2087	0.01267	Uiso	1	-0.184564
C5	C	0.2014	0.5309	0.2932	0.01267	Uiso	1	0.098488
C6	C	0.0438	0.4304	0.0688	0.01267	Uiso	1	-0.141498
C7	C	0.9341	0.5685	0.109	0.01267	Uiso	1	0.035975

C8	C	0.8051	0.5385	0.0576	0.01267	Uiso	1	0.588469	
C9	C	0.9664	0.6607	0.1258	0.01267	Uiso	1	-0.508026	
C10	C	0.69407		0.8453	0.5526	0.01267	Uiso	1	0.074626
C11	C	0.66577		0.7851	0.5778	0.01267	Uiso	1	-0.207529
C12	C	0.74007		0.7087	0.5457	0.01267	Uiso	1	0.162277
C13	C	0.84247		0.6978	0.4891	0.01267	Uiso	1	-0.185437
C14	C	0.86807		0.7623	0.4691	0.01267	Uiso	1	0.100565
C15	C	0.71047		0.6384	0.5696	0.01267	Uiso	1	-0.139731
C16	C	0.60077		0.5405	0.4315	0.01267	Uiso	1	0.035564
C17	C	0.47177		0.5191	0.4615	0.01267	Uiso	1	0.587686
C18	C	0.63307		0.4651	0.3393	0.01267	Uiso	1	-0.507893
C19	C	0.36073		0.7073	0.1547	0.01267	Uiso	1	0.074376
C20	C	0.33243		0.7927	0.2149	0.01267	Uiso	1	-0.207392
C21	C	0.40673		0.837	0.2913	0.01267	Uiso	1	0.162416
C22	C	0.50913		0.7913	0.3022	0.01267	Uiso	1	-0.185297
C23	C	0.53473		0.7068	0.2377	0.01267	Uiso	1	0.101106
C24	C	0.37713		0.9312	0.3616	0.01267	Uiso	1	-0.140478
C25	C	0.26743		0.891	0.4595	0.01267	Uiso	1	0.037417
C26	C	0.13843		0.9424	0.4809	0.01267	Uiso	1	0.586436
C27	C	0.29973		0.8742	0.5349	0.01267	Uiso	1	-0.508322
C28	C	0.5274	0.5526	0.7073	0.01267	Uiso	1	0.072934	
C29	C	0.4991	0.5778	0.7927	0.01267	Uiso	1	-0.206157	
C30	C	0.5734	0.5457	0.837	0.01267	Uiso	1	0.1615	
C31	C	0.6758	0.4891	0.7913	0.01267	Uiso	1	-0.184422	
C32	C	0.7014	0.4691	0.7068	0.01267	Uiso	1	0.098282	
C33	C	0.5438	0.5696	0.9312	0.01267	Uiso	1	-0.14168	
C34	C	0.4341	0.4315	0.891	0.01267	Uiso	1	0.036261	
C35	C	0.3051	0.4615	0.9424	0.01267	Uiso	1	0.588242	
C36	C	0.4664	0.3393	0.8742	0.01267	Uiso	1	-0.50826	
C37	C	0.19407		0.1547	0.4474	0.01267	Uiso	1	0.074351
C38	C	0.16577		0.2149	0.4222	0.01267	Uiso	1	-0.207454
C39	C	0.24007		0.2913	0.4543	0.01267	Uiso	1	0.162215
C40	C	0.34247		0.3022	0.5109	0.01267	Uiso	1	-0.185543
C41	C	0.36807		0.2377	0.5309	0.01267	Uiso	1	0.100601
C42	C	0.21047		0.3616	0.4304	0.01267	Uiso	1	-0.13975
C43	C	0.10077		0.4595	0.5685	0.01267	Uiso	1	0.035628
C44	C	0.97177		0.4809	0.5385	0.01267	Uiso	1	0.587696
C45	C	0.13307		0.5349	0.6607	0.01267	Uiso	1	-0.508242
C46	C	0.86073		0.2927	0.8453	0.01267	Uiso	1	0.074532
C47	C	0.83243		0.2073	0.7851	0.01267	Uiso	1	-0.207343
C48	C	0.90673		0.163	0.7087	0.01267	Uiso	1	0.162395
C49	C	0.00913		0.2087	0.6978	0.01267	Uiso	1	-0.185505
C50	C	0.03473		0.2932	0.7623	0.01267	Uiso	1	0.101298
C51	C	0.87713		0.0688	0.6384	0.01267	Uiso	1	-0.140341
C52	C	0.76743		0.109	0.5405	0.01267	Uiso	1	0.037337
C53	C	0.63843		0.0576	0.5191	0.01267	Uiso	1	0.586437
C54	C	0.79973		0.1258	0.4651	0.01267	Uiso	1	-0.508366
N1	N	0.0365	0.5069	0.0566	0.01267	Uiso	1	-0.32951	
N2	N	0.1276	0.5003	0.3364	0.01267	Uiso	1	-0.197741	
N3	N	0.70317		0.5497	0.4931	0.01267	Uiso	1	-0.330395
N4	N	0.79427		0.8361	0.4997	0.01267	Uiso	1	-0.200059
N5	N	0.36983		0.9434	0.4503	0.01267	Uiso	1	-0.330546

N6	N	0.46093	0.6636	0.1639	0.01267	Uiso	1	-0.198533
N7	N	0.5365	0.4931	0.9434	0.01267	Uiso	1	-0.329446
N8	N	0.6276	0.4997	0.6636	0.01267	Uiso	1	-0.19772
N9	N	0.20317	0.4503	0.5069	0.01267	Uiso	1	-0.330568
N10	N	0.29427	0.1639	0.5003	0.01267	Uiso	1	-0.199785
N11	N	0.86983	0.0566	0.5497	0.01267	Uiso	1	-0.330578
N12	N	0.96093	0.3364	0.8361	0.01267	Uiso	1	-0.19865
Cl1	Cl	0.997	0.55565	0.87054	0.01267	Uiso	1	-0.563455
Cl2	Cl	0.66367	0.31489	0.44435	0.01267	Uiso	1	-0.563627
Cl3	Cl	0.33033	0.12946	0.68511	0.01267	Uiso	1	-0.563485
Cl4	Cl	0.497	0.44435	0.12946	0.01267	Uiso	1	-0.563367
Cl5	Cl	0.16367	0.68511	0.55565	0.01267	Uiso	1	-0.563546
Cl6	Cl	0.83033	0.87054	0.31489	0.01267	Uiso	1	-0.563617
O1	O	0.704	0.5699	0.1039	0.01267	Uiso	1	-0.566858
O2	O	0.8094	0.4874	0.9771	0.01267	Uiso	1	-0.546388
O3	O	0.37067	0.534	0.4301	0.01267	Uiso	1	-0.567168
O4	O	0.47607	0.4897	0.5126	0.01267	Uiso	1	-0.544972
O5	O	0.03733	0.8961	0.466	0.01267	Uiso	1	-0.566292
O6	O	0.14273	0.0229	0.5103	0.01267	Uiso	1	-0.545482
O7	O	0.204	0.4301	0.8961	0.01267	Uiso	1	-0.567008
O8	O	0.3094	0.5126	0.0229	0.01267	Uiso	1	-0.545997
O9	O	0.87067	0.466	0.5699	0.01267	Uiso	1	-0.566966
O10	O	0.97607	0.5103	0.4874	0.01267	Uiso	1	-0.545155
O11	O	0.53733	0.1039	0.534	0.01267	Uiso	1	-0.566294
O12	O	0.64273	0.9771	0.4897	0.01267	Uiso	1	-0.545516

```

data_BEPMAM_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1716
_cell_length_b            17.5911
_cell_length_c            17.5911
_cell_angle_alpha        120.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.86909 0.54333 0.46797 0.01267 Uiso  1   0.400995
Zn2  Zn   0.53576 0.92464 0.45667 0.01267 Uiso  1   0.403537
Zn3  Zn   0.20242 0.53203 0.07536 0.01267 Uiso  1   0.408386
Zn4  Zn   0.36909 0.45667 0.53203 0.01267 Uiso  1   0.400164
Zn5  Zn   0.03576 0.07536 0.54333 0.01267 Uiso  1   0.404784
Zn6  Zn   0.70242 0.46797 0.92464 0.01267 Uiso  1   0.406939
H1   H    0.5852  0.4772  0.7789  0.01267 Uiso  1   0.099963
H2   H    0.6317  0.5229  0.6782  0.01267 Uiso  1   0.111331
H3   H    0.9799  0.6101  0.7948  0.01267 Uiso  1   0.126024
H4   H    0.9277  0.5625  0.8901  0.01267 Uiso  1   0.082929
H5   H    0.7914  0.6338  0.653   0.01267 Uiso  1   0.123601
H6   H    0.9395  0.6148  0.6629  0.01267 Uiso  1   0.114074
H7   H    0.9654  0.4519  0.6134  0.01267 Uiso  1   0.079415
H8   H    0.8028  0.3492  0.508   0.01267 Uiso  1   0.16482
H9   H    0.9421  0.3118  0.5093  0.01267 Uiso  1   0.168719
H10  H    0.9073  0.3353  0.4367  0.01267 Uiso  1   0.156648
H11  H    0.7655  0.4855  0.5584  0.01267 Uiso  1   0.258986
H12  H    0.25187 0.3017  0.5228  0.01267 Uiso  1   0.100067
H13  H    0.29837 0.1553  0.4771  0.01267 Uiso  1   0.109227
H14  H    0.64657 0.1847  0.3899  0.01267 Uiso  1   0.126428
H15  H    0.59437 0.3276  0.4375  0.01267 Uiso  1   0.083518
H16  H    0.45807 0.0192  0.3662  0.01267 Uiso  1   0.123761
H17  H    0.60617 0.0481  0.3852  0.01267 Uiso  1   0.114417
H18  H    0.63207 0.1615  0.5481  0.01267 Uiso  1   0.078378
H19  H    0.46947 0.1588  0.6508  0.01267 Uiso  1   0.164619
H20  H    0.60877 0.1975  0.6882  0.01267 Uiso  1   0.170161

```

H21	H	0.57397	0.1014	0.6647	0.01267	Uiso	1	0.156633
H22	H	0.43217	0.0729	0.5145	0.01267	Uiso	1	0.259259
H23	H	0.91853	0.2211	0.6983	0.01267	Uiso	1	0.099712
H24	H	0.96503	0.3218	0.8447	0.01267	Uiso	1	0.109028
H25	H	0.31323	0.2052	0.8153	0.01267	Uiso	1	0.125999
H26	H	0.26103	0.1099	0.6724	0.01267	Uiso	1	0.082964
H27	H	0.12473	0.347	0.9808	0.01267	Uiso	1	0.123215
H28	H	0.27283	0.3371	0.9519	0.01267	Uiso	1	0.114086
H29	H	0.29873	0.3866	0.8385	0.01267	Uiso	1	0.079286
H30	H	0.13613	0.492	0.8412	0.01267	Uiso	1	0.16468
H31	H	0.27543	0.4907	0.8025	0.01267	Uiso	1	0.169882
H32	H	0.24063	0.5633	0.8986	0.01267	Uiso	1	0.156585
H33	H	0.09883	0.4416	0.9271	0.01267	Uiso	1	0.259232
H34	H	0.0852	0.5228	0.2211	0.01267	Uiso	1	0.099878
H35	H	0.1317	0.4771	0.3218	0.01267	Uiso	1	0.111322
H36	H	0.4799	0.3899	0.2052	0.01267	Uiso	1	0.126073
H37	H	0.4277	0.4375	0.1099	0.01267	Uiso	1	0.083002
H38	H	0.2914	0.3662	0.347	0.01267	Uiso	1	0.123612
H39	H	0.4395	0.3852	0.3371	0.01267	Uiso	1	0.114156
H40	H	0.4654	0.5481	0.3866	0.01267	Uiso	1	0.079446
H41	H	0.3028	0.6508	0.492	0.01267	Uiso	1	0.164794
H42	H	0.4421	0.6882	0.4907	0.01267	Uiso	1	0.168692
H43	H	0.4073	0.6647	0.5633	0.01267	Uiso	1	0.156616
H44	H	0.2655	0.5145	0.4416	0.01267	Uiso	1	0.258884
H45	H	0.75187	0.6983	0.4772	0.01267	Uiso	1	0.100106
H46	H	0.79837	0.8447	0.5229	0.01267	Uiso	1	0.109117
H47	H	0.14657	0.8153	0.6101	0.01267	Uiso	1	0.126587
H48	H	0.09437	0.6724	0.5625	0.01267	Uiso	1	0.083552
H49	H	0.95807	0.9808	0.6338	0.01267	Uiso	1	0.123647
H50	H	0.10617	0.9519	0.6148	0.01267	Uiso	1	0.114449
H51	H	0.13207	0.8385	0.4519	0.01267	Uiso	1	0.078397
H52	H	0.96947	0.8412	0.3492	0.01267	Uiso	1	0.164619
H53	H	0.10877	0.8025	0.3118	0.01267	Uiso	1	0.17028
H54	H	0.07397	0.8986	0.3353	0.01267	Uiso	1	0.156646
H55	H	0.93217	0.9271	0.4855	0.01267	Uiso	1	0.259311
H56	H	0.41853	0.7789	0.3017	0.01267	Uiso	1	0.099633
H57	H	0.46503	0.6782	0.1553	0.01267	Uiso	1	0.109265
H58	H	0.81323	0.7948	0.1847	0.01267	Uiso	1	0.125959
H59	H	0.76103	0.8901	0.3276	0.01267	Uiso	1	0.082899
H60	H	0.62473	0.653	0.0192	0.01267	Uiso	1	0.123286
H61	H	0.77283	0.6629	0.0481	0.01267	Uiso	1	0.113997
H62	H	0.79873	0.6134	0.1615	0.01267	Uiso	1	0.079205
H63	H	0.63613	0.508	0.1588	0.01267	Uiso	1	0.164767
H64	H	0.77543	0.5093	0.1975	0.01267	Uiso	1	0.16984
H65	H	0.74063	0.4367	0.1014	0.01267	Uiso	1	0.15665
H66	H	0.59883	0.5584	0.0729	0.01267	Uiso	1	0.259264
C1	C	0.6656	0.5037	0.7818	0.01267	Uiso	1	0.052422
C2	C	0.6939	0.5309	0.7203	0.01267	Uiso	1	-0.228244
C3	C	0.8138	0.5696	0.7225	0.01267	Uiso	1	0.099198
C4	C	0.8998	0.5823	0.7892	0.01267	Uiso	1	-0.219294
C5	C	0.8673	0.5543	0.8469	0.01267	Uiso	1	0.01649
C6	C	0.8515	0.5904	0.6519	0.01267	Uiso	1	-0.13059

C7	C	0.9448	0.4437	0.5554	0.01267	Uiso	1	0.048034
C8	C	0.0694	0.46	0.5159	0.01267	Uiso	1	0.549139
C9	C	0.8947	0.3517	0.4971	0.01267	Uiso	1	-0.508085
C10	C	0.33227	0.2781	0.4963	0.01267	Uiso	1	0.056481
C11	C	0.36057	0.1894	0.4691	0.01267	Uiso	1	-0.229099
C12	C	0.48047	0.1529	0.4304	0.01267	Uiso	1	0.102368
C13	C	0.56647	0.2069	0.4177	0.01267	Uiso	1	-0.218556
C14	C	0.53397	0.2926	0.4457	0.01267	Uiso	1	0.015357
C15	C	0.51817	0.0615	0.4096	0.01267	Uiso	1	-0.1293
C16	C	0.61147	0.1117	0.5563	0.01267	Uiso	1	0.04954
C17	C	0.73607	0.0559	0.54	0.01267	Uiso	1	0.547046
C18	C	0.56137	0.1454	0.6483	0.01267	Uiso	1	-0.507775
C19	C	0.99893	0.2182	0.7219	0.01267	Uiso	1	0.05587
C20	C	0.02723	0.2797	0.8106	0.01267	Uiso	1	-0.230755
C21	C	0.14713	0.2775	0.8471	0.01267	Uiso	1	0.099997
C22	C	0.23313	0.2108	0.7931	0.01267	Uiso	1	-0.218351
C23	C	0.20063	0.1531	0.7074	0.01267	Uiso	1	0.012025
C24	C	0.18483	0.3481	0.9385	0.01267	Uiso	1	-0.129545
C25	C	0.27813	0.4446	0.8883	0.01267	Uiso	1	0.048907
C26	C	0.40273	0.4841	0.9441	0.01267	Uiso	1	0.548341
C27	C	0.22803	0.5029	0.8546	0.01267	Uiso	1	-0.507996
C28	C	0.1656	0.4963	0.2182	0.01267	Uiso	1	0.052369
C29	C	0.1939	0.4691	0.2797	0.01267	Uiso	1	-0.228289
C30	C	0.3138	0.4304	0.2775	0.01267	Uiso	1	0.099289
C31	C	0.3998	0.4177	0.2108	0.01267	Uiso	1	-0.219343
C32	C	0.3673	0.4457	0.1531	0.01267	Uiso	1	0.016882
C33	C	0.3515	0.4096	0.3481	0.01267	Uiso	1	-0.130704
C34	C	0.4448	0.5563	0.4446	0.01267	Uiso	1	0.047974
C35	C	0.5694	0.54	0.4841	0.01267	Uiso	1	0.549276
C36	C	0.3947	0.6483	0.5029	0.01267	Uiso	1	-0.5081
C37	C	0.83227	0.7219	0.5037	0.01267	Uiso	1	0.05664
C38	C	0.86057	0.8106	0.5309	0.01267	Uiso	1	-0.229175
C39	C	0.98047	0.8471	0.5696	0.01267	Uiso	1	0.102345
C40	C	0.06647	0.7931	0.5823	0.01267	Uiso	1	-0.21867
C41	C	0.03397	0.7074	0.5543	0.01267	Uiso	1	0.015213
C42	C	0.01817	0.9385	0.5904	0.01267	Uiso	1	-0.129239
C43	C	0.11147	0.8883	0.4437	0.01267	Uiso	1	0.049557
C44	C	0.23607	0.9441	0.46	0.01267	Uiso	1	0.546816
C45	C	0.06137	0.8546	0.3517	0.01267	Uiso	1	-0.507914
C46	C	0.49893	0.7818	0.2781	0.01267	Uiso	1	0.055855
C47	C	0.52723	0.7203	0.1894	0.01267	Uiso	1	-0.230786
C48	C	0.64713	0.7225	0.1529	0.01267	Uiso	1	0.100057
C49	C	0.73313	0.7892	0.2069	0.01267	Uiso	1	-0.218547
C50	C	0.70063	0.8469	0.2926	0.01267	Uiso	1	0.012191
C51	C	0.68483	0.6519	0.0615	0.01267	Uiso	1	-0.129513
C52	C	0.77813	0.5554	0.1117	0.01267	Uiso	1	0.049006
C53	C	0.90273	0.5159	0.0559	0.01267	Uiso	1	0.548264
C54	C	0.72803	0.4971	0.1454	0.01267	Uiso	1	-0.508141
N1	N	0.8467	0.5098	0.5648	0.01267	Uiso	1	-0.308847
N2	N	0.7517	0.5152	0.8437	0.01267	Uiso	1	-0.206906
N3	N	0.51337	0.055	0.4902	0.01267	Uiso	1	-0.308626
N4	N	0.41837	0.3285	0.4848	0.01267	Uiso	1	-0.203461

N5	N	0.18003	0.4352	0.945	0.01267	Uiso	1	-0.309828
N6	N	0.08503	0.1563	0.6715	0.01267	Uiso	1	-0.205647
N7	N	0.3467	0.4902	0.4352	0.01267	Uiso	1	-0.308685
N8	N	0.2517	0.4848	0.1563	0.01267	Uiso	1	-0.207297
N9	N	0.01337	0.945	0.5098	0.01267	Uiso	1	-0.308854
N10	N	0.91837	0.6715	0.5152	0.01267	Uiso	1	-0.203749
N11	N	0.68003	0.5648	0.055	0.01267	Uiso	1	-0.30965
N12	N	0.58503	0.8437	0.3285	0.01267	Uiso	1	-0.205347
O1	O	0.1727	0.4234	0.5254	0.01267	Uiso	1	-0.552625
O2	O	0.0633	0.5032	0.4778	0.01267	Uiso	1	-0.504388
O3	O	0.83937	0.102	0.5766	0.01267	Uiso	1	-0.553407
O4	O	0.72997	0.9746	0.4968	0.01267	Uiso	1	-0.504175
O5	O	0.50603	0.4746	0.898	0.01267	Uiso	1	-0.551516
O6	O	0.39663	0.5222	0.0254	0.01267	Uiso	1	-0.504176
O7	O	0.6727	0.5766	0.4746	0.01267	Uiso	1	-0.552724
O8	O	0.5633	0.4968	0.5222	0.01267	Uiso	1	-0.504375
O9	O	0.33937	0.898	0.4234	0.01267	Uiso	1	-0.553155
O10	O	0.22997	0.0254	0.5032	0.01267	Uiso	1	-0.504337
O11	O	0.00603	0.5254	0.102	0.01267	Uiso	1	-0.551705
O12	O	0.89663	0.4778	0.9746	0.01267	Uiso	1	-0.503862

```

data_BEPNOB_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1716
_cell_length_b            17.5911
_cell_length_c            17.5911
_cell_angle_alpha         120.0000
_cell_angle_beta          90.0000
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.86646   0.45663   0.53194   0.01267   Uiso  1   0.749
Zn2  Zn   0.53313   0.07531   0.54337   0.01267   Uiso  1   0.749
Zn3  Zn   0.19979   0.46806   0.92469   0.01267   Uiso  1   0.749
Zn4  Zn   0.36646   0.54337   0.46806   0.01267   Uiso  1   0.749
Zn5  Zn   0.03313   0.92469   0.45663   0.01267   Uiso  1   0.749
Zn6  Zn   0.69979   0.53194   0.07531   0.01267   Uiso  1   0.749
H1   H    0.5832 0.5253 0.2235 0.01267   Uiso  1   0.106
H2   H    0.9267 0.4382 0.1107 0.01267   Uiso  1   0.102
H3   H    0.7883 0.3657 0.3463 0.01267   Uiso  1   0.118
H4   H    0.9366 0.3844 0.3365 0.01267   Uiso  1   0.081
H5   H    0.9625 0.5485 0.3872 0.01267   Uiso  1   0.071
H6   H    0.9762 0.3897 0.2056 0.01267   Uiso  1   0.130
H7   H    0.6284 0.4723 0.3192 0.01267   Uiso  1   0.134
H8   H    0.8003 0.6504 0.4906 0.01267   Uiso  1   0.161
H9   H    0.9404 0.6881 0.4918 0.01267   Uiso  1   0.150
H10  H    0.9018 0.6639 0.5633 0.01267   Uiso  1   0.147
H11  H    0.24987   0.6982 0.4747 0.01267   Uiso  1   0.106
H12  H    0.59337   0.6725 0.5618 0.01267   Uiso  1   0.102
H13  H    0.45497   0.9806 0.6343 0.01267   Uiso  1   0.118
H14  H    0.60327   0.9521 0.6156 0.01267   Uiso  1   0.081
H15  H    0.62917   0.8387 0.4515 0.01267   Uiso  1   0.071
H16  H    0.64287   0.8159 0.6103 0.01267   Uiso  1   0.130
H17  H    0.29507   0.8469 0.5277 0.01267   Uiso  1   0.134
H18  H    0.46697   0.8402 0.3496 0.01267   Uiso  1   0.161
H19  H    0.60707   0.8037 0.3119 0.01267   Uiso  1   0.150
H20  H    0.56847   0.8994 0.3361 0.01267   Uiso  1   0.147
H21  H    0.91653   0.7765 0.3018 0.01267   Uiso  1   0.106

```

H22	H	0.26003	0.8893	0.3275	0.01267	Uiso	1	0.103
H23	H	0.12163	0.6537	0.0194	0.01267	Uiso	1	0.118
H24	H	0.26993	0.6635	0.0479	0.01267	Uiso	1	0.081
H25	H	0.29583	0.6128	0.1613	0.01267	Uiso	1	0.071
H26	H	0.30953	0.7944	0.1841	0.01267	Uiso	1	0.130
H27	H	0.96173	0.6808	0.1531	0.01267	Uiso	1	0.134
H28	H	0.13363	0.5094	0.1598	0.01267	Uiso	1	0.161
H29	H	0.27373	0.5082	0.1963	0.01267	Uiso	1	0.150
H30	H	0.23513	0.4367	0.1006	0.01267	Uiso	1	0.147
H31	H	0.0832	0.4747	0.7765	0.01267	Uiso	1	0.106
H32	H	0.4267	0.5618	0.8893	0.01267	Uiso	1	0.102
H33	H	0.2883	0.6343	0.6537	0.01267	Uiso	1	0.118
H34	H	0.4366	0.6156	0.6635	0.01267	Uiso	1	0.081
H35	H	0.4625	0.4515	0.6128	0.01267	Uiso	1	0.071
H36	H	0.4762	0.6103	0.7944	0.01267	Uiso	1	0.130
H37	H	0.1284	0.5277	0.6808	0.01267	Uiso	1	0.134
H38	H	0.3003	0.3496	0.5094	0.01267	Uiso	1	0.161
H39	H	0.4404	0.3119	0.5082	0.01267	Uiso	1	0.150
H40	H	0.4018	0.3361	0.4367	0.01267	Uiso	1	0.147
H41	H	0.74987	0.3018	0.5253	0.01267	Uiso	1	0.106
H42	H	0.09337	0.3275	0.4382	0.01267	Uiso	1	0.102
H43	H	0.95497	0.0194	0.3657	0.01267	Uiso	1	0.118
H44	H	0.10327	0.0479	0.3844	0.01267	Uiso	1	0.081
H45	H	0.12917	0.1613	0.5485	0.01267	Uiso	1	0.071
H46	H	0.14287	0.1841	0.3897	0.01267	Uiso	1	0.130
H47	H	0.79507	0.1531	0.4723	0.01267	Uiso	1	0.134
H48	H	0.96697	0.1598	0.6504	0.01267	Uiso	1	0.161
H49	H	0.10707	0.1963	0.6881	0.01267	Uiso	1	0.150
H50	H	0.06847	0.1006	0.6639	0.01267	Uiso	1	0.147
H51	H	0.41653	0.2235	0.6982	0.01267	Uiso	1	0.106
H52	H	0.76003	0.1107	0.6725	0.01267	Uiso	1	0.103
H53	H	0.62163	0.3463	0.9806	0.01267	Uiso	1	0.118
H54	H	0.76993	0.3365	0.9521	0.01267	Uiso	1	0.081
H55	H	0.79583	0.3872	0.8387	0.01267	Uiso	1	0.071
H56	H	0.80953	0.2056	0.8159	0.01267	Uiso	1	0.130
H57	H	0.46173	0.3192	0.8469	0.01267	Uiso	1	0.134
H58	H	0.63363	0.4906	0.8402	0.01267	Uiso	1	0.161
H59	H	0.77373	0.4918	0.8037	0.01267	Uiso	1	0.150
H60	H	0.73513	0.5633	0.8994	0.01267	Uiso	1	0.147
C1	C	0.6626	0.497	0.2188	0.01267	Uiso	1	0.056
C2	C	0.8655	0.446	0.1533	0.01267	Uiso	1	0.066
C3	C	0.8487	0.409	0.3475	0.01267	Uiso	1	-0.159
C4	C	0.9421	0.5567	0.4453	0.01267	Uiso	1	0.033
C5	C	0.8964	0.4179	0.2112	0.01267	Uiso	1	-0.218
C6	C	0.067	0.5401	0.484	0.01267	Uiso	1	0.592
C7	C	0.6916	0.467	0.2786	0.01267	Uiso	1	-0.186
C8	C	0.8114	0.4306	0.2773	0.01267	Uiso	1	0.194
C9	C	0.8916	0.6479	0.5029	0.01267	Uiso	1	-0.506
C10	C	0.32927	0.7218	0.503	0.01267	Uiso	1	0.056
C11	C	0.53217	0.7073	0.554	0.01267	Uiso	1	0.066
C12	C	0.51537	0.9385	0.591	0.01267	Uiso	1	-0.159
C13	C	0.60877	0.8886	0.4433	0.01267	Uiso	1	0.033

C14	C	0.56307	0.7933	0.5821	0.01267	Uiso	1	-0.218
C15	C	0.73367	0.9439	0.4599	0.01267	Uiso	1	0.591
C16	C	0.35827	0.8116	0.533	0.01267	Uiso	1	-0.185
C17	C	0.47807	0.8467	0.5694	0.01267	Uiso	1	0.194
C18	C	0.55827	0.855	0.3521	0.01267	Uiso	1	-0.506
C19	C	0.99593	0.7812	0.2782	0.01267	Uiso	1	0.056
C20	C	0.19883	0.8467	0.2927	0.01267	Uiso	1	0.066
C21	C	0.18203	0.6525	0.0615	0.01267	Uiso	1	-0.159
C22	C	0.27543	0.5547	0.1114	0.01267	Uiso	1	0.033
C23	C	0.22973	0.7888	0.2067	0.01267	Uiso	1	-0.218
C24	C	0.40033	0.516	0.0561	0.01267	Uiso	1	0.592
C25	C	0.02493	0.7214	0.1884	0.01267	Uiso	1	-0.185
C26	C	0.14473	0.7227	0.1533	0.01267	Uiso	1	0.194
C27	C	0.22493	0.4971	0.145	0.01267	Uiso	1	-0.506
C28	C	0.1626	0.503	0.7812	0.01267	Uiso	1	0.056
C29	C	0.3655	0.554	0.8467	0.01267	Uiso	1	0.066
C30	C	0.3487	0.591	0.6525	0.01267	Uiso	1	-0.159
C31	C	0.4421	0.4433	0.5547	0.01267	Uiso	1	0.033
C32	C	0.3964	0.5821	0.7888	0.01267	Uiso	1	-0.218
C33	C	0.567	0.4599	0.516	0.01267	Uiso	1	0.592
C34	C	0.1916	0.533	0.7214	0.01267	Uiso	1	-0.186
C35	C	0.3114	0.5694	0.7227	0.01267	Uiso	1	0.194
C36	C	0.3916	0.3521	0.4971	0.01267	Uiso	1	-0.506
C37	C	0.82927	0.2782	0.497	0.01267	Uiso	1	0.056
C38	C	0.03217	0.2927	0.446	0.01267	Uiso	1	0.066
C39	C	0.01537	0.0615	0.409	0.01267	Uiso	1	-0.159
C40	C	0.10877	0.1114	0.5567	0.01267	Uiso	1	0.033
C41	C	0.06307	0.2067	0.4179	0.01267	Uiso	1	-0.219
C42	C	0.23367	0.0561	0.5401	0.01267	Uiso	1	0.591
C43	C	0.85827	0.1884	0.467	0.01267	Uiso	1	-0.185
C44	C	0.97807	0.1533	0.4306	0.01267	Uiso	1	0.194
C45	C	0.05827	0.145	0.6479	0.01267	Uiso	1	-0.506
C46	C	0.49593	0.2188	0.7218	0.01267	Uiso	1	0.056
C47	C	0.69883	0.1533	0.7073	0.01267	Uiso	1	0.066
C48	C	0.68203	0.3475	0.9385	0.01267	Uiso	1	-0.159
C49	C	0.77543	0.4453	0.8886	0.01267	Uiso	1	0.033
C50	C	0.72973	0.2112	0.7933	0.01267	Uiso	1	-0.218
C51	C	0.90033	0.484	0.9439	0.01267	Uiso	1	0.591
C52	C	0.52493	0.2786	0.8116	0.01267	Uiso	1	-0.185
C53	C	0.64473	0.2773	0.8467	0.01267	Uiso	1	0.194
C54	C	0.72493	0.5029	0.855	0.01267	Uiso	1	-0.506
N1	N	0.844	0.4902	0.4356	0.01267	Uiso	1	-0.514
N2	N	0.7481	0.485	0.1561	0.01267	Uiso	1	-0.211
N3	N	0.51067	0.9454	0.5098	0.01267	Uiso	1	-0.514
N4	N	0.41477	0.6711	0.515	0.01267	Uiso	1	-0.212
N5	N	0.17733	0.5644	0.0546	0.01267	Uiso	1	-0.514
N6	N	0.08143	0.8439	0.3289	0.01267	Uiso	1	-0.212
N7	N	0.344	0.5098	0.5644	0.01267	Uiso	1	-0.514
N8	N	0.2481	0.515	0.8439	0.01267	Uiso	1	-0.211
N9	N	0.01067	0.0546	0.4902	0.01267	Uiso	1	-0.514
N10	N	0.91477	0.3289	0.485	0.01267	Uiso	1	-0.212
N11	N	0.67733	0.4356	0.9454	0.01267	Uiso	1	-0.514

N12	N	0.58143	0.1561	0.6711	0.01267	Uiso	1	-0.212
O1	O	0.0608	0.4969	0.5224	0.01267	Uiso	1	-0.521
O2	O	0.1702	0.5765	0.4746	0.01267	Uiso	1	-0.575
O3	O	0.72747	0.0255	0.5031	0.01267	Uiso	1	-0.521
O4	O	0.83687	0.8981	0.4235	0.01267	Uiso	1	-0.575
O5	O	0.39413	0.4776	0.9745	0.01267	Uiso	1	-0.521
O6	O	0.50353	0.5254	0.1019	0.01267	Uiso	1	-0.575
O7	O	0.5608	0.5031	0.4776	0.01267	Uiso	1	-0.521
O8	O	0.6702	0.4235	0.5254	0.01267	Uiso	1	-0.575
O9	O	0.22747	0.9745	0.4969	0.01267	Uiso	1	-0.521
O10	O	0.33687	0.1019	0.5765	0.01267	Uiso	1	-0.575
O11	O	0.89413	0.5224	0.0255	0.01267	Uiso	1	-0.521
O12	O	0.00353	0.4746	0.8981	0.01267	Uiso	1	-0.575

```

data_BEPNUH_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1716
_cell_length_b            17.7440
_cell_length_c            17.7440
_cell_angle_alpha         120.0000
_cell_angle_beta          90.0000
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn  0.86811  0.53163  0.4561 0.01267  Uiso  1  0.689
Zn2  Zn  0.53478  0.92447  0.46837  0.01267  Uiso  1  0.689
Zn3  Zn  0.20144  0.5439 0.07553  0.01267  Uiso  1  0.690
Zn4  Zn  0.36811  0.46837  0.5439 0.01267  Uiso  1  0.689
Zn5  Zn  0.03478  0.07553  0.53163  0.01267  Uiso  1  0.689
Zn6  Zn  0.70144  0.4561 0.92447  0.01267  Uiso  1  0.689
H1   H   0.9694 0.4495 0.5223 0.01267  Uiso  1  0.261
H2   H   0.9441 0.3507 0.379 0.01267  Uiso  1  0.131
H3   H   0.7956 0.3437 0.3983 0.01267  Uiso  1  0.115
H4   H   0.7714 0.4044 0.5644 0.01267  Uiso  1  0.080
H5   H   0.8137 0.1105 0.4398 0.01267  Uiso  1  0.098
H6   H   0.092 0.3332 0.4958 0.01267  Uiso  1  0.133
H7   H   0.753 0.2103 0.399 0.01267  Uiso  1  0.141
H8   H   0.1442 0.2301 0.5349 0.01267  Uiso  1  0.105
H9   H   0.9219 0.5056 0.6666 0.01267  Uiso  1  0.158
H10  H   0.7773 0.5353 0.6979 0.01267  Uiso  1  0.178
H11  H   0.858 0.5801 0.6558 0.01267  Uiso  1  0.161
H12  H   0.63607  0.0728 0.5505 0.01267  Uiso  1  0.261
H13  H   0.61077  0.0283 0.6493 0.01267  Uiso  1  0.131
H14  H   0.46227  0.0546 0.6563 0.01267  Uiso  1  0.115
H15  H   0.43807  0.16 0.5956 0.01267  Uiso  1  0.080
H16  H   0.48037  0.3293 0.8895 0.01267  Uiso  1  0.098
H17  H   0.75867  0.1626 0.6668 0.01267  Uiso  1  0.133
H18  H   0.41967  0.1887 0.7897 0.01267  Uiso  1  0.141
H19  H   0.81087  0.3048 0.7699 0.01267  Uiso  1  0.105
H20  H   0.58857  0.161 0.4944 0.01267  Uiso  1  0.158
H21  H   0.44397  0.1626 0.4647 0.01267  Uiso  1  0.178

```

H22	H	0.52467	0.0757	0.4199	0.01267	Uiso	1	0.161
H23	H	0.30273	0.4777	0.9272	0.01267	Uiso	1	0.261
H24	H	0.27743	0.621	0.9717	0.01267	Uiso	1	0.131
H25	H	0.12893	0.6017	0.9454	0.01267	Uiso	1	0.115
H26	H	0.10473	0.4356	0.84	0.01267	Uiso	1	0.080
H27	H	0.14703	0.5602	0.6707	0.01267	Uiso	1	0.098
H28	H	0.42533	0.5042	0.8374	0.01267	Uiso	1	0.133
H29	H	0.08633	0.601	0.8113	0.01267	Uiso	1	0.141
H30	H	0.47753	0.4651	0.6952	0.01267	Uiso	1	0.105
H31	H	0.25523	0.3334	0.839	0.01267	Uiso	1	0.158
H32	H	0.11063	0.3021	0.8374	0.01267	Uiso	1	0.178
H33	H	0.19133	0.3442	0.9243	0.01267	Uiso	1	0.161
H34	H	0.4694	0.5505	0.4777	0.01267	Uiso	1	0.261
H35	H	0.4441	0.6493	0.621	0.01267	Uiso	1	0.131
H36	H	0.2956	0.6563	0.6017	0.01267	Uiso	1	0.115
H37	H	0.2714	0.5956	0.4356	0.01267	Uiso	1	0.080
H38	H	0.3137	0.8895	0.5602	0.01267	Uiso	1	0.098
H39	H	0.592	0.6668	0.5042	0.01267	Uiso	1	0.133
H40	H	0.253	0.7897	0.601	0.01267	Uiso	1	0.141
H41	H	0.6442	0.7699	0.4651	0.01267	Uiso	1	0.105
H42	H	0.4219	0.4944	0.3334	0.01267	Uiso	1	0.158
H43	H	0.2773	0.4647	0.3021	0.01267	Uiso	1	0.178
H44	H	0.358	0.4199	0.3442	0.01267	Uiso	1	0.161
H45	H	0.13607	0.9272	0.4495	0.01267	Uiso	1	0.261
H46	H	0.11077	0.9717	0.3507	0.01267	Uiso	1	0.131
H47	H	0.96227	0.9454	0.3437	0.01267	Uiso	1	0.115
H48	H	0.93807	0.84	0.4044	0.01267	Uiso	1	0.081
H49	H	0.98037	0.6707	0.1105	0.01267	Uiso	1	0.098
H50	H	0.25867	0.8374	0.3332	0.01267	Uiso	1	0.133
H51	H	0.91967	0.8113	0.2103	0.01267	Uiso	1	0.141
H52	H	0.31087	0.6952	0.2301	0.01267	Uiso	1	0.105
H53	H	0.08857	0.839	0.5056	0.01267	Uiso	1	0.158
H54	H	0.94397	0.8374	0.5353	0.01267	Uiso	1	0.178
H55	H	0.02467	0.9243	0.5801	0.01267	Uiso	1	0.161
H56	H	0.80273	0.5223	0.0728	0.01267	Uiso	1	0.261
H57	H	0.77743	0.379	0.0283	0.01267	Uiso	1	0.131
H58	H	0.62893	0.3983	0.0546	0.01267	Uiso	1	0.115
H59	H	0.60473	0.5644	0.16	0.01267	Uiso	1	0.080
H60	H	0.64703	0.4398	0.3293	0.01267	Uiso	1	0.098
H61	H	0.92533	0.4958	0.1626	0.01267	Uiso	1	0.133
H62	H	0.58633	0.399	0.1887	0.01267	Uiso	1	0.141
H63	H	0.97753	0.5349	0.3048	0.01267	Uiso	1	0.105
H64	H	0.75523	0.6666	0.161	0.01267	Uiso	1	0.158
H65	H	0.61063	0.6979	0.1626	0.01267	Uiso	1	0.178
H66	H	0.69133	0.6558	0.0757	0.01267	Uiso	1	0.161
C1	C	0.9174	0.285	0.445	0.01267	Uiso	1	0.159
C2	C	0.6641	0.4923	0.5446	0.01267	Uiso	1	0.582
C3	C	0.8834	0.3545	0.423	0.01267	Uiso	1	-0.136
C4	C	0.7904	0.4587	0.5648	0.01267	Uiso	1	0.038
C5	C	0.8701	0.1564	0.4519	0.01267	Uiso	1	0.071
C6	C	0.0328	0.2888	0.4843	0.01267	Uiso	1	-0.193
C7	C	0.8328	0.2161	0.427	0.01267	Uiso	1	-0.203

