

Predicting Dye-Sensitized Solar Cell performance of novel linear carbon chain-based dyes: insights from DFT simulations

Giuseppe Consiglio^a, Adam Gorczyński^b, Salvatore Petralia^c and Giuseppe Forte^{*c}

^a Department of Chemical Science University of Catania, Via S. Sofia 64, 95125, Italy,

^b Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Poland

^c Department of Drug Science and Health University of Catania, Via S. Sofia 64, 95125, Italy.

Email gforte@unict.it

Electronic supplementary information (ESI) available

Electronic Supplementary Information:

Table 1 Band gap, and FMOs energies (eV) calculated using the PBE and M06 functionals in comparison with B3LYP.

	B3LYP			PBE			M06		
	HOMO	LUMO	GAP	HOMO	LUMO	GAP	HOMO	LUMO	GAP
PY-4N	-5.07	-3.34	1.73	-5.25	-3.26	1.99	-5.34	-3.19	2.15
PY-3N	-5.05	-3.19	1.86	-5.24	-3.13	2.11	-5.34	-3.07	2.27
PY-4NP	-5.09	-3.26	1.83	-5.22	-3.11	2.11	-5.31	-3.04	2.27
PY-3NP	-5.09	-3.15	1.94	-5.27	-3.07	2.20	-5.37	-3.01	2.36

Table 2. C≡C bond length value (Å) for optimized Dyes@TiO₂ (C₁ is the carbon atom linked to acceptor group, C₆/C₈ are the carbon atoms linked to donor)

	C ₁ ≡C ₂	C ₂ ≡C ₃	C ₃ ≡C ₄	C ₄ ≡C ₅	C ₅ ≡C ₆	C ₆ ≡C ₇	C ₇ ≡C ₈	Av
PY-4N	1.214	1.326	1.215	1.324	1.216	1.333	1.211	1.263
PY-3N	1.215	1.327	1.211	1.326	1.214			1.259
PY-4NP	1.217	1.329	1.215	1.329	1.217	1.332	1.213	1.265
PY-3NP	1.218	1.327	1.214	1.330	1.218			1.261

Optimized geometries of Dyes@TiO₂

```

data_TiO2@PY4COO
_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                38.6882
_cell_length_b                15.1040
_cell_length_c                47.5200
_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
Ti1  Ti  -0.01037  0.56900  0.85266  0.00000  Uiso  1.00
Ti2  Ti   0.88735  0.69459  0.90309  0.00000  Uiso  1.00
Ti3  Ti   0.93317  0.68809  0.86029  0.00000  Uiso  1.00
Ti4  Ti   0.83007  0.56997  0.91612  0.00000  Uiso  1.00
O5   O   0.94852  0.56762  0.87453  0.00000  Uiso  1.00
O6   O   0.83562  0.68868  0.90536  0.00000  Uiso  1.00
O7   O   0.88323  0.67481  0.86287  0.00000  Uiso  1.00
O8   O   0.78058  0.60178  0.92585  0.00000  Uiso  1.00
O9   O   0.88432  0.56473  0.91203  0.00000  Uiso  1.00
O10  O   0.97377  0.69197  0.83644  0.00000  Uiso  1.00
O11  O   0.93813  0.71936  0.89723  0.00000  Uiso  1.00
O12  O   0.80523  0.54525  0.88071  0.00000  Uiso  1.00
Ti13 Ti   0.01742  0.56244  0.92077  0.00000  Uiso  1.00
Ti14 Ti   0.90948  0.68650  0.97574  0.00000  Uiso  1.00
Ti15 Ti   0.96096  0.69446  0.93277  0.00000  Uiso  1.00
Ti16 Ti   0.85253  0.56478  0.98949  0.00000  Uiso  1.00
O17  O   0.96279  0.56692  0.92416  0.00000  Uiso  1.00
O18  O   0.87055  0.69054  1.00301  0.00000  Uiso  1.00
O19  O   0.90966  0.71829  0.93849  0.00000  Uiso  1.00
O20  O   0.80262  0.53886  0.99892  0.00000  Uiso  1.00
O21  O   0.89095  0.56461  0.96366  0.00000  Uiso  1.00
O22  O   0.01524  0.68907  0.92936  0.00000  Uiso  1.00
O23  O   0.96081  0.67362  0.97369  0.00000  Uiso  1.00
O24  O   0.83265  0.59694  0.95455  0.00000  Uiso  1.00

```

Ti25	Ti	-0.01193	0.81635	0.85334	0.00000	Uiso	1.00
Ti26	Ti	0.88529	0.93573	0.90655	0.00000	Uiso	1.00
Ti27	Ti	0.93106	0.94789	0.86028	0.00000	Uiso	1.00
Ti28	Ti	0.82587	0.81084	0.91299	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.94464	0.81802	0.87177	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.83464	0.94035	0.92224	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.87959	0.95964	0.86637	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.77612	0.78455	0.92496	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.87440	0.81682	0.89849	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.97462	0.94350	0.83851	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.93429	0.91058	0.89624	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.80477	0.82823	0.87558	0.00000	Uiso	1.00
Ti37	Ti	0.02174	0.81874	0.92320	0.00000	Uiso	1.00
Ti38	Ti	0.91204	0.94710	0.97582	0.00000	Uiso	1.00
Ti39	Ti	0.95878	0.93562	0.92998	0.00000	Uiso	1.00
Ti40	Ti	0.85361	0.81703	0.98829	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.97242	0.81532	0.93796	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.87289	0.94155	1.00123	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.90980	0.90897	0.94010	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.80450	0.84422	0.99860	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.89527	0.81819	0.96681	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.00809	0.94016	0.91478	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.96375	0.95905	0.97028	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.83304	0.78967	0.95207	0.00000	Uiso	1.00
Ti49	Ti	0.75490	0.56340	0.89475	0.00000	Uiso	1.00
Ti50	Ti	0.65369	0.69347	0.94088	0.00000	Uiso	1.00
Ti51	Ti	0.69456	0.68960	0.89062	0.00000	Uiso	1.00
Ti52	Ti	0.59552	0.56496	0.94544	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.70202	0.56130	0.90435	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.60424	0.68700	0.95534	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.64672	0.71975	0.90317	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.54529	0.57387	0.96043	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.64606	0.56505	0.92944	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74239	0.68161	0.87691	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.70364	0.72006	0.92837	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.56726	0.59237	0.91222	0.00000	Uiso	1.00
Ti61	Ti	0.78486	0.56969	0.96274	0.00000	Uiso	1.00
Ti62	Ti	0.62581	0.68056	0.87028	0.00000	Uiso	1.00
Ti63	Ti	0.72420	0.69259	0.96426	0.00000	Uiso	1.00
Ti64	Ti	0.56585	0.55985	0.87394	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.73696	0.56262	0.97155	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.57679	0.68577	0.85655	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.67558	0.67413	0.97797	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.51612	0.53303	0.88471	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.61268	0.55976	0.88730	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.77602	0.69226	0.97466	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.67273	0.66041	0.85453	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61599	0.53645	0.98072	0.00000	Uiso	1.00
Ti73	Ti	0.75576	0.81139	0.88872	0.00000	Uiso	1.00
Ti74	Ti	0.65065	0.93437	0.93705	0.00000	Uiso	1.00
Ti75	Ti	0.69514	0.93367	0.89025	0.00000	Uiso	1.00