C8	C	0.0643	0.2264	0.5077	0.01267	Uiso	1	0.101	
C9	C	0.8417	0.5262	0.6546	0.01267	Uiso	1	-0.507	
C10	C	0.58407		0.16	0.715	0.01267	Uiso	1	0.160
C11	C	0.33077		0.0523	0.5077	0.01267	Uiso	1	0.582
C12	C	0.55007		0.0685	0.6455	0.01267	Uiso	1	-0.136
C13	C	0.45707		0.1061	0.5413	0.01267	Uiso	1	0.038
C14	C	0.53677		0.2955	0.8436	0.01267	Uiso	1	0.071
C15	C	0.69947		0.1955	0.7112	0.01267	Uiso	1	-0.193
C16	C	0.49947		0.2109	0.7839	0.01267	Uiso	1	-0.204
C17	C	0.73097		0.2813	0.7736	0.01267	Uiso	1	0.101
C18	C	0.50837		0.1284	0.4738	0.01267	Uiso	1	-0.508
C19	C	0.25073		0.555	0.84	0.01267	Uiso	1	0.160
C20	C	0.99743		0.4554	0.9477	0.01267	Uiso	1	0.582
C21	C	0.21673		0.577	0.9315	0.01267	Uiso	1	-0.136
C22	C	0.12373		0.4352	0.8939	0.01267	Uiso	1	0.038
C23	C	0.20343		0.5481	0.7045	0.01267	Uiso	1	0.071
C24	C	0.36613		0.5157	0.8045	0.01267	Uiso	1	-0.193
C25	C	0.16613		0.573	0.7891	0.01267	Uiso	1	-0.203
C26	C	0.39763		0.4923	0.7187	0.01267	Uiso	1	0.101
C27	C	0.17503		0.3454	0.8716	0.01267	Uiso	1	-0.508
C28	C	0.4174	0.715	0.555	0.01267	Uiso	1	0.160	
C29	C	0.1641	0.5077	0.4554	0.01267	Uiso	1	0.582	
C30	C	0.3834	0.6455	0.577	0.01267	Uiso	1	-0.136	
C31	C	0.2904	0.5413	0.4352	0.01267	Uiso	1	0.038	
C32	C	0.3701	0.8436	0.5481	0.01267	Uiso	1	0.071	
C33	C	0.5328	0.7112	0.5157	0.01267	Uiso	1	-0.193	
C34	C	0.3328	0.7839	0.573	0.01267	Uiso	1	-0.204	
C35	C	0.5643	0.7736	0.4923	0.01267	Uiso	1	0.101	
C36	C	0.3417	0.4738	0.3454	0.01267	Uiso	1	-0.508	
C37	C	0.08407		0.84	0.285	0.01267	Uiso	1	0.159
C38	C	0.83077		0.9477	0.4923	0.01267	Uiso	1	0.582
C39	C	0.05007		0.9315	0.3545	0.01267	Uiso	1	-0.136
C40	C	0.95707		0.8939	0.4587	0.01267	Uiso	1	0.038
C41	C	0.03677		0.7045	0.1564	0.01267	Uiso	1	0.071
C42	C	0.19947		0.8045	0.2888	0.01267	Uiso	1	-0.193
C43	C	0.99947		0.7891	0.2161	0.01267	Uiso	1	-0.204
C44	C	0.23097		0.7187	0.2264	0.01267	Uiso	1	0.101
C45	C	0.00837		0.8716	0.5262	0.01267	Uiso	1	-0.508
C46	C	0.75073		0.445	0.16	0.01267	Uiso	1	0.160
C47	C	0.49743		0.5446	0.0523	0.01267	Uiso	1	0.582
C48	C	0.71673		0.423	0.0685	0.01267	Uiso	1	-0.136
C49	C	0.62373		0.5648	0.1061	0.01267	Uiso	1	0.039
C50	C	0.70343		0.4519	0.2955	0.01267	Uiso	1	0.071
C51	C	0.86613		0.4843	0.1955	0.01267	Uiso	1	-0.193
C52	C	0.66613		0.427	0.2109	0.01267	Uiso	1	-0.204
C53	C	0.89763		0.5077	0.2813	0.01267	Uiso	1	0.101
C54	C	0.67503		0.6546	0.1284	0.01267	Uiso	1	-0.508
Br1	Br	0.89847		0.68141	0.55141	0.01267	Uiso	1	-0.540
Br2	Br	0.56514		0.87	0.31859	0.01267	Uiso	1	-0.540
Br3	Br	0.2318	0.44859	0.13	0.01267	Uiso	1	-0.540	
Br4	Br	0.39847		0.31859	0.44859	0.01267	Uiso	1	-0.540
Br5	Br	0.06514		0.13	0.68141	0.01267	Uiso	1	-0.540

Br6	Br	0.7318	0.55141	0.87	0.01267	Uiso	1	-0.540
N1	N	0.8884	0.4419	0.4977	0.01267	Uiso	1	-0.329
N2	N	0.982	0.162	0.4919	0.01267	Uiso	1	-0.186
N3	N	0.55507	0.0558	0.5581	0.01267	Uiso	1	-0.329
N4	N	0.64867	0.3299	0.838	0.01267	Uiso	1	-0.186
N5	N	0.22173	0.5023	0.9442	0.01267	Uiso	1	-0.329
N6	N	0.31533	0.5081	0.6701	0.01267	Uiso	1	-0.186
N7	N	0.3884	0.5581	0.5023	0.01267	Uiso	1	-0.329
N8	N	0.482	0.838	0.5081	0.01267	Uiso	1	-0.186
N9	N	0.05507	0.9442	0.4419	0.01267	Uiso	1	-0.329
N10	N	0.14867	0.6701	0.162	0.01267	Uiso	1	-0.186
N11	N	0.72173	0.4977	0.0558	0.01267	Uiso	1	-0.329
N12	N	0.81533	0.4919	0.3299	0.01267	Uiso	1	-0.186
O1	O	0.6682	0.5169	0.48957	0.01267	Uiso	1	-0.548
O2	O	0.5643	0.4945	0.5878	0.01267	Uiso	1	-0.560
O3	O	0.33487	0.97267	0.4831	0.01267	Uiso	1	-0.548
O4	O	0.23097	0.0933	0.5055	0.01267	Uiso	1	-0.560
O5	O	0.00153	0.51043	0.02733	0.01267	Uiso	1	-0.548
O6	O	0.89763	0.4122	0.9067	0.01267	Uiso	1	-0.560
O7	O	0.1682	0.4831	0.51043	0.01267	Uiso	1	-0.548
O8	O	0.0643	0.5055	0.4122	0.01267	Uiso	1	-0.560
O9	O	0.83487	0.02733	0.5169	0.01267	Uiso	1	-0.548
O10	O	0.73097	0.9067	0.4945	0.01267	Uiso	1	-0.560
O11	O	0.50153	0.48957	0.97267	0.01267	Uiso	1	-0.548
O12	O	0.39763	0.5878	0.0933	0.01267	Uiso	1	-0.560

data_BEPLUF_clean

_audit_creation_date 2014-07-02

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

_symmetry_Int_Tables_number 1

_symmetry_cell_setting triclinic

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

x y z

_cell_length_a 10.1964

_cell_length_b 17.686

_cell_length_c 17.686

_cell_angle_alpha 120

_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label

_atom_site_type_symbol

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_U_iso_or_equiv

_atom_site_adp_type

_atom_site_occupancy

_atom_site_charge

Zn1	Zn	0.98621	0.45883	0.53331	0.01267	Uiso	1	0.291142
Zn2	Zn	0.65288	0.07448	0.54117	0.01267	Uiso	1	0.291451
Zn3	Zn	0.31954	0.46669	0.92552	0.01267	Uiso	1	0.289991
Zn4	Zn	0.48621	0.54117	0.46669	0.01267	Uiso	1	0.291058
Zn5	Zn	0.15288	0.92552	0.45883	0.01267	Uiso	1	0.291719
Zn6	Zn	0.81954	0.53331	0.07448	0.01267	Uiso	1	0.289893
H1	H	0.2046	0.328	0.436	0.01267	Uiso	1	0.084371
H2	H	0.2586	0.1853	0.3919	0.01267	Uiso	1	0.127997
H3	H	0.9217	0.1627	0.4909	0.01267	Uiso	1	0.117034
H4	H	0.8745	0.3064	0.5324	0.01267	Uiso	1	0.100779
H5	H	0.0717	0.0243	0.3726	0.01267	Uiso	1	0.124933
H6	H	0.2204	0.0511	0.3901	0.01267	Uiso	1	0.114522
H7	H	0.2542	0.1593	0.5496	0.01267	Uiso	1	0.078141
H8	H	0.1191	0.1897	0.6647	0.01267	Uiso	1	0.163355
H9	H	0.2549	0.168	0.6909	0.01267	Uiso	1	0.171084
H10	H	0.1429	0.0979	0.6555	0.01267	Uiso	1	0.151151
H11	H	0.0502	0.0744	0.5196	0.01267	Uiso	1	0.263415
H12	H	0.87127	0.108	0.672	0.01267	Uiso	1	0.084733
H13	H	0.92527	0.2066	0.8147	0.01267	Uiso	1	0.128773
H14	H	0.58837	0.3282	0.8373	0.01267	Uiso	1	0.117354
H15	H	0.54117	0.226	0.6936	0.01267	Uiso	1	0.101162
H16	H	0.73837	0.3483	0.9757	0.01267	Uiso	1	0.125409
H17	H	0.88707	0.339	0.9489	0.01267	Uiso	1	0.1143
H18	H	0.92087	0.3903	0.8407	0.01267	Uiso	1	0.077812
H19	H	0.78577	0.475	0.8103	0.01267	Uiso	1	0.162775
H20	H	0.92157	0.5229	0.832	0.01267	Uiso	1	0.170612
H21	H	0.80957	0.5576	0.9021	0.01267	Uiso	1	0.151249

H22	H	0.71687	0.4452	0.9256	0.01267	Uiso	1	0.262891
H23	H	0.53793	0.564	0.892	0.01267	Uiso	1	0.083717
H24	H	0.59193	0.6081	0.7934	0.01267	Uiso	1	0.127854
H25	H	0.25503	0.5091	0.6718	0.01267	Uiso	1	0.117289
H26	H	0.20783	0.4676	0.774	0.01267	Uiso	1	0.100286
H27	H	0.40503	0.6274	0.6517	0.01267	Uiso	1	0.125085
H28	H	0.55373	0.6099	0.661	0.01267	Uiso	1	0.113463
H29	H	0.58753	0.4504	0.6097	0.01267	Uiso	1	0.078376
H30	H	0.45243	0.3353	0.525	0.01267	Uiso	1	0.162457
H31	H	0.58823	0.3091	0.4771	0.01267	Uiso	1	0.170678
H32	H	0.47623	0.3445	0.4424	0.01267	Uiso	1	0.150499
H33	H	0.38353	0.4804	0.5548	0.01267	Uiso	1	0.263034
H34	H	0.7046	0.672	0.564	0.01267	Uiso	1	0.084372
H35	H	0.7586	0.8147	0.6081	0.01267	Uiso	1	0.127927
H36	H	0.4217	0.8373	0.5091	0.01267	Uiso	1	0.11703
H37	H	0.3745	0.6936	0.4676	0.01267	Uiso	1	0.100728
H38	H	0.5717	0.9757	0.6274	0.01267	Uiso	1	0.125003
H39	H	0.7204	0.9489	0.6099	0.01267	Uiso	1	0.114442
H40	H	0.7542	0.8407	0.4504	0.01267	Uiso	1	0.078121
H41	H	0.6191	0.8103	0.3353	0.01267	Uiso	1	0.163409
H42	H	0.7549	0.832	0.3091	0.01267	Uiso	1	0.171037
H43	H	0.6429	0.9021	0.3445	0.01267	Uiso	1	0.151159
H44	H	0.5502	0.9256	0.4804	0.01267	Uiso	1	0.263499
H45	H	0.37127	0.892	0.328	0.01267	Uiso	1	0.084839
H46	H	0.42527	0.7934	0.1853	0.01267	Uiso	1	0.12883
H47	H	0.08837	0.6718	0.1627	0.01267	Uiso	1	0.117212
H48	H	0.04117	0.774	0.3064	0.01267	Uiso	1	0.101072
H49	H	0.23837	0.6517	0.0243	0.01267	Uiso	1	0.12532
H50	H	0.38707	0.661	0.0511	0.01267	Uiso	1	0.114304
H51	H	0.42087	0.6097	0.1593	0.01267	Uiso	1	0.077962
H52	H	0.28577	0.525	0.1897	0.01267	Uiso	1	0.162787
H53	H	0.42157	0.4771	0.168	0.01267	Uiso	1	0.170647
H54	H	0.30957	0.4424	0.0979	0.01267	Uiso	1	0.151136
H55	H	0.21687	0.5548	0.0744	0.01267	Uiso	1	0.262865
H56	H	0.03793	0.436	0.108	0.01267	Uiso	1	0.083709
H57	H	0.09193	0.3919	0.2066	0.01267	Uiso	1	0.127906
H58	H	0.75503	0.4909	0.3282	0.01267	Uiso	1	0.117435
H59	H	0.70783	0.5324	0.226	0.01267	Uiso	1	0.10044
H60	H	0.90503	0.3726	0.3483	0.01267	Uiso	1	0.125082
H61	H	0.05373	0.3901	0.339	0.01267	Uiso	1	0.113367
H62	H	0.08753	0.5496	0.3903	0.01267	Uiso	1	0.078335
H63	H	0.95243	0.6647	0.475	0.01267	Uiso	1	0.162403
H64	H	0.08823	0.6909	0.5229	0.01267	Uiso	1	0.17081
H65	H	0.97623	0.6555	0.5576	0.01267	Uiso	1	0.15053
H66	H	0.88353	0.5196	0.4452	0.01267	Uiso	1	0.26306
C1	C	0.1467	0.295	0.4484	0.01267	Uiso	1	0.051883
C2	C	0.1806	0.2088	0.4218	0.01267	Uiso	1	-0.228864
C3	C	0.0969	0.1587	0.4404	0.01267	Uiso	1	0.116879
C4	C	0.9823	0.1954	0.48	0.01267	Uiso	1	-0.211308
C5	C	0.9537	0.2822	0.5048	0.01267	Uiso	1	0.051252
C6	C	0.1333	0.0649	0.4157	0.01267	Uiso	1	-0.12664
C7	C	0.2324	0.1099	0.5577	0.01267	Uiso	1	0.035541

C8	C	0.3566	0.0549	0.5436	0.01267	Uiso	1	0.562543	
C9	C	0.1827	0.1446	0.6508	0.01267	Uiso	1	-0.512567	
C10	C	0.81337		0.1534	0.705	0.01267	Uiso	1	0.052741
C11	C	0.84727		0.213	0.7912	0.01267	Uiso	1	-0.228577
C12	C	0.76357		0.2817	0.8413	0.01267	Uiso	1	0.118269
C13	C	0.64897		0.2846	0.8046	0.01267	Uiso	1	-0.210769
C14	C	0.62037		0.2226	0.7178	0.01267	Uiso	1	0.052462
C15	C	0.79997		0.3508	0.9351	0.01267	Uiso	1	-0.126393
C16	C	0.89907		0.4478	0.8901	0.01267	Uiso	1	0.03574
C17	C	0.02327		0.4887	0.9451	0.01267	Uiso	1	0.562945
C18	C	0.84937		0.5062	0.8554	0.01267	Uiso	1	-0.511311
C19	C	0.48003		0.5516	0.8466	0.01267	Uiso	1	0.053559
C20	C	0.51393		0.5782	0.787	0.01267	Uiso	1	-0.229668
C21	C	0.43023		0.5596	0.7183	0.01267	Uiso	1	0.118214
C22	C	0.31563		0.52	0.7154	0.01267	Uiso	1	-0.211251
C23	C	0.28703		0.4952	0.7774	0.01267	Uiso	1	0.051472
C24	C	0.46663		0.5843	0.6492	0.01267	Uiso	1	-0.12585
C25	C	0.56573		0.4423	0.5522	0.01267	Uiso	1	0.033964
C26	C	0.68993		0.4564	0.5113	0.01267	Uiso	1	0.562625
C27	C	0.51603		0.3492	0.4938	0.01267	Uiso	1	-0.51003
C28	C	0.6467	0.705	0.5516	0.01267	Uiso	1	0.051752	
C29	C	0.6806	0.7912	0.5782	0.01267	Uiso	1	-0.228813	
C30	C	0.5969	0.8413	0.5596	0.01267	Uiso	1	0.116916	
C31	C	0.4823	0.8046	0.52	0.01267	Uiso	1	-0.211347	
C32	C	0.4537	0.7178	0.4952	0.01267	Uiso	1	0.051226	
C33	C	0.6333	0.9351	0.5843	0.01267	Uiso	1	-0.126598	
C34	C	0.7324	0.8901	0.4423	0.01267	Uiso	1	0.035564	
C35	C	0.8566	0.9451	0.4564	0.01267	Uiso	1	0.562513	
C36	C	0.6827	0.8554	0.3492	0.01267	Uiso	1	-0.512647	
C37	C	0.31337		0.8466	0.295	0.01267	Uiso	1	0.052654
C38	C	0.34727		0.787	0.2088	0.01267	Uiso	1	-0.228625
C39	C	0.26357		0.7183	0.1587	0.01267	Uiso	1	0.11807
C40	C	0.14897		0.7154	0.1954	0.01267	Uiso	1	-0.21066
C41	C	0.12037		0.7774	0.2822	0.01267	Uiso	1	0.052422
C42	C	0.29997		0.6492	0.0649	0.01267	Uiso	1	-0.126309
C43	C	0.39907		0.5522	0.1099	0.01267	Uiso	1	0.0356
C44	C	0.52327		0.5113	0.0549	0.01267	Uiso	1	0.563121
C45	C	0.34937		0.4938	0.1446	0.01267	Uiso	1	-0.511233
C46	C	0.98003		0.4484	0.1534	0.01267	Uiso	1	0.053411
C47	C	0.01393		0.4218	0.213	0.01267	Uiso	1	-0.229742
C48	C	0.93023		0.4404	0.2817	0.01267	Uiso	1	0.118211
C49	C	0.81563		0.48	0.2846	0.01267	Uiso	1	-0.211423
C50	C	0.78703		0.5048	0.2226	0.01267	Uiso	1	0.051483
C51	C	0.96663		0.4157	0.3508	0.01267	Uiso	1	-0.125834
C52	C	0.06573		0.5577	0.4478	0.01267	Uiso	1	0.033957
C53	C	0.18993		0.5436	0.4887	0.01267	Uiso	1	0.562558
C54	C	0.01603		0.6508	0.5062	0.01267	Uiso	1	-0.510127
N1	N	0.13	0.056	0.4938	0.01267	Uiso	1	-0.292102	
N2	N	0.0393	0.3315	0.4893	0.01267	Uiso	1	-0.173982	
N3	N	0.79667		0.4378	0.944	0.01267	Uiso	1	-0.291531
N4	N	0.70597		0.1578	0.6685	0.01267	Uiso	1	-0.174247
N5	N	0.46333		0.5062	0.5622	0.01267	Uiso	1	-0.290467

N6	N	0.37263	0.5107	0.8422	0.01267	Uiso	1	-0.174334
N7	N	0.63	0.944	0.5062	0.01267	Uiso	1	-0.292054
N8	N	0.5393	0.6685	0.5107	0.01267	Uiso	1	-0.173901
N9	N	0.29667	0.5622	0.056	0.01267	Uiso	1	-0.291486
N10	N	0.20597	0.8422	0.3315	0.01267	Uiso	1	-0.174264
N11	N	0.96333	0.4938	0.4378	0.01267	Uiso	1	-0.290465
N12	N	0.87263	0.4893	0.1578	0.01267	Uiso	1	-0.174309
O1	O	0.3501	0.9737	0.4971	0.01267	Uiso	1	-0.525113
O2	O	0.456	0.0983	0.5799	0.01267	Uiso	1	-0.537905
O3	O	0.01677	0.5234	0.0263	0.01267	Uiso	1	-0.524994
O4	O	0.12267	0.4816	0.9017	0.01267	Uiso	1	-0.538297
O5	O	0.68343	0.5029	0.4766	0.01267	Uiso	1	-0.524894
O6	O	0.78933	0.4201	0.5184	0.01267	Uiso	1	-0.538008
O7	O	0.8501	0.0263	0.5029	0.01267	Uiso	1	-0.524987
O8	O	0.956	0.9017	0.4201	0.01267	Uiso	1	-0.537976
O9	O	0.51677	0.4766	0.9737	0.01267	Uiso	1	-0.525136
O10	O	0.62267	0.5184	0.0983	0.01267	Uiso	1	-0.538301
O11	O	0.18343	0.4971	0.5234	0.01267	Uiso	1	-0.524913
O12	O	0.28933	0.5799	0.4816	0.01267	Uiso	1	-0.537917

```

data_BEPNIV_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            10.1486
_cell_length_b            17.5806
_cell_length_c            17.5806
_cell_angle_alpha        120.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.96018 0.46685 0.92633 0.01267 Uiso  1   0.753288
Zn2  Zn   0.62685 0.45948 0.53315 0.01267 Uiso  1   0.753225
Zn3  Zn   0.29351 0.07367 0.54052 0.01267 Uiso  1   0.753442
Zn4  Zn   0.46018 0.53315 0.07367 0.01267 Uiso  1   0.753336
Zn5  Zn   0.12685 0.54052 0.46685 0.01267 Uiso  1   0.753107
Zn6  Zn   0.79351 0.92633 0.45948 0.01267 Uiso  1   0.753388
H1   H    0.0167 0.8919 0.3265 0.01267 Uiso  1   0.099354
H2   H    0.673 0.78 0.3045 0.01267 Uiso  1   0.104161
H3   H    0.0667 0.7966 0.1862 0.01267 Uiso  1   0.131051
H4   H    0.7228 0.6758 0.1607 0.01267 Uiso  1   0.135261
H5   H    0.952 0.5374 0.2061 0.01267 Uiso  1   0.159453
H6   H    0.0606 0.4682 0.1508 0.01267 Uiso  1   0.147709
H7   H    0.9209 0.4623 0.1102 0.01267 Uiso  1   0.155729
H8   H    0.8709 0.6555 0.021 0.01267 Uiso  1   0.120185
H9   H    0.0211 0.6669 0.0463 0.01267 Uiso  1   0.081754
H10  H    0.0547 0.6197 0.1611 0.01267 Uiso  1   0.073148
H11  H    0.68337 0.4346 0.1081 0.01267 Uiso  1   0.099148
H12  H    0.33967 0.5245 0.22 0.01267 Uiso  1   0.104265
H13  H    0.73337 0.3896 0.2034 0.01267 Uiso  1   0.130927
H14  H    0.38947 0.4849 0.3242 0.01267 Uiso  1   0.135226
H15  H    0.61867 0.6687 0.4626 0.01267 Uiso  1   0.159265
H16  H    0.72727 0.6826 0.5318 0.01267 Uiso  1   0.147822
H17  H    0.58757 0.6479 0.5377 0.01267 Uiso  1   0.155674
H18  H    0.53757 0.3655 0.3445 0.01267 Uiso  1   0.12022
H19  H    0.68777 0.3794 0.3331 0.01267 Uiso  1   0.081855
H20  H    0.72137 0.5414 0.3803 0.01267 Uiso  1   0.07285
H21  H    0.35003 0.6735 0.5654 0.01267 Uiso  1   0.099027

```

H22	H	0.00633	0.6955	0.4755	0.01267	Uiso	1	0.104197
H23	H	0.40003	0.8138	0.6104	0.01267	Uiso	1	0.131107
H24	H	0.05613	0.8393	0.5151	0.01267	Uiso	1	0.135219
H25	H	0.28533	0.7939	0.3313	0.01267	Uiso	1	0.159279
H26	H	0.39393	0.8492	0.3174	0.01267	Uiso	1	0.147813
H27	H	0.25423	0.8898	0.3521	0.01267	Uiso	1	0.155685
H28	H	0.20423	0.979	0.6345	0.01267	Uiso	1	0.120326
H29	H	0.35443	0.9537	0.6206	0.01267	Uiso	1	0.081861
H30	H	0.38803	0.8389	0.4586	0.01267	Uiso	1	0.072686
H31	H	0.5167	0.1081	0.6735	0.01267	Uiso	1	0.099248
H32	H	0.173	0.22	0.6955	0.01267	Uiso	1	0.104176
H33	H	0.5667	0.2034	0.8138	0.01267	Uiso	1	0.131038
H34	H	0.2228	0.3242	0.8393	0.01267	Uiso	1	0.135336
H35	H	0.452	0.4626	0.7939	0.01267	Uiso	1	0.159329
H36	H	0.5606	0.5318	0.8492	0.01267	Uiso	1	0.147736
H37	H	0.4209	0.5377	0.8898	0.01267	Uiso	1	0.155765
H38	H	0.3709	0.3445	0.979	0.01267	Uiso	1	0.120235
H39	H	0.5211	0.3331	0.9537	0.01267	Uiso	1	0.081779
H40	H	0.5547	0.3803	0.8389	0.01267	Uiso	1	0.072901
H41	H	0.18337	0.5654	0.8919	0.01267	Uiso	1	0.099249
H42	H	0.83967	0.4755	0.78	0.01267	Uiso	1	0.104272
H43	H	0.23337	0.6104	0.7966	0.01267	Uiso	1	0.131054
H44	H	0.88947	0.5151	0.6758	0.01267	Uiso	1	0.135193
H45	H	0.11867	0.3313	0.5374	0.01267	Uiso	1	0.159326
H46	H	0.22727	0.3174	0.4682	0.01267	Uiso	1	0.147808
H47	H	0.08757	0.3521	0.4623	0.01267	Uiso	1	0.155664
H48	H	0.03757	0.6345	0.6555	0.01267	Uiso	1	0.12021
H49	H	0.18777	0.6206	0.6669	0.01267	Uiso	1	0.081868
H50	H	0.22137	0.4586	0.6197	0.01267	Uiso	1	0.072961
H51	H	0.85003	0.3265	0.4346	0.01267	Uiso	1	0.099047
H52	H	0.50633	0.3045	0.5245	0.01267	Uiso	1	0.104272
H53	H	0.90003	0.1862	0.3896	0.01267	Uiso	1	0.131035
H54	H	0.55613	0.1607	0.4849	0.01267	Uiso	1	0.135201
H55	H	0.78533	0.2061	0.6687	0.01267	Uiso	1	0.159348
H56	H	0.89393	0.1508	0.6826	0.01267	Uiso	1	0.147819
H57	H	0.75423	0.1102	0.6479	0.01267	Uiso	1	0.155646
H58	H	0.70423	0.021	0.3655	0.01267	Uiso	1	0.120288
H59	H	0.85443	0.0463	0.3794	0.01267	Uiso	1	0.081868
H60	H	0.88803	0.1611	0.5414	0.01267	Uiso	1	0.072813
C1	C	0.9563	0.8481	0.2928	0.01267	Uiso	1	0.072855
C2	C	0.754	0.7825	0.2812	0.01267	Uiso	1	0.060545
C3	C	0.9865	0.7913	0.2087	0.01267	Uiso	1	-0.220333
C4	C	0.9003	0.7249	0.1548	0.01267	Uiso	1	0.194288
C5	C	0.7828	0.7204	0.1934	0.01267	Uiso	1	-0.192184
C6	C	0.9877	0.5016	0.1482	0.01267	Uiso	1	-0.513702
C7	C	0.1598	0.5209	0.0586	0.01267	Uiso	1	0.593109
C8	C	0.9349	0.655	0.0618	0.01267	Uiso	1	-0.162404
C9	C	0.0353	0.5609	0.1122	0.01267	Uiso	1	0.026856
C10	C	0.62297	0.4447	0.1519	0.01267	Uiso	1	0.072989
C11	C	0.42067	0.4987	0.2175	0.01267	Uiso	1	0.06044
C12	C	0.65317	0.4174	0.2087	0.01267	Uiso	1	-0.220123
C13	C	0.56697	0.4299	0.2751	0.01267	Uiso	1	0.194235

C14	C	0.44947	0.473	0.2796	0.01267	Uiso	1	-0.191935
C15	C	0.65437	0.6466	0.4984	0.01267	Uiso	1	-0.513259
C16	C	0.82647	0.5377	0.4791	0.01267	Uiso	1	0.593132
C17	C	0.60157	0.4068	0.345	0.01267	Uiso	1	-0.16268
C18	C	0.70197	0.5513	0.4391	0.01267	Uiso	1	0.026852
C19	C	0.28963	0.7072	0.5553	0.01267	Uiso	1	0.072945
C20	C	0.08733	0.7188	0.5013	0.01267	Uiso	1	0.060402
C21	C	0.31983	0.7913	0.5826	0.01267	Uiso	1	-0.220307
C22	C	0.23363	0.8452	0.5701	0.01267	Uiso	1	0.194384
C23	C	0.11613	0.8066	0.527	0.01267	Uiso	1	-0.192064
C24	C	0.32103	0.8518	0.3534	0.01267	Uiso	1	-0.513519
C25	C	0.49313	0.9414	0.4623	0.01267	Uiso	1	0.59306
C26	C	0.26823	0.9382	0.5932	0.01267	Uiso	1	-0.162559
C27	C	0.36863	0.8878	0.4487	0.01267	Uiso	1	0.027174
C28	C	0.4563	0.1519	0.7072	0.01267	Uiso	1	0.072827
C29	C	0.254	0.2175	0.7188	0.01267	Uiso	1	0.060492
C30	C	0.4865	0.2087	0.7913	0.01267	Uiso	1	-0.220265
C31	C	0.4003	0.2751	0.8452	0.01267	Uiso	1	0.194326
C32	C	0.2828	0.2796	0.8066	0.01267	Uiso	1	-0.192113
C33	C	0.4877	0.4984	0.8518	0.01267	Uiso	1	-0.513674
C34	C	0.6598	0.4791	0.9414	0.01267	Uiso	1	0.592895
C35	C	0.4349	0.345	0.9382	0.01267	Uiso	1	-0.162515
C36	C	0.5353	0.4391	0.8878	0.01267	Uiso	1	0.027083
C37	C	0.12297	0.5553	0.8481	0.01267	Uiso	1	0.073099
C38	C	0.92067	0.5013	0.7825	0.01267	Uiso	1	0.06041
C39	C	0.15317	0.5826	0.7913	0.01267	Uiso	1	-0.220231
C40	C	0.06697	0.5701	0.7249	0.01267	Uiso	1	0.194161
C41	C	0.94947	0.527	0.7204	0.01267	Uiso	1	-0.191953
C42	C	0.15437	0.3534	0.5016	0.01267	Uiso	1	-0.513519
C43	C	0.32647	0.4623	0.5209	0.01267	Uiso	1	0.593255
C44	C	0.10157	0.5932	0.655	0.01267	Uiso	1	-0.162354
C45	C	0.20197	0.4487	0.5609	0.01267	Uiso	1	0.02682
C46	C	0.78963	0.2928	0.4447	0.01267	Uiso	1	0.072952
C47	C	0.58733	0.2812	0.4987	0.01267	Uiso	1	0.060415
C48	C	0.81983	0.2087	0.4174	0.01267	Uiso	1	-0.220294
C49	C	0.73363	0.1548	0.4299	0.01267	Uiso	1	0.19431
C50	C	0.61613	0.1934	0.473	0.01267	Uiso	1	-0.192036
C51	C	0.82103	0.1482	0.6466	0.01267	Uiso	1	-0.513399
C52	C	0.99313	0.0586	0.5377	0.01267	Uiso	1	0.593082
C53	C	0.76823	0.0618	0.4068	0.01267	Uiso	1	-0.16276
C54	C	0.86863	0.1122	0.5513	0.01267	Uiso	1	0.027148
N1	N	0.935	0.5668	0.0558	0.01267	Uiso	1	-0.507781
N2	N	0.84	0.8448	0.3319	0.01267	Uiso	1	-0.216843
N3	N	0.60167	0.489	0.4332	0.01267	Uiso	1	-0.50758
N4	N	0.50667	0.4871	0.1552	0.01267	Uiso	1	-0.216877
N5	N	0.26833	0.9442	0.511	0.01267	Uiso	1	-0.507679
N6	N	0.17333	0.6681	0.5129	0.01267	Uiso	1	-0.216829
N7	N	0.435	0.4332	0.9442	0.01267	Uiso	1	-0.507742
N8	N	0.34	0.1552	0.6681	0.01267	Uiso	1	-0.217014
N9	N	0.10167	0.511	0.5668	0.01267	Uiso	1	-0.507828
N10	N	0.00667	0.5129	0.8448	0.01267	Uiso	1	-0.216896
N11	N	0.76833	0.0558	0.489	0.01267	Uiso	1	-0.507611

N12	N	0.67333	0.3319	0.4871	0.01267	Uiso	1	-0.21672
O1	O	0.1546	0.4799	0.9767	0.01267	Uiso	1	-0.520331
O2	O	0.2636	0.5318	0.1043	0.01267	Uiso	1	-0.575343
O3	O	0.82127	0.4968	0.5201	0.01267	Uiso	1	-0.520096
O4	O	0.93027	0.5725	0.4682	0.01267	Uiso	1	-0.575373
O5	O	0.48793	0.0233	0.5032	0.01267	Uiso	1	-0.520109
O6	O	0.59693	0.8957	0.4275	0.01267	Uiso	1	-0.575553
O7	O	0.6546	0.5201	0.0233	0.01267	Uiso	1	-0.520046
O8	O	0.7636	0.4682	0.8957	0.01267	Uiso	1	-0.575344
O9	O	0.32127	0.5032	0.4799	0.01267	Uiso	1	-0.520103
O10	O	0.43027	0.4275	0.5318	0.01267	Uiso	1	-0.575434
O11	O	0.98793	0.9767	0.4968	0.01267	Uiso	1	-0.520303
O12	O	0.09693	0.1043	0.5725	0.01267	Uiso	1	-0.575453

```

_FIQCEN_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            18.6273
_cell_length_b            18.6273
_cell_length_c            18.6273
_cell_angle_alpha        60.0000
_cell_angle_beta         60.0000
_cell_angle_gamma        60.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Cu1  Cu  0.57057 0  0.42943 0.01267 Uiso  1  0.857982
Cu2  Cu  0  0.57057 0  0.01267 Uiso  1  0.857599
Cu3  Cu  0.42943 0  0.57057 0.01267 Uiso  1  0.857902
Cu4  Cu  0  0.42943 0  0.01267 Uiso  1  0.85725
Cu5  Cu  0.57057 0.42943 0  0.01267 Uiso  1  0.858038
Cu6  Cu  0  1  0.42943 0.01267 Uiso  1  0.857239
Cu7  Cu  0.42943 0.57057 0  0.01267 Uiso  1  0.858066
Cu8  Cu  0  0  0.57057 0.01267 Uiso  1  0.857553
Cu9  Cu  0.57057 1  0  0.01267 Uiso  1  0.857572
Cu10 Cu  0  0.42943 0.57057 0.01267 Uiso  1  0.857975
Cu11 Cu  0.42943 1  0  0.01267 Uiso  1  0.85724
Cu12 Cu  0  0.57057 0.42943 0.01267 Uiso  1  0.857926
H1   H   0.728 0.728 0.5116 0.01267 Uiso  1  0.143037
H2   H   0.728 0.728 0.0324 0.01267 Uiso  1  0.142764
H3   H   0.5116 0.0324 0.728 0.01267 Uiso  1  0.143174
H4   H   0.0324 0.5116 0.728 0.01267 Uiso  1  0.143157
H5   H   0.728 0.5116 0.0324 0.01267 Uiso  1  0.143044
H6   H   0.728 0.0324 0.5116 0.01267 Uiso  1  0.142885
H7   H   0.5116 0.728 0.728 0.01267 Uiso  1  0.143322
H8   H   0.0324 0.728 0.728 0.01267 Uiso  1  0.142888
H9   H   0.728 0.0324 0.728 0.01267 Uiso  1  0.142879
H10  H   0.728 0.5116 0.728 0.01267 Uiso  1  0.143294
H11  H   0.5116 0.728 0.0324 0.01267 Uiso  1  0.143074
H12  H   0.0324 0.728 0.5116 0.01267 Uiso  1  0.142867
H13  H   0.272 0.272 0.4884 0.01267 Uiso  1  0.143389
H14  H   0.272 0.272 0.9676 0.01267 Uiso  1  0.142756
H15  H   0.9676 0.4884 0.272 0.01267 Uiso  1  0.143036

```

H16	H	0.4884	0.9676	0.272	0.01267	Uiso	1	0.142988
H17	H	0.4884	0.272	0.9676	0.01267	Uiso	1	0.143009
H18	H	0.9676	0.272	0.4884	0.01267	Uiso	1	0.143172
H19	H	0.272	0.4884	0.272	0.01267	Uiso	1	0.1432
H20	H	0.272	0.9676	0.272	0.01267	Uiso	1	0.142789
H21	H	0.9676	0.272	0.272	0.01267	Uiso	1	0.142783
H22	H	0.4884	0.272	0.272	0.01267	Uiso	1	0.14314
H23	H	0.272	0.4884	0.9676	0.01267	Uiso	1	0.143019
H24	H	0.272	0.9676	0.4884	0.01267	Uiso	1	0.143189
C1	C	0.257	0.969	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.008835
C2	C	0.969	0.257	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.008817
C3	C	0.387	0.387	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.008861
C4	C	0.387	0.387	0.969	0.01267	Uiso	1	-0.008943
C5	C	0.257	0.387	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.008872
C6	C	0.969	0.387	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.0089
C7	C	0.387	0.257	0.969	0.01267	Uiso	1	-0.008871
C8	C	0.387	0.969	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.008826
C9	C	0.257	0.387	0.969	0.01267	Uiso	1	-0.008949
C10	C	0.969	0.387	0.257	0.01267	Uiso	1	-0.008884
C11	C	0.387	0.969	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.008927
C12	C	0.387	0.257	0.387	0.01267	Uiso	1	-0.008888
C13	C	0.031	0.743	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.008883
C14	C	0.743	0.031	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.00887
C15	C	0.613	0.613	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.00892
C16	C	0.613	0.613	0.031	0.01267	Uiso	1	-0.00886
C17	C	0.613	0.743	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.008928
C18	C	0.613	0.031	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.008954
C19	C	0.743	0.613	0.031	0.01267	Uiso	1	-0.008782
C20	C	0.031	0.613	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.008857
C21	C	0.613	0.743	0.031	0.01267	Uiso	1	-0.008798
C22	C	0.613	0.031	0.743	0.01267	Uiso	1	-0.008876
C23	C	0.031	0.613	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.008949
C24	C	0.743	0.613	0.613	0.01267	Uiso	1	-0.008942
C25	C	0.5687	0.5687	0.8377	0.01267	Uiso	1	0.592766
C26	C	0.5687	0.5687	0.0249	0.01267	Uiso	1	0.593173
C27	C	0.8377	0.0249	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.593005
C28	C	0.0249	0.8377	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.592969
C29	C	0.5687	0.8377	0.0249	0.01267	Uiso	1	0.59294
C30	C	0.5687	0.0249	0.8377	0.01267	Uiso	1	0.592927
C31	C	0.8377	0.5687	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.592896
C32	C	0.0249	0.5687	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.593165
C33	C	0.5687	0.0249	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.593196
C34	C	0.5687	0.8377	0.5687	0.01267	Uiso	1	0.592872
C35	C	0.8377	0.5687	0.0249	0.01267	Uiso	1	0.593017
C36	C	0.0249	0.5687	0.8377	0.01267	Uiso	1	0.592959
C37	C	0.4313	0.4313	0.1623	0.01267	Uiso	1	0.592899
C38	C	0.4313	0.4313	0.9751	0.01267	Uiso	1	0.593275
C39	C	0.9751	0.1623	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.592934
C40	C	0.1623	0.9751	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.592913
C41	C	0.1623	0.4313	0.9751	0.01267	Uiso	1	0.593132
C42	C	0.9751	0.4313	0.1623	0.01267	Uiso	1	0.593003
C43	C	0.4313	0.1623	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.592861

C44	C	0.4313	0.9751	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.593161
C45	C	0.9751	0.4313	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.593158
C46	C	0.1623	0.4313	0.4313	0.01267	Uiso	1	0.592791
C47	C	0.4313	0.1623	0.9751	0.01267	Uiso	1	0.59305
C48	C	0.4313	0.9751	0.1623	0.01267	Uiso	1	0.593018
C49	C	0.3006	0.9684	0.4304	0.01267	Uiso	1	-0.109469
C50	C	0.9684	0.3006	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.109143
C51	C	0.4304	0.3006	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.10967
C52	C	0.3006	0.4304	0.9684	0.01267	Uiso	1	-0.10934
C53	C	0.3006	0.4304	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.109727
C54	C	0.9684	0.3006	0.4304	0.01267	Uiso	1	-0.109514
C55	C	0.4304	0.3006	0.9684	0.01267	Uiso	1	-0.109338
C56	C	0.3006	0.9684	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.109198
C57	C	0.3006	0.3006	0.9684	0.01267	Uiso	1	-0.109083
C58	C	0.9684	0.4304	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.109414
C59	C	0.4304	0.9684	0.3006	0.01267	Uiso	1	-0.109395
C60	C	0.3006	0.3006	0.4304	0.01267	Uiso	1	-0.1098
C61	C	0.0316	0.6994	0.5696	0.01267	Uiso	1	-0.109221
C62	C	0.6994	0.0316	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.109305
C63	C	0.6994	0.5696	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.109758
C64	C	0.5696	0.6994	0.0316	0.01267	Uiso	1	-0.109428
C65	C	0.5696	0.6994	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.109755
C66	C	0.6994	0.0316	0.5696	0.01267	Uiso	1	-0.109241
C67	C	0.6994	0.5696	0.0316	0.01267	Uiso	1	-0.109418
C68	C	0.0316	0.6994	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.10929
C69	C	0.6994	0.6994	0.0316	0.01267	Uiso	1	-0.109204
C70	C	0.5696	0.0316	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.109487
C71	C	0.0316	0.5696	0.6994	0.01267	Uiso	1	-0.109497
C72	C	0.6994	0.6994	0.5696	0.01267	Uiso	1	-0.109536
O1	O	0.61201	0.49247	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.52348
O2	O	0.49247	0.61201	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523173
O3	O	0.87425	0.02127	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523068
O4	O	0.02127	0.87425	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.523339
O5	O	0.61201	0.87425	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523282
O6	O	0.49247	0.02127	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.523135
O7	O	0.87425	0.61201	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.523668
O8	O	0.02127	0.49247	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523034
O9	O	0.61201	0.02127	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.523292
O10	O	0.49247	0.87425	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523294
O11	O	0.87425	0.49247	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523256
O12	O	0.02127	0.61201	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.523121
O13	O	0.50753	0.38799	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523581
O14	O	0.38799	0.50753	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523184
O15	O	0.97873	0.12575	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523399
O16	O	0.12575	0.97873	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523165
O17	O	0.12575	0.38799	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523298
O18	O	0.97873	0.50753	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523237
O19	O	0.38799	0.12575	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523384
O20	O	0.50753	0.97873	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523313
O21	O	0.97873	0.38799	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523084
O22	O	0.12575	0.50753	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523582
O23	O	0.50753	0.12575	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523311

O24	O	0.38799	0.97873	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523205
O25	O	0.38799	0.50753	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523551
O26	O	0.50753	0.38799	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523255
O27	O	0.12575	0.97873	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523269
O28	O	0.97873	0.12575	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523079
O29	O	0.38799	0.12575	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523218
O30	O	0.50753	0.97873	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523298
O31	O	0.12575	0.38799	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523439
O32	O	0.97873	0.50753	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523296
O33	O	0.38799	0.97873	0.50753	0.01267	Uiso	1	-0.523023
O34	O	0.50753	0.12575	0.38799	0.01267	Uiso	1	-0.523667
O35	O	0.12575	0.50753	0.97873	0.01267	Uiso	1	-0.523284
O36	O	0.97873	0.38799	0.12575	0.01267	Uiso	1	-0.523224
O37	O	0.49247	0.61201	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.523365
O38	O	0.61201	0.49247	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523245
O39	O	0.02127	0.87425	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523124
O40	O	0.87425	0.02127	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.523451
O41	O	0.87425	0.61201	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523246
O42	O	0.02127	0.49247	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.523215
O43	O	0.61201	0.87425	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.52372
O44	O	0.49247	0.02127	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523034
O45	O	0.02127	0.61201	0.49247	0.01267	Uiso	1	-0.523252
O46	O	0.87425	0.49247	0.61201	0.01267	Uiso	1	-0.523385
O47	O	0.49247	0.87425	0.02127	0.01267	Uiso	1	-0.523164
O48	O	0.61201	0.02127	0.87425	0.01267	Uiso	1	-0.523168

```

data_BEYSEF_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            15.8189
_cell_length_b            15.8189
_cell_length_c            15.8189
_cell_angle_alpha        100.8450
_cell_angle_beta         113.9490
_cell_angle_gamma        113.9490
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Co1  Co   0.49315    0.59117    0.0228 0.01267    Uiso  1    0.503691
Co2  Co   0.00685    0.02965    0.09802 0.01267    Uiso  1    0.50342
Co3  Co   0.43163    0.0228 0.02965    0.01267    Uiso  1    0.504092
Co4  Co   0.06837    0.09802    0.59117 0.01267    Uiso  1    0.503988
Co5  Co   0.50685    0.40883    0.9772 0.01267    Uiso  1    0.503708
Co6  Co   0.99315    0.97035    0.90198 0.01267    Uiso  1    0.503489
Co7  Co   0.56837    0.9772 0.97035    0.01267    Uiso  1    0.504369
Co8  Co   0.93163    0.90198    0.40883 0.01267    Uiso  1    0.503913
H1   H    0.5852 0.7858 0.9972 0.01267    Uiso  1    0.093666
H2   H    0.5245 0.5213 0.7318 0.01267    Uiso  1    0.143294
H3   H    0.6449 0.554 0.8075 0.01267    Uiso  1    0.122978
H4   H    0.6452 0.6835 0.7597 0.01267    Uiso  1    0.150456
H5   H    0.6933 0.7221 0.8772 0.01267    Uiso  1    0.15165
H6   H    0.5725 0.6894 0.8017 0.01267    Uiso  1    0.155692
H7   H    0.3019 0.8888 0.1079 0.01267    Uiso  1    0.073008
H8   H    0.2922 0.6229 0.1485 0.01267    Uiso  1    0.354964
H9   H    0.3648 0.6057 0.1203 0.01267    Uiso  1    0.351444
H10  H    0.9148 0.912 0.2006 0.01267    Uiso  1    0.093928
H11  H    0.9755 0.7073 0.9968 0.01267    Uiso  1    0.142738
H12  H    0.8551 0.6626 0.9091 0.01267    Uiso  1    0.123279
H13  H    0.8548 0.6145 0.0383 0.01267    Uiso  1    0.150417
H14  H    0.8067 0.6839 0.0288 0.01267    Uiso  1    0.151711
H15  H    0.9275 0.7292 0.1169 0.01267    Uiso  1    0.155826
H16  H    0.1981 0.306 0.5869 0.01267    Uiso  1    0.073143
H17  H    0.2078 0.3563 0.3307 0.01267    Uiso  1    0.355256

```

H18	H	0.1352	0.2555	0.2409	0.01267	Uiso	1	0.351821
H19	H	0.2114	0.9972	0.912	0.01267	Uiso	1	0.093881
H20	H	0.2105	0.7318	0.7073	0.01267	Uiso	1	0.14282
H21	H	0.2535	0.8075	0.6626	0.01267	Uiso	1	0.123009
H22	H	0.0762	0.7597	0.6145	0.01267	Uiso	1	0.150708
H23	H	0.1551	0.8772	0.6839	0.01267	Uiso	1	0.151776
H24	H	0.1123	0.8017	0.7292	0.01267	Uiso	1	0.155561
H25	H	0.2191	0.1079	0.306	0.01267	Uiso	1	0.072911
H26	H	0.5256	0.1485	0.3563	0.01267	Uiso	1	0.355057
H27	H	0.5146	0.1203	0.2555	0.01267	Uiso	1	0.364889
H28	H	0.2886	0.2006	0.7858	0.01267	Uiso	1	0.09373
H29	H	0.2895	0.9968	0.5213	0.01267	Uiso	1	0.142942
H30	H	0.2465	0.9091	0.554	0.01267	Uiso	1	0.123058
H31	H	0.4238	0.0383	0.6835	0.01267	Uiso	1	0.150344
H32	H	0.3449	0.0288	0.7221	0.01267	Uiso	1	0.151656
H33	H	0.3877	0.1169	0.6894	0.01267	Uiso	1	0.155691
H34	H	0.2809	0.5869	0.8888	0.01267	Uiso	1	0.073076
H35	H	0.9744	0.3307	0.6229	0.01267	Uiso	1	0.354919
H36	H	0.9854	0.2409	0.6057	0.01267	Uiso	1	0.365146
H37	H	0.4148	0.2142	0.0028	0.01267	Uiso	1	0.093805
H38	H	0.4755	0.4787	0.2682	0.01267	Uiso	1	0.143076
H39	H	0.3551	0.446	0.1925	0.01267	Uiso	1	0.123008
H40	H	0.3548	0.3165	0.2403	0.01267	Uiso	1	0.150398
H41	H	0.3067	0.2779	0.1228	0.01267	Uiso	1	0.151904
H42	H	0.4275	0.3106	0.1983	0.01267	Uiso	1	0.155578
H43	H	0.6981	0.1112	0.8921	0.01267	Uiso	1	0.072895
H44	H	0.7078	0.3771	0.8515	0.01267	Uiso	1	0.35478
H45	H	0.6352	0.3943	0.8797	0.01267	Uiso	1	0.364886
H46	H	0.0852	0.088	0.7994	0.01267	Uiso	1	0.093948
H47	H	0.0245	0.2927	0.0032	0.01267	Uiso	1	0.142947
H48	H	0.1449	0.3374	0.0909	0.01267	Uiso	1	0.123189
H49	H	0.1452	0.3855	0.9617	0.01267	Uiso	1	0.150487
H50	H	0.1933	0.3161	0.9712	0.01267	Uiso	1	0.15145
H51	H	0.0725	0.2708	0.8831	0.01267	Uiso	1	0.155846
H52	H	0.8019	0.694	0.4131	0.01267	Uiso	1	0.073163
H53	H	0.7922	0.6437	0.6693	0.01267	Uiso	1	0.355166
H54	H	0.8648	0.7445	0.7591	0.01267	Uiso	1	0.351797
H55	H	0.7886	0.0028	0.088	0.01267	Uiso	1	0.093884
H56	H	0.7895	0.2682	0.2927	0.01267	Uiso	1	0.142938
H57	H	0.7465	0.1925	0.3374	0.01267	Uiso	1	0.123057
H58	H	0.9238	0.2403	0.3855	0.01267	Uiso	1	0.150655
H59	H	0.8449	0.1228	0.3161	0.01267	Uiso	1	0.151702
H60	H	0.8877	0.1983	0.2708	0.01267	Uiso	1	0.15561
H61	H	0.7809	0.8921	0.694	0.01267	Uiso	1	0.072918
H62	H	0.4744	0.8515	0.6437	0.01267	Uiso	1	0.355247
H63	H	0.4854	0.8797	0.7445	0.01267	Uiso	1	0.351563
H64	H	0.7114	0.7994	0.2142	0.01267	Uiso	1	0.093914
H65	H	0.7105	0.0032	0.4787	0.01267	Uiso	1	0.142914
H66	H	0.7535	0.0909	0.446	0.01267	Uiso	1	0.123131
H67	H	0.5762	0.9617	0.3165	0.01267	Uiso	1	0.150593
H68	H	0.6551	0.9712	0.2779	0.01267	Uiso	1	0.151697
H69	H	0.6123	0.8831	0.3106	0.01267	Uiso	1	0.15554

H70	H	0.7191	0.4131	0.1112	0.01267	Uiso	1	0.073004	
H71	H	0.0256	0.6693	0.3771	0.01267	Uiso	1	0.354753	
H72	H	0.0146	0.7591	0.3943	0.01267	Uiso	1	0.365185	
C1	C	0.53945	0.79004	0.01827	0.01267	Uiso	1	0.174482	
C2	C	0.43175	0.75727	0.07202	0.01267	Uiso	1	-0.063439	
C3	C	0.36086	0.72226	0.1066	0.01267	Uiso	1	0.42314	
C4	C	0.55848	0.54337	0.87497	0.01267	Uiso	1	0.649119	
C5	C	0.58829	0.56751	0.80022	0.01267	Uiso	1	-0.284193	
C6	C	0.6284	0.6754	0.8106	0.01267	Uiso	1	-0.449278	
C7	C	0.44964	0.84354	0.0544	0.01267	Uiso	1	0.266658	
C8	C	0.33712	0.85621	0.09907	0.01267	Uiso	1	0.221029	
C9	C	0.96055	0.97882	0.25059	0.01267	Uiso	1	0.174079	
C10	C	0.06825	0.14027	0.32552	0.01267	Uiso	1	-0.063443	
C11	C	0.13914	0.24574	0.3614	0.01267	Uiso	1	0.423221	
C12	C	0.94152	0.81649	0.98489	0.01267	Uiso	1	0.64867	
C13	C	0.91171	0.71193	0.97922	0.01267	Uiso	1	-0.28402	
C14	C	0.8716	0.6822	0.047	0.01267	Uiso	1	-0.449435	
C15	C	0.05036	0.10476	0.3939	0.01267	Uiso	1	0.266544	
C16	C	0.16288	0.26195	0.51909	0.01267	Uiso	1	0.220456	
C17	C	0.22823	0.01827	0.97882	0.01267	Uiso	1	0.174311	
C18	C	0.31475	0.07202	0.14027	0.01267	Uiso	1	-0.063299	
C19	C	0.38434	0.1066	0.24574	0.01267	Uiso	1	0.422833	
C20	C	0.3316	0.87497	0.81649	0.01267	Uiso	1	0.649024	
C21	C	0.23271	0.80022	0.71193	0.01267	Uiso	1	-0.283895	
C22	C	0.1352	0.8106	0.6822	0.01267	Uiso	1	-0.449429	
C23	C	0.21086	0.0544	0.10476	0.01267	Uiso	1	0.2664	
C24	C	0.24286	0.09907	0.26195	0.01267	Uiso	1	0.22072	
C25	C	0.27177	0.25059	0.79004	0.01267	Uiso	1	0.174143	
C26	C	0.18525	0.32552	0.75727	0.01267	Uiso	1	-0.063586	
C27	C	0.11566	0.3614	0.72226	0.01267	Uiso	1	0.422877	
C28	C	0.1684	0.98489	0.54337	0.01267	Uiso	1	0.648946	
C29	C	0.26729	0.97922	0.56751	0.01267	Uiso	1	-0.283897	
C30	C	0.3648	0.047	0.6754	0.01267	Uiso	1	-0.449324	
C31	C	0.28914	0.3939	0.84354	0.01267	Uiso	1	0.266593	
C32	C	0.25714	0.51909	0.85621	0.01267	Uiso	1	0.220728	
C33	C	0.46055	0.20996	0.98173	0.01267	Uiso	1	0.174486	
C34	C	0.56825	0.24273	0.92798	0.01267	Uiso	1	-0.063534	
C35	C	0.63914	0.27774	0.8934	0.01267	Uiso	1	0.422884	
C36	C	0.44152	0.45663	0.12503	0.01267	Uiso	1	0.649005	
C37	C	0.41171	0.43249	0.19978	0.01267	Uiso	1	-0.284012	
C38	C	0.3716	0.3246	0.1894	0.01267	Uiso	1	-0.4495	
C39	C	0.55036	0.15646	0.9456	0.01267	Uiso	1	0.266636	
C40	C	0.66288	0.14379	0.90093	0.01267	Uiso	1	0.220823	
C41	C	0.03945	0.02118	0.74941	0.01267	Uiso	1	0.174152	
C42	C	0.93175	0.85973	0.67448	0.01267	Uiso	1	-0.06334	
C43	C	0.86086	0.75426	0.6386	0.01267	Uiso	1	0.423235	
C44	C	0.05848	0.18351	0.01511	0.01267	Uiso	1	0.648664	
C45	C	0.08829	0.28807	0.02078	0.01267	Uiso	1	-0.284111	
C46	C	0.1284	0.3178	0.953	0.01267	Uiso	1	-0.449323	
C47	C	0.94964	0.89524	0.6061	0.01267	Uiso	1	0.266576	
C48	C	0.83712	0.73805	0.48091	0.01267	Uiso	1	0.220536	
C49	C	0.77177	0.98173	0.02118	0.01267	Uiso	1	0.174245	

C50	C	0.68525	0.92798	0.85973	0.01267	Uiso	1	-0.063189
C51	C	0.61566	0.8934	0.75426	0.01267	Uiso	1	0.423133
C52	C	0.6684	0.12503	0.18351	0.01267	Uiso	1	0.648666
C53	C	0.76729	0.19978	0.28807	0.01267	Uiso	1	-0.283652
C54	C	0.8648	0.1894	0.3178	0.01267	Uiso	1	-0.449601
C55	C	0.78914	0.9456	0.89524	0.01267	Uiso	1	0.266592
C56	C	0.75714	0.90093	0.73805	0.01267	Uiso	1	0.22071
C57	C	0.72823	0.74941	0.20996	0.01267	Uiso	1	0.174284
C58	C	0.81475	0.67448	0.24273	0.01267	Uiso	1	-0.063648
C59	C	0.88434	0.6386	0.27774	0.01267	Uiso	1	0.422861
C60	C	0.8316	0.01511	0.45663	0.01267	Uiso	1	0.649274
C61	C	0.73271	0.02078	0.43249	0.01267	Uiso	1	-0.283983
C62	C	0.6352	0.953	0.3246	0.01267	Uiso	1	-0.449201
C63	C	0.71086	0.6061	0.15646	0.01267	Uiso	1	0.26649
C64	C	0.74286	0.48091	0.14379	0.01267	Uiso	1	0.220792
N1	N	0.49048	0.7223	0.0479	0.01267	Uiso	1	-0.284754
N2	N	0.33635	0.64055	0.12762	0.01267	Uiso	1	-0.681794
N3	N	0.31418	0.77498	0.11926	0.01267	Uiso	1	-0.436083
N4	N	0.51901	0.86503	0.02044	0.01267	Uiso	1	-0.324864
N5	N	0.4038	0.89723	0.06783	0.01267	Uiso	1	-0.292362
N6	N	0.00952	0.05742	0.23182	0.01267	Uiso	1	-0.28434
N7	N	0.16365	0.29127	0.3042	0.01267	Uiso	1	-0.682355
N8	N	0.18582	0.30508	0.4608	0.01267	Uiso	1	-0.435934
N9	N	0.98099	0.00143	0.34602	0.01267	Uiso	1	-0.324958
N10	N	0.0962	0.16403	0.49343	0.01267	Uiso	1	-0.292531
N11	N	0.3256	0.0479	0.05742	0.01267	Uiso	1	-0.284747
N12	N	0.48707	0.12762	0.29127	0.01267	Uiso	1	-0.692093
N13	N	0.34428	0.11926	0.30508	0.01267	Uiso	1	-0.435995
N14	N	0.15541	0.02044	0.00143	0.01267	Uiso	1	-0.324981
N15	N	0.1706	0.06783	0.16403	0.01267	Uiso	1	-0.292446
N16	N	0.1744	0.23182	0.7223	0.01267	Uiso	1	-0.284202
N17	N	0.01293	0.3042	0.64055	0.01267	Uiso	1	-0.692026
N18	N	0.15572	0.4608	0.77498	0.01267	Uiso	1	-0.43606
N19	N	0.34459	0.34602	0.86503	0.01267	Uiso	1	-0.325387
N20	N	0.3294	0.49343	0.89723	0.01267	Uiso	1	-0.292795
N21	N	0.50952	0.2777	0.9521	0.01267	Uiso	1	-0.284415
N22	N	0.66365	0.35945	0.87238	0.01267	Uiso	1	-0.691689
N23	N	0.68582	0.22502	0.88074	0.01267	Uiso	1	-0.436129
N24	N	0.48099	0.13497	0.97956	0.01267	Uiso	1	-0.324959
N25	N	0.5962	0.10277	0.93217	0.01267	Uiso	1	-0.29254
N26	N	0.99048	0.94258	0.76818	0.01267	Uiso	1	-0.284637
N27	N	0.83635	0.70873	0.6958	0.01267	Uiso	1	-0.682349
N28	N	0.81418	0.69492	0.5392	0.01267	Uiso	1	-0.436072
N29	N	0.01901	0.99857	0.65398	0.01267	Uiso	1	-0.324935
N30	N	0.9038	0.83597	0.50657	0.01267	Uiso	1	-0.292489
N31	N	0.6744	0.9521	0.94258	0.01267	Uiso	1	-0.28464
N32	N	0.51293	0.87238	0.70873	0.01267	Uiso	1	-0.681912
N33	N	0.65572	0.88074	0.69492	0.01267	Uiso	1	-0.435865
N34	N	0.84459	0.97956	0.99857	0.01267	Uiso	1	-0.325214
N35	N	0.8294	0.93217	0.83597	0.01267	Uiso	1	-0.292776
N36	N	0.8256	0.76818	0.2777	0.01267	Uiso	1	-0.284331
N37	N	0.98707	0.6958	0.35945	0.01267	Uiso	1	-0.692071

N38	N	0.84428	0.5392	0.22502	0.01267	Uiso	1	-0.436317
N39	N	0.65541	0.65398	0.13497	0.01267	Uiso	1	-0.325292
N40	N	0.6706	0.50657	0.10277	0.01267	Uiso	1	-0.292585
O1	O	0.53633	0.59896	0.91719	0.01267	Uiso	1	-0.488677
O2	O	0.55528	0.46655	0.88933	0.01267	Uiso	1	-0.532084
O3	O	0.96367	0.88086	0.06263	0.01267	Uiso	1	-0.488713
O4	O	0.94472	0.83405	0.91127	0.01267	Uiso	1	-0.528636
O5	O	0.31823	0.91719	0.88086	0.01267	Uiso	1	-0.489191
O6	O	0.42278	0.88933	0.83405	0.01267	Uiso	1	-0.529265
O7	O	0.18177	0.06263	0.59896	0.01267	Uiso	1	-0.488713
O8	O	0.07722	0.91127	0.46655	0.01267	Uiso	1	-0.532504
O9	O	0.46367	0.40104	0.08281	0.01267	Uiso	1	-0.488851
O10	O	0.44472	0.53345	0.11067	0.01267	Uiso	1	-0.528392
O11	O	0.03633	0.11914	0.93737	0.01267	Uiso	1	-0.488657
O12	O	0.05528	0.16595	0.08873	0.01267	Uiso	1	-0.528646
O13	O	0.68177	0.08281	0.11914	0.01267	Uiso	1	-0.489222
O14	O	0.57722	0.11067	0.16595	0.01267	Uiso	1	-0.532304
O15	O	0.81823	0.93737	0.40104	0.01267	Uiso	1	-0.48892
O16	O	0.92278	0.08873	0.53345	0.01267	Uiso	1	-0.532723

```

data_DUPVER_clean
_cell_length_a 14.4022
_cell_length_b 25.92
_cell_length_c 17.4395
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 107.384
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
_symmetry_int_tables_number 1

```

```

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x,y,z'

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge
Zn1 1 0.83466 0.00072 0.1257 Biso 1.00 Zn 0.878223
Zn2 1 0.89769 0.06598 0.31073 Biso 1.00 Zn 0.871029
Zn3 1 0.04064 0.31969 0.77347 Biso 1.00 Zn 0.904714
O1 1 0.9379 0.0707 0.427 Biso 1.00 O -0.498626
O2 1 0.0464 0.24519 0.757 Biso 1.00 O -0.549066
O3 1 0.7624 0.4351 0.4838 Biso 1.00 O -0.479157
O4 1 0.9232 0.3584 0.7441 Biso 1.00 O -0.576494
O5 1 0.5127 0.4171 0.7793 Biso 1.00 O -0.515085
C1 1 0.9442 0.1176 0.4499 Biso 1.00 C 0.555184
C2 1 0.9791 0.1754 0.5685 Biso 1.00 C -0.116104
H1 1 0.9536 0.2026 0.5337 Biso 1.00 H 0.133095
O6 1 0.9725 0.2729 0.6334 Biso 1.00 O -0.537546
O7 1 0.9194 0.1541 0.4027 Biso 1.00 O -0.448847
O8 1 0.4363 0.445 0.6569 Biso 1.00 O -0.573469
C3 1 0.6055 0.4379 0.6109 Biso 1.00 C -0.113422
H2 1 0.5534 0.4562 0.5776 Biso 1.00 H 0.138596
C4 1 0.5995 0.4183 0.6836 Biso 1.00 C -0.02065
O9 1 0.6372 0.4842 0.4744 Biso 1.00 O -0.497268
C5 1 0.0103 0.2377 0.6811 Biso 1.00 C 0.575311
C6 1 0.0208 0.0859 0.59 Biso 1.00 C -0.105345
H3 1 0.0219 0.0527 0.57 Biso 1.00 H 0.136349
C7 1 0.9824 0.1256 0.5377 Biso 1.00 C -0.023803
C8 1 0.0536 0.144 0.7039 Biso 1.00 C -0.108596
H4 1 0.0767 0.1497 0.7589 Biso 1.00 H 0.141978
C9 1 0.7642 0.4033 0.6385 Biso 1.00 C -0.12623

```

H5	1	0.8195	0.3974	0.6227	Biso	1.00	H	0.111331
C10	1	0.0139	0.1843	0.6511	Biso	1.00	C	-0.019363
C11	1	0.0578	0.0945	0.6719	Biso	1.00	C	-0.026866
C12	1	0.6782	0.3916	0.7334	Biso	1.00	C	-0.114982
H6	1	0.6742	0.3783	0.7818	Biso	1.00	H	0.136397
C13	1	0.6885	0.4303	0.5881	Biso	1.00	C	-0.015201
C14	1	0.5103	0.4276	0.7088	Biso	1.00	C	0.60772
C15	1	0.7613	0.3846	0.7122	Biso	1.00	C	-0.013142
O10	1	0.8395	0.3289	0.8195	Biso	1.00	O	-0.433867
C16	1	0.6971	0.4507	0.5094	Biso	1.00	C	0.568585
C17	1	0.8476	0.3541	0.7654	Biso	1.00	C	0.598954
N1	1	0.7679	0.0905	0.2469	Biso	1.00	N	-0.375469
N2	1	0.714	0.0393	0.1244	Biso	1.00	N	-0.351169
N3	1	0.6313	0.1386	0.2291	Biso	1.00	N	-0.316724
N4	1	0.4634	0.1261	0.0708	Biso	1.00	N	-0.591975
H7	1	0.4183	0.1192	0.0271	Biso	1.00	H	0.370353
H8	1	0.4564	0.1514	0.1006	Biso	1.00	H	0.35749
C18	1	0.6201	0.1057	0.1641	Biso	1.00	C	-0.039891
C19	1	0.7038	0.0759	0.1754	Biso	1.00	C	0.306594
N5	1	0.5509	0.0591	0.0436	Biso	1.00	N	-0.377262
C20	1	0.6331	0.0332	0.0611	Biso	1.00	C	0.244534
H9	1	0.6361	0.0073	0.0251	Biso	1.00	H	0.079615
C21	1	0.7202	0.1272	0.2763	Biso	1.00	C	0.18447
H10	1	0.7476	0.1431	0.3257	Biso	1.00	H	0.101783
C22	1	0.5427	0.0982	0.0919	Biso	1.00	C	0.432716
C23	1	0.0995	0.0502	0.727	Biso	1.00	C	0.611875
O11	1	0.1177	0.0566	0.8011	Biso	1.00	O	-0.528647
O12	1	0.1158	0.01	0.6951	Biso	1.00	O	-0.555074
Zn4	1	0.66534	0.50072	0.3743	Biso	1.00	Zn	0.878399
Zn5	1	0.60231	0.56598	0.18927	Biso	1.00	Zn	0.870618
Zn6	1	0.45936	0.81969	0.72653	Biso	1.00	Zn	0.904766
O13	1	0.5621	0.5707	0.073	Biso	1.00	O	-0.501545
O14	1	0.4536	0.74519	0.743	Biso	1.00	O	-0.54941
O15	1	0.7376	0.9351	0.0162	Biso	1.00	O	-0.496567
O16	1	0.5768	0.8584	0.7559	Biso	1.00	O	-0.57231
O17	1	0.9873	0.9171	0.7207	Biso	1.00	O	-0.515829
C24	1	0.5558	0.6176	0.0501	Biso	1.00	C	0.555925
C25	1	0.5209	0.6754	0.9315	Biso	1.00	C	-0.116462
H11	1	0.5464	0.7026	0.9663	Biso	1.00	H	0.132976
O18	1	0.5275	0.7729	0.8666	Biso	1.00	O	-0.534775
O19	1	0.5806	0.6541	0.0973	Biso	1.00	O	-0.45301
O20	1	0.0637	0.945	0.8431	Biso	1.00	O	-0.571246
C26	1	0.8945	0.9379	0.8891	Biso	1.00	C	-0.112571
H12	1	0.9466	0.9562	0.9224	Biso	1.00	H	0.138824
C27	1	0.9005	0.9183	0.8164	Biso	1.00	C	-0.019901
O21	1	0.8628	0.9842	0.0256	Biso	1.00	O	-0.498817
C28	1	0.4897	0.7377	0.8189	Biso	1.00	C	0.574912
C29	1	0.4792	0.5859	0.91	Biso	1.00	C	-0.10511
H13	1	0.4781	0.5527	0.93	Biso	1.00	H	0.136301
C30	1	0.5176	0.6256	0.9623	Biso	1.00	C	-0.023235
C31	1	0.4464	0.644	0.7961	Biso	1.00	C	-0.108571
H14	1	0.4233	0.6497	0.7411	Biso	1.00	H	0.141948

C32	1	0.7358	0.9033	0.8615	Biso	1.00	C	-0.124194	
H15	1	0.6805	0.8974	0.8773	Biso	1.00	H	0.111965	
C33	1	0.4861	0.6843	0.8489	Biso	1.00	C	-0.019284	
C34	1	0.4422	0.5945	0.8281	Biso	1.00	C	-0.028421	
C35	1	0.8218	0.8916	0.7666	Biso	1.00	C	-0.115942	
H16	1	0.8258	0.8783	0.7182	Biso	1.00	H	0.13654	
C36	1	0.8115	0.9303	0.9119	Biso	1.00	C	-0.01361	
C37	1	0.9897	0.9276	0.7912	Biso	1.00	C	0.607286	
C38	1	0.7387	0.8846	0.7878	Biso	1.00	C	-0.01339	
O22	1	0.6605	0.8289	0.6805	Biso	1.00	O	-0.419729	
C39	1	0.8029	0.9507	0.9906	Biso	1.00	C	0.569965	
C40	1	0.6524	0.8541	0.7346	Biso	1.00	C	0.597532	
N6	1	0.7321	0.5905	0.2531	Biso	1.00	N	-0.375592	
N7	1	0.786	0.5393	0.3756	Biso	1.00	N	-0.352905	
N8	1	0.8687	0.6386	0.2709	Biso	1.00	N	-0.317048	
N9	1	0.0366	0.6261	0.4292	Biso	1.00	N	-0.593158	
H17	1	0.0817	0.6192	0.4729	Biso	1.00	H	0.370281	
H18	1	0.0436	0.6514	0.3994	Biso	1.00	H	0.357549	
C41	1	0.8799	0.6057	0.3359	Biso	1.00	C	-0.040617	
C42	1	0.7962	0.5759	0.3246	Biso	1.00	C	0.306421	
N10	1	0.9491	0.5591	0.4564	Biso	1.00	N	-0.377032	
C43	1	0.8669	0.5332	0.4389	Biso	1.00	C	0.243504	
H19	1	0.8639	0.5073	0.4749	Biso	1.00	H	0.07883	
C44	1	0.7798	0.6272	0.2237	Biso	1.00	C	0.184844	
H20	1	0.7524	0.6431	0.1743	Biso	1.00	H	0.10204	
C45	1	0.9573	0.5982	0.4081	Biso	1.00	C	0.433081	
C46	1	0.4005	0.5502	0.773	Biso	1.00	C	0.611114	
O23	1	0.3823	0.5566	0.6989	Biso	1.00	O	-0.52712	
O24	1	0.3842	0.51	0.8049	Biso	1.00	O	-0.55396	
Zn7	1	0.16534		0.99928	0.8743	Biso	1.00	Zn	0.87776
Zn8	1	0.10231		0.93402	0.68927	Biso	1.00	Zn	0.870574
Zn9	1	0.95936		0.68031	0.22653	Biso	1.00	Zn	0.905304
O25	1	0.0621	0.9293	0.573	Biso	1.00	O	-0.501015	
O26	1	0.9536	0.75481		0.243	Biso	1.00	O	-0.551583
O27	1	0.2376	0.5649	0.5162	Biso	1.00	O	-0.484254	
O28	1	0.0768	0.6416	0.2559	Biso	1.00	O	-0.572894	
O29	1	0.4873	0.5829	0.2207	Biso	1.00	O	-0.513715	
C47	1	0.0558	0.8824	0.5501	Biso	1.00	C	0.55544	
C48	1	0.0209	0.8246	0.4315	Biso	1.00	C	-0.116686	
H21	1	0.0464	0.7974	0.4663	Biso	1.00	H	0.133054	
O30	1	0.0275	0.7271	0.3666	Biso	1.00	O	-0.543368	
O31	1	0.0806	0.8459	0.5973	Biso	1.00	O	-0.446109	
O32	1	0.5637	0.555	0.3431	Biso	1.00	O	-0.567413	
C49	1	0.3945	0.5621	0.3891	Biso	1.00	C	-0.110173	
H22	1	0.4466	0.5438	0.4224	Biso	1.00	H	0.139185	
C50	1	0.4005	0.5817	0.3164	Biso	1.00	C	-0.020413	
O33	1	0.3628	0.5158	0.5256	Biso	1.00	O	-0.496658	
C51	1	0.9897	0.7623	0.3189	Biso	1.00	C	0.575637	
C52	1	0.9792	0.9141	0.41	Biso	1.00	C	-0.105414	
H23	1	0.9781	0.9473	0.43	Biso	1.00	H	0.13589	
C53	1	0.0176	0.8744	0.4623	Biso	1.00	C	-0.024075	
C54	1	0.9464	0.856	0.2961	Biso	1.00	C	-0.108845	

H24	1	0.9233	0.8503	0.2411	Biso	1.00	H	0.142324
C55	1	0.2358	0.5967	0.3615	Biso	1.00	C	-0.125458
H25	1	0.1805	0.6026	0.3773	Biso	1.00	H	0.111923
C56	1	0.9861	0.8157	0.3489	Biso	1.00	C	-0.01867
C57	1	0.9422	0.9055	0.3281	Biso	1.00	C	-0.027126
C58	1	0.3218	0.6084	0.2666	Biso	1.00	C	-0.114639
H26	1	0.3258	0.6217	0.2182	Biso	1.00	H	0.13676
C59	1	0.3115	0.5697	0.4119	Biso	1.00	C	-0.013208
C60	1	0.4897	0.5724	0.2912	Biso	1.00	C	0.60629
C61	1	0.2387	0.6154	0.2878	Biso	1.00	C	-0.01169
O34	1	0.1605	0.6711	0.1805	Biso	1.00	O	-0.419808
C62	1	0.3029	0.5493	0.4906	Biso	1.00	C	0.568712
C63	1	0.1524	0.6459	0.2346	Biso	1.00	C	0.598112
N11	1	0.2321	0.9095	0.7531	Biso	1.00	N	-0.375842
N12	1	0.286	0.9607	0.8756	Biso	1.00	N	-0.354236
N13	1	0.3687	0.8614	0.7709	Biso	1.00	N	-0.317296
N14	1	0.5366	0.8739	0.9292	Biso	1.00	N	-0.596923
H27	1	0.5817	0.8808	0.9729	Biso	1.00	H	0.370712
H28	1	0.5436	0.8486	0.8994	Biso	1.00	H	0.357265
C64	1	0.3799	0.8943	0.8359	Biso	1.00	C	-0.041794
C65	1	0.2962	0.9241	0.8246	Biso	1.00	C	0.306327
N15	1	0.4491	0.9409	0.9564	Biso	1.00	N	-0.377955
C66	1	0.3669	0.9668	0.9389	Biso	1.00	C	0.242717
H29	1	0.3639	0.9927	0.9749	Biso	1.00	H	0.078366
C67	1	0.2798	0.8728	0.7237	Biso	1.00	C	0.183025
H30	1	0.2524	0.8569	0.6743	Biso	1.00	H	0.101589
C68	1	0.4573	0.9018	0.9081	Biso	1.00	C	0.433587
C69	1	0.9005	0.9498	0.273	Biso	1.00	C	0.611838
O35	1	0.8823	0.9434	0.1989	Biso	1.00	O	-0.527168
O36	1	0.8842	0.99	0.3049	Biso	1.00	O	-0.557403
Zn10	1	0.33466	0.49928	0.6257	Biso	1.00	Zn	0.878284
Zn11	1	0.39769	0.43402	0.81073	Biso	1.00	Zn	0.870013
Zn12	1	0.54064	0.18031	0.27347	Biso	1.00	Zn	0.904623
O37	1	0.4379	0.4293	0.927	Biso	1.00	O	-0.500365
O38	1	0.5464	0.25481	0.257	Biso	1.00	O	-0.550689
O39	1	0.2624	0.0649	0.9838	Biso	1.00	O	-0.481101
O40	1	0.4232	0.1416	0.2441	Biso	1.00	O	-0.573891
O41	1	0.0127	0.0829	0.2793	Biso	1.00	O	-0.51604
C70	1	0.4442	0.3824	0.9499	Biso	1.00	C	0.554885
C71	1	0.4791	0.3246	0.0685	Biso	1.00	C	-0.117226
H31	1	0.4536	0.2974	0.0337	Biso	1.00	H	0.133218
O42	1	0.4725	0.2271	0.1334	Biso	1.00	O	-0.541702
O43	1	0.4194	0.3459	0.9027	Biso	1.00	O	-0.438943
O44	1	0.9363	0.055	0.1569	Biso	1.00	O	-0.572213
C72	1	0.1055	0.0621	0.1109	Biso	1.00	C	-0.110648
H32	1	0.0534	0.0438	0.0776	Biso	1.00	H	0.13921
C73	1	0.0995	0.0817	0.1836	Biso	1.00	C	-0.021001
O45	1	0.1372	0.0158	0.9744	Biso	1.00	O	-0.497651
C74	1	0.5103	0.2623	0.1811	Biso	1.00	C	0.575449
C75	1	0.5208	0.4141	0.09	Biso	1.00	C	-0.104692
H33	1	0.5219	0.4473	0.07	Biso	1.00	H	0.13637
C76	1	0.4824	0.3744	0.0377	Biso	1.00	C	-0.024159