Ti76	Ti	0.59168	0.81331	0.95043	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.70409	0.81174	0.87832	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.59676	0.93912	0.93779	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.64821	0.90120	0.90034	0.00000	Uiso	1.00
O80	O	0.53875	0.80134	0.95953	0.00000	Uiso	1.00
O81	O	0.64396	0.81545	0.94825	0.00000	Uiso	1.00
O82	O	0.74309	0.94156	0.88053	0.00000	Uiso	1.00
O83	O	0.70026	0.90130	0.92708	0.00000	Uiso	1.00
O84	O	0.56740	0.78587	0.91492	0.00000	Uiso	1.00
Ti85	Ti	0.78479	0.81518	0.96273	0.00000	Uiso	1.00
Ti86	Ti	0.62754	0.94471	0.86910	0.00000	Uiso	1.00
Ti87	Ti	0.72563	0.94073	0.95782	0.00000	Uiso	1.00
Ti88	Ti	0.56914	0.81203	0.87520	0.00000	Uiso	1.00
O89	O	0.73711	0.82255	0.97584	0.00000	Uiso	1.00
O90	O	0.57953	0.93703	0.85728	0.00000	Uiso	1.00
O91	O	0.67630	0.96069	0.97207	0.00000	Uiso	1.00
O92	O	0.52187	0.84879	0.88508	0.00000	Uiso	1.00
O93	O	0.61715	0.81416	0.88259	0.00000	Uiso	1.00
O94	O	0.77844	0.94252	0.94881	0.00000	Uiso	1.00
O95	O	0.67504	0.96508	0.85388	0.00000	Uiso	1.00
O96	O	0.60466	0.84160	0.98830	0.00000	Uiso	1.00
Ti97	Ti	0.51962	0.56759	0.92415	0.00000	Uiso	1.00
Ti98	Ti	0.41006	0.69787	0.97505	0.00000	Uiso	1.00
Ti99	Ti	0.45741	0.68467	0.92941	0.00000	Uiso	1.00
Ti100	Ti	0.35373	0.56690	0.98819	0.00000	Uiso	1.00
O101	O	0.47105	0.56465	0.93916	0.00000	Uiso	1.00
O102	O	0.37140	0.69290	1.00279	0.00000	Uiso	1.00
O103	O	0.40744	0.66010	0.93845	0.00000	Uiso	1.00
O104	O	0.30476	0.54040	0.99855	0.00000	Uiso	1.00
O105	O	0.39516	0.56587	0.96648	0.00000	Uiso	1.00
O106	O	0.50700	0.68920	0.91552	0.00000	Uiso	1.00
O107	O	0.46160	0.71142	0.96956	0.00000	Uiso	1.00
O108	O	0.33356	0.59277	0.95177	0.00000	Uiso	1.00
Ti109	Ti	0.48511	0.55643	0.85259	0.00000	Uiso	1.00
Ti110	Ti	0.38785	0.68297	0.90247	0.00000	Uiso	1.00
Ti111	Ti	0.43292	0.69522	0.85700	0.00000	Uiso	1.00
Ti112	Ti	0.32615	0.56826	0.91296	0.00000	Uiso	1.00
O113	O	0.43430	0.56196	0.84746	0.00000	Uiso	1.00
O114	O	0.33626	0.69090	0.90545	0.00000	Uiso	1.00
O115	O	0.38290	0.70234	0.86389	0.00000	Uiso	1.00
O116	O	0.27647	0.59444	0.92474	0.00000	Uiso	1.00
O117	O	0.37454	0.56182	0.89805	0.00000	Uiso	1.00
O118	O	0.48179	0.69026	0.84702	0.00000	Uiso	1.00
O119	O	0.43777	0.65371	0.89389	0.00000	Uiso	1.00
O120	O	0.30418	0.54800	0.87605	0.00000	Uiso	1.00
Ti121	Ti	0.51703	0.81131	0.92211	0.00000	Uiso	1.00
Ti122	Ti	0.41076	0.93613	0.97517	0.00000	Uiso	1.00
Ti123	Ti	0.46103	0.94433	0.93195	0.00000	Uiso	1.00
Ti124	Ti	0.35230	0.81740	0.98940	0.00000	Uiso	1.00
O125	O	0.46237	0.81648	0.92252	0.00000	Uiso	1.00
O126	O	0.37229	0.94147	1.00088	0.00000	Uiso	1.00

O127	O	0.41166	0.97256	0.93910	0.00000	Uiso	1.00
O128	O	0.30206	0.84009	0.99878	0.00000	Uiso	1.00
O129	O	0.39015	0.81858	0.96303	0.00000	Uiso	1.00
O130	O	0.51498	0.93848	0.92961	0.00000	Uiso	1.00
O131	O	0.46171	0.92032	0.97250	0.00000	Uiso	1.00
O132	O	0.33273	0.78319	0.95461	0.00000	Uiso	1.00
Ti133	Ti	0.48712	0.81507	0.86074	0.00000	Uiso	1.00
Ti134	Ti	0.38802	0.94489	0.90633	0.00000	Uiso	1.00
Ti135	Ti	0.42980	0.92778	0.85759	0.00000	Uiso	1.00
Ti136	Ti	0.33190	0.81046	0.91603	0.00000	Uiso	1.00
O137	O	0.43978	0.81176	0.87323	0.00000	Uiso	1.00
O138	O	0.33735	0.93973	0.92258	0.00000	Uiso	1.00
O139	O	0.37960	0.92136	0.86843	0.00000	Uiso	1.00
O140	O	0.28185	0.78245	0.92453	0.00000	Uiso	1.00
O141	O	0.38640	0.81392	0.91172	0.00000	Uiso	1.00
O142	O	0.47658	0.93225	0.84283	0.00000	Uiso	1.00
O143	O	0.43884	0.96929	0.89473	0.00000	Uiso	1.00
O144	O	0.31063	0.83521	0.87947	0.00000	Uiso	1.00
Ti145	Ti	0.28546	0.56668	0.96241	0.00000	Uiso	1.00
Ti146	Ti	0.13112	0.69002	0.86575	0.00000	Uiso	1.00
Ti147	Ti	0.22295	0.68574	0.96376	0.00000	Uiso	1.00
Ti148	Ti	0.07192	0.56376	0.87315	0.00000	Uiso	1.00
O149	O	0.23861	0.55864	0.97506	0.00000	Uiso	1.00
O150	O	0.08233	0.68954	0.85574	0.00000	Uiso	1.00
O151	O	0.17215	0.67398	0.97502	0.00000	Uiso	1.00
O152	O	0.02309	0.59433	0.88136	0.00000	Uiso	1.00
O153	O	0.12098	0.56438	0.88122	0.00000	Uiso	1.00
O154	O	0.27516	0.68838	0.97362	0.00000	Uiso	1.00
O155	O	0.17856	0.71427	0.85106	0.00000	Uiso	1.00
O156	O	0.11284	0.59147	0.98170	0.00000	Uiso	1.00
Ti157	Ti	0.25479	0.56565	0.88900	0.00000	Uiso	1.00
Ti158	Ti	0.15250	0.68601	0.93632	0.00000	Uiso	1.00
Ti159	Ti	0.19820	0.69661	0.88872	0.00000	Uiso	1.00
Ti160	Ti	0.09373	0.56484	0.94576	0.00000	Uiso	1.00
O161	O	0.20094	0.56592	0.88087	0.00000	Uiso	1.00
O162	O	0.09858	0.69213	0.93736	0.00000	Uiso	1.00
O163	O	0.15101	0.71293	0.89941	0.00000	Uiso	1.00
O164	O	0.04209	0.55624	0.95837	0.00000	Uiso	1.00
O165	O	0.14202	0.56522	0.93037	0.00000	Uiso	1.00
O166	O	0.24590	0.69282	0.87522	0.00000	Uiso	1.00
O167	O	0.20380	0.66510	0.92717	0.00000	Uiso	1.00
O168	O	0.06732	0.53781	0.91231	0.00000	Uiso	1.00
Ti169	Ti	0.28458	0.81111	0.96229	0.00000	Uiso	1.00
Ti170	Ti	0.12946	0.93644	0.86595	0.00000	Uiso	1.00
Ti171	Ti	0.22704	0.94192	0.95750	0.00000	Uiso	1.00
Ti172	Ti	0.07009	0.81349	0.87319	0.00000	Uiso	1.00
O173	O	0.23554	0.81787	0.97110	0.00000	Uiso	1.00
O174	O	0.07971	0.93773	0.85445	0.00000	Uiso	1.00
O175	O	0.17915	0.95725	0.97450	0.00000	Uiso	1.00
O176	O	0.02087	0.78870	0.88324	0.00000	Uiso	1.00
O177	O	0.11757	0.81195	0.88212	0.00000	Uiso	1.00