C77	1	0.5536	0.356	0.2039	Biso	1.00	C	-0.108841
H34	1	0.5767	0.3503	0.2589	Biso	1.00	H	0.142205
C78	1	0.2642	0.0967	0.1385	Biso	1.00	C	-0.127971
H35	1	0.3195	0.1026	0.1227	Biso	1.00	H	0.11159
C79	1	0.5139	0.3157	0.1511	Biso	1.00	C	-0.018273
C80	1	0.5578	0.4055	0.1719	Biso	1.00	C	-0.027465
C81	1	0.1782	0.1084	0.2334	Biso	1.00	C	-0.1136
H36	1	0.1742	0.1217	0.2818	Biso	1.00	H	0.136426
C82	1	0.1885	0.0697	0.0881	Biso	1.00	C	-0.012757
C83	1	0.0103	0.0724	0.2088	Biso	1.00	C	0.607216
C84	1	0.2613	0.1154	0.2122	Biso	1.00	C	-0.012457
O46	1	0.3395	0.1711	0.3195	Biso	1.00	O	-0.42477
C85	1	0.1971	0.0493	0.0094	Biso	1.00	C	0.568599
C86	1	0.3476	0.1459	0.2654	Biso	1.00	C	0.598045
N16	1	0.2679	0.4095	0.7469	Biso	1.00	N	-0.376633
N17	1	0.214	0.4607	0.6244	Biso	1.00	N	-0.353323
N18	1	0.1313	0.3614	0.7291	Biso	1.00	N	-0.31679
N19	1	0.9634	0.3739	0.5708	Biso	1.00	N	-0.593304
H37	1	0.9183	0.3808	0.5271	Biso	1.00	H	0.370278
H38	1	0.9564	0.3486	0.6006	Biso	1.00	H	0.35782
C87	1	0.1201	0.3943	0.6641	Biso	1.00	C	-0.037453
C88	1	0.2038	0.4241	0.6754	Biso	1.00	C	0.307014
N20	1	0.0509	0.4409	0.5436	Biso	1.00	N	-0.37774
C89	1	0.1331	0.4668	0.5611	Biso	1.00	C	0.243789
H39	1	0.1361	0.4927	0.5251	Biso	1.00	H	0.07908
C90	1	0.2202	0.3728	0.7763	Biso	1.00	C	0.184449
H40	1	0.2476	0.3569	0.8257	Biso	1.00	H	0.101524
C91	1	0.0427	0.4018	0.5919	Biso	1.00	C	0.433011
C92	1	0.5995	0.4498	0.227	Biso	1.00	C	0.612074
O47	1	0.6177	0.4434	0.3011	Biso	1.00	O	-0.527272
O48	1	0.6158	0.49	0.1951	Biso	1.00	O	-0.558578

data_IVILEG_clean

_cell_length_a 32.1446
_cell_length_b 32.1446
_cell_length_c 10.9808
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x,y,z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Zn1	1	0.28384	0.71609	0.60755	Biso	1	Zn	0.766
N1	1	0.27538	0.85586	0.8801	Biso	1	N	-0.265
O1	1	0.4185	0.79995	0.0881	Biso	1	O	-0.567
N2	1	0.25632	0.81067	0.7214	Biso	1	N	-0.327
N3	1	0.34388	0.8437	0.0176	Biso	1	N	-0.704
H1	1	0.3275	0.8647	0.0232	Biso	1	H	0.345
H2	1	0.365	0.8417	0.0651	Biso	1	H	0.361
O2	1	0.65682	0.1572	0.6791	Biso	1	O	-0.568
C1	1	0.2452	0.8479	0.7826	Biso	1	C	0.145
H3	1	0.2225	0.8646	0.7639	Biso	1	H	0.116
O3	1	0.6812	0.1816	0.5045	Biso	1	O	-0.573
C2	1	0.6588	0.1556	0.5675	Biso	1	C	0.580
C3	1	0.33529	0.80943	0.9221	Biso	1	C	0.374
C4	1	0.29962	0.82003	0.8576	Biso	1	C	-0.047
C5	1	0.28648	0.79541	0.7609	Biso	1	C	0.344
N4	1	0.30901	0.76018	0.7287	Biso	1	N	-0.349
C6	1	0.34468	0.74957	0.7932	Biso	1	C	0.244
H4	1	0.3598	0.726	0.7716	Biso	1	H	0.123
N5	1	0.35782	0.7742	0.8898	Biso	1	N	-0.337
C7	1	0.5996	0.1111	0.5401	Biso	1	C	-0.112
H5	1	0.5888	0.1241	0.6089	Biso	1	H	0.115
C8	1	0.5759	0.082	0.4773	Biso	1	C	-0.161
H6	1	0.5492	0.0755	0.5041	Biso	1	H	0.114
C9	1	0.592	0.0627	0.3744	Biso	1	C	0.100
C10	1	0.6318	0.0724	0.3343	Biso	1	C	-0.158

H7	1	0.6426	0.0595	0.2654	Biso	1	H	0.116		
C11	1	0.6555	0.1015	0.397	Biso	1	C	-0.115		
H8	1	0.6822	0.1081	0.3702	Biso	1	H	0.107		
C12	1	0.6394	0.1209	0.5	Biso	1	C	-0.036		
O4	1	0.4587	0.7959	0.9286	Biso	1	O	-0.540		
C13	1	0.45	0.8142	0.029	Biso	1	C	0.551		
C14	1	0.4741	0.8472	0.082	Biso	1	C	-0.024		
C15	1	0.4641	0.8633	0.1957	Biso	1	C	-0.108		
H9	1	0.443	0.8513	0.2416	Biso	1	H	0.119		
C16	1	0.4856	0.8975	0.241	Biso	1	C	-0.162		
H10	1	0.4789	0.9083	0.317	Biso	1	H	0.120		
C17	1	0.5172	0.9155	0.1724	Biso	1	C	0.110		
C18	1	0.5272	0.8994	0.0587	Biso	1	C	-0.160		
H11	1	0.5483	0.9115	0.0128	Biso	1	H	0.125		
C19	1	0.5057	0.8653	0.0135	Biso	1	C	-0.094		
H12	1	0.5124	0.8545	0.9374	Biso	1	H	0.128		
C20	1	0.5684	0.0292	0.3142	Biso	1	C	0.003		
C21	1	0.5413	0.951	0.214	Biso	1	C	-0.017		
C22	1	0.5496	0.9618	0.334	Biso	1	C	0.192		
C23	1	0.5625	0.0288	0.187	Biso	1	C	0.110		
C24	1	0.5607	0.9976	0.4	Biso	1	C	-0.249		
H13	1	0.5626	0	0.4844	Biso	1	H	0.157		
C25	1	0.5428	0.9909	0.157	Biso	1	C	-0.210		
H14	1	0.5278	0.9922	0.0844	Biso	1	H	0.090		
C26	1	0.5736	0.0638	0.099	Biso	1	C	-0.514		
H15	1	0.6034	0.0642	0.0925	Biso	1	H	0.161		
H16	1	0.5618	0.0566	0.0214	Biso	1	H	0.168		
H17	1	0.5638	0.0908	0.1229	Biso	1	H	0.175		
C27	1	0.5531	0.9262	0.402	Biso	1	C	-0.577		
H18	1	0.5363	0.9318	0.4726	Biso	1	H	0.160		
H19	1	0.5812	0.9209	0.4272	Biso	1	H	0.181		
H20	1	0.5424	0.9023	0.3603	Biso	1	H	0.158		
Zn2	1	0.21616	0.78391	0.60755	Biso	1	Zn	0.766		
N6	1	0.22462	0.64414	0.8801	Biso	1	N	-0.265		
O5	1	0.0815	0.70005	0.0881	Biso	1	O	-0.571		
N7	1	0.24368	0.68933	0.7214	Biso	1	N	-0.327		
N8	1	0.15612	0.6563	0.0176	Biso	1	N	-0.704		
H21	1	0.1725	0.6353	0.0232	Biso	1	H	0.345		
H22	1	0.135	0.6583	0.0651	Biso	1	H	0.361		
O6	1	0.84318	0.3428	0.6791	Biso	1	O	-0.568		
C28	1	0.2548	0.6521	0.7826	Biso	1	C	0.145		
H23	1	0.2775	0.6354	0.7639	Biso	1	H	0.116		
O7	1	0.8188	0.3184	0.5045	Biso	1	O	-0.573		
C29	1	0.8412	0.3444	0.5675	Biso	1	C	0.580		
C30	1	0.16471	0.69057	0.9221	Biso	1	C	0.374		
C31	1	0.20038	0.67997	0.8576	Biso	1	C	-0.047		
C32	1	0.21352	0.70459	0.7609	Biso	1	C	0.344		
N9	1	0.19099	0.73982	0.7287	Biso	1	N	-0.349		
C33	1	0.15532	0.75043	0.7932	Biso	1	C	0.244		
H24	1	0.1402	0.774	0.7716	Biso	1	H	0.123		
N10	1	0.14218	0.7258	0.8898	Biso	1	N	-0.336		
C34	1	0.9004	0.3889	0.5401	Biso	1	C	-0.112		

H25	1	0.9112	0.3759	0.6089	Biso	1	H	0.115		
C35	1	0.9241	0.418	0.4773	Biso	1	C	-0.161		
H26	1	0.9508	0.4245	0.5041	Biso	1	H	0.114		
C36	1	0.908	0.4373	0.3744	Biso	1	C	0.100		
C37	1	0.8682	0.4276	0.3343	Biso	1	C	-0.158		
H27	1	0.8574	0.4405	0.2654	Biso	1	H	0.116		
C38	1	0.8445	0.3985	0.397	Biso	1	C	-0.115		
H28	1	0.8178	0.3919	0.3702	Biso	1	H	0.107		
C39	1	0.8606	0.3791	0.5	Biso	1	C	-0.036		
O8	1	0.0413	0.7041	0.9286	Biso	1	O	-0.537		
C40	1	0.05	0.6858	0.029	Biso	1	C	0.552		
C41	1	0.0259	0.6528	0.082	Biso	1	C	-0.023		
C42	1	0.0359	0.6367	0.1957	Biso	1	C	-0.107		
H29	1	0.057	0.6487	0.2416	Biso	1	H	0.119		
C43	1	0.0144	0.6025	0.241	Biso	1	C	-0.162		
H30	1	0.0211	0.5917	0.317	Biso	1	H	0.120		
C44	1	0.9828	0.5845	0.1724	Biso	1	C	0.110		
C45	1	0.9728	0.6006	0.0587	Biso	1	C	-0.160		
H31	1	0.9517	0.5885	0.0128	Biso	1	H	0.125		
C46	1	0.9943	0.6347	0.0135	Biso	1	C	-0.094		
H32	1	0.9876	0.6455	0.9374	Biso	1	H	0.128		
C47	1	0.9316	0.4708	0.3142	Biso	1	C	0.003		
C48	1	0.9587	0.549	0.214	Biso	1	C	-0.017		
C49	1	0.9504	0.5382	0.334	Biso	1	C	0.193		
C50	1	0.9375	0.4712	0.187	Biso	1	C	0.110		
C51	1	0.9393	0.5024	0.4	Biso	1	C	-0.249		
H33	1	0.9374	0.5	0.4844	Biso	1	H	0.157		
C52	1	0.9572	0.5091	0.157	Biso	1	C	-0.210		
H34	1	0.9722	0.5078	0.0844	Biso	1	H	0.090		
C53	1	0.9264	0.4362	0.099	Biso	1	C	-0.514		
H35	1	0.8966	0.4358	0.0925	Biso	1	H	0.161		
H36	1	0.9382	0.4434	0.0214	Biso	1	H	0.168		
H37	1	0.9362	0.4092	0.1229	Biso	1	H	0.175		
C54	1	0.9469	0.5738	0.402	Biso	1	C	-0.577		
H38	1	0.9637	0.5682	0.4726	Biso	1	H	0.160		
H39	1	0.9188	0.5791	0.4272	Biso	1	H	0.181		
H40	1	0.9576	0.5977	0.3603	Biso	1	H	0.159		
Zn3	1	0.21616	0.71609	0.39245	Biso	1	Zn	0.766		
N11	1	0.22462	0.85586	0.1199	Biso	1	N	-0.265		
O9	1	0.0815	0.79995	0.9119	Biso	1	O	-0.574		
N12	1	0.24368	0.81067	0.2786	Biso	1	N	-0.327		
N13	1	0.15612	0.8437	0.9824	Biso	1	N	-0.704		
H41	1	0.1725	0.8647	0.9768	Biso	1	H	0.345		
H42	1	0.135	0.8417	0.9349	Biso	1	H	0.362		
O10	1	0.84318	0.1572	0.3209	Biso	1	O	-0.568		
C55	1	0.2548	0.8479	0.2174	Biso	1	C	0.145		
H43	1	0.2775	0.8646	0.2361	Biso	1	H	0.116		
O11	1	0.8188	0.1816	0.4955	Biso	1	O	-0.574		
C56	1	0.8412	0.1556	0.4325	Biso	1	C	0.580		
C57	1	0.16471	0.80943	0.0779	Biso	1	C	0.374		
C58	1	0.20038	0.82003	0.1424	Biso	1	C	-0.047		
C59	1	0.21352	0.79541	0.2391	Biso	1	C	0.344		

N14	1	0.19099	0.76018	0.2713	Biso	1	N	-0.349
C60	1	0.15532	0.74957	0.2068	Biso	1	C	0.244
H44	1	0.1402	0.726	0.2284	Biso	1	H	0.123
N15	1	0.14218	0.7742	0.1102	Biso	1	N	-0.336
C61	1	0.9004	0.1111	0.4599	Biso	1	C	-0.112
H45	1	0.9112	0.1241	0.3911	Biso	1	H	0.115
C62	1	0.9241	0.082	0.5227	Biso	1	C	-0.161
H46	1	0.9508	0.0755	0.4959	Biso	1	H	0.115
C63	1	0.908	0.0627	0.6256	Biso	1	C	0.100
C64	1	0.8682	0.0724	0.6657	Biso	1	C	-0.158
H47	1	0.8574	0.0595	0.7346	Biso	1	H	0.116
C65	1	0.8445	0.1015	0.603	Biso	1	C	-0.115
H48	1	0.8178	0.1081	0.6298	Biso	1	H	0.107
C66	1	0.8606	0.1209	0.5	Biso	1	C	-0.036
O12	1	0.0413	0.7959	0.0714	Biso	1	O	-0.542
C67	1	0.05	0.8142	0.971	Biso	1	C	0.552
C68	1	0.0259	0.8472	0.918	Biso	1	C	-0.023
C69	1	0.0359	0.8633	0.8043	Biso	1	C	-0.108
H49	1	0.057	0.8513	0.7584	Biso	1	H	0.119
C70	1	0.0144	0.8975	0.759	Biso	1	C	-0.162
H50	1	0.0211	0.9083	0.683	Biso	1	H	0.120
C71	1	0.9828	0.9155	0.8276	Biso	1	C	0.109
C72	1	0.9728	0.8994	0.9413	Biso	1	C	-0.161
H51	1	0.9517	0.9115	0.9872	Biso	1	H	0.124
C73	1	0.9943	0.8653	0.9865	Biso	1	C	-0.095
H52	1	0.9876	0.8545	0.0626	Biso	1	H	0.128
C74	1	0.9316	0.0292	0.6858	Biso	1	C	0.003
C75	1	0.9587	0.951	0.786	Biso	1	C	-0.017
C76	1	0.9504	0.9618	0.666	Biso	1	C	0.192
C77	1	0.9375	0.0288	0.813	Biso	1	C	0.110
C78	1	0.9393	0.9976	0.6	Biso	1	C	-0.249
H53	1	0.9374	0	0.5156	Biso	1	H	0.157
C79	1	0.9572	0.9909	0.843	Biso	1	C	-0.210
H54	1	0.9722	0.9922	0.9156	Biso	1	H	0.090
C80	1	0.9264	0.0638	0.901	Biso	1	C	-0.515
H55	1	0.8966	0.0642	0.9075	Biso	1	H	0.161
H56	1	0.9382	0.0566	0.9786	Biso	1	H	0.168
H57	1	0.9362	0.0908	0.8771	Biso	1	H	0.175
C81	1	0.9469	0.9262	0.598	Biso	1	C	-0.577
H58	1	0.9637	0.9318	0.5274	Biso	1	H	0.160
H59	1	0.9188	0.9209	0.5728	Biso	1	H	0.181
H60	1	0.9576	0.9023	0.6397	Biso	1	H	0.159
Zn4	1	0.28384	0.78391	0.39245	Biso	1	Zn	0.766
N16	1	0.27538	0.64414	0.1199	Biso	1	N	-0.265
O13	1	0.4185	0.70005	0.9119	Biso	1	O	-0.567
N17	1	0.25632	0.68933	0.2786	Biso	1	N	-0.327
N18	1	0.34388	0.6563	0.9824	Biso	1	N	-0.704
H61	1	0.3275	0.6353	0.9768	Biso	1	H	0.345
H62	1	0.365	0.6583	0.9349	Biso	1	H	0.361
O14	1	0.65682	0.3428	0.3209	Biso	1	O	-0.568
C82	1	0.2452	0.6521	0.2174	Biso	1	C	0.146
H63	1	0.2225	0.6354	0.2361	Biso	1	H	0.116

O15	1	0.6812	0.3184	0.4955	Biso	1	O	-0.573		
C83	1	0.6588	0.3444	0.4325	Biso	1	C	0.580		
C84	1	0.33529		0.69057		0.0779	Biso	1	C	0.374
C85	1	0.29962		0.67997		0.1424	Biso	1	C	-0.047
C86	1	0.28648		0.70459		0.2391	Biso	1	C	0.345
N19	1	0.30901		0.73982		0.2713	Biso	1	N	-0.349
C87	1	0.34468		0.75043		0.2068	Biso	1	C	0.244
H64	1	0.3598	0.774	0.2284	Biso	1	H	0.123		
N20	1	0.35782		0.7258	0.1102	Biso	1	N	-0.337	
C88	1	0.5996	0.3889	0.4599	Biso	1	C	-0.112		
H65	1	0.5888	0.3759	0.3911	Biso	1	H	0.115		
C89	1	0.5759	0.418	0.5227	Biso	1	C	-0.161		
H66	1	0.5492	0.4245	0.4959	Biso	1	H	0.115		
C90	1	0.592	0.4373	0.6256	Biso	1	C	0.100		
C91	1	0.6318	0.4276	0.6657	Biso	1	C	-0.158		
H67	1	0.6426	0.4405	0.7346	Biso	1	H	0.116		
C92	1	0.6555	0.3985	0.603	Biso	1	C	-0.115		
H68	1	0.6822	0.3919	0.6298	Biso	1	H	0.107		
C93	1	0.6394	0.3791	0.5	Biso	1	C	-0.036		
O16	1	0.4587	0.7041	0.0714	Biso	1	O	-0.541		
C94	1	0.45	0.6858	0.971	Biso	1	C	0.552		
C95	1	0.4741	0.6528	0.918	Biso	1	C	-0.024		
C96	1	0.4641	0.6367	0.8043	Biso	1	C	-0.108		
H69	1	0.443	0.6487	0.7584	Biso	1	H	0.119		
C97	1	0.4856	0.6025	0.759	Biso	1	C	-0.162		
H70	1	0.4789	0.5917	0.683	Biso	1	H	0.120		
C98	1	0.5172	0.5845	0.8276	Biso	1	C	0.110		
C99	1	0.5272	0.6006	0.9413	Biso	1	C	-0.160		
H71	1	0.5483	0.5885	0.9872	Biso	1	H	0.125		
C100	1	0.5057	0.6347	0.9865	Biso	1	C	-0.094		
H72	1	0.5124	0.6455	0.0626	Biso	1	H	0.128		
C101	1	0.5684	0.4708	0.6858	Biso	1	C	0.003		
C102	1	0.5413	0.549	0.786	Biso	1	C	-0.017		
C103	1	0.5496	0.5382	0.666	Biso	1	C	0.192		
C104	1	0.5625	0.4712	0.813	Biso	1	C	0.110		
C105	1	0.5607	0.5024	0.6	Biso	1	C	-0.249		
H73	1	0.5626	0.5	0.5156	Biso	1	H	0.157		
C106	1	0.5428	0.5091	0.843	Biso	1	C	-0.210		
H74	1	0.5278	0.5078	0.9156	Biso	1	H	0.090		
C107	1	0.5736	0.4362	0.901	Biso	1	C	-0.515		
H75	1	0.6034	0.4358	0.9075	Biso	1	H	0.161		
H76	1	0.5618	0.4434	0.9786	Biso	1	H	0.168		
H77	1	0.5638	0.4092	0.8771	Biso	1	H	0.175		
C108	1	0.5531	0.5738	0.598	Biso	1	C	-0.577		
H78	1	0.5363	0.5682	0.5274	Biso	1	H	0.160		
H79	1	0.5812	0.5791	0.5728	Biso	1	H	0.181		
H80	1	0.5424	0.5977	0.6397	Biso	1	H	0.158		
Zn5	1	0.71616		0.28391		0.39245	Biso	1	Zn	0.766
N21	1	0.72462		0.14414		0.1199	Biso	1	N	-0.264
O17	1	0.5815	0.20005		0.9119	Biso	1	O	-0.567	
N22	1	0.74368		0.18933		0.2786	Biso	1	N	-0.327
N23	1	0.65612		0.1563	0.9824	Biso	1	N	-0.704	

H81	1	0.6725	0.1353	0.9768	Biso	1	H	0.345		
H82	1	0.635	0.1583	0.9349	Biso	1	H	0.361		
O18	1	0.34318		0.8428	0.3209	Biso	1	O	-0.568	
C109	1	0.7548	0.1521	0.2174	Biso	1	C	0.146		
H83	1	0.7775	0.1354	0.2361	Biso	1	H	0.116		
O19	1	0.3188	0.8184	0.4955	Biso	1	O	-0.574		
C110	1	0.3412	0.8444	0.4325	Biso	1	C	0.580		
C111	1	0.66471		0.19057		0.0779	Biso	1	C	0.374
C112	1	0.70038		0.17997		0.1424	Biso	1	C	-0.047
C113	1	0.71352		0.20459		0.2391	Biso	1	C	0.345
N24	1	0.69099		0.23982		0.2713	Biso	1	N	-0.349
C114	1	0.65532		0.25043		0.2068	Biso	1	C	0.244
H84	1	0.6402	0.274	0.2284	Biso	1	H	0.123		
N25	1	0.64218		0.2258	0.1102	Biso	1	N	-0.337	
C115	1	0.4004	0.8889	0.4599	Biso	1	C	-0.112		
H85	1	0.4112	0.8759	0.3911	Biso	1	H	0.115		
C116	1	0.4241	0.918	0.5227	Biso	1	C	-0.161		
H86	1	0.4508	0.9245	0.4959	Biso	1	H	0.114		
C117	1	0.408	0.9373	0.6256	Biso	1	C	0.100		
C118	1	0.3682	0.9276	0.6657	Biso	1	C	-0.158		
H87	1	0.3574	0.9405	0.7346	Biso	1	H	0.116		
C119	1	0.3445	0.8985	0.603	Biso	1	C	-0.115		
H88	1	0.3178	0.8919	0.6298	Biso	1	H	0.107		
C120	1	0.3606	0.8791	0.5	Biso	1	C	-0.036		
O20	1	0.5413	0.2041	0.0714	Biso	1	O	-0.540		
C121	1	0.55	0.1858	0.971	Biso	1	C	0.552		
C122	1	0.5259	0.1528	0.918	Biso	1	C	-0.024		
C123	1	0.5359	0.1367	0.8043	Biso	1	C	-0.108		
H89	1	0.557	0.1487	0.7584	Biso	1	H	0.119		
C124	1	0.5144	0.1025	0.759	Biso	1	C	-0.162		
H90	1	0.5211	0.0917	0.683	Biso	1	H	0.120		
C125	1	0.4828	0.0845	0.8276	Biso	1	C	0.110		
C126	1	0.4728	0.1006	0.9413	Biso	1	C	-0.160		
H91	1	0.4517	0.0885	0.9872	Biso	1	H	0.125		
C127	1	0.4943	0.1347	0.9865	Biso	1	C	-0.094		
H92	1	0.4876	0.1455	0.0626	Biso	1	H	0.128		
C128	1	0.4316	0.9708	0.6858	Biso	1	C	0.003		
C129	1	0.4587	0.049	0.786	Biso	1	C	-0.017		
C130	1	0.4504	0.0382	0.666	Biso	1	C	0.192		
C131	1	0.4375	0.9712	0.813	Biso	1	C	0.110		
C132	1	0.4393	0.0024	0.6	Biso	1	C	-0.249		
H93	1	0.4374	0	0.5156	Biso	1	H	0.157		
C133	1	0.4572	0.0091	0.843	Biso	1	C	-0.210		
H94	1	0.4722	0.0078	0.9156	Biso	1	H	0.090		
C134	1	0.4264	0.9362	0.901	Biso	1	C	-0.515		
H95	1	0.3966	0.9358	0.9075	Biso	1	H	0.161		
H96	1	0.4382	0.9434	0.9786	Biso	1	H	0.168		
H97	1	0.4362	0.9092	0.8771	Biso	1	H	0.175		
C135	1	0.4469	0.0738	0.598	Biso	1	C	-0.577		
H98	1	0.4637	0.0682	0.5274	Biso	1	H	0.160		
H99	1	0.4188	0.0791	0.5728	Biso	1	H	0.181		
H100	1	0.4576	0.0977	0.6397	Biso	1	H	0.158		

Zn6	1	0.78384	0.21609	0.39245	Biso	1	Zn	0.766
N26	1	0.77538	0.35586	0.1199	Biso	1	N	-0.265
O21	1	0.9185	0.29995	0.9119	Biso	1	O	-0.568
N27	1	0.75632	0.31067	0.2786	Biso	1	N	-0.327
N28	1	0.84388	0.3437	0.9824	Biso	1	N	-0.704
H101	1	0.8275	0.3647	0.9768	Biso	1	H	0.345
H102	1	0.865	0.3417	0.9349	Biso	1	H	0.361
O22	1	0.15682	0.6572	0.3209	Biso	1	O	-0.568
C136	1	0.7452	0.3479	0.2174	Biso	1	C	0.145
H103	1	0.7225	0.3646	0.2361	Biso	1	H	0.116
O23	1	0.1812	0.6816	0.4955	Biso	1	O	-0.574
C137	1	0.1588	0.6556	0.4325	Biso	1	C	0.580
C138	1	0.83529	0.30943	0.0779	Biso	1	C	0.374
C139	1	0.79962	0.32003	0.1424	Biso	1	C	-0.047
C140	1	0.78648	0.29541	0.2391	Biso	1	C	0.345
N29	1	0.80901	0.26018	0.2713	Biso	1	N	-0.349
C141	1	0.84468	0.24957	0.2068	Biso	1	C	0.244
H104	1	0.8598	0.226	0.2284	Biso	1	H	0.123
N30	1	0.85782	0.2742	0.1102	Biso	1	N	-0.336
C142	1	0.0996	0.6111	0.4599	Biso	1	C	-0.112
H105	1	0.0888	0.6241	0.3911	Biso	1	H	0.115
C143	1	0.0759	0.582	0.5227	Biso	1	C	-0.161
H106	1	0.0492	0.5755	0.4959	Biso	1	H	0.115
C144	1	0.092	0.5627	0.6256	Biso	1	C	0.100
C145	1	0.1318	0.5724	0.6657	Biso	1	C	-0.158
H107	1	0.1426	0.5595	0.7346	Biso	1	H	0.116
C146	1	0.1555	0.6015	0.603	Biso	1	C	-0.115
H108	1	0.1822	0.6081	0.6298	Biso	1	H	0.107
C147	1	0.1394	0.6209	0.5	Biso	1	C	-0.036
O24	1	0.9587	0.2959	0.0714	Biso	1	O	-0.541
C148	1	0.95	0.3142	0.971	Biso	1	C	0.552
C149	1	0.9741	0.3472	0.918	Biso	1	C	-0.023
C150	1	0.9641	0.3633	0.8043	Biso	1	C	-0.108
H109	1	0.943	0.3513	0.7584	Biso	1	H	0.119
C151	1	0.9856	0.3975	0.759	Biso	1	C	-0.162
H110	1	0.9789	0.4083	0.683	Biso	1	H	0.120
C152	1	0.0172	0.4155	0.8276	Biso	1	C	0.110
C153	1	0.0272	0.3994	0.9413	Biso	1	C	-0.160
H111	1	0.0483	0.4115	0.9872	Biso	1	H	0.125
C154	1	0.0057	0.3653	0.9865	Biso	1	C	-0.094
H112	1	0.0124	0.3545	0.0626	Biso	1	H	0.128
C155	1	0.0684	0.5292	0.6858	Biso	1	C	0.003
C156	1	0.0413	0.451	0.786	Biso	1	C	-0.017
C157	1	0.0496	0.4618	0.666	Biso	1	C	0.192
C158	1	0.0625	0.5288	0.813	Biso	1	C	0.110
C159	1	0.0607	0.4976	0.6	Biso	1	C	-0.249
H113	1	0.0626	0.5	0.5156	Biso	1	H	0.157
C160	1	0.0428	0.4909	0.843	Biso	1	C	-0.210
H114	1	0.0278	0.4922	0.9156	Biso	1	H	0.090
C161	1	0.0736	0.5638	0.901	Biso	1	C	-0.514
H115	1	0.1034	0.5642	0.9075	Biso	1	H	0.161
H116	1	0.0618	0.5566	0.9786	Biso	1	H	0.168

H117	1	0.0638	0.5908	0.8771	Biso	1	H	0.175		
C162	1	0.0531	0.4262	0.598	Biso	1	C	-0.577		
H118	1	0.0363	0.4318	0.5274	Biso	1	H	0.160		
H119	1	0.0812	0.4209	0.5728	Biso	1	H	0.181		
H120	1	0.0424	0.4023	0.6397	Biso	1	H	0.158		
Zn7	1	0.78384		0.28391		0.60755	Biso	1	Zn	0.766
N31	1	0.77538		0.14414		0.8801	Biso	1	N	-0.265
O25	1	0.9185	0.20005		0.0881	Biso	1	O	-0.567	
N32	1	0.75632		0.18933		0.7214	Biso	1	N	-0.327
N33	1	0.84388		0.1563	0.0176	Biso	1	N	-0.704	
H121	1	0.8275	0.1353	0.0232	Biso	1	H	0.345		
H122	1	0.865	0.1583	0.0651	Biso	1	H	0.361		
O26	1	0.15682		0.8428	0.6791	Biso	1	O	-0.568	
C163	1	0.7452	0.1521	0.7826	Biso	1	C	0.145		
H123	1	0.7225	0.1354	0.7639	Biso	1	H	0.116		
O27	1	0.1812	0.8184	0.5045	Biso	1	O	-0.574		
C164	1	0.1588	0.8444	0.5675	Biso	1	C	0.580		
C165	1	0.83529		0.19057		0.9221	Biso	1	C	0.374
C166	1	0.79962		0.17997		0.8576	Biso	1	C	-0.047
C167	1	0.78648		0.20459		0.7609	Biso	1	C	0.345
N34	1	0.80901		0.23982		0.7287	Biso	1	N	-0.349
C168	1	0.84468		0.25043		0.7932	Biso	1	C	0.244
H124	1	0.8598	0.274	0.7716	Biso	1	H	0.123		
N35	1	0.85782		0.2258	0.8898	Biso	1	N	-0.337	
C169	1	0.0996	0.8889	0.5401	Biso	1	C	-0.112		
H125	1	0.0888	0.8759	0.6089	Biso	1	H	0.115		
C170	1	0.0759	0.918	0.4773	Biso	1	C	-0.161		
H126	1	0.0492	0.9245	0.5041	Biso	1	H	0.114		
C171	1	0.092	0.9373	0.3744	Biso	1	C	0.100		
C172	1	0.1318	0.9276	0.3343	Biso	1	C	-0.158		
H127	1	0.1426	0.9405	0.2654	Biso	1	H	0.116		
C173	1	0.1555	0.8985	0.397	Biso	1	C	-0.115		
H128	1	0.1822	0.8919	0.3702	Biso	1	H	0.107		
C174	1	0.1394	0.8791	0.5	Biso	1	C	-0.035		
O28	1	0.9587	0.2041	0.9286	Biso	1	O	-0.540		
C175	1	0.95	0.1858	0.029	Biso	1	C	0.551		
C176	1	0.9741	0.1528	0.082	Biso	1	C	-0.024		
C177	1	0.9641	0.1367	0.1957	Biso	1	C	-0.108		
H129	1	0.943	0.1487	0.2416	Biso	1	H	0.119		
C178	1	0.9856	0.1025	0.241	Biso	1	C	-0.162		
H130	1	0.9789	0.0917	0.317	Biso	1	H	0.120		
C179	1	0.0172	0.0845	0.1724	Biso	1	C	0.110		
C180	1	0.0272	0.1006	0.0587	Biso	1	C	-0.160		
H131	1	0.0483	0.0885	0.0128	Biso	1	H	0.125		
C181	1	0.0057	0.1347	0.0135	Biso	1	C	-0.094		
H132	1	0.0124	0.1455	0.9374	Biso	1	H	0.128		
C182	1	0.0684	0.9708	0.3142	Biso	1	C	0.003		
C183	1	0.0413	0.049	0.214	Biso	1	C	-0.017		
C184	1	0.0496	0.0382	0.334	Biso	1	C	0.192		
C185	1	0.0625	0.9712	0.187	Biso	1	C	0.110		
C186	1	0.0607	0.0024	0.4	Biso	1	C	-0.249		
H133	1	0.0626	0	0.4844	Biso	1	H	0.158		

C187	1	0.0428	0.0091	0.157	Biso	1	C	-0.210		
H134	1	0.0278	0.0078	0.0844	Biso	1	H	0.090		
C188	1	0.0736	0.9362	0.099	Biso	1	C	-0.514		
H135	1	0.1034	0.9358	0.0925	Biso	1	H	0.161		
H136	1	0.0618	0.9434	0.0214	Biso	1	H	0.168		
H137	1	0.0638	0.9092	0.1229	Biso	1	H	0.175		
C189	1	0.0531	0.0738	0.402	Biso	1	C	-0.577		
H138	1	0.0363	0.0682	0.4726	Biso	1	H	0.160		
H139	1	0.0812	0.0791	0.4272	Biso	1	H	0.181		
H140	1	0.0424	0.0977	0.3603	Biso	1	H	0.158		
Zn8	1	0.71616		0.21609		0.60755	Biso	1	Zn	0.766
N36	1	0.72462		0.35586		0.8801	Biso	1	N	-0.265
O29	1	0.5815	0.29995		0.0881	Biso	1	O	-0.567	
N37	1	0.74368		0.31067		0.7214	Biso	1	N	-0.327
N38	1	0.65612		0.3437	0.0176	Biso	1	N	-0.704	
H141	1	0.6725	0.3647	0.0232	Biso	1	H	0.345		
H142	1	0.635	0.3417	0.0651	Biso	1	H	0.361		
O30	1	0.34318		0.6572	0.6791	Biso	1	O	-0.568	
C190	1	0.7548	0.3479	0.7826	Biso	1	C	0.146		
H143	1	0.7775	0.3646	0.7639	Biso	1	H	0.116		
O31	1	0.3188	0.6816	0.5045	Biso	1	O	-0.574		
C191	1	0.3412	0.6556	0.5675	Biso	1	C	0.580		
C192	1	0.66471		0.30943		0.9221	Biso	1	C	0.374
C193	1	0.70038		0.32003		0.8576	Biso	1	C	-0.047
C194	1	0.71352		0.29541		0.7609	Biso	1	C	0.344
N39	1	0.69099		0.26018		0.7287	Biso	1	N	-0.349
C195	1	0.65532		0.24957		0.7932	Biso	1	C	0.244
H144	1	0.6402	0.226	0.7716	Biso	1	H	0.123		
N40	1	0.64218		0.2742	0.8898	Biso	1	N	-0.336	
C196	1	0.4004	0.6111	0.5401	Biso	1	C	-0.112		
H145	1	0.4112	0.6241	0.6089	Biso	1	H	0.115		
C197	1	0.4241	0.582	0.4773	Biso	1	C	-0.161		
H146	1	0.4508	0.5755	0.5041	Biso	1	H	0.114		
C198	1	0.408	0.5627	0.3744	Biso	1	C	0.100		
C199	1	0.3682	0.5724	0.3343	Biso	1	C	-0.158		
H147	1	0.3574	0.5595	0.2654	Biso	1	H	0.116		
C200	1	0.3445	0.6015	0.397	Biso	1	C	-0.115		
H148	1	0.3178	0.6081	0.3702	Biso	1	H	0.107		
C201	1	0.3606	0.6209	0.5	Biso	1	C	-0.035		
O32	1	0.5413	0.2959	0.9286	Biso	1	O	-0.540		
C202	1	0.55	0.3142	0.029	Biso	1	C	0.551		
C203	1	0.5259	0.3472	0.082	Biso	1	C	-0.024		
C204	1	0.5359	0.3633	0.1957	Biso	1	C	-0.108		
H149	1	0.557	0.3513	0.2416	Biso	1	H	0.119		
C205	1	0.5144	0.3975	0.241	Biso	1	C	-0.162		
H150	1	0.5211	0.4083	0.317	Biso	1	H	0.120		
C206	1	0.4828	0.4155	0.1724	Biso	1	C	0.110		
C207	1	0.4728	0.3994	0.0587	Biso	1	C	-0.160		
H151	1	0.4517	0.4115	0.0128	Biso	1	H	0.125		
C208	1	0.4943	0.3653	0.0135	Biso	1	C	-0.094		
H152	1	0.4876	0.3545	0.9374	Biso	1	H	0.128		
C209	1	0.4316	0.5292	0.3142	Biso	1	C	0.003		