O178	O	0.27985	0.93950	0.94904	0.00000	Uiso	1.00
O179	O	0.17717	0.91383	0.85159	0.00000	Uiso	1.00
O180	O	0.11272	0.78998	0.98516	0.00000	Uiso	1.00
Ti181	Ti	0.25966	0.81568	0.89101	0.00000	Uiso	1.00
Ti182	Ti	0.15424	0.94672	0.93894	0.00000	Uiso	1.00
Ti183	Ti	0.19616	0.93485	0.88915	0.00000	Uiso	1.00
Ti184	Ti	0.09711	0.81688	0.94792	0.00000	Uiso	1.00
O185	O	0.20888	0.81615	0.90167	0.00000	Uiso	1.00
O186	O	0.10543	0.94109	0.95466	0.00000	Uiso	1.00
O187	O	0.14748	0.92034	0.90132	0.00000	Uiso	1.00
O188	O	0.04544	0.82698	0.95973	0.00000	Uiso	1.00
O189	O	0.15086	0.81571	0.94190	0.00000	Uiso	1.00
O190	O	0.24409	0.93855	0.87802	0.00000	Uiso	1.00
O191	O	0.20219	0.97015	0.92535	0.00000	Uiso	1.00
O192	O	0.07100	0.84227	0.91255	0.00000	Uiso	1.00
Ti193	Ti	-0.01037	0.06898	0.85266	0.00000	Uiso	1.00
Ti194	Ti	0.88736	0.19455	0.90310	0.00000	Uiso	1.00
Ti195	Ti	0.93317	0.18808	0.86029	0.00000	Uiso	1.00
Ti196	Ti	0.83007	0.06995	0.91614	0.00000	Uiso	1.00
O197	O	0.94853	0.06762	0.87453	0.00000	Uiso	1.00
O198	O	0.83563	0.18865	0.90537	0.00000	Uiso	1.00
O199	O	0.88324	0.17477	0.86288	0.00000	Uiso	1.00
O200	O	0.78058	0.10172	0.92586	0.00000	Uiso	1.00
O201	O	0.88432	0.06470	0.91205	0.00000	Uiso	1.00
O202	O	0.97376	0.19195	0.83644	0.00000	Uiso	1.00
O203	O	0.93814	0.21931	0.89723	0.00000	Uiso	1.00
O204	O	0.80523	0.04511	0.88074	0.00000	Uiso	1.00
Ti205	Ti	0.01742	0.06240	0.92077	0.00000	Uiso	1.00
Ti206	Ti	0.90949	0.18650	0.97574	0.00000	Uiso	1.00
Ti207	Ti	0.96096	0.19443	0.93277	0.00000	Uiso	1.00
Ti208	Ti	0.85252	0.06479	0.98950	0.00000	Uiso	1.00
O209	O	0.96279	0.06689	0.92417	0.00000	Uiso	1.00
O210	O	0.87056	0.19055	1.00302	0.00000	Uiso	1.00
O211	O	0.90966	0.21826	0.93850	0.00000	Uiso	1.00
O212	O	0.80261	0.03896	0.99895	0.00000	Uiso	1.00
O213	O	0.89095	0.06462	0.96367	0.00000	Uiso	1.00
O214	O	0.01524	0.18904	0.92936	0.00000	Uiso	1.00
O215	O	0.96081	0.17362	0.97369	0.00000	Uiso	1.00
O216	O	0.83264	0.09697	0.95456	0.00000	Uiso	1.00
Ti217	Ti	-0.01194	0.31635	0.85333	0.00000	Uiso	1.00
Ti218	Ti	0.88530	0.43575	0.90655	0.00000	Uiso	1.00
Ti219	Ti	0.93106	0.44789	0.86027	0.00000	Uiso	1.00
Ti220	Ti	0.82590	0.31081	0.91299	0.00000	Uiso	1.00
O221	O	0.94463	0.31802	0.87176	0.00000	Uiso	1.00
O222	O	0.83465	0.44035	0.92222	0.00000	Uiso	1.00
O223	O	0.87960	0.45962	0.86636	0.00000	Uiso	1.00
O224	O	0.77616	0.28450	0.92496	0.00000	Uiso	1.00
O225	O	0.87443	0.31680	0.89850	0.00000	Uiso	1.00
O226	O	0.97462	0.44351	0.83850	0.00000	Uiso	1.00
O227	O	0.93430	0.41061	0.89623	0.00000	Uiso	1.00
O228	O	0.80485	0.32818	0.87558	0.00000	Uiso	1.00

Ti229	Ti	0.02172	0.31872	0.92319	0.00000	Uiso	1.00
Ti230	Ti	0.91204	0.44710	0.97582	0.00000	Uiso	1.00
Ti231	Ti	0.95879	0.43564	0.92998	0.00000	Uiso	1.00
Ti232	Ti	0.85361	0.31704	0.98830	0.00000	Uiso	1.00
O233	O	0.97241	0.31532	0.93795	0.00000	Uiso	1.00
O234	O	0.87290	0.44156	1.00122	0.00000	Uiso	1.00
O235	O	0.90980	0.40901	0.94009	0.00000	Uiso	1.00
O236	O	0.80450	0.34429	0.99859	0.00000	Uiso	1.00
O237	O	0.89527	0.31819	0.96681	0.00000	Uiso	1.00
O238	O	0.00810	0.44018	0.91478	0.00000	Uiso	1.00
O239	O	0.96376	0.45906	0.97028	0.00000	Uiso	1.00
O240	O	0.83305	0.28966	0.95207	0.00000	Uiso	1.00
Ti241	Ti	0.75490	0.06327	0.89478	0.00000	Uiso	1.00
Ti242	Ti	0.65360	0.19369	0.94082	0.00000	Uiso	1.00
Ti243	Ti	0.69468	0.18962	0.89062	0.00000	Uiso	1.00
Ti244	Ti	0.59549	0.06513	0.94561	0.00000	Uiso	1.00
O245	O	0.70201	0.06137	0.90439	0.00000	Uiso	1.00
O246	O	0.60404	0.18737	0.95514	0.00000	Uiso	1.00
O247	O	0.64682	0.21984	0.90306	0.00000	Uiso	1.00
O248	O	0.54522	0.07387	0.96072	0.00000	Uiso	1.00
O249	O	0.64601	0.06511	0.92953	0.00000	Uiso	1.00
O250	O	0.74250	0.18156	0.87697	0.00000	Uiso	1.00
O251	O	0.70360	0.22026	0.92839	0.00000	Uiso	1.00
O252	O	0.56736	0.09267	0.91236	0.00000	Uiso	1.00
Ti253	Ti	0.78484	0.06973	0.96277	0.00000	Uiso	1.00
Ti254	Ti	0.62620	0.18043	0.87012	0.00000	Uiso	1.00
Ti255	Ti	0.72414	0.19268	0.96427	0.00000	Uiso	1.00
Ti256	Ti	0.56587	0.06133	0.87388	0.00000	Uiso	1.00
O257	O	0.73694	0.06270	0.97157	0.00000	Uiso	1.00
O258	O	0.57752	0.18583	0.85600	0.00000	Uiso	1.00
O259	O	0.67545	0.17457	0.97795	0.00000	Uiso	1.00
O260	O	0.51574	0.04186	0.88474	0.00000	Uiso	1.00
O261	O	0.61267	0.06046	0.88734	0.00000	Uiso	1.00
O262	O	0.77598	0.19233	0.97467	0.00000	Uiso	1.00
O263	O	0.67311	0.16019	0.85450	0.00000	Uiso	1.00
O264	O	0.61603	0.03724	0.98091	0.00000	Uiso	1.00
Ti265	Ti	0.75585	0.31136	0.88873	0.00000	Uiso	1.00
Ti266	Ti	0.65058	0.43438	0.93692	0.00000	Uiso	1.00
Ti267	Ti	0.69526	0.43360	0.89021	0.00000	Uiso	1.00
Ti268	Ti	0.59131	0.31361	0.95002	0.00000	Uiso	1.00
O269	O	0.70423	0.31170	0.87827	0.00000	Uiso	1.00
O270	O	0.59667	0.43928	0.93737	0.00000	Uiso	1.00
O271	O	0.64832	0.40111	0.90019	0.00000	Uiso	1.00
O272	O	0.53815	0.30190	0.95883	0.00000	Uiso	1.00
O273	O	0.64366	0.31562	0.94809	0.00000	Uiso	1.00
O274	O	0.74320	0.44155	0.88058	0.00000	Uiso	1.00
O275	O	0.70022	0.40113	0.92705	0.00000	Uiso	1.00
O276	O	0.56718	0.28666	0.91427	0.00000	Uiso	1.00
Ti277	Ti	0.78480	0.31520	0.96272	0.00000	Uiso	1.00
Ti278	Ti	0.62785	0.44465	0.86890	0.00000	Uiso	1.00
Ti279	Ti	0.72564	0.44070	0.95776	0.00000	Uiso	1.00

Ti280	Ti	0.56954	0.31181	0.87444	0.00000	Uiso	1.00
O281	O	0.73711	0.32262	0.97582	0.00000	Uiso	1.00
O282	O	0.58002	0.43698	0.85680	0.00000	Uiso	1.00
O283	O	0.67629	0.46060	0.97195	0.00000	Uiso	1.00
O284	O	0.52133	0.34397	0.88255	0.00000	Uiso	1.00
O285	O	0.61745	0.31399	0.88223	0.00000	Uiso	1.00
O286	O	0.77845	0.44249	0.94876	0.00000	Uiso	1.00
O287	O	0.67537	0.46515	0.85380	0.00000	Uiso	1.00
O288	O	0.60398	0.34193	0.98796	0.00000	Uiso	1.00
Ti289	Ti	0.51969	0.06866	0.92438	0.00000	Uiso	1.00
Ti290	Ti	0.40968	0.19781	0.97507	0.00000	Uiso	1.00
Ti291	Ti	0.45685	0.18495	0.92966	0.00000	Uiso	1.00
Ti292	Ti	0.35376	0.06663	0.98808	0.00000	Uiso	1.00
O293	O	0.47095	0.06482	0.93909	0.00000	Uiso	1.00
O294	O	0.37115	0.19263	1.00284	0.00000	Uiso	1.00
O295	O	0.40664	0.16014	0.93841	0.00000	Uiso	1.00
O296	O	0.30484	0.04011	0.99845	0.00000	Uiso	1.00
O297	O	0.39515	0.06574	0.96634	0.00000	Uiso	1.00
O298	O	0.50656	0.18942	0.91588	0.00000	Uiso	1.00
O299	O	0.46117	0.21098	0.96983	0.00000	Uiso	1.00
O300	O	0.33367	0.09313	0.95165	0.00000	Uiso	1.00
Ti301	Ti	0.48363	0.06273	0.85322	0.00000	Uiso	1.00
Ti302	Ti	0.38667	0.18483	0.90231	0.00000	Uiso	1.00
Ti303	Ti	0.43079	0.19424	0.85838	0.00000	Uiso	1.00
Ti304	Ti	0.32634	0.06814	0.91278	0.00000	Uiso	1.00
O305	O	0.43245	0.06105	0.84858	0.00000	Uiso	1.00
O306	O	0.33526	0.19123	0.90522	0.00000	Uiso	1.00
O307	O	0.38132	0.21036	0.86278	0.00000	Uiso	1.00
O308	O	0.27661	0.09366	0.92465	0.00000	Uiso	1.00
O309	O	0.37478	0.06316	0.89754	0.00000	Uiso	1.00
O310	O	0.47592	0.19174	0.83948	0.00000	Uiso	1.00
O311	O	0.43623	0.15374	0.89456	0.00000	Uiso	1.00
O312	O	0.30423	0.04731	0.87595	0.00000	Uiso	1.00
Ti313	Ti	0.51663	0.31143	0.92123	0.00000	Uiso	1.00
Ti314	Ti	0.41046	0.43614	0.97542	0.00000	Uiso	1.00
Ti315	Ti	0.46074	0.44428	0.93229	0.00000	Uiso	1.00
Ti316	Ti	0.35197	0.31724	0.98949	0.00000	Uiso	1.00
O317	O	0.46191	0.31666	0.92312	0.00000	Uiso	1.00
O318	O	0.37194	0.44146	1.00104	0.00000	Uiso	1.00
O319	O	0.41102	0.47193	0.93931	0.00000	Uiso	1.00
O320	O	0.30176	0.33991	0.99892	0.00000	Uiso	1.00
O321	O	0.38987	0.31868	0.96324	0.00000	Uiso	1.00
O322	O	0.51474	0.43815	0.92954	0.00000	Uiso	1.00
O323	O	0.46137	0.42046	0.97286	0.00000	Uiso	1.00
O324	O	0.33225	0.28283	0.95472	0.00000	Uiso	1.00
Ti325	Ti	0.48838	0.31411	0.85476	0.00000	Uiso	1.00
Ti326	Ti	0.38631	0.44388	0.90663	0.00000	Uiso	1.00
Ti327	Ti	0.42855	0.43091	0.86021	0.00000	Uiso	1.00
Ti328	Ti	0.33100	0.31032	0.91620	0.00000	Uiso	1.00
O329	O	0.44585	0.31187	0.87414	0.00000	Uiso	1.00
O330	O	0.33593	0.43937	0.92278	0.00000	Uiso	1.00

O331	O	0.37812	0.41783	0.86744	0.00000	Uiso	1.00
O332	O	0.28109	0.28217	0.92470	0.00000	Uiso	1.00
O333	O	0.38532	0.31419	0.91224	0.00000	Uiso	1.00
O334	O	0.47161	0.43073	0.83811	0.00000	Uiso	1.00
O335	O	0.43650	0.47193	0.89636	0.00000	Uiso	1.00
O336	O	0.31009	0.33557	0.87962	0.00000	Uiso	1.00
Ti337	Ti	0.28556	0.06659	0.96233	0.00000	Uiso	1.00
Ti338	Ti	0.13106	0.18998	0.86570	0.00000	Uiso	1.00
Ti339	Ti	0.22285	0.18549	0.96379	0.00000	Uiso	1.00
Ti340	Ti	0.07193	0.06368	0.87315	0.00000	Uiso	1.00
O341	O	0.23871	0.05835	0.97497	0.00000	Uiso	1.00
O342	O	0.08227	0.18948	0.85573	0.00000	Uiso	1.00
O343	O	0.17206	0.17371	0.97501	0.00000	Uiso	1.00
O344	O	0.02309	0.09427	0.88137	0.00000	Uiso	1.00
O345	O	0.12099	0.06437	0.88120	0.00000	Uiso	1.00
O346	O	0.27501	0.18818	0.97367	0.00000	Uiso	1.00
O347	O	0.17849	0.21410	0.85101	0.00000	Uiso	1.00
O348	O	0.11283	0.09140	0.98170	0.00000	Uiso	1.00
Ti349	Ti	0.25484	0.06556	0.88889	0.00000	Uiso	1.00
Ti350	Ti	0.15246	0.18592	0.93631	0.00000	Uiso	1.00
Ti351	Ti	0.19810	0.19641	0.88868	0.00000	Uiso	1.00
Ti352	Ti	0.09374	0.06475	0.94576	0.00000	Uiso	1.00
O353	O	0.20098	0.06567	0.88082	0.00000	Uiso	1.00
O354	O	0.09854	0.19205	0.93736	0.00000	Uiso	1.00
O355	O	0.15091	0.21254	0.89938	0.00000	Uiso	1.00
O356	O	0.04210	0.05612	0.95837	0.00000	Uiso	1.00
O357	O	0.14202	0.06516	0.93035	0.00000	Uiso	1.00
O358	O	0.24581	0.19288	0.87520	0.00000	Uiso	1.00
O359	O	0.20376	0.16513	0.92716	0.00000	Uiso	1.00
O360	O	0.06732	0.03771	0.91231	0.00000	Uiso	1.00
Ti361	Ti	0.28422	0.31095	0.96244	0.00000	Uiso	1.00
Ti362	Ti	0.12940	0.43648	0.86593	0.00000	Uiso	1.00
Ti363	Ti	0.22681	0.44198	0.95768	0.00000	Uiso	1.00
Ti364	Ti	0.07006	0.31348	0.87318	0.00000	Uiso	1.00
O365	O	0.23523	0.31775	0.97131	0.00000	Uiso	1.00
O366	O	0.07966	0.43778	0.85444	0.00000	Uiso	1.00
O367	O	0.17890	0.45732	0.97458	0.00000	Uiso	1.00
O368	O	0.02085	0.28870	0.88324	0.00000	Uiso	1.00
O369	O	0.11756	0.31194	0.88208	0.00000	Uiso	1.00
O370	O	0.27952	0.43942	0.94924	0.00000	Uiso	1.00
O371	O	0.17711	0.41413	0.85159	0.00000	Uiso	1.00
O372	O	0.11268	0.29000	0.98516	0.00000	Uiso	1.00
Ti373	Ti	0.25928	0.31570	0.89110	0.00000	Uiso	1.00
Ti374	Ti	0.15415	0.44673	0.93896	0.00000	Uiso	1.00
Ti375	Ti	0.19603	0.43507	0.88918	0.00000	Uiso	1.00
Ti376	Ti	0.09706	0.31684	0.94792	0.00000	Uiso	1.00
O377	O	0.20854	0.31613	0.90161	0.00000	Uiso	1.00
O378	O	0.10535	0.44112	0.95464	0.00000	Uiso	1.00
O379	O	0.14735	0.42074	0.90132	0.00000	Uiso	1.00
O380	O	0.04540	0.32694	0.95973	0.00000	Uiso	1.00
O381	O	0.15079	0.31568	0.94188	0.00000	Uiso	1.00

O382	O	0.24396	0.43864	0.87808	0.00000	Uiso	1.00
O383	O	0.20211	0.47003	0.92542	0.00000	Uiso	1.00
O384	O	0.07098	0.34220	0.91255	0.00000	Uiso	1.00
C385	C	-0.61096	-0.11462	0.47236	0.00000	Uiso	1.00
C386	C	-0.60917	-0.13387	0.49703	0.00000	Uiso	1.00
C387	C	-0.60699	-0.15458	0.52424	0.00000	Uiso	1.00
C388	C	-0.60481	-0.17300	0.54909	0.00000	Uiso	1.00
C389	C	-0.60222	-0.19252	0.57616	0.00000	Uiso	1.00
C390	C	-0.59969	-0.20993	0.60102	0.00000	Uiso	1.00
C391	C	-0.59678	-0.22839	0.62821	0.00000	Uiso	1.00
C392	C	-0.59404	-0.24481	0.65311	0.00000	Uiso	1.00
C393	C	-0.59089	-0.26261	0.68098	0.00000	Uiso	1.00
C394	C	-0.58509	-0.34285	0.69103	0.00000	Uiso	1.00
S395	S	-0.59375	-0.17852	0.70755	0.00000	Uiso	1.00
C396	C	-0.58245	-0.34535	0.71995	0.00000	Uiso	1.00
H397	H	-0.58250	-0.40111	0.67791	0.00000	Uiso	1.00
C398	C	-0.58629	-0.26707	0.73254	0.00000	Uiso	1.00
H399	H	-0.57752	-0.40639	0.73122	0.00000	Uiso	1.00
C400	C	-0.58335	-0.25857	0.76199	0.00000	Uiso	1.00
H401	H	-0.57696	-0.31913	0.77306	0.00000	Uiso	1.00
C402	C	-0.58701	-0.18395	0.77777	0.00000	Uiso	1.00
C403	C	-0.59630	-0.10375	0.76665	0.00000	Uiso	1.00
C404	C	-0.58033	-0.18594	0.80863	0.00000	Uiso	1.00
O405	O	-0.57364	-0.26115	0.82004	0.00000	Uiso	1.00
O406	O	-0.58076	-0.11461	0.82111	0.00000	Uiso	1.00
N407	N	-0.60415	-0.03446	0.75812	0.00000	Uiso	1.00
C408	C	-0.61278	-0.09258	0.44480	0.00000	Uiso	1.00
C409	C	-0.62614	-0.01699	0.43580	0.00000	Uiso	1.00
S410	S	-0.59631	-0.16254	0.41726	0.00000	Uiso	1.00
C411	C	-0.62476	-0.00750	0.40696	0.00000	Uiso	1.00
H412	H	-0.63686	0.03296	0.44963	0.00000	Uiso	1.00
C413	C	-0.61060	-0.07598	0.39377	0.00000	Uiso	1.00
H414	H	-0.63424	0.05071	0.39618	0.00000	Uiso	1.00
H415	H	-0.61162	-0.01986	0.35398	0.00000	Uiso	1.00
C416	C	-0.59200	-0.15017	0.35029	0.00000	Uiso	1.00
C417	C	-0.57428	-0.14370	0.32660	0.00000	Uiso	1.00
C418	C	-0.56949	-0.22912	0.31671	0.00000	Uiso	1.00
H419	H	-0.56578	-0.08309	0.31671	0.00000	Uiso	1.00
C420	C	-0.58509	-0.28451	0.33434	0.00000	Uiso	1.00
H421	H	-0.55591	-0.24768	0.29772	0.00000	Uiso	1.00
H422	H	-0.58614	-0.35582	0.33195	0.00000	Uiso	1.00
N423	N	-0.60595	-0.07685	0.36548	0.00000	Uiso	1.00
N424	N	-0.60005	-0.23990	0.35559	0.00000	Uiso	1.00
H425	H	-0.61478	-0.26568	0.37203	0.00000	Uiso	1.00
H426	H	0.36044	0.72847	0.85077	0.00000	Uiso	1.00