C210	1	0.4587	0.451	0.214	Biso	1	C	-0.017
C211	1	0.4504	0.4618	0.334	Biso	1	C	0.192
C212	1	0.4375	0.5288	0.187	Biso	1	C	0.110
C213	1	0.4393	0.4976	0.4	Biso	1	C	-0.249
H153	1	0.4374	0.5	0.4844	Biso	1	H	0.157
C214	1	0.4572	0.4909	0.157	Biso	1	C	-0.210
H154	1	0.4722	0.4922	0.0844	Biso	1	H	0.090
C215	1	0.4264	0.5638	0.099	Biso	1	C	-0.514
H155	1	0.3966	0.5642	0.0925	Biso	1	H	0.161
H156	1	0.4382	0.5566	0.0214	Biso	1	H	0.168
H157	1	0.4362	0.5908	0.1229	Biso	1	H	0.175
C216	1	0.4469	0.4262	0.402	Biso	1	C	-0.577
H158	1	0.4637	0.4318	0.4726	Biso	1	H	0.160
H159	1	0.4188	0.4209	0.4272	Biso	1	H	0.181
H160	1	0.4576	0.4023	0.3603	Biso	1	H	0.158
Zn9	1	0.25	0.89931	0	Biso	1	Zn	0.260
Zn10	1	0.25	0.60069	0	Biso	1	Zn	0.258
Zn11	1	0.75	0.10069	0	Biso	1	Zn	0.258
Zn12	1	0.75	0.39931	0	Biso	1	Zn	0.258
Zn13	1	0.3993	0.75	0	Biso	1	Zn	0.798
Zn14	1	0.1007	0.75	0	Biso	1	Zn	0.797
Zn15	1	0.6007	0.25	0	Biso	1	Zn	0.798
Zn16	1	0.8993	0.25	0	Biso	1	Zn	0.798
O33	1	0.25	0.75	0.5	Biso	1	O	-0.851
O34	1	0.75	0.25	0.5	Biso	1	O	-0.851

```

data_IZUMUM_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a            15.2980
_cell_length_b            15.2980
_cell_length_c            15.6131
_cell_angle_alpha         119.3350
_cell_angle_beta          119.3350
_cell_angle_gamma         90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Cu1  Cu   0.42563    0.48407    0.88834    0.01267    Uiso  1    0.652368
Cu2  Cu   0.96271    0.40427    0.88834    0.01267    Uiso  1    0.652499
Cu3  Cu   0.98407    0.46271    0.38834    0.01267    Uiso  1    0.651703
Cu4  Cu   0.90427    0.92563    0.38834    0.01267    Uiso  1    0.652757
Cu5  Cu   0.57437    0.51593    0.11166    0.01267    Uiso  1    0.652385
Cu6  Cu   0.03729    0.59573    0.11166    0.01267    Uiso  1    0.65243
Cu7  Cu   0.01593    0.53729    0.61166    0.01267    Uiso  1    0.651897
Cu8  Cu   0.09573    0.07437    0.61166    0.01267    Uiso  1    0.652636
H1   H    0.457 0.6319 0.8154 0.01267    Uiso  1    0.080586
H2   H    0.7948 0.9342 0.172 0.01267    Uiso  1    0.347505
H3   H    0.7286 0.921 0.0554 0.01267    Uiso  1    0.35264
H4   H    0.7735 0.7174 0.301 0.01267    Uiso  1    0.090442
H5   H    0.6052 0.2858 0.7684 0.01267    Uiso  1    0.17908
H6   H    0.711 0.3474 0.895 0.01267    Uiso  1    0.191295
H7   H    0.6311 0.2486 0.8532 0.01267    Uiso  1    0.199069
H8   H    0.8584 0.1835 0.8154 0.01267    Uiso  1    0.080109
H9   H    0.8772 0.2378 0.172 0.01267    Uiso  1    0.351187
H10  H    0.8268 0.1344 0.0554 0.01267    Uiso  1    0.353667
H11  H    0.0275 0.5836 0.301 0.01267    Uiso  1    0.090925
H12  H    0.6632 0.4826 0.7684 0.01267    Uiso  1    0.179022
H13  H    0.684 0.5476 0.895 0.01267    Uiso  1    0.191589
H14  H    0.7221 0.6046 0.8532 0.01267    Uiso  1    0.199708
H15  H    0.1319 0.3584 0.3154 0.01267    Uiso  1    0.080212
H16  H    0.4342 0.3772 0.672 0.01267    Uiso  1    0.350047
H17  H    0.421 0.3268 0.5554 0.01267    Uiso  1    0.353858

```

H18	H	0.2174	0.5275	0.801	0.01267	Uiso	1	0.090479
H19	H	0.7858	0.1632	0.2684	0.01267	Uiso	1	0.179575
H20	H	0.8474	0.184	0.395	0.01267	Uiso	1	0.191584
H21	H	0.7486	0.2221	0.3532	0.01267	Uiso	1	0.199742
H22	H	0.6835	0.957	0.3154	0.01267	Uiso	1	0.080576
H23	H	0.7378	0.2948	0.672	0.01267	Uiso	1	0.346623
H24	H	0.6344	0.2286	0.5554	0.01267	Uiso	1	0.35339
H25	H	0.0836	0.2735	0.801	0.01267	Uiso	1	0.090855
H26	H	0.9826	0.1052	0.2684	0.01267	Uiso	1	0.179291
H27	H	0.0476	0.211	0.395	0.01267	Uiso	1	0.19201
H28	H	0.1046	0.1311	0.3532	0.01267	Uiso	1	0.199457
H29	H	0.543	0.3681	0.1846	0.01267	Uiso	1	0.080582
H30	H	0.2052	0.0658	0.828	0.01267	Uiso	1	0.347476
H31	H	0.2714	0.079	0.9446	0.01267	Uiso	1	0.35268
H32	H	0.2265	0.2826	0.699	0.01267	Uiso	1	0.090417
H33	H	0.3948	0.7142	0.2316	0.01267	Uiso	1	0.179139
H34	H	0.289	0.6526	0.105	0.01267	Uiso	1	0.191365
H35	H	0.3689	0.7514	0.1468	0.01267	Uiso	1	0.198994
H36	H	0.1416	0.8165	0.1846	0.01267	Uiso	1	0.080149
H37	H	0.1228	0.7622	0.828	0.01267	Uiso	1	0.351049
H38	H	0.1732	0.8656	0.9446	0.01267	Uiso	1	0.353649
H39	H	0.9725	0.4164	0.699	0.01267	Uiso	1	0.090974
H40	H	0.3368	0.5174	0.2316	0.01267	Uiso	1	0.178976
H41	H	0.316	0.4524	0.105	0.01267	Uiso	1	0.191435
H42	H	0.2779	0.3954	0.1468	0.01267	Uiso	1	0.199837
H43	H	0.8681	0.6416	0.6846	0.01267	Uiso	1	0.080268
H44	H	0.5658	0.6228	0.328	0.01267	Uiso	1	0.350022
H45	H	0.579	0.6732	0.4446	0.01267	Uiso	1	0.353995
H46	H	0.7826	0.4725	0.199	0.01267	Uiso	1	0.090356
H47	H	0.2142	0.8368	0.7316	0.01267	Uiso	1	0.179588
H48	H	0.1526	0.816	0.605	0.01267	Uiso	1	0.191507
H49	H	0.2514	0.7779	0.6468	0.01267	Uiso	1	0.199628
H50	H	0.3165	0.043	0.6846	0.01267	Uiso	1	0.080536
H51	H	0.2622	0.7052	0.328	0.01267	Uiso	1	0.346641
H52	H	0.3656	0.7714	0.4446	0.01267	Uiso	1	0.353349
H53	H	0.9164	0.7265	0.199	0.01267	Uiso	1	0.090832
H54	H	0.0174	0.8948	0.7316	0.01267	Uiso	1	0.179306
H55	H	0.9524	0.789	0.605	0.01267	Uiso	1	0.192016
H56	H	0.8954	0.8689	0.6468	0.01267	Uiso	1	0.19952
C1	C	0.5175	0.6626	0.8914	0.01267	Uiso	1	0.227469
C2	C	0.6156	0.6662	0.0562	0.01267	Uiso	1	0.277035
C3	C	0.6899	0.7642	0.116	0.01267	Uiso	1	-0.042025
C4	C	0.676	0.8046	0.0542	0.01267	Uiso	1	0.397211
C5	C	0.7359	0.7171	0.2326	0.01267	Uiso	1	0.18813
C6	C	0.583	0.3801	0.9002	0.01267	Uiso	1	0.717775
C7	C	0.6376	0.309	0.8496	0.01267	Uiso	1	-0.611188
C8	C	0.8739	0.2288	0.8914	0.01267	Uiso	1	0.228265
C9	C	0.9406	0.39	0.0562	0.01267	Uiso	1	0.275626
C10	C	0.9261	0.3518	0.116	0.01267	Uiso	1	-0.040752
C11	C	0.8782	0.2496	0.0542	0.01267	Uiso	1	0.398224
C12	C	0.9967	0.5155	0.2326	0.01267	Uiso	1	0.18826
C13	C	0.8172	0.5201	0.9002	0.01267	Uiso	1	0.717013

C14	C	0.712	0.5406	0.8496	0.01267	Uiso	1	-0.612868
C15	C	0.1626	0.3739	0.3914	0.01267	Uiso	1	0.228777
C16	C	0.1662	0.4406	0.5562	0.01267	Uiso	1	0.276343
C17	C	0.2642	0.4261	0.616	0.01267	Uiso	1	-0.042293
C18	C	0.3046	0.3782	0.5542	0.01267	Uiso	1	0.398902
C19	C	0.2171	0.4967	0.7326	0.01267	Uiso	1	0.188052
C20	C	0.8801	0.3172	0.4002	0.01267	Uiso	1	0.718198
C21	C	0.809	0.212	0.3496	0.01267	Uiso	1	-0.613209
C22	C	0.7288	0.0175	0.3914	0.01267	Uiso	1	0.227062
C23	C	0.89	0.1156	0.5562	0.01267	Uiso	1	0.276907
C24	C	0.8518	0.1899	0.616	0.01267	Uiso	1	-0.041358
C25	C	0.7496	0.176	0.5542	0.01267	Uiso	1	0.39768
C26	C	0.0155	0.2359	0.7326	0.01267	Uiso	1	0.188246
C27	C	0.0201	0.083	0.4002	0.01267	Uiso	1	0.717124
C28	C	0.0406	0.1376	0.3496	0.01267	Uiso	1	-0.61334
C29	C	0.4825	0.3374	0.1086	0.01267	Uiso	1	0.227419
C30	C	0.3844	0.3338	0.9438	0.01267	Uiso	1	0.276894
C31	C	0.3101	0.2358	0.884	0.01267	Uiso	1	-0.0418
C32	C	0.324	0.1954	0.9458	0.01267	Uiso	1	0.397182
C33	C	0.2641	0.2829	0.7674	0.01267	Uiso	1	0.18813
C34	C	0.417	0.6199	0.0998	0.01267	Uiso	1	0.717709
C35	C	0.3624	0.691	0.1504	0.01267	Uiso	1	-0.6112
C36	C	0.1261	0.7712	0.1086	0.01267	Uiso	1	0.228157
C37	C	0.0594	0.61	0.9438	0.01267	Uiso	1	0.275594
C38	C	0.0739	0.6482	0.884	0.01267	Uiso	1	-0.040859
C39	C	0.1218	0.7504	0.9458	0.01267	Uiso	1	0.398249
C40	C	0.0033	0.4845	0.7674	0.01267	Uiso	1	0.188177
C41	C	0.1828	0.4799	0.0998	0.01267	Uiso	1	0.71712
C42	C	0.288	0.4594	0.1504	0.01267	Uiso	1	-0.612854
C43	C	0.8374	0.6261	0.6086	0.01267	Uiso	1	0.22887
C44	C	0.8338	0.5594	0.4438	0.01267	Uiso	1	0.276214
C45	C	0.7358	0.5739	0.384	0.01267	Uiso	1	-0.042205
C46	C	0.6954	0.6218	0.4458	0.01267	Uiso	1	0.398881
C47	C	0.7829	0.5033	0.2674	0.01267	Uiso	1	0.188154
C48	C	0.1199	0.6828	0.5998	0.01267	Uiso	1	0.718034
C49	C	0.191	0.788	0.6504	0.01267	Uiso	1	-0.613103
C50	C	0.2712	0.9825	0.6086	0.01267	Uiso	1	0.22712
C51	C	0.11	0.8844	0.4438	0.01267	Uiso	1	0.276804
C52	C	0.1482	0.8101	0.384	0.01267	Uiso	1	-0.04133
C53	C	0.2504	0.824	0.4458	0.01267	Uiso	1	0.397677
C54	C	0.9845	0.7641	0.2674	0.01267	Uiso	1	0.188261
C55	C	0.9799	0.917	0.5998	0.01267	Uiso	1	0.717092
C56	C	0.9594	0.8624	0.6504	0.01267	Uiso	1	-0.613295
N1	N	0.584	0.7493	0.9342	0.01267	Uiso	1	-0.434086
N2	N	0.5268	0.6133	0.9444	0.01267	Uiso	1	-0.34568
N3	N	0.7411	0.8981	0.0994	0.01267	Uiso	1	-0.678818
N4	N	0.7664	0.7946	0.2268	0.01267	Uiso	1	-0.331745
N5	N	0.6474	0.6387	0.1332	0.01267	Uiso	1	-0.36112
N6	N	0.8502	0.1849	0.9342	0.01267	Uiso	1	-0.434192
N7	N	0.9176	0.3311	0.9444	0.01267	Uiso	1	-0.34482
N8	N	0.8583	0.2013	0.0994	0.01267	Uiso	1	-0.684896
N9	N	0.9604	0.4322	0.2268	0.01267	Uiso	1	-0.332454

N10	N	0.9858	0.4945	0.1332	0.01267	Uiso	1	-0.36137
N11	N	0.2493	0.3502	0.4342	0.01267	Uiso	1	-0.435427
N12	N	0.1133	0.4176	0.4444	0.01267	Uiso	1	-0.344763
N13	N	0.3981	0.3583	0.5994	0.01267	Uiso	1	-0.683807
N14	N	0.2946	0.4604	0.7268	0.01267	Uiso	1	-0.330986
N15	N	0.1387	0.4858	0.6332	0.01267	Uiso	1	-0.361371
N16	N	0.6849	0.084	0.4342	0.01267	Uiso	1	-0.434372
N17	N	0.8311	0.0268	0.4444	0.01267	Uiso	1	-0.345537
N18	N	0.7013	0.2411	0.5994	0.01267	Uiso	1	-0.678175
N19	N	0.9322	0.2664	0.7268	0.01267	Uiso	1	-0.332753
N20	N	0.9945	0.1474	0.6332	0.01267	Uiso	1	-0.362541
N21	N	0.416	0.2507	0.0658	0.01267	Uiso	1	-0.433905
N22	N	0.4732	0.3867	0.0556	0.01267	Uiso	1	-0.345623
N23	N	0.2589	0.1019	0.9006	0.01267	Uiso	1	-0.67866
N24	N	0.2336	0.2054	0.7732	0.01267	Uiso	1	-0.331861
N25	N	0.3526	0.3613	0.8668	0.01267	Uiso	1	-0.361342
N26	N	0.1498	0.8151	0.0658	0.01267	Uiso	1	-0.434146
N27	N	0.0824	0.6689	0.0556	0.01267	Uiso	1	-0.344686
N28	N	0.1417	0.7987	0.9006	0.01267	Uiso	1	-0.684898
N29	N	0.0396	0.5678	0.7732	0.01267	Uiso	1	-0.332372
N30	N	0.0142	0.5055	0.8668	0.01267	Uiso	1	-0.360959
N31	N	0.7507	0.6498	0.5658	0.01267	Uiso	1	-0.435388
N32	N	0.8867	0.5824	0.5556	0.01267	Uiso	1	-0.344573
N33	N	0.6019	0.6417	0.4006	0.01267	Uiso	1	-0.683875
N34	N	0.7054	0.5396	0.2732	0.01267	Uiso	1	-0.331012
N35	N	0.8613	0.5142	0.3668	0.01267	Uiso	1	-0.361742
N36	N	0.3151	0.916	0.5658	0.01267	Uiso	1	-0.434537
N37	N	0.1689	0.9732	0.5556	0.01267	Uiso	1	-0.345582
N38	N	0.2987	0.7589	0.4006	0.01267	Uiso	1	-0.678222
N39	N	0.0678	0.7336	0.2732	0.01267	Uiso	1	-0.332802
N40	N	0.0055	0.8526	0.3668	0.01267	Uiso	1	-0.362339
O1	O	0.5096	0.3997	0.8362	0.01267	Uiso	1	-0.551547
O2	O	0.6207	0.418	0.0068	0.01267	Uiso	1	-0.544534
O3	O	0.8266	0.4365	0.8362	0.01267	Uiso	1	-0.54951
O4	O	0.8861	0.5888	0.0068	0.01267	Uiso	1	-0.545113
O5	O	0.8997	0.3266	0.3362	0.01267	Uiso	1	-0.551351
O6	O	0.918	0.3861	0.5068	0.01267	Uiso	1	-0.54451
O7	O	0.9365	0.0096	0.3362	0.01267	Uiso	1	-0.549684
O8	O	0.0888	0.1207	0.5068	0.01267	Uiso	1	-0.544019
O9	O	0.4904	0.6003	0.1638	0.01267	Uiso	1	-0.551448
O10	O	0.3793	0.582	0.9932	0.01267	Uiso	1	-0.544529
O11	O	0.1734	0.5635	0.1638	0.01267	Uiso	1	-0.549543
O12	O	0.1139	0.4112	0.9932	0.01267	Uiso	1	-0.545264
O13	O	0.1003	0.6734	0.6638	0.01267	Uiso	1	-0.55129
O14	O	0.082	0.6139	0.4932	0.01267	Uiso	1	-0.544416
O15	O	0.0635	0.9904	0.6638	0.01267	Uiso	1	-0.549613
O16	O	0.9112	0.8793	0.4932	0.01267	Uiso	1	-0.544039

```

data_NUDLAA_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a11.1753
_cell_length_b      27.609
_cell_length_c27.609
_cell_angle_alpha   87.6526
_cell_angle_beta    78.3236
_cell_angle_gamma   78.3237
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.39435   0.45855   0.45975   0.01267   Uiso  1.00  0.775036
Zn2  Zn   0.31265   0.54145   0.54025   0.01267   Uiso  1.00  0.774536
Zn3  Zn   0.1041 0.04025   0.95855   0.01267   Uiso  1.00  0.775488
Zn4  Zn   0.1029 0.95975   0.04145   0.01267   Uiso  1.00  0.775100
Zn5  Zn   0.93735   0.95975   0.95855   0.01267   Uiso  1.00  0.774393
Zn6  Zn   0.85565   0.04025   0.04145   0.01267   Uiso  1.00  0.775036
Zn7  Zn   0.1471 0.45855   0.54025   0.01267   Uiso  1.00  0.775296
Zn8  Zn   0.1459 0.54145   0.45975   0.01267   Uiso  1.00  0.775359
Zn9  Zn   0.41168   0.17664   0         0.01267   Uiso  1.00  0.827327
Zn10 Zn   0.58832   0.82336   0         0.01267   Uiso  1.00  0.826218
Zn11 Zn   0.66168   0.5       0.67664   0.01267   Uiso  1.00  0.824549
Zn12 Zn   0.83832   0.5       0.32336   0.01267   Uiso  1.00  0.827563
Zn13 Zn   0.41324   0         0.17352   0.01267   Uiso  1.00  0.776046
Zn14 Zn   0.58676   0         0.82648   0.01267   Uiso  1.00  0.774532
Zn15 Zn   0.83676   0.32648   0.5       0.01267   Uiso  1.00  0.775585
Zn16 Zn   0.66324   0.67352   0.5       0.01267   Uiso  1.00  0.776638
H1   H    0.4138 0.1347 0.0913 0.01267   Uiso  1.00  0.347803
H2   H    0.447  0.1017 0.1327 0.01267   Uiso  1.00  0.347121
H3   H    0.2257 0.1289 0.9655 0.01267   Uiso  1.00  0.098384
H4   H    0.218  0.9733 0.1295 0.01267   Uiso  1.00  0.103732
H5   H    0.5737 0.3268 0.3294 0.01267   Uiso  1.00  0.113822
H6   H    0.5505 0.2891 0.2591 0.01267   Uiso  1.00  0.106693
H7   H    0.2083 0.3735 0.2693 0.01267   Uiso  1.00  0.122722
H8   H    0.2315 0.4111 0.3395 0.01267   Uiso  1.00  0.119295
H9   H    0.4741 0.2388 0.2232 0.01267   Uiso  1.00  0.113252

```

H10	H	0.4696	0.202	0.1498	0.01267	Uiso	1.00	0.120969
H11	H	0.2447	0.3248	0.1132	0.01267	Uiso	1.00	0.126220
H12	H	0.2492	0.3617	0.1865	0.01267	Uiso	1.00	0.126476
H13	H	0.0377	0.9743	0.2939	0.01267	Uiso	1.00	0.126291
H14	H	0.9346	0.9199	0.3439	0.01267	Uiso	1.00	0.128226
H15	H	0.2143	0.8069	0.2921	0.01267	Uiso	1.00	0.116045
H16	H	0.3175	0.8614	0.242	0.01267	Uiso	1.00	0.121330
H17	H	0.6398	0.8653	0.9087	0.01267	Uiso	1.00	0.347416
H18	H	0.6814	0.8983	0.8673	0.01267	Uiso	1.00	0.348902
H19	H	0.3201	0.8711	0.0345	0.01267	Uiso	1.00	0.098034
H20	H	0.3208	0.0267	0.8705	0.01267	Uiso	1.00	0.103442
H21	H	0.2299	0.6732	0.6706	0.01267	Uiso	1.00	0.114118
H22	H	0.0987	0.7109	0.7409	0.01267	Uiso	1.00	0.106340
H23	H	0.8511	0.6265	0.7307	0.01267	Uiso	1.00	0.122012
H24	H	0.9821	0.5889	0.6605	0.01267	Uiso	1.00	0.120583
H25	H	0.9361	0.7612	0.7768	0.01267	Uiso	1.00	0.113522
H26	H	0.8214	0.798	0.8502	0.01267	Uiso	1.00	0.120758
H27	H	0.6827	0.6752	0.8868	0.01267	Uiso	1.00	0.127919
H28	H	0.7974	0.6383	0.8135	0.01267	Uiso	1.00	0.126419
H29	H	0.3059	0.0257	0.7061	0.01267	Uiso	1.00	0.126212
H30	H	0.1984	0.0801	0.6561	0.01267	Uiso	1.00	0.127653
H31	H	0.3133	0.1931	0.7079	0.01267	Uiso	1.00	0.115840
H32	H	0.4209	0.1386	0.758	0.01267	Uiso	1.00	0.119814
H33	H	0.7551	0.4087	0.6347	0.01267	Uiso	1.00	0.348136
H34	H	0.8297	0.3673	0.6017	0.01267	Uiso	1.00	0.348169
H35	H	0.4412	0.5345	0.6289	0.01267	Uiso	1.00	0.098225
H36	H	0.5975	0.3705	0.4733	0.01267	Uiso	1.00	0.103926
H37	H	0.1531	0.1706	0.8268	0.01267	Uiso	1.00	0.113435
H38	H	0.0596	0.2409	0.7891	0.01267	Uiso	1.00	0.106521
H39	H	0.7276	0.2307	0.8735	0.01267	Uiso	1.00	0.122905
H40	H	0.821	0.1605	0.9111	0.01267	Uiso	1.00	0.118868
H41	H	0.9473	0.2768	0.7388	0.01267	Uiso	1.00	0.112197
H42	H	0.8694	0.3502	0.702	0.01267	Uiso	1.00	0.121472
H43	H	0.6079	0.3868	0.8248	0.01267	Uiso	1.00	0.127314
H44	H	0.6857	0.3135	0.8617	0.01267	Uiso	1.00	0.125987
H45	H	0.5816	0.2061	0.4743	0.01267	Uiso	1.00	0.126485
H46	H	0.5285	0.1561	0.4199	0.01267	Uiso	1.00	0.127117
H47	H	0.7564	0.2079	0.3069	0.01267	Uiso	1.00	0.116542
H48	H	0.8095	0.258	0.3614	0.01267	Uiso	1.00	0.120354
H49	H	0.7985	0.5913	0.3653	0.01267	Uiso	1.00	0.348306
H50	H	0.7987	0.6327	0.3983	0.01267	Uiso	1.00	0.349961
H51	H	0.6046	0.4655	0.3711	0.01267	Uiso	1.00	0.097464
H52	H	0.4413	0.6295	0.5267	0.01267	Uiso	1.00	0.103572
H53	H	0.1505	0.8294	0.1732	0.01267	Uiso	1.00	0.113322
H54	H	0.0896	0.7591	0.2109	0.01267	Uiso	1.00	0.106928
H55	H	0.8318	0.7693	0.1265	0.01267	Uiso	1.00	0.121771
H56	H	0.8926	0.8395	0.0889	0.01267	Uiso	1.00	0.118610
H57	H	0.9629	0.7232	0.2612	0.01267	Uiso	1.00	0.112331
H58	H	0.9216	0.6498	0.298	0.01267	Uiso	1.00	0.121445
H59	H	0.8195	0.6132	0.1752	0.01267	Uiso	1.00	0.126802
H60	H	0.8609	0.6865	0.1383	0.01267	Uiso	1.00	0.126208
H61	H	0.262	0.7939	0.5257	0.01267	Uiso	1.00	0.126484

H62	H	0.1045	0.8439	0.5801	0.01267	Uiso	1.00	0.128226
H63	H	0.2712	0.7921	0.6931	0.01267	Uiso	1.00	0.116043
H64	H	0.4289	0.742	0.6386	0.01267	Uiso	1.00	0.120942
H65	H	0.6102	0.5913	0.6347	0.01267	Uiso	1.00	0.347254
H66	H	0.5686	0.6327	0.6017	0.01267	Uiso	1.00	0.355073
H67	H	0.9299	0.4655	0.6289	0.01267	Uiso	1.00	0.098117
H68	H	0.9292	0.6295	0.4733	0.01267	Uiso	1.00	0.104038
H69	H	0.0201	0.8294	0.8268	0.01267	Uiso	1.00	0.113637
H70	H	0.1513	0.7591	0.7891	0.01267	Uiso	1.00	0.106402
H71	H	0.3989	0.7693	0.8735	0.01267	Uiso	1.00	0.122446
H72	H	0.2679	0.8395	0.9111	0.01267	Uiso	1.00	0.120333
H73	H	0.3139	0.7232	0.7388	0.01267	Uiso	1.00	0.113267
H74	H	0.4286	0.6498	0.702	0.01267	Uiso	1.00	0.121270
H75	H	0.5673	0.6132	0.8248	0.01267	Uiso	1.00	0.128086
H76	H	0.4526	0.6865	0.8617	0.01267	Uiso	1.00	0.126129
H77	H	0.9441	0.7939	0.4743	0.01267	Uiso	1.00	0.125849
H78	H	0.0516	0.8439	0.4199	0.01267	Uiso	1.00	0.127332
H79	H	0.9367	0.7921	0.3069	0.01267	Uiso	1.00	0.116129
H80	H	0.8291	0.742	0.3614	0.01267	Uiso	1.00	0.120060
H81	H	0.8362	0.4087	0.3653	0.01267	Uiso	1.00	0.347792
H82	H	0.803	0.3673	0.3983	0.01267	Uiso	1.00	0.347079
H83	H	0.0243	0.5345	0.3711	0.01267	Uiso	1.00	0.098300
H84	H	0.032	0.3705	0.5267	0.01267	Uiso	1.00	0.103610
H85	H	0.6763	0.1706	0.1732	0.01267	Uiso	1.00	0.114064
H86	H	0.6995	0.2409	0.2109	0.01267	Uiso	1.00	0.106795
H87	H	0.0417	0.2307	0.1265	0.01267	Uiso	1.00	0.122819
H88	H	0.0185	0.1605	0.0889	0.01267	Uiso	1.00	0.119654
H89	H	0.7759	0.2768	0.2612	0.01267	Uiso	1.00	0.113507
H90	H	0.7804	0.3502	0.298	0.01267	Uiso	1.00	0.121063
H91	H	0.0053	0.3868	0.1752	0.01267	Uiso	1.00	0.126435
H92	H	0.0008	0.3135	0.1383	0.01267	Uiso	1.00	0.126727
H93	H	0.2123	0.2061	0.5257	0.01267	Uiso	1.00	0.126976
H94	H	0.3154	0.1561	0.5801	0.01267	Uiso	1.00	0.128739
H95	H	0.0357	0.2079	0.6931	0.01267	Uiso	1.00	0.115920
H96	H	0.9325	0.258	0.6386	0.01267	Uiso	1.00	0.121181
H97	H	0.4515	0.1347	0.9087	0.01267	Uiso	1.00	0.347922
H98	H	0.4513	0.1017	0.8673	0.01267	Uiso	1.00	0.349750
H99	H	0.6454	0.1289	0.0345	0.01267	Uiso	1.00	0.097149
H100	H	0.8087	0.9733	0.8705	0.01267	Uiso	1.00	0.103475
H101	H	0.0995	0.3268	0.6706	0.01267	Uiso	1.00	0.113237
H102	H	0.1604	0.2891	0.7409	0.01267	Uiso	1.00	0.106640
H103	H	0.4182	0.3735	0.7307	0.01267	Uiso	1.00	0.121893
H104	H	0.3574	0.4111	0.6605	0.01267	Uiso	1.00	0.118775
H105	H	0.2871	0.2388	0.7768	0.01267	Uiso	1.00	0.112558
H106	H	0.3284	0.202	0.8502	0.01267	Uiso	1.00	0.121492
H107	H	0.4305	0.3248	0.8868	0.01267	Uiso	1.00	0.126626
H108	H	0.3891	0.3617	0.8135	0.01267	Uiso	1.00	0.126240
H109	H	0.988	0.9743	0.7061	0.01267	Uiso	1.00	0.126263
H110	H	0.1455	0.9199	0.6561	0.01267	Uiso	1.00	0.128471
H111	H	0.9788	0.8069	0.7079	0.01267	Uiso	1.00	0.116182
H112	H	0.8211	0.8614	0.758	0.01267	Uiso	1.00	0.120432
H113	H	0.4949	0.8653	0.0913	0.01267	Uiso	1.00	0.348216

H114	H	0.4203	0.8983	0.1327	0.01267	Uiso	1.00	0.348074
H115	H	0.8088	0.8711	0.9655	0.01267	Uiso	1.00	0.098754
H116	H	0.6525	0.0267	0.1295	0.01267	Uiso	1.00	0.103877
H117	H	0.0969	0.6732	0.3294	0.01267	Uiso	1.00	0.113075
H118	H	0.1904	0.7109	0.2591	0.01267	Uiso	1.00	0.106344
H119	H	0.5224	0.6265	0.2693	0.01267	Uiso	1.00	0.123095
H120	H	0.429	0.5889	0.3395	0.01267	Uiso	1.00	0.118909
H121	H	0.3027	0.7612	0.2232	0.01267	Uiso	1.00	0.111973
H122	H	0.3806	0.798	0.1498	0.01267	Uiso	1.00	0.121008
H123	H	0.6421	0.6752	0.1132	0.01267	Uiso	1.00	0.127575
H124	H	0.5643	0.6383	0.1865	0.01267	Uiso	1.00	0.126197
H125	H	0.6684	0.0257	0.2939	0.01267	Uiso	1.00	0.126718
H126	H	0.7215	0.0801	0.3439	0.01267	Uiso	1.00	0.127048
H127	H	0.4936	0.1931	0.2921	0.01267	Uiso	1.00	0.116468
H128	H	0.4405	0.1386	0.242	0.01267	Uiso	1.00	0.120441
C1	C	0.2348	0.1112	0.9944	0.01267	Uiso	1.00	0.198289
C2	C	0.2148	0.0541	0.0455	0.01267	Uiso	1.00	0.334744
C3	C	0.2346	0.0007	0.1105	0.01267	Uiso	1.00	0.244714
C4	C	0.338	0.0733	0.0953	0.01267	Uiso	1.00	0.373931
C5	C	0.2855	0.0851	0.0589	0.01267	Uiso	1.00	-0.049856
C6	C	0.4285	0.3983	0.3853	0.01267	Uiso	1.00	0.578534
C7	C	0.5005	0.3361	0.3173	0.01267	Uiso	1.00	-0.109285
C8	C	0.4866	0.3136	0.2752	0.01267	Uiso	1.00	-0.152477
C9	C	0.3771	0.3276	0.2572	0.01267	Uiso	1.00	0.081091
C10	C	0.2816	0.3641	0.2813	0.01267	Uiso	1.00	-0.134889
C11	C	0.2954	0.3867	0.3235	0.01267	Uiso	1.00	-0.099905
C12	C	0.4049	0.3726	0.3414	0.01267	Uiso	1.00	-0.017685
C13	C	0.4281	0.2561	0.2011	0.01267	Uiso	1.00	-0.150679
C14	C	0.4255	0.2339	0.1571	0.01267	Uiso	1.00	-0.107775
C15	C	0.3568	0.2596	0.1242	0.01267	Uiso	1.00	-0.014220
C16	C	0.2907	0.3076	0.1352	0.01267	Uiso	1.00	-0.103890
C17	C	0.2934	0.3297	0.1791	0.01267	Uiso	1.00	-0.135842
C18	C	0.362	0.304	0.2122	0.01267	Uiso	1.00	0.084251
C19	C	0.3542	0.2364	0.0754	0.01267	Uiso	1.00	0.573090
C20	C	0.2636	0.9539	0.2305	0.01267	Uiso	1.00	0.581725
C21	C	0.0728	0.9408	0.2936	0.01267	Uiso	1.00	-0.090775
C22	C	0.0113	0.9081	0.3235	0.01267	Uiso	1.00	-0.155284
C23	C	0.0645	0.858	0.323	0.01267	Uiso	1.00	0.088127
C24	C	0.1785	0.8405	0.2925	0.01267	Uiso	1.00	-0.156287
C25	C	0.2407	0.8731	0.2625	0.01267	Uiso	1.00	-0.109924
C26	C	0.1878	0.9232	0.263	0.01267	Uiso	1.00	-0.026972
C27	C	0.3404	0.8888	0.0056	0.01267	Uiso	1.00	0.197473
C28	C	0.3144	0.9459	0.9545	0.01267	Uiso	1.00	0.338370
C29	C	0.3458	0.9993	0.8895	0.01267	Uiso	1.00	0.243336
C30	C	0.5066	0.9267	0.9047	0.01267	Uiso	1.00	0.372588
C31	C	0.4295	0.9149	0.9411	0.01267	Uiso	1.00	-0.051195
C32	C	0.2121	0.6017	0.6147	0.01267	Uiso	1.00	0.577460
C33	C	0.1539	0.6639	0.6827	0.01267	Uiso	1.00	-0.107879
C34	C	0.0754	0.6864	0.7248	0.01267	Uiso	1.00	-0.153227
C35	C	0.9619	0.6724	0.7428	0.01267	Uiso	1.00	0.080688
C36	C	0.927	0.6359	0.7187	0.01267	Uiso	1.00	-0.133515
C37	C	0.0056	0.6133	0.6765	0.01267	Uiso	1.00	-0.100904

C38	C	0.1189	0.6274	0.6586	0.01267	Uiso	1.00	-0.018631
C39	C	0.8853	0.7439	0.7989	0.01267	Uiso	1.00	-0.149238
C40	C	0.8165	0.7661	0.8429	0.01267	Uiso	1.00	-0.107979
C41	C	0.7406	0.7404	0.8758	0.01267	Uiso	1.00	-0.013951
C42	C	0.7335	0.6924	0.8648	0.01267	Uiso	1.00	-0.105272
C43	C	0.8022	0.6703	0.8209	0.01267	Uiso	1.00	-0.135833
C44	C	0.8782	0.696	0.7878	0.01267	Uiso	1.00	0.084537
C45	C	0.666	0.7636	0.9246	0.01267	Uiso	1.00	0.572560
C46	C	0.448	0.0461	0.7695	0.01267	Uiso	1.00	0.578405
C47	C	0.3072	0.0592	0.7064	0.01267	Uiso	1.00	-0.087325
C48	C	0.2429	0.0919	0.6765	0.01267	Uiso	1.00	-0.154857
C49	C	0.2455	0.142	0.677	0.01267	Uiso	1.00	0.088379
C50	C	0.3115	0.1595	0.7075	0.01267	Uiso	1.00	-0.156375
C51	C	0.3763	0.1269	0.7375	0.01267	Uiso	1.00	-0.109369
C52	C	0.374	0.0768	0.737	0.01267	Uiso	1.00	-0.025469
C53	C	0.4792	0.5056	0.6112	0.01267	Uiso	1.00	0.197431
C54	C	0.5103	0.4545	0.5541	0.01267	Uiso	1.00	0.335139
C55	C	0.5951	0.3895	0.5007	0.01267	Uiso	1.00	0.246368
C56	C	0.6833	0.4047	0.5733	0.01267	Uiso	1.00	0.374722
C57	C	0.5944	0.4411	0.5851	0.01267	Uiso	1.00	-0.050665
C58	C	0.0638	0.1147	0.8983	0.01267	Uiso	1.00	0.576986
C59	C	0.0678	0.1827	0.8361	0.01267	Uiso	1.00	-0.106835
C60	C	0.0118	0.2248	0.8136	0.01267	Uiso	1.00	-0.154010
C61	C	0.8843	0.2428	0.8276	0.01267	Uiso	1.00	0.080989
C62	C	0.8129	0.2187	0.8641	0.01267	Uiso	1.00	-0.134877
C63	C	0.8689	0.1765	0.8867	0.01267	Uiso	1.00	-0.098616
C64	C	0.9963	0.1586	0.8726	0.01267	Uiso	1.00	-0.018007
C65	C	0.8792	0.2989	0.7561	0.01267	Uiso	1.00	-0.147128
C66	C	0.8326	0.3429	0.7339	0.01267	Uiso	1.00	-0.109429
C67	C	0.731	0.3758	0.7596	0.01267	Uiso	1.00	-0.011313
C68	C	0.6759	0.3648	0.8076	0.01267	Uiso	1.00	-0.105298
C69	C	0.7225	0.3209	0.8297	0.01267	Uiso	1.00	-0.136177
C70	C	0.8242	0.2878	0.804	0.01267	Uiso	1.00	0.085180
C71	C	0.6796	0.4246	0.7364	0.01267	Uiso	1.00	0.571940
C72	C	0.7441	0.2695	0.4539	0.01267	Uiso	1.00	0.579115
C73	C	0.6164	0.2064	0.4408	0.01267	Uiso	1.00	-0.090801
C74	C	0.5848	0.1765	0.4081	0.01267	Uiso	1.00	-0.153377
C75	C	0.6375	0.177	0.358	0.01267	Uiso	1.00	0.089099
C76	C	0.721	0.2075	0.3405	0.01267	Uiso	1.00	-0.159064
C77	C	0.7532	0.2375	0.3731	0.01267	Uiso	1.00	-0.108407
C78	C	0.7008	0.237	0.4232	0.01267	Uiso	1.00	-0.026564
C79	C	0.596	0.4944	0.3888	0.01267	Uiso	1.00	0.199610
C80	C	0.5189	0.5455	0.4459	0.01267	Uiso	1.00	0.336130
C81	C	0.4853	0.6105	0.4993	0.01267	Uiso	1.00	0.245967
C82	C	0.6613	0.5953	0.4267	0.01267	Uiso	1.00	0.374052
C83	C	0.6206	0.5589	0.4149	0.01267	Uiso	1.00	-0.050491
C84	C	0.0768	0.8853	0.1017	0.01267	Uiso	1.00	0.576763
C85	C	0.0866	0.8173	0.1639	0.01267	Uiso	1.00	-0.106020
C86	C	0.0502	0.7752	0.1864	0.01267	Uiso	1.00	-0.154972
C87	C	0.9547	0.7572	0.1724	0.01267	Uiso	1.00	0.081164
C88	C	0.8957	0.7813	0.1359	0.01267	Uiso	1.00	-0.134483
C89	C	0.9321	0.8235	0.1133	0.01267	Uiso	1.00	-0.097606

C90	C	0.0275	0.8414	0.1274	0.01267	Uiso	1.00	-0.018493
C91	C	0.9342	0.7011	0.2439	0.01267	Uiso	1.00	-0.148575
C92	C	0.9094	0.6571	0.2661	0.01267	Uiso	1.00	-0.108691
C93	C	0.8664	0.6242	0.2404	0.01267	Uiso	1.00	-0.013620
C94	C	0.8483	0.6352	0.1924	0.01267	Uiso	1.00	-0.103529
C95	C	0.8731	0.6791	0.1703	0.01267	Uiso	1.00	-0.136879
C96	C	0.916	0.7122	0.196	0.01267	Uiso	1.00	0.085581
C97	C	0.8406	0.5754	0.2636	0.01267	Uiso	1.00	0.573089
C98	C	0.4675	0.7305	0.5461	0.01267	Uiso	1.00	0.578800
C99	C	0.2636	0.7936	0.5592	0.01267	Uiso	1.00	-0.089321
C100	C	0.1694	0.8235	0.5919	0.01267	Uiso	1.00	-0.154045
C101	C	0.1725	0.823	0.642	0.01267	Uiso	1.00	0.087713
C102	C	0.269	0.7925	0.6595	0.01267	Uiso	1.00	-0.157123
C103	C	0.3638	0.7625	0.6269	0.01267	Uiso	1.00	-0.108570
C104	C	0.361	0.763	0.5768	0.01267	Uiso	1.00	-0.027419
C105	C	0.9096	0.4944	0.6112	0.01267	Uiso	1.00	0.197831
C106	C	0.9356	0.5455	0.5541	0.01267	Uiso	1.00	0.338388
C107	C	0.9042	0.6105	0.5007	0.01267	Uiso	1.00	0.243156
C108	C	0.7434	0.5953	0.5733	0.01267	Uiso	1.00	0.372265
C109	C	0.8205	0.5589	0.5851	0.01267	Uiso	1.00	-0.051483
C110	C	0.0379	0.8853	0.8983	0.01267	Uiso	1.00	0.577856
C111	C	0.0961	0.8173	0.8361	0.01267	Uiso	1.00	-0.108053
C112	C	0.1746	0.7752	0.8136	0.01267	Uiso	1.00	-0.153050
C113	C	0.2881	0.7572	0.8276	0.01267	Uiso	1.00	0.080983
C114	C	0.323	0.7813	0.8641	0.01267	Uiso	1.00	-0.133758
C115	C	0.2444	0.8235	0.8867	0.01267	Uiso	1.00	-0.100715
C116	C	0.1311	0.8414	0.8726	0.01267	Uiso	1.00	-0.018729
C117	C	0.3647	0.7011	0.7561	0.01267	Uiso	1.00	-0.148760
C118	C	0.4335	0.6571	0.7339	0.01267	Uiso	1.00	-0.108018
C119	C	0.5094	0.6242	0.7596	0.01267	Uiso	1.00	-0.013150
C120	C	0.5165	0.6352	0.8076	0.01267	Uiso	1.00	-0.105477
C121	C	0.4478	0.6791	0.8297	0.01267	Uiso	1.00	-0.136078
C122	C	0.3718	0.7122	0.804	0.01267	Uiso	1.00	0.084254
C123	C	0.584	0.5754	0.7364	0.01267	Uiso	1.00	0.572039
C124	C	0.802	0.7305	0.4539	0.01267	Uiso	1.00	0.580879
C125	C	0.9428	0.7936	0.4408	0.01267	Uiso	1.00	-0.089491
C126	C	0.0071	0.8235	0.4081	0.01267	Uiso	1.00	-0.154763
C127	C	0.0045	0.823	0.358	0.01267	Uiso	1.00	0.087373
C128	C	0.9385	0.7925	0.3405	0.01267	Uiso	1.00	-0.156494
C129	C	0.8737	0.7625	0.3731	0.01267	Uiso	1.00	-0.108417
C130	C	0.876	0.763	0.4232	0.01267	Uiso	1.00	-0.026916
C131	C	0.0152	0.5056	0.3888	0.01267	Uiso	1.00	0.198234
C132	C	0.0352	0.4545	0.4459	0.01267	Uiso	1.00	0.334816
C133	C	0.0154	0.3895	0.4993	0.01267	Uiso	1.00	0.244642
C134	C	0.912	0.4047	0.4267	0.01267	Uiso	1.00	0.373956
C135	C	0.9645	0.4411	0.4149	0.01267	Uiso	1.00	-0.049901
C136	C	0.8215	0.1147	0.1017	0.01267	Uiso	1.00	0.578398
C137	C	0.7495	0.1827	0.1639	0.01267	Uiso	1.00	-0.108680
C138	C	0.7634	0.2248	0.1864	0.01267	Uiso	1.00	-0.152180
C139	C	0.8729	0.2428	0.1724	0.01267	Uiso	1.00	0.080980
C140	C	0.9684	0.2187	0.1359	0.01267	Uiso	1.00	-0.134219
C141	C	0.9546	0.1765	0.1133	0.01267	Uiso	1.00	-0.100094

C142	C	0.8451	0.1586	0.1274	0.01267	Uiso	1.00	-0.016751
C143	C	0.8219	0.2989	0.2439	0.01267	Uiso	1.00	-0.150463
C144	C	0.8245	0.3429	0.2661	0.01267	Uiso	1.00	-0.107516
C145	C	0.8932	0.3758	0.2404	0.01267	Uiso	1.00	-0.013669
C146	C	0.9593	0.3648	0.1924	0.01267	Uiso	1.00	-0.103540
C147	C	0.9566	0.3209	0.1703	0.01267	Uiso	1.00	-0.135587
C148	C	0.888	0.2878	0.196	0.01267	Uiso	1.00	0.084663
C149	C	0.8958	0.4246	0.2636	0.01267	Uiso	1.00	0.573485
C150	C	0.9864	0.2695	0.5461	0.01267	Uiso	1.00	0.581056
C151	C	0.1772	0.2064	0.5592	0.01267	Uiso	1.00	-0.090231
C152	C	0.2387	0.1765	0.5919	0.01267	Uiso	1.00	-0.154472
C153	C	0.1855	0.177	0.642	0.01267	Uiso	1.00	0.088733
C154	C	0.0715	0.2075	0.6595	0.01267	Uiso	1.00	-0.155777
C155	C	0.0093	0.2375	0.6269	0.01267	Uiso	1.00	-0.109757
C156	C	0.0622	0.237	0.5768	0.01267	Uiso	1.00	-0.025932
C157	C	0.654	0.1112	0.0056	0.01267	Uiso	1.00	0.198990
C158	C	0.7311	0.0541	0.9545	0.01267	Uiso	1.00	0.336501
C159	C	0.7647	0.0007	0.8895	0.01267	Uiso	1.00	0.246489
C160	C	0.5887	0.0733	0.9047	0.01267	Uiso	1.00	0.374623
C161	C	0.6294	0.0851	0.9411	0.01267	Uiso	1.00	-0.050773
C162	C	0.1732	0.3983	0.6147	0.01267	Uiso	1.00	0.576844
C163	C	0.1634	0.3361	0.6827	0.01267	Uiso	1.00	-0.106638
C164	C	0.1998	0.3136	0.7248	0.01267	Uiso	1.00	-0.154556
C165	C	0.2953	0.3276	0.7428	0.01267	Uiso	1.00	0.081207
C166	C	0.3543	0.3641	0.7187	0.01267	Uiso	1.00	-0.134992
C167	C	0.3179	0.3867	0.6765	0.01267	Uiso	1.00	-0.097149
C168	C	0.2225	0.3726	0.6586	0.01267	Uiso	1.00	-0.018015
C169	C	0.3158	0.2561	0.7989	0.01267	Uiso	1.00	-0.148380
C170	C	0.3406	0.2339	0.8429	0.01267	Uiso	1.00	-0.108881
C171	C	0.3836	0.2596	0.8758	0.01267	Uiso	1.00	-0.013277
C172	C	0.4017	0.3076	0.8648	0.01267	Uiso	1.00	-0.103332
C173	C	0.3769	0.3297	0.8209	0.01267	Uiso	1.00	-0.136900
C174	C	0.334	0.304	0.7878	0.01267	Uiso	1.00	0.085728
C175	C	0.4094	0.2364	0.9246	0.01267	Uiso	1.00	0.573018
C176	C	0.7825	0.9539	0.7695	0.01267	Uiso	1.00	0.577242
C177	C	0.9864	0.9408	0.7064	0.01267	Uiso	1.00	-0.087842
C178	C	0.0806	0.9081	0.6765	0.01267	Uiso	1.00	-0.154154
C179	C	0.0775	0.858	0.677	0.01267	Uiso	1.00	0.089018
C180	C	0.981	0.8405	0.7075	0.01267	Uiso	1.00	-0.157870
C181	C	0.8862	0.8731	0.7375	0.01267	Uiso	1.00	-0.109421
C182	C	0.889	0.9232	0.737	0.01267	Uiso	1.00	-0.026657
C183	C	0.7708	0.8888	0.9944	0.01267	Uiso	1.00	0.197386
C184	C	0.7397	0.9459	0.0455	0.01267	Uiso	1.00	0.335086
C185	C	0.6549	0.9993	0.1105	0.01267	Uiso	1.00	0.246127
C186	C	0.5667	0.9267	0.0953	0.01267	Uiso	1.00	0.374290
C187	C	0.6556	0.9149	0.0589	0.01267	Uiso	1.00	-0.050274
C188	C	0.1862	0.6017	0.3853	0.01267	Uiso	1.00	0.577424
C189	C	0.1822	0.6639	0.3173	0.01267	Uiso	1.00	-0.106673
C190	C	0.2382	0.6864	0.2752	0.01267	Uiso	1.00	-0.153852
C191	C	0.3657	0.6724	0.2572	0.01267	Uiso	1.00	0.081230
C192	C	0.4371	0.6359	0.2813	0.01267	Uiso	1.00	-0.135079
C193	C	0.3811	0.6133	0.3235	0.01267	Uiso	1.00	-0.098754

C194	C	0.2537	0.6274	0.3414	0.01267	Uiso	1.00	-0.018170	
C195	C	0.3708	0.7439	0.2011	0.01267	Uiso	1.00	-0.147201	
C196	C	0.4174	0.7661	0.1571	0.01267	Uiso	1.00	-0.109377	
C197	C	0.519	0.7404	0.1242	0.01267	Uiso	1.00	-0.012284	
C198	C	0.5741	0.6924	0.1352	0.01267	Uiso	1.00	-0.105440	
C199	C	0.5275	0.6703	0.1791	0.01267	Uiso	1.00	-0.135326	
C200	C	0.4258	0.696	0.2122	0.01267	Uiso	1.00	0.084605	
C201	C	0.5704	0.7636	0.0754	0.01267	Uiso	1.00	0.572262	
C202	C	0.5059	0.0461	0.2305	0.01267	Uiso	1.00	0.579502	
C203	C	0.6336	0.0592	0.2936	0.01267	Uiso	1.00	-0.090978	
C204	C	0.6652	0.0919	0.3235	0.01267	Uiso	1.00	-0.153577	
C205	C	0.6125	0.142	0.323	0.01267	Uiso	1.00	0.088315	
C206	C	0.529	0.1595	0.2925	0.01267	Uiso	1.00	-0.158939	
C207	C	0.4968	0.1269	0.2625	0.01267	Uiso	1.00	-0.108598	
C208	C	0.5492	0.0768	0.263	0.01267	Uiso	1.00	-0.027301	
N1	N	0.1832	0.0718	0.0058	0.01267	Uiso	1.00	-0.334058	
N2	N	0.1834	0.0129	0.0699	0.01267	Uiso	1.00	-0.369607	
N3	N	0.306	0.0273	0.1227	0.01267	Uiso	1.00	-0.368065	
N4	N	0.3041	0.1256	0.0272	0.01267	Uiso	1.00	-0.325870	
N5	N	0.40941		0.10799	0.10819	0.01267	Uiso	1.00	-0.669926
N6	N	0.2608	0.9282	0.9942	0.01267	Uiso	1.00	-0.335591	
N7	N	0.2662	0.9871	0.9301	0.01267	Uiso	1.00	-0.371439	
N8	N	0.456	0.9727	0.8773	0.01267	Uiso	1.00	-0.368543	
N9	N	0.4569	0.8744	0.9728	0.01267	Uiso	1.00	-0.325341	
N10	N	0.62559		0.89201	0.89181	0.01267	Uiso	1.00	-0.671282
N11	N	0.439	0.4942	0.5718	0.01267	Uiso	1.00	-0.333212	
N12	N	0.5033	0.4301	0.5129	0.01267	Uiso	1.00	-0.371283	
N13	N	0.6787	0.3773	0.5273	0.01267	Uiso	1.00	-0.370359	
N14	N	0.5813	0.4728	0.6256	0.01267	Uiso	1.00	-0.325522	
N15	N	0.7676	0.39181		0.60799	0.01267	Uiso	1.00	-0.671558
N16	N	0.505	0.5058	0.4282	0.01267	Uiso	1.00	-0.334488	
N17	N	0.4463	0.5699	0.4871	0.01267	Uiso	1.00	-0.370446	
N18	N	0.5833	0.6227	0.4727	0.01267	Uiso	1.00	-0.369444	
N19	N	0.6797	0.5272	0.3744	0.01267	Uiso	1.00	-0.326070	
N20	N	0.7674	0.60819		0.39201	0.01267	Uiso	1.00	-0.673054
N21	N	0.9892	0.5058	0.5718	0.01267	Uiso	1.00	-0.335178	
N22	N	0.9838	0.5699	0.5129	0.01267	Uiso	1.00	-0.370719	
N23	N	0.794	0.6227	0.5273	0.01267	Uiso	1.00	-0.366947	
N24	N	0.7931	0.5272	0.6256	0.01267	Uiso	1.00	-0.325313	
N25	N	0.62441		0.60819	0.60799	0.01267	Uiso	1.00	-0.674896
N26	N	0.0668	0.4942	0.4282	0.01267	Uiso	1.00	-0.333957	
N27	N	0.0666	0.4301	0.4871	0.01267	Uiso	1.00	-0.369985	
N28	N	0.944	0.3773	0.4727	0.01267	Uiso	1.00	-0.368917	
N29	N	0.9459	0.4728	0.3744	0.01267	Uiso	1.00	-0.325944	
N30	N	0.84059		0.39181	0.39201	0.01267	Uiso	1.00	-0.670024
N31	N	0.745	0.0718	0.9942	0.01267	Uiso	1.00	-0.334906	
N32	N	0.8037	0.0129	0.9301	0.01267	Uiso	1.00	-0.371272	
N33	N	0.6667	0.0273	0.8773	0.01267	Uiso	1.00	-0.371960	
N34	N	0.5703	0.1256	0.9728	0.01267	Uiso	1.00	-0.326564	
N35	N	0.4826	0.10799		0.89181	0.01267	Uiso	1.00	-0.674253
N36	N	0.811	0.9282	0.0058	0.01267	Uiso	1.00	-0.332850	
N37	N	0.7467	0.9871	0.0699	0.01267	Uiso	1.00	-0.371303	

N38	N	0.5713	0.9727	0.1227	0.01267	Uiso	1.00	-0.369718	
N39	N	0.6687	0.8744	0.0272	0.01267	Uiso	1.00	-0.325875	
N40	N	0.4824	0.89201		0.10819	0.01267	Uiso	1.00	-0.671074
O1	O	0.5315	0.3902	0.3934	0.01267	Uiso	1.00	-0.545306	
O2	O	0.3373	0.4302	0.4064	0.01267	Uiso	1.00	-0.548547	
O3	O	0.4413	0.1999	0.0597	0.01267	Uiso	1.00	-0.554134	
O4	O	0.2715	0.25	0.0532	0.01267	Uiso	1.00	-0.497440	
O5	O	0.3473	0.9397	0.1977	0.01267	Uiso	1.00	-0.502198	
O6	O	0.2367	0.9994	0.242	0.01267	Uiso	1.00	-0.509520	
O7	O	0.3151	0.6098	0.6066	0.01267	Uiso	1.00	-0.544738	
O8	O	0.1739	0.5698	0.5936	0.01267	Uiso	1.00	-0.547687	
O9	O	0.7009	0.8001	0.9403	0.01267	Uiso	1.00	-0.555067	
O10	O	0.5747	0.75	0.9468	0.01267	Uiso	1.00	-0.495953	
O11	O	0.4847	0.0603	0.8023	0.01267	Uiso	1.00	-0.489464	
O12	O	0.4781	0.0006	0.758	0.01267	Uiso	1.00	-0.521177	
O13	O	0.1749	0.1066	0.8902	0.01267	Uiso	1.00	-0.544312	
O14	O	0.9937	0.0936	0.9302	0.01267	Uiso	1.00	-0.548096	
O15	O	0.751	0.4403	0.6999	0.01267	Uiso	1.00	-0.557192	
O16	O	0.5747	0.4468	0.75	0.01267	Uiso	1.00	-0.493161	
O17	O	0.795	0.3023	0.4397	0.01267	Uiso	1.00	-0.499342	
O18	O	0.7287	0.258	0.4994	0.01267	Uiso	1.00	-0.512329	
O19	O	0.1717	0.8934	0.1098	0.01267	Uiso	1.00	-0.544490	
O20	O	0.0175	0.9064	0.0698	0.01267	Uiso	1.00	-0.547888	
O21	O	0.8912	0.5597	0.3001	0.01267	Uiso	1.00	-0.554369	
O22	O	0.7715	0.5532	0.25	0.01267	Uiso	1.00	-0.497137	
O23	O	0.537	0.6977	0.5603	0.01267	Uiso	1.00	-0.504972	
O24	O	0.4861	0.742	0.5006	0.01267	Uiso	1.00	-0.506836	
O25	O	0.9349	0.8934	0.8902	0.01267	Uiso	1.00	-0.545573	
O26	O	0.0761	0.9064	0.9302	0.01267	Uiso	1.00	-0.547718	
O27	O	0.5491	0.5597	0.6999	0.01267	Uiso	1.00	-0.558601	
O28	O	0.6753	0.5532	0.75	0.01267	Uiso	1.00	-0.492797	
O29	O	0.7653	0.6977	0.4397	0.01267	Uiso	1.00	-0.504270	
O30	O	0.7719	0.742	0.4994	0.01267	Uiso	1.00	-0.508182	
O31	O	0.7185	0.1066	0.1098	0.01267	Uiso	1.00	-0.545050	
O32	O	0.9127	0.0936	0.0698	0.01267	Uiso	1.00	-0.548340	
O33	O	0.8087	0.4403	0.3001	0.01267	Uiso	1.00	-0.554385	
O34	O	0.9785	0.4468	0.25	0.01267	Uiso	1.00	-0.497551	
O35	O	0.9027	0.3023	0.5603	0.01267	Uiso	1.00	-0.499298	
O36	O	0.0133	0.258	0.5006	0.01267	Uiso	1.00	-0.509606	
O37	O	0.0783	0.3902	0.6066	0.01267	Uiso	1.00	-0.545145	
O38	O	0.2325	0.4302	0.5936	0.01267	Uiso	1.00	-0.547817	
O39	O	0.3588	0.1999	0.9403	0.01267	Uiso	1.00	-0.554461	
O40	O	0.4785	0.25	0.9468	0.01267	Uiso	1.00	-0.496667	
O41	O	0.713	0.9397	0.8023	0.01267	Uiso	1.00	-0.488822	
O42	O	0.7639	0.9994	0.758	0.01267	Uiso	1.00	-0.519944	
O43	O	0.0751	0.6098	0.3934	0.01267	Uiso	1.00	-0.545489	
O44	O	0.2563	0.5698	0.4064	0.01267	Uiso	1.00	-0.548159	
O45	O	0.499	0.8001	0.0597	0.01267	Uiso	1.00	-0.554394	
O46	O	0.6753	0.75	0.0532	0.01267	Uiso	1.00	-0.494634	
O47	O	0.455	0.0603	0.1977	0.01267	Uiso	1.00	-0.501626	
O48	O	0.5213	0.0006	0.242	0.01267	Uiso	1.00	-0.509686	
O49	O	0.25	0.5	0.5	0.01267	Uiso	1.00	-0.857336	

O50 O 0 0 0 0.01267 Uiso 1.00 -0.857430

data_RUGKOV_clean

_cell_length_a 20.1049

_cell_length_b 12.7575

_cell_length_c 14.427

_cell_angle_alpha 90

_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 90

_symmetry_space_group_name_H-M P 1

_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x,y,z'

loop_

_atom_site_label

_atom_site_occupancy

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv

_atom_site_type_symbol

_atom_site_charge

Zn1	1	0.23262	0.70643	0.33937	Biso	1	Zn	0.663012
Zn2	1	0.26797	0.53213	0.17437	Biso	1	Zn	0.782005
N1	1	0.171	0.5686	0.1569	Biso	1	N	-0.382626
N2	1	0.2751	0.4886	0.3075	Biso	1	N	-0.219549
N3	1	0.1837	0.169	0.8262	Biso	1	N	-0.215776
N4	1	0.0699	0.5655	0.0834	Biso	1	N	-0.299450
O1	1	0.0474	0.3692	0.9619	Biso	1	O	-0.612502
C1	1	0.0702	0.6404	0.1545	Biso	1	C	-0.050721
N5	1	0.2554	0.5594	0.3739	Biso	1	N	-0.171481
N6	1	0.1989	0.2377	0.7579	Biso	1	N	-0.150793
O2	1	0.266	0.3455	0.5932	Biso	1	O	-0.554506
O3	1	0.305	0.2335	0.4929	Biso	1	O	-0.585528
C2	1	0.1397	0.2137	0.8826	Biso	1	C	-0.064341
H1	1	0.1213	0.1823	0.9348	Biso	1	H	0.118704
C3	1	0.257	0.5086	0.4559	Biso	1	C	0.004385
H2	1	0.2461	0.5383	0.5128	Biso	1	H	0.138752
C4	1	0.2772	0.4069	0.4433	Biso	1	C	-0.120153
C5	1	0.1298	0.6395	0.1979	Biso	1	C	0.288941
C6	1	0.1649	0.3234	0.7741	Biso	1	C	-0.004848
H3	1	0.1674	0.3832	0.7374	Biso	1	H	0.133786
C7	1	0.0812	0.3966	0.8917	Biso	1	C	0.615862
N7	1	0.1443	0.7007	0.2723	Biso	1	N	-0.329122
C8	1	0.1329	0.5248	0.0902	Biso	1	C	0.144693
H4	1	0.1482	0.4714	0.0519	Biso	1	H	0.094000
N8	1	0.9621	0.7258	0.1388	Biso	1	N	-0.686666

H5	1	0.935	0.7741	0.1561	Biso	1	H	0.360614			
H6	1	0.9522	0.6862	0.0925	Biso	1	H	0.348400			
C9	1	0.1253	0.3151	0.8513	Biso	1	C	-0.145401			
C10	1	0.0944	0.763	0.2962	Biso	1	C	0.247821			
H7	1	0.1015	0.8048	0.3481	Biso	1	H	0.089841			
O4	1	0.0796	0.4816	0.8626	Biso	1	O	-0.523694			
C11	1	0.2866	0.3997	0.3508	Biso	1	C	-0.030026			
H8	1	0.2997	0.3385	0.3209	Biso	1	H	0.120806			
C12	1	0.021	0.712	0.1847	Biso	1	C	0.433950			
N9	1	0.035	0.7733	0.255	Biso	1	N	-0.407055			
C13	1	0.2836	0.3251	0.5107	Biso	1	C	0.582678			
Zn3	1	0.76738		0.29357		0.33937	Biso	1	Zn	0.662915	
Zn4	1	0.73203		0.46787		0.17437	Biso	1	Zn	0.782115	
N10	1	0.829	0.4314	0.1569	Biso	1	N	-0.382481			
N11	1	0.7249	0.5114	0.3075	Biso	1	N	-0.219421			
N12	1	0.8163	0.831	0.8262	Biso	1	N	-0.215545			
N13	1	0.9301	0.4345	0.0834	Biso	1	N	-0.299538			
O5	1	0.9526	0.6308	0.9619	Biso	1	O	-0.612667			
C14	1	0.9298	0.3596	0.1545	Biso	1	C	-0.051049			
N14	1	0.7446	0.4406	0.3739	Biso	1	N	-0.171668			
N15	1	0.8011	0.7623	0.7579	Biso	1	N	-0.150529			
O6	1	0.734	0.6545	0.5932	Biso	1	O	-0.554761			
O7	1	0.695	0.7665	0.4929	Biso	1	O	-0.585321			
C15	1	0.8603	0.7863	0.8826	Biso	1	C	-0.064489			
H9	1	0.8787	0.8177	0.9348	Biso	1	H	0.118724			
C16	1	0.743	0.4914	0.4559	Biso	1	C	0.004314			
H10	1	0.7539	0.4617	0.5128	Biso	1	H	0.138667			
C17	1	0.7228	0.5931	0.4433	Biso	1	C	-0.120103			
C18	1	0.8702	0.3605	0.1979	Biso	1	C	0.288912			
C19	1	0.8351	0.6766	0.7741	Biso	1	C	-0.005152			
H11	1	0.8326	0.6168	0.7374	Biso	1	H	0.133788			
C20	1	0.9188	0.6034	0.8917	Biso	1	C	0.616183			
N16	1	0.8557	0.2993	0.2723	Biso	1	N	-0.328758			
C21	1	0.8671	0.4752	0.0902	Biso	1	C	0.144924			
H12	1	0.8518	0.5286	0.0519	Biso	1	H	0.094060			
N17	1	0.0379	0.2742	0.1388	Biso	1	N	-0.686753			
H13	1	0.065	0.2259	0.1561	Biso	1	H	0.360381			
H14	1	0.0478	0.3138	0.0925	Biso	1	H	0.348366			
C22	1	0.8747	0.6849	0.8513	Biso	1	C	-0.145484			
C23	1	0.9056	0.237	0.2962	Biso	1	C	0.247652			
H15	1	0.8985	0.1952	0.3481	Biso	1	H	0.089812			
O8	1	0.9204	0.5184	0.8626	Biso	1	O	-0.523923			
C24	1	0.7134	0.6003	0.3508	Biso	1	C	-0.029863			
H16	1	0.7003	0.6615	0.3209	Biso	1	H	0.120905			
C25	1	0.979	0.288	0.1847	Biso	1	C	0.434220			
N18	1	0.965	0.2267	0.255	Biso	1	N	-0.407367			
C26	1	0.7164	0.6749	0.5107	Biso	1	C	0.582729			
Zn5	1	0.26738		0.20643		0.66063	Biso	1	Zn	0.662931	
Zn6	1	0.23203		0.03213		0.82563	Biso	1	Zn	0.782098	
N19	1	0.329	0.0686	0.8431	Biso	1	N	-0.382550			
N20	1	0.2249	0.9886	0.6925	Biso	1	N	-0.219556			
N21	1	0.3163	0.669	0.1738	Biso	1	N	-0.215764			

N22	1	0.4301	0.0655	0.9166	Biso	1	N	-0.299434		
O9	1	0.4526	0.8692	0.0381	Biso	1	O	-0.612686		
C27	1	0.4298	0.1404	0.8455	Biso	1	C	-0.050944		
N23	1	0.2446	0.0594	0.6261	Biso	1	N	-0.171348		
N24	1	0.3011	0.7377	0.2421	Biso	1	N	-0.150769		
O10	1	0.234	0.8455	0.4068	Biso	1	O	-0.554493		
O11	1	0.195	0.7335	0.5071	Biso	1	O	-0.585584		
C28	1	0.3603	0.7137	0.1174	Biso	1	C	-0.064438		
H17	1	0.3787	0.6823	0.0652	Biso	1	H	0.118712		
C29	1	0.243	0.0086	0.5441	Biso	1	C	0.004498		
H18	1	0.2539	0.0383	0.4872	Biso	1	H	0.138652		
C30	1	0.2228	0.9069	0.5567	Biso	1	C	-0.120142		
C31	1	0.3702	0.1395	0.8021	Biso	1	C	0.289022		
C32	1	0.3351	0.8234	0.2259	Biso	1	C	-0.004767		
H19	1	0.3326	0.8832	0.2626	Biso	1	H	0.133792		
C33	1	0.4188	0.8966	0.1083	Biso	1	C	0.616094		
N25	1	0.3557	0.2007	0.7277	Biso	1	N	-0.329055		
C34	1	0.3671	0.0248	0.9098	Biso	1	C	0.144758		
H20	1	0.3518	0.9714	0.9481	Biso	1	H	0.094029		
N26	1	0.5379	0.2258	0.8612	Biso	1	N	-0.686645		
H21	1	0.565	0.2741	0.8439	Biso	1	H	0.360398		
H22	1	0.5478	0.1862	0.9075	Biso	1	H	0.348253		
C35	1	0.3747	0.8151	0.1487	Biso	1	C	-0.145523		
C36	1	0.4056	0.263	0.7038	Biso	1	C	0.247780		
H23	1	0.3985	0.3048	0.6519	Biso	1	H	0.089836		
O12	1	0.4204	0.9816	0.1374	Biso	1	O	-0.523707		
C37	1	0.2134	0.8997	0.6492	Biso	1	C	-0.030075		
H24	1	0.2003	0.8385	0.6791	Biso	1	H	0.120819		
C38	1	0.479	0.212	0.8153	Biso	1	C	0.434234		
N27	1	0.465	0.2733	0.745	Biso	1	N	-0.407162		
C39	1	0.2164	0.8251	0.4893	Biso	1	C	0.582730		
Zn7	1	0.73262		0.79357		0.66063	Biso	1	Zn	0.662853
Zn8	1	0.76797		0.96787		0.82563	Biso	1	Zn	0.782078
N28	1	0.671	0.9314	0.8431	Biso	1	N	-0.382689		
N29	1	0.7751	0.0114	0.6925	Biso	1	N	-0.219484		
N30	1	0.6837	0.331	0.1738	Biso	1	N	-0.215704		
N31	1	0.5699	0.9345	0.9166	Biso	1	N	-0.299296		
O13	1	0.5474	0.1308	0.0381	Biso	1	O	-0.612371		
C40	1	0.5702	0.8596	0.8455	Biso	1	C	-0.050698		
N32	1	0.7554	0.9406	0.6261	Biso	1	N	-0.171523		
N33	1	0.6989	0.2623	0.2421	Biso	1	N	-0.150878		
O14	1	0.766	0.1545	0.4068	Biso	1	O	-0.554546		
O15	1	0.805	0.2665	0.5071	Biso	1	O	-0.585530		
C41	1	0.6397	0.2863	0.1174	Biso	1	C	-0.064234		
H25	1	0.6213	0.3177	0.0652	Biso	1	H	0.118723		
C42	1	0.757	0.9914	0.5441	Biso	1	C	0.004407		
H26	1	0.7461	0.9617	0.4872	Biso	1	H	0.138762		
C43	1	0.7772	0.0931	0.5567	Biso	1	C	-0.120069		
C44	1	0.6298	0.8605	0.8021	Biso	1	C	0.288852		
C45	1	0.6649	0.1766	0.2259	Biso	1	C	-0.005021		
H27	1	0.6674	0.1168	0.2626	Biso	1	H	0.133784		
C46	1	0.5812	0.1034	0.1083	Biso	1	C	0.615860		

N34	1	0.6443	0.7993	0.7277	Biso	1	N	-0.329114
C47	1	0.6329	0.9752	0.9098	Biso	1	C	0.144753
H28	1	0.6482	0.0286	0.9481	Biso	1	H	0.094034
N35	1	0.4621	0.7742	0.8612	Biso	1	N	-0.686546
H29	1	0.435	0.7259	0.8439	Biso	1	H	0.360447
H30	1	0.4522	0.8138	0.9075	Biso	1	H	0.348434
C48	1	0.6253	0.1849	0.1487	Biso	1	C	-0.145235
C49	1	0.5944	0.737	0.7038	Biso	1	C	0.247649
H31	1	0.6015	0.6952	0.6519	Biso	1	H	0.089818
O16	1	0.5796	0.0184	0.1374	Biso	1	O	-0.523868
C50	1	0.7866	0.1003	0.6492	Biso	1	C	-0.030071
H32	1	0.7997	0.1615	0.6791	Biso	1	H	0.120851
C51	1	0.521	0.788	0.8153	Biso	1	C	0.434003
N36	1	0.535	0.7267	0.745	Biso	1	N	-0.407026
C52	1	0.7836	0.1749	0.4893	Biso	1	C	0.582767
Zn9	1	0	0.5	0.99806	Biso	1	Zn	0.771934
Zn10	1	0.5	0	0.00194	Biso	1	Zn	0.772093

data_XACZEH_clean

_audit_creation_date 2014-07-02

_audit_creation_method 'Materials Studio'

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'

_symmetry_Int_Tables_number 1

_symmetry_cell_setting triclinic

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

x,y,z

_cell_length_a 14.285

_cell_length_b 18.7158

_cell_length_c 18.7158

_cell_angle_alpha 66.24

_cell_angle_beta 75.2608

_cell_angle_gamma 104.739

loop_

_atom_site_label

_atom_site_type_symbol

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_U_iso_or_equiv

_atom_site_adp_type

_atom_site_occupancy

_atom_site_charge

Cu1	Cu	0.40337	0.44059	0.00743	0.01267	Uiso	1	0.696445
Cu2	Cu	0.46757	0.52714	0.33119	0.01267	Uiso	1	0.707501
Cu3	Cu	0.4108	0.00743	0.55198	0.01267	Uiso	1	0.696786
Cu4	Cu	0.79876	0.33119	0.14167	0.01267	Uiso	1	0.708917
Cu5	Cu	0.96278	0.55198	0.44059	0.01267	Uiso	1	0.69813
Cu6	Cu	0.94043	0.14167	0.52714	0.01267	Uiso	1	0.706165
Cu7	Cu	0.59663	0.55941	0.99257	0.01267	Uiso	1	0.695742
Cu8	Cu	0.53243	0.47286	0.66881	0.01267	Uiso	1	0.707578
Cu9	Cu	0.5892	0.99257	0.44802	0.01267	Uiso	1	0.696974
Cu10	Cu	0.20124	0.66881	0.85833	0.01267	Uiso	1	0.708948
Cu11	Cu	0.03722	0.44802	0.55941	0.01267	Uiso	1	0.698302
Cu12	Cu	0.05957	0.85833	0.47286	0.01267	Uiso	1	0.706006
H1	H	0.199	0.3153	0.1711	0.01267	Uiso	1	0.090685
H2	H	0.5928	0.5785	0.1514	0.01267	Uiso	1	0.104174
H3	H	0.2684	0.3704	0.405	0.01267	Uiso	1	0.354931
H4	H	0.1706	0.3054	0.418	0.01267	Uiso	1	0.357043
H5	H	0.3451	0.2552	0.0876	0.01267	Uiso	1	0.084132
H6	H	0.7586	0.4977	0.0511	0.01267	Uiso	1	0.106603
H7	H	0.5272	0.1157	0.1824	0.01267	Uiso	1	0.36591
H8	H	0.6288	0.1783	0.1673	0.01267	Uiso	1	0.343398
H9	H	0.3701	0.1711	0.5136	0.01267	Uiso	1	0.091247
H10	H	0.7442	0.1514	0.2701	0.01267	Uiso	1	0.103328
H11	H	0.6734	0.405	0.2246	0.01267	Uiso	1	0.354399
H12	H	0.5886	0.418	0.2766	0.01267	Uiso	1	0.354674
H13	H	0.4327	0.0876	0.6572	0.01267	Uiso	1	0.084905

H14	H	0.8097	0.0511	0.4512	0.01267	Uiso	1	0.106877
H15	H	0.7096	0.1824	0.7019	0.01267	Uiso	1	0.364234
H16	H	0.7961	0.1673	0.6544	0.01267	Uiso	1	0.340107
H17	H	0.8837	0.5136	0.3153	0.01267	Uiso	1	0.090734
H18	H	0.0143	0.2701	0.5785	0.01267	Uiso	1	0.104404
H19	H	0.898	0.2246	0.3704	0.01267	Uiso	1	0.356378
H20	H	0.8652	0.2766	0.3054	0.01267	Uiso	1	0.356602
H21	H	0.0899	0.6572	0.2552	0.01267	Uiso	1	0.085716
H22	H	0.2609	0.4512	0.4977	0.01267	Uiso	1	0.107254
H23	H	0.4115	0.7019	0.1157	0.01267	Uiso	1	0.365318
H24	H	0.4505	0.6544	0.1783	0.01267	Uiso	1	0.342229
H25	H	0.801	0.6847	0.8289	0.01267	Uiso	1	0.090601
H26	H	0.4072	0.4215	0.8486	0.01267	Uiso	1	0.10432
H27	H	0.7316	0.6296	0.595	0.01267	Uiso	1	0.354996
H28	H	0.8294	0.6946	0.582	0.01267	Uiso	1	0.356794
H29	H	0.6549	0.7448	0.9124	0.01267	Uiso	1	0.08413
H30	H	0.2414	0.5023	0.9489	0.01267	Uiso	1	0.106717
H31	H	0.4728	0.8843	0.8176	0.01267	Uiso	1	0.365716
H32	H	0.3712	0.8217	0.8327	0.01267	Uiso	1	0.343411
H33	H	0.6299	0.8289	0.4864	0.01267	Uiso	1	0.091289
H34	H	0.2558	0.8486	0.7299	0.01267	Uiso	1	0.103271
H35	H	0.3266	0.595	0.7754	0.01267	Uiso	1	0.354427
H36	H	0.4114	0.582	0.7234	0.01267	Uiso	1	0.35483
H37	H	0.5673	0.9124	0.3428	0.01267	Uiso	1	0.084936
H38	H	0.1903	0.9489	0.5488	0.01267	Uiso	1	0.106759
H39	H	0.2904	0.8176	0.2981	0.01267	Uiso	1	0.364376
H40	H	0.2039	0.8327	0.3456	0.01267	Uiso	1	0.340101
H41	H	0.1163	0.4864	0.6847	0.01267	Uiso	1	0.09089
H42	H	0.9857	0.7299	0.4215	0.01267	Uiso	1	0.104303
H43	H	0.102	0.7754	0.6296	0.01267	Uiso	1	0.356233
H44	H	0.1348	0.7234	0.6946	0.01267	Uiso	1	0.356637
H45	H	0.9101	0.3428	0.7448	0.01267	Uiso	1	0.085903
H46	H	0.7391	0.5488	0.5023	0.01267	Uiso	1	0.107163
H47	H	0.5885	0.2981	0.8843	0.01267	Uiso	1	0.365494
H48	H	0.5495	0.3456	0.8217	0.01267	Uiso	1	0.342148
C1	C	0.6694	0.5683	0.32	0.01267	Uiso	1	0.470639
C2	C	0.6124	0.5928	0.3835	0.01267	Uiso	1	0.461035
C3	C	0.2418	0.3555	0.1921	0.01267	Uiso	1	0.257584
C4	C	0.3971	0.4573	0.1559	0.01267	Uiso	1	0.296356
C5	C	0.3644	0.4405	0.2408	0.01267	Uiso	1	-0.060487
C6	C	0.2675	0.3739	0.3017	0.01267	Uiso	1	0.434385
C7	C	0.521	0.5361	0.1678	0.01267	Uiso	1	0.161549
C8	C	0.4129	0.2728	0.0872	0.01267	Uiso	1	0.22715
C9	C	0.5561	0.3758	0.0618	0.01267	Uiso	1	0.286218
C10	C	0.5998	0.3166	0.098	0.01267	Uiso	1	-0.053175
C11	C	0.537	0.2305	0.1301	0.01267	Uiso	1	0.414463
C12	C	0.7043	0.4405	0.0569	0.01267	Uiso	1	0.19945
C13	C	0.9894	0.32	0.1117	0.01267	Uiso	1	0.469805
C14	C	0.9959	0.3835	0.0237	0.01267	Uiso	1	0.462354
C15	C	0.4339	0.1921	0.4524	0.01267	Uiso	1	0.257122
C16	C	0.553	0.1559	0.3868	0.01267	Uiso	1	0.296704
C17	C	0.6052	0.2408	0.3187	0.01267	Uiso	1	-0.05835