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

_geom_bond_distance

_geom_bond_site_symmetry_2

_ccdc_geom_bond_type

Ti1	O5	1.900	1_455	S
Ti1	O10	2.103	1_455	S
Ti1	O152	1.919	.	S
Ti1	O226	2.093	1_455	S
Ti2	O6	2.007	.	S
Ti2	O11	2.019	.	S
Ti2	O9	2.010	.	S
Ti2	O19	1.924	.	S
Ti2	O7	1.941	.	S
Ti2	O33	1.925	.	S
Ti3	O7	1.946	.	S
Ti3	O10	1.938	.	S
Ti3	O5	2.030	.	S
Ti3	O29	2.085	.	S
Ti3	O11	1.828	.	S
Ti4	O8	2.028	.	S
Ti4	O9	2.109	.	S
Ti4	O24	1.874	.	S
Ti4	O6	1.877	.	S
Ti4	O222	1.987	.	S
Ti4	O12	1.973	.	S
O5	Ti1	1.900	1_655	S
O5	Ti219	2.046	.	S
O6	Ti28	1.918	.	S
O8	Ti61	1.826	.	S
O8	Ti49	1.872	.	S
O9	Ti218	1.966	.	S
O10	Ti1	2.103	1_655	S
O10	Ti25	2.117	1_655	S
O11	Ti15	1.942	.	S
O12	Ti49	2.076	.	S
Ti13	O17	2.121	1_455	S
Ti13	O168	2.006	.	S
Ti13	O22	1.957	.	S
Ti13	O152	1.946	.	S
Ti13	O164	2.028	.	S
Ti13	O238	1.903	.	S
Ti14	O18	1.988	.	S
Ti14	O23	1.997	.	S
Ti14	O21	2.057	.	S
Ti14	O19	1.834	.	S
Ti14	O45	2.107	.	S
Ti15	O19	2.035	.	S
Ti15	O22	2.108	1_655	S
Ti15	O17	1.971	.	S
Ti15	O41	1.895	.	S
Ti15	O23	1.970	.	S
Ti16	O20	2.020	.	S
Ti16	O21	1.928	.	S
Ti16	O18	2.123	.	S
Ti16	O234	2.097	.	S

Ti16	O24	1.893	.	S
O17	Ti13	2.121	1_655	S
O17	Ti231	2.008	.	S
O18	Ti40	2.138	.	S
O20	Ti61	1.909	.	S
O21	Ti230	2.037	.	S
O22	Ti15	2.108	1_455	S
O22	Ti37	1.996	.	S
O24	Ti61	1.934	.	S
Ti25	O29	1.895	1_455	S
Ti25	O34	2.111	1_455	S
Ti25	O176	1.950	.	S
Ti25	O10	2.117	1_455	S
Ti26	O30	2.098	.	S
Ti26	O35	1.994	.	S
Ti26	O33	1.884	.	S
Ti26	O43	1.898	.	S
Ti26	O31	1.956	.	S
Ti26	O201	1.966	1_565	S
Ti27	O31	2.020	.	S
Ti27	O34	1.978	.	S
Ti27	O29	2.103	.	S
Ti27	O197	2.046	1_565	S
Ti27	O35	1.804	.	S
Ti28	O32	2.046	.	S
Ti28	O33	2.002	.	S
Ti28	O48	1.905	.	S
Ti28	O30	2.033	.	S
Ti28	O36	1.974	.	S
O29	Ti25	1.895	1_655	S
O30	Ti196	1.987	1_565	S
O32	Ti85	1.884	.	S
O32	Ti73	1.937	.	S
O34	Ti25	2.111	1_655	S
O34	Ti193	2.093	1_665	S
O35	Ti39	1.901	.	S
O36	Ti73	2.013	.	S
Ti37	O41	2.033	1_455	S
Ti37	O192	2.004	.	S
Ti37	O46	1.950	.	S
Ti37	O176	1.952	.	S
Ti37	O188	1.967	.	S
Ti38	O42	1.939	.	S
Ti38	O47	2.026	.	S
Ti38	O45	2.097	.	S
Ti38	O43	1.795	.	S
Ti38	O213	2.037	1_565	S
Ti39	O43	1.996	.	S
Ti39	O46	2.041	1_655	S
Ti39	O41	1.930	.	S
Ti39	O209	2.008	1_565	S

Ti39	O47	1.957	.	S
Ti40	O44	2.004	.	S
Ti40	O45	1.908	.	S
Ti40	O42	2.115	.	S
Ti40	O48	1.941	.	S
O41	Ti37	2.033	1_655	S
O42	Ti208	2.097	1_565	S
O44	Ti85	1.918	.	S
O46	Ti39	2.041	1_455	S
O46	Ti205	1.903	1_565	S
O48	Ti85	1.972	.	S
Ti49	O53	2.097	.	S
Ti49	O58	2.035	.	S
Ti49	O274	2.011	.	S
Ti50	O54	2.035	.	S
Ti50	O59	2.061	.	S
Ti50	O57	2.036	.	S
Ti50	O67	1.977	.	S
Ti50	O55	1.855	.	S
Ti50	O81	1.913	.	S
Ti51	O55	1.997	.	S
Ti51	O58	1.965	.	S
Ti51	O71	1.962	.	S
Ti51	O53	2.065	.	S
Ti51	O77	1.970	.	S
Ti51	O59	1.885	.	S
Ti52	O56	2.074	.	S
Ti52	O57	2.098	.	S
Ti52	O72	1.903	.	S
Ti52	O54	1.932	.	S
Ti52	O270	1.937	.	S
Ti52	O60	1.965	.	S
O53	Ti267	2.059	.	S
O54	Ti76	1.983	.	S
O55	Ti62	1.857	.	S
O56	Ti97	1.992	.	S
O57	Ti266	2.013	.	S
O58	Ti73	2.103	.	S
O59	Ti63	1.927	.	S
O60	Ti97	1.964	.	S
O60	Ti64	1.885	.	S
Ti61	O65	1.903	.	S
Ti61	O70	1.966	.	S
Ti61	O286	2.048	.	S
Ti62	O66	2.007	.	S
Ti62	O71	1.987	.	S
Ti62	O69	2.059	.	S
Ti62	O93	2.128	.	S
Ti63	O67	2.010	.	S
Ti63	O70	2.065	.	S
Ti63	O65	2.054	.	S

Ti63	O89	2.099	.	S
Ti64	O68	2.032	.	S
Ti64	O69	1.920	.	S
Ti64	O66	2.116	.	S
Ti64	O282	2.100	.	S
O65	Ti279	2.003	.	S
O66	Ti88	2.124	.	S
O68	Ti97	1.950	.	S
O68	Ti109	1.973	.	S
O69	Ti278	2.033	.	S
O70	Ti85	1.971	.	S
Ti73	O77	2.059	.	S
Ti73	O82	2.063	.	S
Ti74	O78	2.087	.	S
Ti74	O83	2.039	.	S
Ti74	O81	1.891	.	S
Ti74	O91	1.978	.	S
Ti74	O79	1.817	.	S
Ti74	O249	2.015	1_565	S
Ti75	O79	1.941	.	S
Ti75	O82	1.915	.	S
Ti75	O95	1.954	.	S
Ti75	O77	1.958	.	S
Ti75	O245	2.060	1_565	S
Ti75	O83	1.828	.	S
Ti76	O80	2.101	.	S
Ti76	O81	2.025	.	S
Ti76	O96	1.917	.	S
Ti76	O78	2.003	.	S
Ti76	O84	1.975	.	S
O78	Ti244	1.940	1_565	S
O79	Ti86	1.810	.	S
O80	Ti121	1.972	.	S
O82	Ti241	2.012	1_565	S
O83	Ti87	1.858	.	S
O84	Ti121	2.015	.	S
O84	Ti88	1.930	.	S
Ti85	O89	1.950	.	S
Ti85	O94	2.049	.	S
Ti86	O90	1.944	.	S
Ti86	O95	1.999	.	S
Ti86	O93	2.112	.	S
Ti86	O261	2.034	1_565	S
Ti87	O91	2.047	.	S
Ti87	O94	2.087	.	S
Ti87	O89	2.029	.	S
Ti87	O257	2.003	1_565	S
Ti88	O92	1.968	.	S
Ti88	O93	1.891	.	S
Ti88	O90	2.110	.	S
O90	Ti256	2.104	1_565	S