C18	C	0.5692	0.3017	0.3244	0.01267	Uiso	1	0.431499
C19	C	0.6888	0.1678	0.2961	0.01267	Uiso	1	0.163219
C20	C	0.5001	0.0872	0.64	0.01267	Uiso	1	0.226304
C21	C	0.6179	0.0618	0.5624	0.01267	Uiso	1	0.28827
C22	C	0.6978	0.098	0.5854	0.01267	Uiso	1	-0.055956
C23	C	0.6671	0.1301	0.6394	0.01267	Uiso	1	0.414827
C24	C	0.7612	0.0569	0.5026	0.01267	Uiso	1	0.198461
C25	C	0.1011	0.1117	0.5683	0.01267	Uiso	1	0.470805
C26	C	0.0196	0.0237	0.5928	0.01267	Uiso	1	0.462276
C27	C	0.8863	0.4524	0.3555	0.01267	Uiso	1	0.25798
C28	C	0.9398	0.3868	0.4573	0.01267	Uiso	1	0.298343
C29	C	0.9239	0.3187	0.4405	0.01267	Uiso	1	-0.061301
C30	C	0.8936	0.3244	0.3739	0.01267	Uiso	1	0.435168
C31	C	0.9849	0.2961	0.5361	0.01267	Uiso	1	0.162008
C32	C	0.1401	0.64	0.2728	0.01267	Uiso	1	0.223406
C33	C	0.1803	0.5624	0.3758	0.01267	Uiso	1	0.287627
C34	C	0.2832	0.5854	0.3166	0.01267	Uiso	1	-0.053979
C35	C	0.3065	0.6394	0.2305	0.01267	Uiso	1	0.414952
C36	C	0.2638	0.5026	0.4405	0.01267	Uiso	1	0.199233
C37	C	0.3306	0.4317	0.68	0.01267	Uiso	1	0.47093
C38	C	0.3876	0.4072	0.6165	0.01267	Uiso	1	0.461148
C39	C	0.7582	0.6445	0.8079	0.01267	Uiso	1	0.257469
C40	C	0.6029	0.5427	0.8441	0.01267	Uiso	1	0.296425
C41	C	0.6356	0.5595	0.7592	0.01267	Uiso	1	-0.060645
C42	C	0.7325	0.6261	0.6983	0.01267	Uiso	1	0.434631
C43	C	0.479	0.4639	0.8322	0.01267	Uiso	1	0.161584
C44	C	0.5871	0.7272	0.9128	0.01267	Uiso	1	0.227025
C45	C	0.4439	0.6242	0.9382	0.01267	Uiso	1	0.286088
C46	C	0.4002	0.6834	0.902	0.01267	Uiso	1	-0.053277
C47	C	0.463	0.7695	0.8699	0.01267	Uiso	1	0.414647
C48	C	0.2957	0.5595	0.9431	0.01267	Uiso	1	0.199812
C49	C	0.0106	0.68	0.8883	0.01267	Uiso	1	0.470065
C50	C	0.0041	0.6165	0.9763	0.01267	Uiso	1	0.46196
C51	C	0.5661	0.8079	0.5476	0.01267	Uiso	1	0.256998
C52	C	0.447	0.8441	0.6132	0.01267	Uiso	1	0.296655
C53	C	0.3948	0.7592	0.6813	0.01267	Uiso	1	-0.058216
C54	C	0.4308	0.6983	0.6756	0.01267	Uiso	1	0.431377
C55	C	0.3112	0.8322	0.7039	0.01267	Uiso	1	0.163137
C56	C	0.4999	0.9128	0.36	0.01267	Uiso	1	0.226339
C57	C	0.3821	0.9382	0.4376	0.01267	Uiso	1	0.288129
C58	C	0.3022	0.902	0.4146	0.01267	Uiso	1	-0.055673
C59	C	0.3329	0.8699	0.3606	0.01267	Uiso	1	0.41468
C60	C	0.2388	0.9431	0.4974	0.01267	Uiso	1	0.198225
C61	C	0.8989	0.8883	0.4317	0.01267	Uiso	1	0.470552
C62	C	0.9804	0.9763	0.4072	0.01267	Uiso	1	0.462937
C63	C	0.1137	0.5476	0.6445	0.01267	Uiso	1	0.258196
C64	C	0.0602	0.6132	0.5427	0.01267	Uiso	1	0.298483
C65	C	0.0761	0.6813	0.5595	0.01267	Uiso	1	-0.061216
C66	C	0.1064	0.6756	0.6261	0.01267	Uiso	1	0.434977
C67	C	0.0151	0.7039	0.4639	0.01267	Uiso	1	0.16204
C68	C	0.8599	0.36	0.7272	0.01267	Uiso	1	0.223373
C69	C	0.8197	0.4376	0.6242	0.01267	Uiso	1	0.28748

C70	C	0.7168	0.4146	0.6834	0.01267	Uiso	1	-0.053585
C71	C	0.6935	0.3606	0.7695	0.01267	Uiso	1	0.414759
C72	C	0.7362	0.4974	0.5595	0.01267	Uiso	1	0.199041
N1	N	0.2067	0.3338	0.2715	0.01267	Uiso	1	-0.386427
N2	N	0.3369	0.4155	0.1273	0.01267	Uiso	1	-0.394002
N3	N	0.4444	0.4943	0.2466	0.01267	Uiso	1	-0.338657
N4	N	0.4948	0.5176	0.1115	0.01267	Uiso	1	-0.392753
N5	N	0.2326	0.3478	0.3842	0.01267	Uiso	1	-0.634623
N6	N	0.4396	0.2075	0.1284	0.01267	Uiso	1	-0.411895
N7	N	0.4625	0.3533	0.0531	0.01267	Uiso	1	-0.347075
N8	N	0.6955	0.3612	0.0937	0.01267	Uiso	1	-0.300056
N9	N	0.6229	0.4528	0.0362	0.01267	Uiso	1	-0.392599
N10	N	0.5685	0.1672	0.1631	0.01267	Uiso	1	-0.675227
N11	N	0.4782	0.2715	0.3947	0.01267	Uiso	1	-0.384749
N12	N	0.4642	0.1273	0.4572	0.01267	Uiso	1	-0.392896
N13	N	0.691	0.2466	0.2591	0.01267	Uiso	1	-0.340092
N14	N	0.6063	0.1115	0.3709	0.01267	Uiso	1	-0.394216
N15	N	0.6168	0.3842	0.268	0.01267	Uiso	1	-0.630366
N16	N	0.568	0.1284	0.6641	0.01267	Uiso	1	-0.411307
N17	N	0.5156	0.0531	0.5936	0.01267	Uiso	1	-0.346867
N18	N	0.7892	0.0937	0.5451	0.01267	Uiso	1	-0.297468
N19	N	0.6591	0.0362	0.511	0.01267	Uiso	1	-0.391546
N20	N	0.7316	0.1631	0.6697	0.01267	Uiso	1	-0.668465
N21	N	0.8729	0.3947	0.3338	0.01267	Uiso	1	-0.386391
N22	N	0.9214	0.4572	0.4155	0.01267	Uiso	1	-0.394592
N23	N	0.9501	0.2591	0.4943	0.01267	Uiso	1	-0.33748
N24	N	0.9772	0.3709	0.5176	0.01267	Uiso	1	-0.395637
N25	N	0.8848	0.268	0.3478	0.01267	Uiso	1	-0.635327
N26	N	0.2321	0.6641	0.2075	0.01267	Uiso	1	-0.410674
N27	N	0.1092	0.5936	0.3533	0.01267	Uiso	1	-0.345766
N28	N	0.3343	0.5451	0.3612	0.01267	Uiso	1	-0.300567
N29	N	0.1701	0.511	0.4528	0.01267	Uiso	1	-0.392903
N30	N	0.4013	0.6697	0.1672	0.01267	Uiso	1	-0.671604
N31	N	0.7933	0.6662	0.7285	0.01267	Uiso	1	-0.386754
N32	N	0.6631	0.5845	0.8727	0.01267	Uiso	1	-0.393803
N33	N	0.5556	0.5057	0.7534	0.01267	Uiso	1	-0.33872
N34	N	0.5052	0.4824	0.8885	0.01267	Uiso	1	-0.392727
N35	N	0.7674	0.6522	0.6158	0.01267	Uiso	1	-0.634505
N36	N	0.5604	0.7925	0.8716	0.01267	Uiso	1	-0.41225
N37	N	0.5375	0.6467	0.9469	0.01267	Uiso	1	-0.346754
N38	N	0.3045	0.6388	0.9063	0.01267	Uiso	1	-0.300585
N39	N	0.3771	0.5472	0.9638	0.01267	Uiso	1	-0.392248
N40	N	0.4315	0.8328	0.8369	0.01267	Uiso	1	-0.675427
N41	N	0.5218	0.7285	0.6053	0.01267	Uiso	1	-0.384306
N42	N	0.5358	0.8727	0.5428	0.01267	Uiso	1	-0.39301
N43	N	0.309	0.7534	0.7409	0.01267	Uiso	1	-0.339695
N44	N	0.3937	0.8885	0.6291	0.01267	Uiso	1	-0.394562
N45	N	0.3832	0.6158	0.732	0.01267	Uiso	1	-0.630231
N46	N	0.432	0.8716	0.3359	0.01267	Uiso	1	-0.411148
N47	N	0.4844	0.9469	0.4064	0.01267	Uiso	1	-0.347067
N48	N	0.2108	0.9063	0.4549	0.01267	Uiso	1	-0.297401
N49	N	0.3409	0.9638	0.489	0.01267	Uiso	1	-0.391599

N50	N	0.2684	0.8369	0.3303	0.01267	Uiso	1	-0.668544
N51	N	0.1271	0.6053	0.6662	0.01267	Uiso	1	-0.386303
N52	N	0.0786	0.5428	0.5845	0.01267	Uiso	1	-0.394634
N53	N	0.0499	0.7409	0.5057	0.01267	Uiso	1	-0.337812
N54	N	0.0228	0.6291	0.4824	0.01267	Uiso	1	-0.395688
N55	N	0.1152	0.732	0.6522	0.01267	Uiso	1	-0.635426
N56	N	0.7679	0.3359	0.7925	0.01267	Uiso	1	-0.410344
N57	N	0.8908	0.4064	0.6467	0.01267	Uiso	1	-0.345795
N58	N	0.6657	0.4549	0.6388	0.01267	Uiso	1	-0.300712
N59	N	0.8299	0.489	0.5472	0.01267	Uiso	1	-0.392802
N60	N	0.5987	0.3303	0.8328	0.01267	Uiso	1	-0.671578
O1	O	0.612	0.5347	0.2915	0.01267	Uiso	1	-0.542652
O2	O	0.5131	0.5733	0.3979	0.01267	Uiso	1	-0.529242
O3	O	0.7634	0.583	0.3008	0.01267	Uiso	1	-0.489849
O4	O	0.6634	0.6283	0.4118	0.01267	Uiso	1	-0.474114
O5	O	0.9035	0.2915	0.1738	0.01267	Uiso	1	-0.542406
O6	O	0.911	0.3979	0.0288	0.01267	Uiso	1	-0.530373
O7	O	0.0642	0.3008	0.1162	0.01267	Uiso	1	-0.489284
O8	O	0.0752	0.4118	0.9599	0.01267	Uiso	1	-0.475095
O9	O	0.0773	0.1738	0.5347	0.01267	Uiso	1	-0.543034
O10	O	0.9398	0.0288	0.5733	0.01267	Uiso	1	-0.529996
O11	O	0.1804	0.1162	0.583	0.01267	Uiso	1	-0.491434
O12	O	0.0351	0.9599	0.6283	0.01267	Uiso	1	-0.474507
O13	O	0.388	0.4653	0.7085	0.01267	Uiso	1	-0.542892
O14	O	0.4869	0.4267	0.6021	0.01267	Uiso	1	-0.529207
O15	O	0.2366	0.417	0.6992	0.01267	Uiso	1	-0.489827
O16	O	0.3366	0.3717	0.5882	0.01267	Uiso	1	-0.473962
O17	O	0.0965	0.7085	0.8262	0.01267	Uiso	1	-0.542665
O18	O	0.089	0.6021	0.9712	0.01267	Uiso	1	-0.530011
O19	O	0.9358	0.6992	0.8838	0.01267	Uiso	1	-0.489465
O20	O	0.9248	0.5882	0.0401	0.01267	Uiso	1	-0.47495
O21	O	0.9227	0.8262	0.4653	0.01267	Uiso	1	-0.542926
O22	O	0.0602	0.9712	0.4267	0.01267	Uiso	1	-0.530691
O23	O	0.8196	0.8838	0.417	0.01267	Uiso	1	-0.491824
O24	O	0.9649	0.0401	0.3717	0.01267	Uiso	1	-0.475653

data_ZUGDEM_clean
_cell_length_a 14.2079
_cell_length_b 17.2295
_cell_length_c 26.1584
_cell_angle_alpha 88.764
_cell_angle_beta 74.47
_cell_angle_gamma 70.377

_symmetry_space_group_name_H-M P 1
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x,y,z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
_atom_site_charge

Zn1	1	0.11005	0.79977	0.42005	Biso	1	Zn	0.874119
Zn2	1	0.17306	0.61911	0.47782	Biso	1	Zn	0.876684
Zn3	1	0.46896	0.21843	0.70865	Biso	1	Zn	0.881063
Zn4	1	0.6662	0.11612	0.00883	Biso	1	Zn	0.874653
Zn5	1	0.85584	0.27887	0.19851	Biso	1	Zn	0.901765
Zn6	1	0.57025	0.31381	0.07135	Biso	1	Zn	0.866932
C1	1	0.3264	0.671	0.3953	Biso	1	C	0.307431
C2	1	0.3238	0.7872	0.3632	Biso	1	C	0.189455
H1	1	0.299	0.8425	0.3563	Biso	1	H	0.104780
C3	1	0.4255	0.6612	0.3633	Biso	1	C	-0.054038
C4	1	0.5024	0.5844	0.3533	Biso	1	C	0.438995
C5	1	0.3841	0.536	0.409	Biso	1	C	0.250338
H2	1	0.3729	0.491	0.4265	Biso	1	H	0.082413
C6	1	0.0575	0.8294	0.5882	Biso	1	C	-0.019519
C7	1	0.0842	0.794	0.6323	Biso	1	C	-0.094075
H3	1	0.1226	0.738	0.6304	Biso	1	H	0.142199
C8	1	0.0541	0.8416	0.679	Biso	1	C	-0.021444
C9	1	0.0056	0.9271	0.6798	Biso	1	C	-0.114078
H4	1	0.9849	0.9597	0.7115	Biso	1	H	0.132211
C10	1	0.9882	0.9638	0.6342	Biso	1	C	-0.015718
C11	1	0.0137	0.9152	0.5888	Biso	1	C	-0.108239
H5	1	0.0019	0.9393	0.5579	Biso	1	H	0.136279
C12	1	0.0869	0.7798	0.5372	Biso	1	C	0.592810
C13	1	0.0829	0.8095	0.7275	Biso	1	C	0.605582
C14	1	0.9375	0.0557	0.6347	Biso	1	C	0.550072

C15	1	0.1899	0.4207	0.5731	Biso	1	C	-0.009027
C16	1	0.245	0.376	0.6073	Biso	1	C	-0.125562
H6	1	0.2987	0.3902	0.6136	Biso	1	H	0.119741
C17	1	0.2202	0.31	0.6319	Biso	1	C	-0.012422
C18	1	0.1379	0.2917	0.624	Biso	1	C	-0.111721
H7	1	0.1192	0.2489	0.6408	Biso	1	H	0.143996
C19	1	0.0834	0.3377	0.5907	Biso	1	C	-0.013308
C20	1	0.1085	0.4033	0.566	Biso	1	C	-0.109440
H8	1	0.0693	0.4349	0.5447	Biso	1	H	0.138571
C21	1	0.2141	0.4928	0.5452	Biso	1	C	0.549785
C22	1	0.2792	0.2616	0.6689	Biso	1	C	0.569659
C23	1	0.9952	0.3161	0.581	Biso	1	C	0.593745
C24	1	0.5274	0.3165	0.8297	Biso	1	C	-0.000814
C25	1	0.5716	0.2699	0.8675	Biso	1	C	-0.099096
H9	1	0.5962	0.2125	0.8629	Biso	1	H	0.137995
C26	1	0.5786	0.3078	0.9106	Biso	1	C	-0.018187
C27	1	0.5531	0.3923	0.9149	Biso	1	C	-0.103410
H10	1	0.558	0.4179	0.9446	Biso	1	H	0.136521
C28	1	0.5195	0.4405	0.8741	Biso	1	C	-0.008630
C29	1	0.5048	0.4017	0.8336	Biso	1	C	-0.123623
H11	1	0.479	0.433	0.8078	Biso	1	H	0.128231
C30	1	0.5113	0.2756	0.7859	Biso	1	C	0.566369
C31	1	0.6156	0.2602	0.9547	Biso	1	C	0.599923
C32	1	0.4896	0.5338	0.8799	Biso	1	C	0.545028
C33	1	0.1653	0.2317	0.1224	Biso	1	C	-0.025753
C34	1	0.1754	0.1531	0.098	Biso	1	C	-0.107833
H12	1	0.1177	0.1373	0.1014	Biso	1	H	0.121550
C35	1	0.2783	0.1003	0.0682	Biso	1	C	-0.011634
C36	1	0.3609	0.1211	0.0639	Biso	1	C	-0.105259
H13	1	0.426	0.0852	0.045	Biso	1	H	0.139055
C37	1	0.3525	0.197	0.0875	Biso	1	C	-0.014040
C38	1	0.2562	0.2504	0.1169	Biso	1	C	-0.106825
H14	1	0.2519	0.2994	0.1332	Biso	1	H	0.141659
C39	1	0.0651	0.2828	0.1534	Biso	1	C	0.566758
C40	1	0.2833	0.0216	0.0433	Biso	1	C	0.558285
C41	1	0.8272	0.1591	0.1168	Biso	1	C	-0.038521
C42	1	0.4492	0.2177	0.0803	Biso	1	C	0.596077
C43	1	0.7077	0.2757	0.1412	Biso	1	C	0.181487
H15	1	0.666	0.3261	0.16	Biso	1	H	0.094867
C44	1	0.7613	0.171	0.086	Biso	1	C	0.295321
C45	1	0.8557	0.0496	0.041	Biso	1	C	0.242379
H16	1	0.868	0.0115	0.0132	Biso	1	H	0.074651
C46	1	0.9101	0.0854	0.1076	Biso	1	C	0.421345
N1	1	0.9262	0.0296	0.0676	Biso	1	N	-0.372357
N2	1	0.9796	0.0666	0.1368	Biso	1	N	-0.639743
H17	1	0.0313	0.0208	0.1295	Biso	1	H	0.370550
H18	1	0.9721	0.1004	0.1625	Biso	1	H	0.354436
N3	1	0.7939	0.2284	0.15268	Biso	1	N	-0.329468
N4	1	0.6846	0.2467	0.1015	Biso	1	N	-0.366062
N5	1	0.7696	0.1154	0.0474	Biso	1	N	-0.356945
N6	1	0.3013	0.6072	0.4206	Biso	1	N	-0.383656
N7	1	0.2621	0.7486	0.3951	Biso	1	N	-0.393084

N8	1	0.4218	0.739	0.3431	Biso	1	N	-0.316733		
N9	1	0.6002	0.5652	0.3227	Biso	1	N	-0.627709		
H19	1	0.6423	0.515	0.3191	Biso	1	H	0.369473		
H20	1	0.621	0.603	0.3066	Biso	1	H	0.359840		
N10	1	0.4757	0.5209	0.3774	Biso	1	N	-0.385366		
O1	1	0.0595	0.8139	0.49839	Biso	1	O	-0.530812		
O2	1	0.1382	0.7016	0.53611	Biso	1	O	-0.553559		
O3	1	0.1311	0.7303	0.7275	Biso	1	O	-0.584810		
O4	1	0.0613	0.8493	0.7676	Biso	1	O	-0.539143		
O5	1	0.8902	0.1028	0.6755	Biso	1	O	-0.405065		
O6	1	0.9427	0.084	0.58846	Biso	1	O	-0.502862		
O7	1	0.2731	0.5236	0.5594	Biso	1	O	-0.397797		
O8	1	0.1755	0.5145	0.50765	Biso	1	O	-0.489008		
O9	1	0.9443	0.3613	0.55147	Biso	1	O	-0.554482		
O10	1	0.9744	0.253	0.60208	Biso	1	O	-0.539041		
O11	1	0.2498	0.2083	0.6938	Biso	1	O	-0.449216		
O12	1	0.3583	0.2767	0.67165	Biso	1	O	-0.544668		
O13	1	0.4902	0.5715	0.8362	Biso	1	O	-0.449018		
O14	1	0.469	0.5672	0.924	Biso	1	O	-0.454885		
O15	1	0.4346	0.3177	0.7671	Biso	1	O	-0.568678		
O16	1	0.5593	0.2011	0.77018	Biso	1	O	-0.514669		
O17	1	0.622	0.3	0.99361	Biso	1	O	-0.574228		
O18	1	0.6346	0.1849	0.9503	Biso	1	O	-0.502145		
O19	1	0.0595	0.3377	0.187	Biso	1	O	-0.381381		
O20	1	0.9864	0.2708	0.1465	Biso	1	O	-0.541377		
O21	1	0.2131	0.9914	0.0574	Biso	1	O	-0.509734		
O22	1	0.3642	0.9855	0.0059	Biso	1	O	-0.501066		
O23	1	0.5336	0.1637	0.0684	Biso	1	O	-0.543179		
O24	1	0.4356	0.2959	0.0884	Biso	1	O	-0.547574		
Zn7	1	0.88995		0.20023		0.57995	Biso	1	Zn	0.874438
Zn8	1	0.82694		0.38089		0.52218	Biso	1	Zn	0.877906
Zn9	1	0.53104		0.78157		0.29135	Biso	1	Zn	0.880251
Zn10	1	0.3338	0.88388		0.99117		Biso	1	Zn	0.874259
Zn11	1	0.14416		0.72113		0.80149	Biso	1	Zn	0.900864
Zn12	1	0.42975		0.68619		0.92865	Biso	1	Zn	0.867030
C47	1	0.6736	0.329	0.6047	Biso	1	C	0.307267		
C48	1	0.6762	0.2128	0.6368	Biso	1	C	0.189241		
H21	1	0.701	0.1575	0.6437	Biso	1	H	0.104467		
C49	1	0.5745	0.3388	0.6367	Biso	1	C	-0.054393		
C50	1	0.4976	0.4156	0.6467	Biso	1	C	0.438500		
C51	1	0.6159	0.464	0.591	Biso	1	C	0.250607		
H22	1	0.6271	0.509	0.5735	Biso	1	H	0.082745		
C52	1	0.9425	0.1706	0.4118	Biso	1	C	-0.019019		
C53	1	0.9158	0.206	0.3677	Biso	1	C	-0.093790		
H23	1	0.8774	0.262	0.3696	Biso	1	H	0.142513		
C54	1	0.9459	0.1584	0.321	Biso	1	C	-0.021027		
C55	1	0.9944	0.0729	0.3202	Biso	1	C	-0.114456		
H24	1	0.0151	0.0403	0.2885	Biso	1	H	0.132543		
C56	1	0.0118	0.0362	0.3658	Biso	1	C	-0.015910		
C57	1	0.9863	0.0848	0.4112	Biso	1	C	-0.108474		
H25	1	0.9981	0.0607	0.4421	Biso	1	H	0.135918		
C58	1	0.9131	0.2202	0.4628	Biso	1	C	0.592616		

C59	1	0.9171	0.1905	0.2725	Biso	1	C	0.604418
C60	1	0.0625	0.9443	0.3653	Biso	1	C	0.549899
C61	1	0.8101	0.5793	0.4269	Biso	1	C	-0.006911
C62	1	0.755	0.624	0.3927	Biso	1	C	-0.126420
H26	1	0.7013	0.6098	0.3864	Biso	1	H	0.119958
C63	1	0.7798	0.69	0.3681	Biso	1	C	-0.012884
C64	1	0.8621	0.7083	0.376	Biso	1	C	-0.112176
H27	1	0.8808	0.7511	0.3592	Biso	1	H	0.144151
C65	1	0.9166	0.6623	0.4093	Biso	1	C	-0.014120
C66	1	0.8915	0.5967	0.434	Biso	1	C	-0.109068
H28	1	0.9307	0.5651	0.4553	Biso	1	H	0.138442
C67	1	0.7859	0.5072	0.4548	Biso	1	C	0.552618
C68	1	0.7208	0.7384	0.3311	Biso	1	C	0.569048
C69	1	0.0048	0.6839	0.419	Biso	1	C	0.593911
C70	1	0.4726	0.6835	0.1703	Biso	1	C	-0.002082
C71	1	0.4284	0.7301	0.1325	Biso	1	C	-0.101438
H29	1	0.4038	0.7875	0.1371	Biso	1	H	0.137832
C72	1	0.4214	0.6922	0.0894	Biso	1	C	-0.018750
C73	1	0.4469	0.6077	0.0851	Biso	1	C	-0.105974
H30	1	0.442	0.5821	0.0554	Biso	1	H	0.136037
C74	1	0.4805	0.5595	0.1259	Biso	1	C	-0.009389
C75	1	0.4952	0.5983	0.1664	Biso	1	C	-0.122678
H31	1	0.521	0.567	0.1922	Biso	1	H	0.127588
C76	1	0.4887	0.7244	0.2141	Biso	1	C	0.567311
C77	1	0.3844	0.7398	0.0453	Biso	1	C	0.600216
C78	1	0.5104	0.4662	0.1201	Biso	1	C	0.546225
C79	1	0.8347	0.7683	0.8776	Biso	1	C	-0.025759
C80	1	0.8246	0.8469	0.902	Biso	1	C	-0.110979
H32	1	0.8823	0.8627	0.8986	Biso	1	H	0.121662
C81	1	0.7217	0.8997	0.9318	Biso	1	C	-0.010001
C82	1	0.6391	0.8789	0.9361	Biso	1	C	-0.102336
H33	1	0.574	0.9148	0.955	Biso	1	H	0.139318
C83	1	0.6475	0.803	0.9125	Biso	1	C	-0.014858
C84	1	0.7438	0.7496	0.8831	Biso	1	C	-0.106237
H34	1	0.7481	0.7006	0.8668	Biso	1	H	0.141491
C85	1	0.9349	0.7172	0.8466	Biso	1	C	0.566247
C86	1	0.7167	0.9784	0.9567	Biso	1	C	0.559151
C87	1	0.1728	0.8409	0.8832	Biso	1	C	-0.038274
C88	1	0.5508	0.7823	0.9197	Biso	1	C	0.596710
C89	1	0.2923	0.7243	0.8588	Biso	1	C	0.181410
H35	1	0.334	0.6739	0.84	Biso	1	H	0.094674
C90	1	0.2387	0.829	0.914	Biso	1	C	0.295795
C91	1	0.1443	0.9504	0.959	Biso	1	C	0.243292
H36	1	0.132	0.9885	0.9868	Biso	1	H	0.075176
C92	1	0.0899	0.9146	0.8924	Biso	1	C	0.420946
N11	1	0.0738	0.9704	0.9324	Biso	1	N	-0.370768
N12	1	0.0204	0.9334	0.8632	Biso	1	N	-0.636461
H37	1	0.9687	0.9792	0.8705	Biso	1	H	0.370830
H38	1	0.0279	0.8996	0.8375	Biso	1	H	0.354559
N13	1	0.2061	0.7716	0.84732	Biso	1	N	-0.328071
N14	1	0.3154	0.7533	0.8985	Biso	1	N	-0.366003
N15	1	0.2304	0.8846	0.9526	Biso	1	N	-0.355627

N16	1	0.6987	0.3928	0.5794	Biso	1	N	-0.383400
N17	1	0.7379	0.2514	0.6049	Biso	1	N	-0.392713
N18	1	0.5782	0.261	0.6569	Biso	1	N	-0.317398
N19	1	0.3998	0.4348	0.6773	Biso	1	N	-0.629654
H39	1	0.3577	0.485	0.6809	Biso	1	H	0.369233
H40	1	0.379	0.397	0.6934	Biso	1	H	0.359568
N20	1	0.5243	0.4791	0.6226	Biso	1	N	-0.385924
O25	1	0.9405	0.1861	0.50161	Biso	1	O	-0.532439
O26	1	0.8618	0.2984	0.46389	Biso	1	O	-0.552989
O27	1	0.8689	0.2697	0.2725	Biso	1	O	-0.582415
O28	1	0.9387	0.1507	0.2324	Biso	1	O	-0.535860
O29	1	0.1098	0.8972	0.3245	Biso	1	O	-0.402968
O30	1	0.0573	0.916	0.41154	Biso	1	O	-0.501552
O31	1	0.7269	0.4764	0.4406	Biso	1	O	-0.406334
O32	1	0.8245	0.4855	0.49235	Biso	1	O	-0.496772
O33	1	0.0557	0.6387	0.44853	Biso	1	O	-0.555044
O34	1	0.0256	0.747	0.39792	Biso	1	O	-0.539081
O35	1	0.7502	0.7917	0.3062	Biso	1	O	-0.441745
O36	1	0.6417	0.7233	0.32835	Biso	1	O	-0.543041
O37	1	0.5098	0.4285	0.1638	Biso	1	O	-0.457695
O38	1	0.531	0.4328	0.076	Biso	1	O	-0.457701
O39	1	0.5654	0.6823	0.2329	Biso	1	O	-0.571726
O40	1	0.4407	0.7989	0.22982	Biso	1	O	-0.516030
O41	1	0.378	0.7	0.00639	Biso	1	O	-0.574348
O42	1	0.3654	0.8151	0.0497	Biso	1	O	-0.502492
O43	1	0.9405	0.6623	0.813	Biso	1	O	-0.372649
O44	1	0.0136	0.7292	0.8535	Biso	1	O	-0.539682
O45	1	0.7869	0.0086	0.9426	Biso	1	O	-0.506847
O46	1	0.6358	0.0145	0.9941	Biso	1	O	-0.506056
O47	1	0.4664	0.8363	0.9316	Biso	1	O	-0.545188
O48	1	0.5644	0.7041	0.9116	Biso	1	O	-0.548147

```

data_BEPIX_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a           10.3953
_cell_length_b           17.4542
_cell_length_c           17.4542
_cell_angle_alpha        120.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.88459   0.46662   0.92866   0.01267   Uiso  1   0.408194
Zn2  Zn   0.55126   0.46204   0.53338   0.01267   Uiso  1   0.406511
Zn3  Zn   0.21792   0.07134   0.53796   0.01267   Uiso  1   0.406895
Zn4  Zn   0.38459   0.53338   0.07134   0.01267   Uiso  1   0.408278
Zn5  Zn   0.05126   0.53796   0.46662   0.01267   Uiso  1   0.407774
Zn6  Zn   0.71792   0.92866   0.46204   0.01267   Uiso  1   0.407553
H1   H    0.789 0.5534 0.081 0.01267   Uiso  1   0.262831
H2   H    0.9707 0.7988 0.1793 0.01267   Uiso  1   0.124902
H3   H    0.9925 0.6286 0.1577 0.01267   Uiso  1   0.089935
H4   H    0.9232 0.8964 0.3262 0.01267   Uiso  1   0.086784
H5   H    0.7789 0.6445 0.0214 0.01267   Uiso  1   0.121979
H6   H    0.9256 0.665 0.0435 0.01267   Uiso  1   0.111797
H7   H    0.6355 0.6778 0.1595 0.01267   Uiso  1   0.109288
H8   H    0.5973 0.7768 0.3063 0.01267   Uiso  1   0.09467
H9   H    0.8363 0.4234 0.0707 0.01267   Uiso  1   0.136782
H10  H    0.8665 0.4043 0.1476 0.01267   Uiso  1   0.161639
H11  H    0.974 0.3919 0.0794 0.01267   Uiso  1   0.159268
H12  H    0.0223 0.5207 0.1984 0.01267   Uiso  1   0.065869
H13  H    0.8774 0.6333 0.2815 0.01267   Uiso  1   0.16067
H14  H    0.8352 0.5458 0.2789 0.01267   Uiso  1   0.15554
H15  H    0.7645 0.5765 0.2196 0.01267   Uiso  1   0.151465
H16  H    0.45567   0.5276 0.4466 0.01267   Uiso  1   0.262681
H17  H    0.63737   0.3805 0.2012 0.01267   Uiso  1   0.124603
H18  H    0.65917   0.5291 0.3714 0.01267   Uiso  1   0.089343
H19  H    0.58987   0.4298 0.1036 0.01267   Uiso  1   0.087263

```

H20	H	0.44557	0.3769	0.3555	0.01267	Uiso	1	0.12159
H21	H	0.59227	0.3785	0.335	0.01267	Uiso	1	0.11224
H22	H	0.30217	0.4817	0.3222	0.01267	Uiso	1	0.108156
H23	H	0.26397	0.5295	0.2232	0.01267	Uiso	1	0.094186
H24	H	0.50297	0.6473	0.5766	0.01267	Uiso	1	0.136635
H25	H	0.53317	0.7433	0.5957	0.01267	Uiso	1	0.161598
H26	H	0.64067	0.6875	0.6081	0.01267	Uiso	1	0.158346
H27	H	0.68897	0.6777	0.4793	0.01267	Uiso	1	0.065382
H28	H	0.54407	0.6482	0.3667	0.01267	Uiso	1	0.160836
H29	H	0.50187	0.7331	0.4542	0.01267	Uiso	1	0.155102
H30	H	0.43117	0.6431	0.4235	0.01267	Uiso	1	0.151775
H31	H	0.12233	0.919	0.4724	0.01267	Uiso	1	0.262057
H32	H	0.30403	0.8207	0.6195	0.01267	Uiso	1	0.125702
H33	H	0.32583	0.8423	0.4709	0.01267	Uiso	1	0.089525
H34	H	0.25653	0.6738	0.5702	0.01267	Uiso	1	0.087047
H35	H	0.11223	0.9786	0.6231	0.01267	Uiso	1	0.122334
H36	H	0.25893	0.9565	0.6215	0.01267	Uiso	1	0.112238
H37	H	0.96883	0.8405	0.5183	0.01267	Uiso	1	0.108051
H38	H	0.93063	0.6937	0.4705	0.01267	Uiso	1	0.0947
H39	H	0.16963	0.9293	0.3527	0.01267	Uiso	1	0.137324
H40	H	0.19983	0.8524	0.2567	0.01267	Uiso	1	0.162004
H41	H	0.30733	0.9206	0.3125	0.01267	Uiso	1	0.158948
H42	H	0.35563	0.8016	0.3223	0.01267	Uiso	1	0.06527
H43	H	0.21073	0.7185	0.3518	0.01267	Uiso	1	0.160818
H44	H	0.16853	0.7211	0.2669	0.01267	Uiso	1	0.156499
H45	H	0.09783	0.7804	0.3569	0.01267	Uiso	1	0.151806
H46	H	0.289	0.4466	0.919	0.01267	Uiso	1	0.262658
H47	H	0.4707	0.2012	0.8207	0.01267	Uiso	1	0.12502
H48	H	0.4925	0.3714	0.8423	0.01267	Uiso	1	0.089895
H49	H	0.4232	0.1036	0.6738	0.01267	Uiso	1	0.086854
H50	H	0.2789	0.3555	0.9786	0.01267	Uiso	1	0.122067
H51	H	0.4256	0.335	0.9565	0.01267	Uiso	1	0.111926
H52	H	0.1355	0.3222	0.8405	0.01267	Uiso	1	0.109199
H53	H	0.0973	0.2232	0.6937	0.01267	Uiso	1	0.094609
H54	H	0.3363	0.5766	0.9293	0.01267	Uiso	1	0.13677
H55	H	0.3665	0.5957	0.8524	0.01267	Uiso	1	0.161535
H56	H	0.474	0.6081	0.9206	0.01267	Uiso	1	0.159339
H57	H	0.5223	0.4793	0.8016	0.01267	Uiso	1	0.065746
H58	H	0.3774	0.3667	0.7185	0.01267	Uiso	1	0.16071
H59	H	0.3352	0.4542	0.7211	0.01267	Uiso	1	0.155463
H60	H	0.2645	0.4235	0.7804	0.01267	Uiso	1	0.151424
H61	H	0.95567	0.4724	0.5534	0.01267	Uiso	1	0.262688
H62	H	0.13737	0.6195	0.7988	0.01267	Uiso	1	0.124722
H63	H	0.15917	0.4709	0.6286	0.01267	Uiso	1	0.089368
H64	H	0.08987	0.5702	0.8964	0.01267	Uiso	1	0.087415
H65	H	0.94557	0.6231	0.6445	0.01267	Uiso	1	0.121702
H66	H	0.09227	0.6215	0.665	0.01267	Uiso	1	0.11232
H67	H	0.80217	0.5183	0.6778	0.01267	Uiso	1	0.108113
H68	H	0.76397	0.4705	0.7768	0.01267	Uiso	1	0.0943
H69	H	0.00297	0.3527	0.4234	0.01267	Uiso	1	0.136579
H70	H	0.03317	0.2567	0.4043	0.01267	Uiso	1	0.161648
H71	H	0.14067	0.3125	0.3919	0.01267	Uiso	1	0.158369

H72	H	0.18897	0.3223	0.5207	0.01267	Uiso	1	0.065405
H73	H	0.04407	0.3518	0.6333	0.01267	Uiso	1	0.160898
H74	H	0.00187	0.2669	0.5458	0.01267	Uiso	1	0.155135
H75	H	0.93117	0.3569	0.5765	0.01267	Uiso	1	0.151763
H76	H	0.62233	0.081	0.5276	0.01267	Uiso	1	0.262103
H77	H	0.80403	0.1793	0.3805	0.01267	Uiso	1	0.12569
H78	H	0.82583	0.1577	0.5291	0.01267	Uiso	1	0.089377
H79	H	0.75653	0.3262	0.4298	0.01267	Uiso	1	0.086795
H80	H	0.61223	0.0214	0.3769	0.01267	Uiso	1	0.122387
H81	H	0.75893	0.0435	0.3785	0.01267	Uiso	1	0.112177
H82	H	0.46883	0.1595	0.4817	0.01267	Uiso	1	0.108049
H83	H	0.43063	0.3063	0.5295	0.01267	Uiso	1	0.094703
H84	H	0.66963	0.0707	0.6473	0.01267	Uiso	1	0.137361
H85	H	0.69983	0.1476	0.7433	0.01267	Uiso	1	0.162079
H86	H	0.80733	0.0794	0.6875	0.01267	Uiso	1	0.158964
H87	H	0.85563	0.1984	0.6777	0.01267	Uiso	1	0.065225
H88	H	0.71073	0.2815	0.6482	0.01267	Uiso	1	0.160793
H89	H	0.66853	0.2789	0.7331	0.01267	Uiso	1	0.156537
H90	H	0.59783	0.2196	0.6431	0.01267	Uiso	1	0.151863
C1	C	0.0907	0.5249	0.0576	0.01267	Uiso	1	0.565546
C2	C	0.8956	0.792	0.2042	0.01267	Uiso	1	-0.221882
C3	C	0.9723	0.5665	0.1161	0.01267	Uiso	1	-0.072111
C4	C	0.8658	0.8511	0.2924	0.01267	Uiso	1	0.031031
C5	C	0.812	0.7232	0.1543	0.01267	Uiso	1	0.100234
C6	C	0.8463	0.65	0.0623	0.01267	Uiso	1	-0.132888
C7	C	0.6969	0.7203	0.1928	0.01267	Uiso	1	-0.217681
C8	C	0.6736	0.7807	0.2806	0.01267	Uiso	1	0.051128
C9	C	0.9009	0.4267	0.1116	0.01267	Uiso	1	-0.532361
C10	C	0.9417	0.5221	0.17	0.01267	Uiso	1	0.118462
C11	C	0.8458	0.5742	0.2443	0.01267	Uiso	1	-0.523969
C12	C	0.75737	0.5327	0.4751	0.01267	Uiso	1	0.564603
C13	C	0.56227	0.4122	0.208	0.01267	Uiso	1	-0.221995
C14	C	0.63897	0.5496	0.4335	0.01267	Uiso	1	-0.07263
C15	C	0.53247	0.4413	0.1489	0.01267	Uiso	1	0.030514
C16	C	0.47867	0.4311	0.2768	0.01267	Uiso	1	0.101068
C17	C	0.51297	0.4123	0.35	0.01267	Uiso	1	-0.133426
C18	C	0.36357	0.4725	0.2797	0.01267	Uiso	1	-0.216133
C19	C	0.34027	0.4999	0.2193	0.01267	Uiso	1	0.051624
C20	C	0.56757	0.6849	0.5733	0.01267	Uiso	1	-0.530992
C21	C	0.60837	0.6479	0.4779	0.01267	Uiso	1	0.119571
C22	C	0.51247	0.6701	0.4258	0.01267	Uiso	1	-0.524495
C23	C	0.42403	0.9424	0.4673	0.01267	Uiso	1	0.565404
C24	C	0.22893	0.7958	0.5878	0.01267	Uiso	1	-0.223838
C25	C	0.30563	0.8839	0.4504	0.01267	Uiso	1	-0.073016
C26	C	0.19913	0.7076	0.5587	0.01267	Uiso	1	0.031931
C27	C	0.14533	0.8457	0.5689	0.01267	Uiso	1	0.10199
C28	C	0.17963	0.9377	0.5877	0.01267	Uiso	1	-0.134193
C29	C	0.03023	0.8072	0.5275	0.01267	Uiso	1	-0.216273
C30	C	0.00693	0.7194	0.5001	0.01267	Uiso	1	0.051014
C31	C	0.23423	0.8884	0.3151	0.01267	Uiso	1	-0.533006
C32	C	0.27503	0.83	0.3521	0.01267	Uiso	1	0.120376
C33	C	0.17913	0.7557	0.3299	0.01267	Uiso	1	-0.526042

C34	C	0.5907	0.4751	0.9424	0.01267	Uiso	1	0.565613	
C35	C	0.3956	0.208	0.7958	0.01267	Uiso	1	-0.221747	
C36	C	0.4723	0.4335	0.8839	0.01267	Uiso	1	-0.072053	
C37	C	0.3658	0.1489	0.7076	0.01267	Uiso	1	0.031124	
C38	C	0.312	0.2768	0.8457	0.01267	Uiso	1	0.100433	
C39	C	0.3463	0.35	0.9377	0.01267	Uiso	1	-0.132818	
C40	C	0.1969	0.2797	0.8072	0.01267	Uiso	1	-0.21768	
C41	C	0.1736	0.2193	0.7194	0.01267	Uiso	1	0.051311	
C42	C	0.4009	0.5733	0.8884	0.01267	Uiso	1	-0.532361	
C43	C	0.4417	0.4779	0.83	0.01267	Uiso	1	0.118351	
C44	C	0.3458	0.4258	0.7557	0.01267	Uiso	1	-0.523993	
C45	C	0.25737		0.4673	0.5249	0.01267	Uiso	1	0.564644
C46	C	0.06227		0.5878	0.792	0.01267	Uiso	1	-0.221912
C47	C	0.13897		0.4504	0.5665	0.01267	Uiso	1	-0.072724
C48	C	0.03247		0.5587	0.8511	0.01267	Uiso	1	0.030966
C49	C	0.97867		0.5689	0.7232	0.01267	Uiso	1	0.101455
C50	C	0.01297		0.5877	0.65	0.01267	Uiso	1	-0.133457
C51	C	0.86357		0.5275	0.7203	0.01267	Uiso	1	-0.215874
C52	C	0.84027		0.5001	0.7807	0.01267	Uiso	1	0.052056
C53	C	0.06757		0.3151	0.4267	0.01267	Uiso	1	-0.530992
C54	C	0.10837		0.3521	0.5221	0.01267	Uiso	1	0.11956
C55	C	0.01247		0.3299	0.5742	0.01267	Uiso	1	-0.524613
C56	C	0.92403		0.0576	0.5327	0.01267	Uiso	1	0.565214
C57	C	0.72893		0.2042	0.4122	0.01267	Uiso	1	-0.223866
C58	C	0.80563		0.1161	0.5496	0.01267	Uiso	1	-0.072833
C59	C	0.69913		0.2924	0.4413	0.01267	Uiso	1	0.032305
C60	C	0.64533		0.1543	0.4311	0.01267	Uiso	1	0.102165
C61	C	0.67963		0.0623	0.4123	0.01267	Uiso	1	-0.134068
C62	C	0.53023		0.1928	0.4725	0.01267	Uiso	1	-0.216236
C63	C	0.50693		0.2806	0.4999	0.01267	Uiso	1	0.051267
C64	C	0.73423		0.1116	0.6849	0.01267	Uiso	1	-0.532958
C65	C	0.77503		0.17	0.6479	0.01267	Uiso	1	0.120161
C66	C	0.67913		0.2443	0.6701	0.01267	Uiso	1	-0.526156
N1	N	0.7578	0.8444	0.3297	0.01267	Uiso	1	-0.20862	
N2	N	0.8623	0.5647	0.06	0.01267	Uiso	1	-0.294578	
N3	N	0.42447		0.4853	0.1556	0.01267	Uiso	1	-0.208965
N4	N	0.52897		0.4953	0.4353	0.01267	Uiso	1	-0.293173
N5	N	0.09113		0.6703	0.5147	0.01267	Uiso	1	-0.209486
N6	N	0.19563		0.94	0.5047	0.01267	Uiso	1	-0.292962
N7	N	0.2578	0.1556	0.6703	0.01267	Uiso	1	-0.208405	
N8	N	0.3623	0.4353	0.94	0.01267	Uiso	1	-0.294393	
N9	N	0.92447		0.5147	0.8444	0.01267	Uiso	1	-0.208555
N10	N	0.02897		0.5047	0.5647	0.01267	Uiso	1	-0.293267
N11	N	0.59113		0.3297	0.4853	0.01267	Uiso	1	-0.209205
N12	N	0.69563		0.06	0.4953	0.01267	Uiso	1	-0.29305
O1	O	0.1927	0.5339	0.0993	0.01267	Uiso	1	-0.539634	
O2	O	0.081	0.486	0.9745	0.01267	Uiso	1	-0.524859	
O3	O	0.85937		0.5654	0.4661	0.01267	Uiso	1	-0.53936
O4	O	0.74767		0.4885	0.514	0.01267	Uiso	1	-0.524231
O5	O	0.52603		0.9007	0.4346	0.01267	Uiso	1	-0.539586
O6	O	0.41433		0.0255	0.5115	0.01267	Uiso	1	-0.524235
O7	O	0.6927	0.4661	0.9007	0.01267	Uiso	1	-0.539931	

O8	O	0.581	0.514	0.0255	0.01267	Uiso	1	-0.524611	
O9	O	0.35937		0.4346	0.5339	0.01267	Uiso	1	-0.539122
O10	O	0.24767		0.5115	0.486	0.01267	Uiso	1	-0.524266
O11	O	0.02603		0.0993	0.5654	0.01267	Uiso	1	-0.539567
O12	O	0.91433		0.9745	0.4885	0.01267	Uiso	1	-0.524215

```

data_BEPPOD_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a           10.3433
_cell_length_b           17.7336
_cell_length_c           17.7336
_cell_angle_alpha        120.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.8442 0.45553   0.92874   0.01267   Uiso  1   0.778612
Zn2  Zn   0.51087  0.47321   0.54447   0.01267   Uiso  1   0.778349
Zn3  Zn   0.17753  0.07126   0.52679   0.01267   Uiso  1   0.778463
Zn4  Zn   0.3442 0.54447   0.07126   0.01267   Uiso  1   0.778465
Zn5  Zn   0.01087  0.52679   0.45553   0.01267   Uiso  1   0.778447
Zn6  Zn   0.67753  0.92874   0.47321   0.01267   Uiso  1   0.778723
H1   H    0.3035 0.5714 0.6766 0.01267   Uiso  1   0.095825
H2   H    0.6318 0.476 0.6966 0.01267   Uiso  1   0.101478
H3   H    0.2516 0.618 0.8193 0.01267   Uiso  1   0.130594
H4   H    0.2343 0.4733 0.8458 0.01267   Uiso  1   0.084601
H5   H    0.2108 0.3263 0.8061 0.01267   Uiso  1   0.047051
H6   H    0.4462 0.6274 0.9799 0.01267   Uiso  1   0.115977
H7   H    0.2988 0.6236 0.9571 0.01267   Uiso  1   0.082201
H8   H    0.5934 0.5212 0.8411 0.01267   Uiso  1   0.13402
H9   H    0.4008 0.3599 0.9312 0.01267   Uiso  1   0.148898
H10  H    0.3695 0.2649 0.8569 0.01267   Uiso  1   0.150751
H11  H    0.2632 0.3203 0.9254 0.01267   Uiso  1   0.1473
H12  H    0.3527 0.3509 0.7215 0.01267   Uiso  1   0.148257
H13  H    0.41 0.276 0.734 0.01267   Uiso  1   0.144994
H14  H    0.4656 0.3707 0.7879 0.01267   Uiso  1   0.152995
H15  H    0.97017  0.1052 0.4286 0.01267   Uiso  1   0.096072
H16  H    0.29847  0.2206 0.524 0.01267   Uiso  1   0.10083
H17  H    0.91827  0.2013 0.382 0.01267   Uiso  1   0.131996
H18  H    0.90097  0.3725 0.5267 0.01267   Uiso  1   0.084743
H19  H    0.87747  0.4798 0.6737 0.01267   Uiso  1   0.047204

```

H20	H	0.11287	0.3525	0.3726	0.01267	Uiso	1	0.116564
H21	H	0.96547	0.3335	0.3764	0.01267	Uiso	1	0.08206
H22	H	0.26007	0.3199	0.4788	0.01267	Uiso	1	0.134189
H23	H	0.06747	0.5713	0.6401	0.01267	Uiso	1	0.14905
H24	H	0.03617	0.592	0.7351	0.01267	Uiso	1	0.150907
H25	H	0.92987	0.6051	0.6797	0.01267	Uiso	1	0.147685
H26	H	0.01937	0.3706	0.6491	0.01267	Uiso	1	0.148603
H27	H	0.07667	0.458	0.724	0.01267	Uiso	1	0.144827
H28	H	0.13227	0.4172	0.6293	0.01267	Uiso	1	0.153494
H29	H	0.63683	0.3234	0.8948	0.01267	Uiso	1	0.095647
H30	H	0.96513	0.3034	0.7794	0.01267	Uiso	1	0.101674
H31	H	0.58493	0.1807	0.7987	0.01267	Uiso	1	0.130824
H32	H	0.56763	0.1542	0.6275	0.01267	Uiso	1	0.084603
H33	H	0.54413	0.1939	0.5202	0.01267	Uiso	1	0.047231
H34	H	0.77953	0.0201	0.6475	0.01267	Uiso	1	0.116333
H35	H	0.63213	0.0429	0.6665	0.01267	Uiso	1	0.082291
H36	H	0.92673	0.1589	0.6801	0.01267	Uiso	1	0.134465
H37	H	0.73413	0.0688	0.4287	0.01267	Uiso	1	0.148648
H38	H	0.70283	0.1431	0.408	0.01267	Uiso	1	0.150924
H39	H	0.59653	0.0746	0.3949	0.01267	Uiso	1	0.147917
H40	H	0.68603	0.2785	0.6294	0.01267	Uiso	1	0.148628
H41	H	0.74333	0.266	0.542	0.01267	Uiso	1	0.144829
H42	H	0.79893	0.2121	0.5828	0.01267	Uiso	1	0.153071
H43	H	0.8035	0.4286	0.3234	0.01267	Uiso	1	0.095699
H44	H	0.1318	0.524	0.3034	0.01267	Uiso	1	0.101544
H45	H	0.7516	0.382	0.1807	0.01267	Uiso	1	0.130628
H46	H	0.7343	0.5267	0.1542	0.01267	Uiso	1	0.084258
H47	H	0.7108	0.6737	0.1939	0.01267	Uiso	1	0.047119
H48	H	0.9462	0.3726	0.0201	0.01267	Uiso	1	0.11604
H49	H	0.7988	0.3764	0.0429	0.01267	Uiso	1	0.082176
H50	H	0.0934	0.4788	0.1589	0.01267	Uiso	1	0.134219
H51	H	0.9008	0.6401	0.0688	0.01267	Uiso	1	0.148803
H52	H	0.8695	0.7351	0.1431	0.01267	Uiso	1	0.15081
H53	H	0.7632	0.6797	0.0746	0.01267	Uiso	1	0.147435
H54	H	0.8527	0.6491	0.2785	0.01267	Uiso	1	0.148058
H55	H	0.91	0.724	0.266	0.01267	Uiso	1	0.145056
H56	H	0.9656	0.6293	0.2121	0.01267	Uiso	1	0.152881
H57	H	0.47017	0.8948	0.5714	0.01267	Uiso	1	0.096251
H58	H	0.79847	0.7794	0.476	0.01267	Uiso	1	0.100834
H59	H	0.41827	0.7987	0.618	0.01267	Uiso	1	0.131639
H60	H	0.40097	0.6275	0.4733	0.01267	Uiso	1	0.08498
H61	H	0.37747	0.5202	0.3263	0.01267	Uiso	1	0.047379
H62	H	0.61287	0.6475	0.6274	0.01267	Uiso	1	0.116336
H63	H	0.46547	0.6665	0.6236	0.01267	Uiso	1	0.081979
H64	H	0.76007	0.6801	0.5212	0.01267	Uiso	1	0.134036
H65	H	0.56747	0.4287	0.3599	0.01267	Uiso	1	0.148934
H66	H	0.53617	0.408	0.2649	0.01267	Uiso	1	0.15111
H67	H	0.42987	0.3949	0.3203	0.01267	Uiso	1	0.147656
H68	H	0.51937	0.6294	0.3509	0.01267	Uiso	1	0.148816
H69	H	0.57667	0.542	0.276	0.01267	Uiso	1	0.145022
H70	H	0.63227	0.5828	0.3707	0.01267	Uiso	1	0.15335
H71	H	0.13683	0.6766	0.1052	0.01267	Uiso	1	0.095584

H72	H	0.46513	0.6966	0.2206	0.01267	Uiso	1	0.101607
H73	H	0.08493	0.8193	0.2013	0.01267	Uiso	1	0.130908
H74	H	0.06763	0.8458	0.3725	0.01267	Uiso	1	0.084756
H75	H	0.04413	0.8061	0.4798	0.01267	Uiso	1	0.047081
H76	H	0.27953	0.9799	0.3525	0.01267	Uiso	1	0.116577
H77	H	0.13213	0.9571	0.3335	0.01267	Uiso	1	0.082379
H78	H	0.42673	0.8411	0.3199	0.01267	Uiso	1	0.134425
H79	H	0.23413	0.9312	0.5713	0.01267	Uiso	1	0.148817
H80	H	0.20283	0.8569	0.592	0.01267	Uiso	1	0.15071
H81	H	0.09653	0.9254	0.6051	0.01267	Uiso	1	0.147922
H82	H	0.18603	0.7215	0.3706	0.01267	Uiso	1	0.148675
H83	H	0.24333	0.734	0.458	0.01267	Uiso	1	0.144526
H84	H	0.29893	0.7879	0.4172	0.01267	Uiso	1	0.153267
C1	C	0.1389	0.4673	0.9447	0.01267	Uiso	1	0.605305
C2	C	0.3623	0.5617	0.7105	0.01267	Uiso	1	0.096518
C3	C	0.5559	0.5058	0.7225	0.01267	Uiso	1	0.046012
C4	C	0.3294	0.5893	0.7965	0.01267	Uiso	1	-0.22827
C5	C	0.2571	0.4537	0.8869	0.01267	Uiso	1	-0.087912
C6	C	0.2905	0.3573	0.8346	0.01267	Uiso	1	0.133505
C7	C	0.3795	0.5915	0.9391	0.01267	Uiso	1	-0.162895
C8	C	0.4145	0.5735	0.8483	0.01267	Uiso	1	0.188939
C9	C	0.5321	0.5315	0.809	0.01267	Uiso	1	-0.18105
C10	C	0.335	0.3224	0.8922	0.01267	Uiso	1	-0.528512
C11	C	0.3888	0.3368	0.7628	0.01267	Uiso	1	-0.52423
C12	C	0.80557	0.4774	0.5327	0.01267	Uiso	1	0.604862
C13	C	0.02897	0.1488	0.4383	0.01267	Uiso	1	0.095635
C14	C	0.22257	0.2167	0.4942	0.01267	Uiso	1	0.04671
C15	C	0.99607	0.2072	0.4107	0.01267	Uiso	1	-0.229903
C16	C	0.92377	0.4332	0.5463	0.01267	Uiso	1	-0.087197
C17	C	0.95717	0.4773	0.6427	0.01267	Uiso	1	0.133265
C18	C	0.04617	0.3476	0.4085	0.01267	Uiso	1	-0.163822
C19	C	0.08117	0.2748	0.4265	0.01267	Uiso	1	0.19009
C20	C	0.19877	0.2775	0.4685	0.01267	Uiso	1	-0.180986
C21	C	0.00167	0.5698	0.6776	0.01267	Uiso	1	-0.52897
C22	C	0.05547	0.426	0.6632	0.01267	Uiso	1	-0.525568
C23	C	0.47223	0.0553	0.5226	0.01267	Uiso	1	0.604701
C24	C	0.69563	0.2895	0.8512	0.01267	Uiso	1	0.096729
C25	C	0.88923	0.2775	0.7833	0.01267	Uiso	1	0.046115
C26	C	0.66273	0.2035	0.7928	0.01267	Uiso	1	-0.229147
C27	C	0.59043	0.1131	0.5668	0.01267	Uiso	1	-0.086583
C28	C	0.62383	0.1654	0.5227	0.01267	Uiso	1	0.132806
C29	C	0.71283	0.0609	0.6524	0.01267	Uiso	1	-0.163908
C30	C	0.74783	0.1517	0.7252	0.01267	Uiso	1	0.190204
C31	C	0.86543	0.191	0.7225	0.01267	Uiso	1	-0.181767
C32	C	0.66833	0.1078	0.4302	0.01267	Uiso	1	-0.528822
C33	C	0.72213	0.2372	0.574	0.01267	Uiso	1	-0.52455
C34	C	0.6389	0.5327	0.0553	0.01267	Uiso	1	0.60505
C35	C	0.8623	0.4383	0.2895	0.01267	Uiso	1	0.096572
C36	C	0.0559	0.4942	0.2775	0.01267	Uiso	1	0.046196
C37	C	0.8294	0.4107	0.2035	0.01267	Uiso	1	-0.228225
C38	C	0.7571	0.5463	0.1131	0.01267	Uiso	1	-0.08756
C39	C	0.7905	0.6427	0.1654	0.01267	Uiso	1	0.133205

C40	C	0.8795	0.4085	0.0609	0.01267	Uiso	1	-0.163201	
C41	C	0.9145	0.4265	0.1517	0.01267	Uiso	1	0.18886	
C42	C	0.0321	0.4685	0.191	0.01267	Uiso	1	-0.181055	
C43	C	0.835	0.6776	0.1078	0.01267	Uiso	1	-0.52816	
C44	C	0.8888	0.6632	0.2372	0.01267	Uiso	1	-0.524137	
C45	C	0.30557		0.5226	0.4673	0.01267	Uiso	1	0.604907
C46	C	0.52897		0.8512	0.5617	0.01267	Uiso	1	0.095454
C47	C	0.72257		0.7833	0.5058	0.01267	Uiso	1	0.046862
C48	C	0.49607		0.7928	0.5893	0.01267	Uiso	1	-0.229473
C49	C	0.42377		0.5668	0.4537	0.01267	Uiso	1	-0.087302
C50	C	0.45717		0.5227	0.3573	0.01267	Uiso	1	0.133295
C51	C	0.54617		0.6524	0.5915	0.01267	Uiso	1	-0.163682
C52	C	0.58117		0.7252	0.5735	0.01267	Uiso	1	0.190005
C53	C	0.69877		0.7225	0.5315	0.01267	Uiso	1	-0.181123
C54	C	0.50167		0.4302	0.3224	0.01267	Uiso	1	-0.529273
C55	C	0.55547		0.574	0.3368	0.01267	Uiso	1	-0.525564
C56	C	0.97223		0.9447	0.4774	0.01267	Uiso	1	0.604456
C57	C	0.19563		0.7105	0.1488	0.01267	Uiso	1	0.097019
C58	C	0.38923		0.7225	0.2167	0.01267	Uiso	1	0.046074
C59	C	0.16273		0.7965	0.2072	0.01267	Uiso	1	-0.229288
C60	C	0.09043		0.8869	0.4332	0.01267	Uiso	1	-0.086878
C61	C	0.12383		0.8346	0.4773	0.01267	Uiso	1	0.132928
C62	C	0.21283		0.9391	0.3476	0.01267	Uiso	1	-0.163878
C63	C	0.24783		0.8483	0.2748	0.01267	Uiso	1	0.190298
C64	C	0.36543		0.809	0.2775	0.01267	Uiso	1	-0.181692
C65	C	0.16833		0.8922	0.5698	0.01267	Uiso	1	-0.528951
C66	C	0.22213		0.7628	0.426	0.01267	Uiso	1	-0.524577
N1	N	0.4707	0.523	0.6746	0.01267	Uiso	1	-0.213162	
N2	N	0.3659	0.5086	0.942	0.01267	Uiso	1	-0.505273	
N3	N	0.13737		0.1516	0.477	0.01267	Uiso	1	-0.213256
N4	N	0.03257		0.4334	0.4914	0.01267	Uiso	1	-0.505922
N5	N	0.80403		0.3254	0.8484	0.01267	Uiso	1	-0.213562
N6	N	0.69923		0.058	0.5666	0.01267	Uiso	1	-0.506526
N7	N	0.9707	0.477	0.3254	0.01267	Uiso	1	-0.213516	
N8	N	0.8659	0.4914	0.058	0.01267	Uiso	1	-0.505143	
N9	N	0.63737		0.8484	0.523	0.01267	Uiso	1	-0.213111
N10	N	0.53257		0.5666	0.5086	0.01267	Uiso	1	-0.505942
N11	N	0.30403		0.6746	0.1516	0.01267	Uiso	1	-0.21366
N12	N	0.19923		0.942	0.4334	0.01267	Uiso	1	-0.506577
O1	O	0.0381	0.4288	0.9026	0.01267	Uiso	1	-0.571053	
O2	O	0.1479	0.5147	0.0253	0.01267	Uiso	1	-0.531321	
O3	O	0.70477		0.4738	0.5712	0.01267	Uiso	1	-0.570884
O4	O	0.81457		0.5106	0.4853	0.01267	Uiso	1	-0.530653
O5	O	0.37143		0.0974	0.5262	0.01267	Uiso	1	-0.570454
O6	O	0.48123		0.9747	0.4894	0.01267	Uiso	1	-0.531074
O7	O	0.5381	0.5712	0.0974	0.01267	Uiso	1	-0.570917	
O8	O	0.6479	0.4853	0.9747	0.01267	Uiso	1	-0.531049	
O9	O	0.20477		0.5262	0.4288	0.01267	Uiso	1	-0.570734
O10	O	0.31457		0.4894	0.5147	0.01267	Uiso	1	-0.530984
O11	O	0.87143		0.9026	0.4738	0.01267	Uiso	1	-0.570539
O12	O	0.98123		0.0253	0.5106	0.01267	Uiso	1	-0.530746

```

data_BEPPAP_clean
_audit_creation_date      2014-07-02
_audit_creation_method    'Materials Studio'
_symmetry_space_group_name_H-M  'P1'
_symmetry_Int_Tables_number  1
_symmetry_cell_setting    triclinic
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  x,y,z
_cell_length_a           10.2448
_cell_length_b           17.4587
_cell_length_c           17.4587
_cell_angle_alpha        120.0000
_cell_angle_beta         90.0000
_cell_angle_gamma        90.0000
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_charge
Zn1  Zn   0.84569   0.4581 0.53313   0.01267   Uiso  1   0.709949
Zn2  Zn   0.51236   0.07503  0.5419 0.01267   Uiso  1   0.710563
Zn3  Zn   0.17902   0.46687  0.92497 0.01267   Uiso  1   0.710386
Zn4  Zn   0.34569   0.5419 0.46687   0.01267   Uiso  1   0.709876
Zn5  Zn   0.01236   0.92497  0.4581 0.01267   Uiso  1   0.710732
Zn6  Zn   0.67902   0.53313  0.07503 0.01267   Uiso  1   0.710378
H1   H    0.9542 0.5355 0.4614 0.01267   Uiso  1   0.263527
H2   H    0.8797 0.4786 0.3152 0.01267   Uiso  1   0.160138
H3   H    0.7301 0.4578 0.2988 0.01267   Uiso  1   0.180401
H4   H    0.8153 0.4113 0.3384 0.01267   Uiso  1   0.163697
H5   H    0.766  0.5959 0.4293 0.01267   Uiso  1   0.072623
H6   H    0.7761 0.7957 0.619  0.01267   Uiso  1   0.142319
H7   H    0.8192 0.8969 0.5753 0.01267   Uiso  1   0.1007
H8   H    0.068  0.6452 0.4606 0.01267   Uiso  1   0.135535
H9   H    0.1065 0.7529 0.4249 0.01267   Uiso  1   0.106436
H10  H    0.9571 0.6376 0.607  0.01267   Uiso  1   0.136815
H11  H    0.8069 0.652  0.6023 0.01267   Uiso  1   0.115726
H12  H    0.62087  0.9259 0.4645 0.01267   Uiso  1   0.262934
H13  H    0.54637  0.8366 0.5214 0.01267   Uiso  1   0.160202
H14  H    0.39677  0.841  0.5422 0.01267   Uiso  1   0.179877
H15  H    0.48197  0.9271 0.5887 0.01267   Uiso  1   0.163405
H16  H    0.43267  0.8334 0.4041 0.01267   Uiso  1   0.072286
H17  H    0.44277  0.8233 0.2043 0.01267   Uiso  1   0.143196
H18  H    0.48587  0.6784 0.1031 0.01267   Uiso  1   0.099848
H19  H    0.73467  0.8154 0.3548 0.01267   Uiso  1   0.135477

```

H20	H	0.77317	0.672	0.2471	0.01267	Uiso	1	0.107362
H21	H	0.62377	0.9694	0.3624	0.01267	Uiso	1	0.136036
H22	H	0.47357	0.9503	0.348	0.01267	Uiso	1	0.115398
H23	H	0.28753	0.5386	0.0741	0.01267	Uiso	1	0.263157
H24	H	0.21303	0.6848	0.1634	0.01267	Uiso	1	0.160325
H25	H	0.06343	0.7012	0.159	0.01267	Uiso	1	0.180709
H26	H	0.14863	0.6616	0.0729	0.01267	Uiso	1	0.163666
H27	H	0.09933	0.5707	0.1666	0.01267	Uiso	1	0.072629
H28	H	0.10943	0.381	0.1767	0.01267	Uiso	1	0.142906
H29	H	0.15253	0.4247	0.3216	0.01267	Uiso	1	0.100583
H30	H	0.40133	0.5394	0.1846	0.01267	Uiso	1	0.136123
H31	H	0.43983	0.5751	0.328	0.01267	Uiso	1	0.106543
H32	H	0.29043	0.393	0.0306	0.01267	Uiso	1	0.136852
H33	H	0.14023	0.3977	0.0497	0.01267	Uiso	1	0.114554
H34	H	0.4542	0.4645	0.5386	0.01267	Uiso	1	0.263664
H35	H	0.3797	0.5214	0.6848	0.01267	Uiso	1	0.160137
H36	H	0.2301	0.5422	0.7012	0.01267	Uiso	1	0.180451
H37	H	0.3153	0.5887	0.6616	0.01267	Uiso	1	0.163899
H38	H	0.266	0.4041	0.5707	0.01267	Uiso	1	0.0724
H39	H	0.2761	0.2043	0.381	0.01267	Uiso	1	0.14223
H40	H	0.3192	0.1031	0.4247	0.01267	Uiso	1	0.100407
H41	H	0.568	0.3548	0.5394	0.01267	Uiso	1	0.135656
H42	H	0.6065	0.2471	0.5751	0.01267	Uiso	1	0.106481
H43	H	0.4571	0.3624	0.393	0.01267	Uiso	1	0.136774
H44	H	0.3069	0.348	0.3977	0.01267	Uiso	1	0.115682
H45	H	0.12087	0.0741	0.5355	0.01267	Uiso	1	0.263039
H46	H	0.04637	0.1634	0.4786	0.01267	Uiso	1	0.160296
H47	H	0.89677	0.159	0.4578	0.01267	Uiso	1	0.180008
H48	H	0.98197	0.0729	0.4113	0.01267	Uiso	1	0.163145
H49	H	0.93267	0.1666	0.5959	0.01267	Uiso	1	0.072578
H50	H	0.94277	0.1767	0.7957	0.01267	Uiso	1	0.143037
H51	H	0.98587	0.3216	0.8969	0.01267	Uiso	1	0.099991
H52	H	0.23467	0.1846	0.6452	0.01267	Uiso	1	0.135371
H53	H	0.27317	0.328	0.7529	0.01267	Uiso	1	0.107503
H54	H	0.12377	0.0306	0.6376	0.01267	Uiso	1	0.135858
H55	H	0.97357	0.0497	0.652	0.01267	Uiso	1	0.115396
H56	H	0.78753	0.4614	0.9259	0.01267	Uiso	1	0.263013
H57	H	0.71303	0.3152	0.8366	0.01267	Uiso	1	0.160234
H58	H	0.56343	0.2988	0.841	0.01267	Uiso	1	0.180608
H59	H	0.64863	0.3384	0.9271	0.01267	Uiso	1	0.163744
H60	H	0.59933	0.4293	0.8334	0.01267	Uiso	1	0.072673
H61	H	0.60943	0.619	0.8233	0.01267	Uiso	1	0.143055
H62	H	0.65253	0.5753	0.6784	0.01267	Uiso	1	0.100665
H63	H	0.90133	0.4606	0.8154	0.01267	Uiso	1	0.136054
H64	H	0.93983	0.4249	0.672	0.01267	Uiso	1	0.106336
H65	H	0.79043	0.607	0.9694	0.01267	Uiso	1	0.137115
H66	H	0.64023	0.6023	0.9503	0.01267	Uiso	1	0.114708
C1	C	0.8022	0.4651	0.3371	0.01267	Uiso	1	-0.50738
C2	C	0.773	0.5405	0.4304	0.01267	Uiso	1	0.039486
C3	C	0.843	0.7853	0.579	0.01267	Uiso	1	-0.207175
C4	C	0.8702	0.8462	0.5531	0.01267	Uiso	1	0.071966
C5	C	0.6442	0.523	0.4629	0.01267	Uiso	1	0.583885

C6	C	0.9163	0.708	0.5448	0.01267	Uiso	1	0.160424	
C7	C	0.0171	0.6961	0.4852	0.01267	Uiso	1	-0.183033	
C8	C	0.0391	0.7609	0.4639	0.01267	Uiso	1	0.09817	
C9	C	0.8878	0.6376	0.5691	0.01267	Uiso	1	-0.140122	
C10	C	0.46887		0.872	0.5349	0.01267	Uiso	1	-0.507052
C11	C	0.43967		0.8899	0.4595	0.01267	Uiso	1	0.040778
C12	C	0.50967		0.7937	0.2147	0.01267	Uiso	1	-0.207996
C13	C	0.53687		0.7069	0.1538	0.01267	Uiso	1	0.072564
C14	C	0.31087		0.9399	0.477	0.01267	Uiso	1	0.58398
C15	C	0.58297		0.8368	0.292	0.01267	Uiso	1	0.160281
C16	C	0.68377		0.7891	0.3039	0.01267	Uiso	1	-0.183091
C17	C	0.70577		0.703	0.2391	0.01267	Uiso	1	0.098158
C18	C	0.55447		0.9315	0.3624	0.01267	Uiso	1	-0.138911
C19	C	0.13553		0.6629	0.128	0.01267	Uiso	1	-0.507588
C20	C	0.10633		0.5696	0.1101	0.01267	Uiso	1	0.039098
C21	C	0.17633		0.421	0.2063	0.01267	Uiso	1	-0.207056
C22	C	0.20353		0.4469	0.2931	0.01267	Uiso	1	0.070885
C23	C	0.97753		0.5371	0.0601	0.01267	Uiso	1	0.584427
C24	C	0.24963		0.4552	0.1632	0.01267	Uiso	1	0.161683
C25	C	0.35043		0.5148	0.2109	0.01267	Uiso	1	-0.18406
C26	C	0.37243		0.5361	0.297	0.01267	Uiso	1	0.098158
C27	C	0.22113		0.4309	0.0685	0.01267	Uiso	1	-0.140185
C28	C	0.3022	0.5349	0.6629	0.01267	Uiso	1	-0.507359	
C29	C	0.273	0.4595	0.5696	0.01267	Uiso	1	0.039364	
C30	C	0.343	0.2147	0.421	0.01267	Uiso	1	-0.207208	
C31	C	0.3702	0.1538	0.4469	0.01267	Uiso	1	0.072146	
C32	C	0.1442	0.477	0.5371	0.01267	Uiso	1	0.584044	
C33	C	0.4163	0.292	0.4552	0.01267	Uiso	1	0.160399	
C34	C	0.5171	0.3039	0.5148	0.01267	Uiso	1	-0.182848	
C35	C	0.5391	0.2391	0.5361	0.01267	Uiso	1	0.098121	
C36	C	0.3878	0.3624	0.4309	0.01267	Uiso	1	-0.140106	
C37	C	0.96887		0.128	0.4651	0.01267	Uiso	1	-0.506943
C38	C	0.93967		0.1101	0.5405	0.01267	Uiso	1	0.040636
C39	C	0.00967		0.2063	0.7853	0.01267	Uiso	1	-0.207994
C40	C	0.03687		0.2931	0.8462	0.01267	Uiso	1	0.072393
C41	C	0.81087		0.0601	0.523	0.01267	Uiso	1	0.584458
C42	C	0.08297		0.1632	0.708	0.01267	Uiso	1	0.160243
C43	C	0.18377		0.2109	0.6961	0.01267	Uiso	1	-0.183139
C44	C	0.20577		0.297	0.7609	0.01267	Uiso	1	0.098099
C45	C	0.05447		0.0685	0.6376	0.01267	Uiso	1	-0.138973
C46	C	0.63553		0.3371	0.872	0.01267	Uiso	1	-0.507753
C47	C	0.60633		0.4304	0.8899	0.01267	Uiso	1	0.038838
C48	C	0.67633		0.579	0.7937	0.01267	Uiso	1	-0.206964
C49	C	0.70353		0.5531	0.7069	0.01267	Uiso	1	0.071038
C50	C	0.47753		0.4629	0.9399	0.01267	Uiso	1	0.584569
C51	C	0.74963		0.5448	0.8368	0.01267	Uiso	1	0.161625
C52	C	0.85043		0.4852	0.7891	0.01267	Uiso	1	-0.184057
C53	C	0.87243		0.4639	0.703	0.01267	Uiso	1	0.098095
C54	C	0.72113		0.5691	0.9315	0.01267	Uiso	1	-0.1403
N1	N	0.8771	0.5488	0.49117	0.01267	Uiso	1	-0.332946	
N2	N	0.9678	0.83531	0.4969	0.01267	Uiso	1	-0.195857	
N3	N	0.54377	0.94237	0.4512	0.01267	Uiso	1	-0.333564	

N4	N	0.63447	0.66159	0.16469	0.01267	Uiso	1	-0.196448
N5	N	0.21043	0.50883	0.05763	0.01267	Uiso	1	-0.332325
N6	N	0.30113	0.5031	0.33841	0.01267	Uiso	1	-0.195739
N7	N	0.3771	0.4512	0.50883	0.01267	Uiso	1	-0.332993
N8	N	0.4678	0.16469	0.5031	0.01267	Uiso	1	-0.196024
N9	N	0.04377	0.05763	0.5488	0.01267	Uiso	1	-0.333726
N10	N	0.13447	0.33841	0.83531	0.01267	Uiso	1	-0.196024
N11	N	0.71043	0.49117	0.94237	0.01267	Uiso	1	-0.33213
N12	N	0.80113	0.4969	0.66159	0.01267	Uiso	1	-0.195854
Cl1	Cl	0.82973	0.31249	0.43838	0.01267	Uiso	1	-0.564048
Cl2	Cl	0.4964	0.12589	0.68751	0.01267	Uiso	1	-0.56403
Cl3	Cl	0.16306	0.56162	0.87411	0.01267	Uiso	1	-0.563828
Cl4	Cl	0.32973	0.68751	0.56162	0.01267	Uiso	1	-0.563828
Cl5	Cl	0.9964	0.87411	0.31249	0.01267	Uiso	1	-0.564133
Cl6	Cl	0.66306	0.43838	0.12589	0.01267	Uiso	1	-0.563969
O1	O	0.6488	0.49114	0.51354	0.01267	Uiso	1	-0.554738
O2	O	0.542	0.5392	0.43371	0.01267	Uiso	1	-0.556437
O3	O	0.31547	0.0224	0.50886	0.01267	Uiso	1	-0.554627
O4	O	0.20867	0.89451	0.4608	0.01267	Uiso	1	-0.556802
O5	O	0.98213	0.48646	0.9776	0.01267	Uiso	1	-0.554684
O6	O	0.87533	0.56629	0.10549	0.01267	Uiso	1	-0.55706
O7	O	0.1488	0.50886	0.48646	0.01267	Uiso	1	-0.554631
O8	O	0.042	0.4608	0.56629	0.01267	Uiso	1	-0.556578
O9	O	0.81547	0.9776	0.49114	0.01267	Uiso	1	-0.555261
O10	O	0.70867	0.10549	0.5392	0.01267	Uiso	1	-0.556681
O11	O	0.48213	0.51354	0.0224	0.01267	Uiso	1	-0.554466
O12	O	0.37533	0.43371	0.89451	0.01267	Uiso	1	-0.557365