O92	Ti121	1.858	.	S
O92	Ti133	1.845	.	S
O94	Ti253	2.048	1_565	S
Ti97	O101	2.010	.	S
Ti97	O106	1.944	.	S
Ti97	O322	1.981	.	S
Ti98	O102	1.995	.	S
Ti98	O107	2.021	.	S
Ti98	O105	2.115	.	S
Ti98	O103	1.833	.	S
Ti98	O129	2.060	.	S
Ti99	O103	2.015	.	S
Ti99	O106	2.030	.	S
Ti99	O119	1.909	.	S
Ti99	O101	1.944	.	S
Ti99	O125	2.027	.	S
Ti99	O107	1.957	.	S
Ti100	O104	1.998	.	S
Ti100	O105	1.906	.	S
Ti100	O102	2.138	.	S
Ti100	O318	2.112	.	S
Ti100	O108	1.938	.	S
O101	Ti315	1.890	.	S
O102	Ti124	2.118	.	S
O103	Ti110	1.902	.	S
O104	Ti145	1.914	.	S
O105	Ti314	2.090	.	S
O106	Ti121	1.911	.	S
O108	Ti145	1.969	.	S
O108	Ti112	1.903	.	S
Ti109	O113	1.983	.	S
Ti109	O118	2.043	.	S
Ti109	O334	2.086	.	S
Ti110	O114	2.005	.	S
Ti110	O119	2.023	.	S
Ti110	O117	1.913	.	S
Ti110	O141	2.027	.	S
Ti110	O115	1.866	.	S
Ti111	O115	1.966	.	S
Ti111	O118	1.951	.	S
Ti111	O113	2.064	.	S
Ti111	O137	1.940	.	S
Ti111	O119	1.871	.	S
Ti111	O405	1.893	1_665	S
Ti112	O116	2.040	.	S
Ti112	O117	2.004	.	S
Ti112	O114	1.926	.	S
Ti112	O330	2.037	.	S
Ti112	O120	1.973	.	S
O113	Ti327	2.082	.	S
O114	Ti136	1.882	.	S

O115	H426	1.140	.	S
O116	Ti145	1.871	.	S
O116	Ti157	1.944	.	S
O117	Ti326	1.883	.	S
O118	Ti133	2.005	.	S
O120	Ti157	2.025	.	S
Ti121	O125	2.116	.	S
Ti121	O130	1.955	.	S
Ti122	O126	1.927	.	S
Ti122	O131	1.989	.	S
Ti122	O129	2.030	.	S
Ti122	O127	1.800	.	S
Ti122	O297	2.091	1_565	S
Ti123	O127	1.986	.	S
Ti123	O130	2.092	.	S
Ti123	O143	2.002	.	S
Ti123	O125	1.983	.	S
Ti123	O293	1.890	1_565	S
Ti123	O131	1.961	.	S
Ti124	O128	2.023	.	S
Ti124	O129	1.927	.	S
Ti124	O126	2.099	.	S
Ti124	O132	1.890	.	S
O126	Ti292	2.111	1_565	S
O127	Ti134	1.854	.	S
O128	Ti169	1.912	.	S
O130	Ti289	1.990	1_565	S
O132	Ti169	1.944	.	S
O132	Ti136	1.880	.	S
Ti133	O137	1.926	.	S
Ti133	O142	2.006	.	S
Ti134	O138	2.108	.	S
Ti134	O143	2.075	.	S
Ti134	O141	1.996	.	S
Ti134	O139	1.864	.	S
Ti134	O309	1.905	1_565	S
Ti135	O139	2.012	.	S
Ti135	O142	1.942	.	S
Ti135	O137	1.942	.	S
Ti135	O305	2.061	1_565	S
Ti135	O143	1.906	.	S
Ti135	O406	1.892	1_665	S
Ti136	O140	2.023	.	S
Ti136	O141	2.119	.	S
Ti136	O138	1.988	.	S
Ti136	O144	1.958	.	S
O138	Ti304	2.040	1_565	S
O140	Ti169	1.849	.	S
O140	Ti181	1.878	.	S
O142	Ti301	2.050	1_565	S
O144	Ti181	2.068	.	S

Ti145	O149	1.913	.	S
Ti145	O154	1.955	.	S
Ti145	O370	2.034	.	S
Ti146	O150	1.947	.	S
Ti146	O155	1.998	.	S
Ti146	O153	2.072	.	S
Ti146	O163	1.808	.	S
Ti146	O177	2.067	.	S
Ti147	O151	2.044	.	S
Ti147	O154	2.074	.	S
Ti147	O167	1.915	.	S
Ti147	O149	2.083	.	S
Ti147	O173	2.084	.	S
Ti148	O152	1.984	.	S
Ti148	O153	1.936	.	S
Ti148	O168	1.910	.	S
Ti148	O150	2.111	.	S
Ti148	O366	2.121	.	S
O149	Ti363	1.999	.	S
O150	Ti172	2.102	.	S
O151	Ti158	1.998	.	S
O153	Ti362	2.089	.	S
O154	Ti169	1.964	.	S
O155	Ti159	1.962	.	S
O156	Ti160	1.904	.	S
Ti157	O161	2.119	.	S
Ti157	O166	2.058	.	S
Ti157	O382	2.031	.	S
Ti158	O162	2.089	.	S
Ti158	O167	2.056	.	S
Ti158	O165	1.890	.	S
Ti158	O163	1.801	.	S
Ti158	O189	1.978	.	S
Ti159	O163	1.911	.	S
Ti159	O166	1.954	.	S
Ti159	O161	2.012	.	S
Ti159	O185	1.952	.	S
Ti159	O167	1.901	.	S
Ti160	O164	2.090	.	S
Ti160	O165	2.006	.	S
Ti160	O162	1.973	.	S
Ti160	O378	1.968	.	S
Ti160	O168	1.933	.	S
O161	Ti375	2.024	.	S
O162	Ti184	1.951	.	S
O165	Ti374	1.895	.	S
O166	Ti181	2.071	.	S
Ti169	O173	1.946	.	S
Ti169	O178	2.047	.	S
Ti170	O174	2.001	.	S
Ti170	O179	1.997	.	S

Ti170	O177	2.083	.	S
Ti170	O187	1.836	.	S
Ti170	O345	2.090	1_565	S
Ti171	O175	2.034	.	S
Ti171	O178	2.082	.	S
Ti171	O191	1.855	.	S
Ti171	O173	2.009	.	S
Ti171	O341	1.996	1_565	S
Ti172	O176	1.998	.	S
Ti172	O177	1.886	.	S
Ti172	O192	1.921	.	S
Ti172	O174	2.110	.	S
O174	Ti340	2.121	1_565	S
O175	Ti182	1.952	.	S
O178	Ti337	2.033	1_565	S
O179	Ti183	1.956	.	S
O180	Ti184	1.913	.	S
Ti181	O185	2.029	.	S
Ti181	O190	2.047	.	S
Ti182	O186	2.032	.	S
Ti182	O191	1.996	.	S
Ti182	O189	1.988	.	S
Ti182	O187	1.850	.	S
Ti182	O357	1.895	1_565	S
Ti183	O187	1.982	.	S
Ti183	O190	1.929	.	S
Ti183	O185	1.952	.	S
Ti183	O353	2.024	1_565	S
Ti183	O191	1.816	.	S
Ti184	O188	2.082	.	S
Ti184	O189	2.099	.	S
Ti184	O186	1.930	.	S
Ti184	O192	1.998	.	S
O186	Ti352	1.968	1_565	S
O190	Ti349	2.030	1_565	S
Ti193	O197	1.900	1_455	S
Ti193	O202	2.103	1_455	S
Ti193	O344	1.919	.	S
Ti193	O34	2.093	1_445	S
Ti194	O198	2.007	.	S
Ti194	O203	2.019	.	S
Ti194	O201	2.010	.	S
Ti194	O211	1.924	.	S
Ti194	O199	1.941	.	S
Ti194	O225	1.926	.	S
Ti195	O199	1.946	.	S
Ti195	O202	1.938	.	S
Ti195	O197	2.030	.	S
Ti195	O221	2.085	.	S
Ti195	O203	1.828	.	S
Ti196	O200	2.028	.	S

Ti196	O201	2.109	.	S
Ti196	O216	1.874	.	S
Ti196	O198	1.877	.	S
Ti196	O30	1.987	1_545	S
Ti196	O204	1.973	.	S
O197	Ti193	1.900	1_655	S
O197	Ti27	2.046	1_545	S
O198	Ti220	1.918	.	S
O200	Ti253	1.826	.	S
O200	Ti241	1.872	.	S
O201	Ti26	1.966	1_545	S
O202	Ti193	2.103	1_655	S
O202	Ti217	2.117	1_655	S
O203	Ti207	1.942	.	S
O204	Ti241	2.076	.	S
Ti205	O209	2.121	1_455	S
Ti205	O360	2.007	.	S
Ti205	O214	1.958	.	S
Ti205	O344	1.946	.	S
Ti205	O356	2.028	.	S
Ti205	O46	1.903	1_545	S
Ti206	O210	1.988	.	S
Ti206	O215	1.998	.	S
Ti206	O213	2.057	.	S
Ti206	O211	1.834	.	S
Ti206	O237	2.107	.	S
Ti207	O211	2.035	.	S
Ti207	O214	2.108	1_655	S
Ti207	O209	1.971	.	S
Ti207	O233	1.895	.	S
Ti207	O215	1.970	.	S
Ti208	O212	2.021	.	S
Ti208	O213	1.928	.	S
Ti208	O210	2.123	.	S
Ti208	O42	2.097	1_545	S
Ti208	O216	1.893	.	S
O209	Ti205	2.121	1_655	S
O209	Ti39	2.008	1_545	S
O210	Ti232	2.138	.	S
O212	Ti253	1.909	.	S
O213	Ti38	2.037	1_545	S
O214	Ti207	2.108	1_455	S
O214	Ti229	1.996	.	S
O216	Ti253	1.934	.	S
Ti217	O221	1.895	1_455	S
Ti217	O226	2.111	1_455	S
Ti217	O368	1.950	.	S
Ti217	O202	2.117	1_455	S
Ti218	O222	2.097	.	S
Ti218	O227	1.994	.	S
Ti218	O225	1.884	.	S

Ti218	O235	1.898	.	S
Ti218	O223	1.956	.	S
Ti219	O223	2.020	.	S
Ti219	O226	1.978	.	S
Ti219	O221	2.103	.	S
Ti219	O227	1.804	.	S
Ti220	O224	2.046	.	S
Ti220	O225	2.002	.	S
Ti220	O240	1.905	.	S
Ti220	O222	2.033	.	S
Ti220	O228	1.973	.	S
O221	Ti217	1.895	1_655	S
O224	Ti277	1.883	.	S
O224	Ti265	1.935	.	S
O226	Ti217	2.111	1_655	S
O226	Ti1	2.093	1_655	S
O227	Ti231	1.901	.	S
O228	Ti265	2.012	.	S
Ti229	O233	2.033	1_455	S
Ti229	O384	2.003	.	S
Ti229	O238	1.950	.	S
Ti229	O368	1.952	.	S
Ti229	O380	1.967	.	S
Ti230	O234	1.939	.	S
Ti230	O239	2.026	.	S
Ti230	O237	2.097	.	S
Ti230	O235	1.795	.	S
Ti231	O235	1.996	.	S
Ti231	O238	2.041	1_655	S
Ti231	O233	1.930	.	S
Ti231	O239	1.957	.	S
Ti232	O236	2.004	.	S
Ti232	O237	1.908	.	S
Ti232	O234	2.114	.	S
Ti232	O240	1.941	.	S
O233	Ti229	2.033	1_655	S
O236	Ti277	1.918	.	S
O238	Ti231	2.041	1_455	S
O240	Ti277	1.972	.	S
Ti241	O245	2.097	.	S
Ti241	O250	2.034	.	S
Ti241	O82	2.012	1_545	S
Ti242	O246	2.037	.	S
Ti242	O251	2.062	.	S
Ti242	O249	2.036	.	S
Ti242	O259	1.978	.	S
Ti242	O247	1.856	.	S
Ti242	O273	1.913	.	S
Ti243	O247	1.997	.	S
Ti243	O250	1.964	.	S
Ti243	O263	1.960	.	S

Ti243	O245	2.064	.	S
Ti243	O269	1.970	.	S
Ti243	O251	1.885	.	S
Ti244	O248	2.078	.	S
Ti244	O249	2.099	.	S
Ti244	O264	1.904	.	S
Ti244	O246	1.930	.	S
Ti244	O78	1.940	1_545	S
Ti244	O252	1.963	.	S
O245	Ti75	2.060	1_545	S
O246	Ti268	1.984	.	S
O247	Ti254	1.855	.	S
O248	Ti289	1.991	.	S
O249	Ti74	2.015	1_545	S
O250	Ti265	2.103	.	S
O251	Ti255	1.927	.	S
O252	Ti289	1.965	.	S
O252	Ti256	1.890	.	S
Ti253	O257	1.903	.	S
Ti253	O262	1.966	.	S
Ti253	O94	2.048	1_545	S
Ti254	O258	2.001	.	S
Ti254	O263	1.985	.	S
Ti254	O261	2.056	.	S
Ti254	O285	2.125	.	S
Ti255	O259	2.011	.	S
Ti255	O262	2.065	.	S
Ti255	O257	2.054	.	S
Ti255	O281	2.099	.	S
Ti256	O260	2.028	.	S
Ti256	O261	1.920	.	S
Ti256	O258	2.112	.	S
Ti256	O90	2.104	1_545	S
O257	Ti87	2.003	1_545	S
O258	Ti280	2.118	.	S
O260	Ti289	1.933	.	S
O260	Ti301	1.971	.	S
O261	Ti86	2.034	1_545	S
O262	Ti277	1.971	.	S
Ti265	O269	2.058	.	S
Ti265	O274	2.063	.	S
Ti266	O270	2.087	.	S
Ti266	O275	2.040	.	S
Ti266	O273	1.890	.	S
Ti266	O283	1.979	.	S
Ti266	O271	1.818	.	S
Ti267	O271	1.940	.	S
Ti267	O274	1.914	.	S
Ti267	O287	1.953	.	S
Ti267	O269	1.958	.	S
Ti267	O275	1.828	.	S

Ti268	O272	2.106	.	S
Ti268	O273	2.028	.	S
Ti268	O288	1.917	.	S
Ti268	O270	2.002	.	S
Ti268	O276	1.980	.	S
O271	Ti278	1.808	.	S
O272	Ti313	1.977	.	S
O275	Ti279	1.858	.	S
O276	Ti313	2.019	.	S
O276	Ti280	1.933	.	S
Ti277	O281	1.951	.	S
Ti277	O286	2.049	.	S
Ti278	O282	1.941	.	S
Ti278	O287	1.997	.	S
Ti278	O285	2.111	.	S
Ti279	O283	2.047	.	S
Ti279	O286	2.088	.	S
Ti279	O281	2.028	.	S
Ti280	O284	1.966	.	S
Ti280	O285	1.890	.	S
Ti280	O282	2.107	.	S
O284	Ti313	1.911	.	S
O284	Ti325	1.890	.	S
Ti289	O293	2.012	.	S
Ti289	O298	1.936	.	S
Ti289	O130	1.990	1_545	S
Ti290	O294	1.992	.	S
Ti290	O299	2.017	.	S
Ti290	O297	2.114	.	S
Ti290	O295	1.836	.	S
Ti290	O321	2.058	.	S
Ti291	O295	2.022	.	S
Ti291	O298	2.033	.	S
Ti291	O311	1.908	.	S
Ti291	O293	1.947	.	S
Ti291	O317	2.023	.	S
Ti291	O299	1.956	.	S
Ti292	O296	1.997	.	S
Ti292	O297	1.905	.	S
Ti292	O294	2.137	.	S
Ti292	O126	2.111	1_545	S
Ti292	O300	1.939	.	S
O293	Ti123	1.890	1_545	S
O294	Ti316	2.120	.	S
O295	Ti302	1.918	.	S
O296	Ti337	1.913	.	S
O297	Ti122	2.091	1_545	S
O298	Ti313	1.901	.	S
O300	Ti337	1.970	.	S
O300	Ti304	1.907	.	S
Ti301	O305	1.993	.	S

Ti301	O310	2.077	.	S
Ti301	O142	2.050	1_545	S
Ti302	O306	1.996	.	S
Ti302	O311	2.008	.	S
Ti302	O309	1.908	.	S
Ti302	O307	1.929	.	S
Ti302	O333	2.011	.	S
Ti303	O307	1.940	.	S
Ti303	O310	1.964	.	S
Ti303	O305	2.066	.	S
Ti303	O329	2.014	.	S
Ti303	O311	1.837	.	S
Ti304	O308	2.042	.	S
Ti304	O309	2.011	.	S
Ti304	O306	1.925	.	S
Ti304	O138	2.040	1_545	S
Ti304	O312	1.973	.	S
O305	Ti135	2.061	1_545	S
O306	Ti328	1.880	.	S
O308	Ti337	1.869	.	S
O308	Ti349	1.943	.	S
O309	Ti134	1.905	1_545	S
O310	Ti325	2.043	.	S
O312	Ti349	2.026	.	S
Ti313	O317	2.120	.	S
Ti313	O322	1.956	.	S
Ti314	O318	1.926	.	S
Ti314	O323	1.988	.	S
Ti314	O321	2.029	.	S
Ti314	O319	1.799	.	S
Ti315	O319	1.997	.	S
Ti315	O322	2.095	.	S
Ti315	O335	1.992	.	S
Ti315	O317	1.977	.	S
Ti315	O323	1.961	.	S
Ti316	O320	2.023	.	S
Ti316	O321	1.925	.	S
Ti316	O318	2.102	.	S
Ti316	O324	1.893	.	S
O319	Ti326	1.872	.	S
O320	Ti361	1.912	.	S
O324	Ti361	1.941	.	S
O324	Ti328	1.878	.	S
Ti325	O329	1.886	.	S
Ti325	O334	2.037	.	S
Ti326	O330	2.096	.	S
Ti326	O335	2.046	.	S
Ti326	O333	1.977	.	S
Ti326	O331	1.929	.	S
Ti327	O331	1.991	.	S
Ti327	O334	1.969	.	S

Ti327	O329	2.030	.	S
Ti327	O335	1.852	.	S
Ti328	O332	2.018	.	S
Ti328	O333	2.111	.	S
Ti328	O330	1.983	.	S
Ti328	O336	1.955	.	S
O332	Ti361	1.849	.	S
O332	Ti373	1.876	.	S
O336	Ti373	2.062	.	S
Ti337	O341	1.914	.	S
Ti337	O346	1.957	.	S
Ti337	O178	2.033	1_545	S
Ti338	O342	1.946	.	S
Ti338	O347	1.997	.	S
Ti338	O345	2.072	.	S
Ti338	O355	1.808	.	S
Ti338	O369	2.067	.	S
Ti339	O343	2.044	.	S
Ti339	O346	2.072	.	S
Ti339	O359	1.916	.	S
Ti339	O341	2.085	.	S
Ti339	O365	2.085	.	S
Ti340	O344	1.984	.	S
Ti340	O345	1.936	.	S
Ti340	O360	1.910	.	S
Ti340	O342	2.111	.	S
Ti340	O174	2.121	1_545	S
O341	Ti171	1.996	1_545	S
O342	Ti364	2.102	.	S
O343	Ti350	1.998	.	S
O345	Ti170	2.090	1_545	S
O346	Ti361	1.962	.	S
O347	Ti351	1.962	.	S
O348	Ti352	1.904	.	S
Ti349	O353	2.119	.	S
Ti349	O358	2.060	.	S
Ti349	O190	2.030	1_545	S
Ti350	O354	2.088	.	S
Ti350	O359	2.056	.	S
Ti350	O357	1.889	.	S
Ti350	O355	1.801	.	S
Ti350	O381	1.979	.	S
Ti351	O355	1.911	.	S
Ti351	O358	1.954	.	S
Ti351	O353	2.013	.	S
Ti351	O377	1.952	.	S
Ti351	O359	1.901	.	S
Ti352	O356	2.090	.	S
Ti352	O357	2.007	.	S
Ti352	O354	1.972	.	S
Ti352	O186	1.968	1_545	S

Ti352	O360	1.933	.	S
O353	Ti183	2.024	1_545	S
O354	Ti376	1.951	.	S
O357	Ti182	1.895	1_545	S
O358	Ti373	2.070	.	S
Ti361	O365	1.944	.	S
Ti361	O370	2.047	.	S
Ti362	O366	2.000	.	S
Ti362	O371	1.996	.	S
Ti362	O369	2.083	.	S
Ti362	O379	1.835	.	S
Ti363	O367	2.033	.	S
Ti363	O370	2.079	.	S
Ti363	O383	1.855	.	S
Ti363	O365	2.012	.	S
Ti364	O368	1.998	.	S
Ti364	O369	1.886	.	S
Ti364	O384	1.921	.	S
Ti364	O366	2.111	.	S
O367	Ti374	1.951	.	S
O371	Ti375	1.956	.	S
O372	Ti376	1.913	.	S
Ti373	O377	2.025	.	S
Ti373	O382	2.045	.	S
Ti374	O378	2.031	.	S
Ti374	O383	1.995	.	S
Ti374	O381	1.988	.	S
Ti374	O379	1.850	.	S
Ti375	O379	1.982	.	S
Ti375	O382	1.929	.	S
Ti375	O377	1.952	.	S
Ti375	O383	1.817	.	S
Ti376	O380	2.082	.	S
Ti376	O381	2.098	.	S
Ti376	O378	1.931	.	S
Ti376	O384	1.998	.	S
C385	C386	1.210	.	T
C385	C408	1.353	.	A
C386	C387	1.333	.	D
C387	C388	1.216	.	T
C388	C389	1.324	.	D
C389	C390	1.215	.	T
C390	C391	1.326	.	D
C391	C392	1.214	.	T
C392	C393	1.357	.	A
C393	C394	1.322	.	D
C393	S395	1.794	.	S
C394	C396	1.379	.	A
C394	H397	1.083	.	S
S395	C398	1.812	.	S
C396	C398	1.333	.	D

C396	H399	1.083	.	S
C398	C400	1.410	.	A
C400	H401	1.084	.	S
C400	C402	1.361	.	D
C402	C403	1.370	.	A
C402	C404	1.489	.	S
C403	N407	1.163	.	T
C404	O405	1.285	.	A
C404	O406	1.230	.	D
O405	Ti111	1.893	1_445	S
O406	Ti135	1.892	1_445	S
C408	C409	1.324	.	D
C408	S410	1.799	.	S
C409	C411	1.379	.	A
C409	H412	1.083	.	S
S410	C413	1.806	.	S
C411	C413	1.328	.	D
C411	H414	1.082	.	S
C413	N423	1.356	.	A
H415	N423	1.043	.	S
C416	C417	1.321	.	D
C416	N423	1.428	.	S
C416	N424	1.413	.	S
C417	C418	1.385	.	A
C417	H419	1.080	.	S
C418	C420	1.329	.	D
C418	H421	1.081	.	S
C420	H422	1.084	.	S
C420	N424	1.345	.	A
N424	H425	1.042	.	S

data_TiO2@PY3COO

_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 38.6882

_cell_length_b 15.1040

_cell_length_c 47.5200

_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

<u>_atom_site_fract_z</u>							
<u>_atom_site_U_iso_or_equiv</u>							
<u>_atom_site_adp_type</u>							
<u>_atom_site_occupancy</u>							
Ti1	Ti	-0.00744	0.50326	0.83905	0.00000	Uiso	1.00
Ti2	Ti	0.89033	0.62884	0.88949	0.00000	Uiso	1.00
Ti3	Ti	0.93610	0.62235	0.84667	0.00000	Uiso	1.00
Ti4	Ti	0.83305	0.50423	0.90251	0.00000	Uiso	1.00
O5	O	0.95145	0.50189	0.86092	0.00000	Uiso	1.00
O6	O	0.83860	0.62294	0.89178	0.00000	Uiso	1.00
O7	O	0.88617	0.60908	0.84927	0.00000	Uiso	1.00
O8	O	0.78356	0.53601	0.91224	0.00000	Uiso	1.00
O9	O	0.88729	0.49898	0.89842	0.00000	Uiso	1.00
O10	O	0.97670	0.62623	0.82283	0.00000	Uiso	1.00
O11	O	0.94111	0.65360	0.88361	0.00000	Uiso	1.00
O12	O	0.80823	0.47958	0.86710	0.00000	Uiso	1.00
Ti13	Ti	0.02034	0.49672	0.90717	0.00000	Uiso	1.00
Ti14	Ti	0.91246	0.62069	0.96215	0.00000	Uiso	1.00
Ti15	Ti	0.96388	0.62871	0.91917	0.00000	Uiso	1.00
Ti16	Ti	0.85550	0.49898	0.97590	0.00000	Uiso	1.00
O17	O	0.96571	0.50118	0.91056	0.00000	Uiso	1.00
O18	O	0.87353	0.62474	0.98943	0.00000	Uiso	1.00
O19	O	0.91259	0.65252	0.92491	0.00000	Uiso	1.00
O20	O	0.80559	0.47309	0.98533	0.00000	Uiso	1.00
O21	O	0.89392	0.49881	0.95007	0.00000	Uiso	1.00
O22	O	0.01816	0.62334	0.91575	0.00000	Uiso	1.00
O23	O	0.96378	0.60783	0.96008	0.00000	Uiso	1.00
O24	O	0.83565	0.53112	0.94095	0.00000	Uiso	1.00
Ti25	Ti	-0.00902	0.75062	0.83973	0.00000	Uiso	1.00
Ti26	Ti	0.88826	0.86999	0.89295	0.00000	Uiso	1.00
Ti27	Ti	0.93399	0.88216	0.84666	0.00000	Uiso	1.00
Ti28	Ti	0.82885	0.74509	0.89939	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.94755	0.75229	0.85816	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.83761	0.87460	0.90862	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.88253	0.89387	0.85277	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.77911	0.71883	0.91135	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.87738	0.75108	0.88489	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.97754	0.87776	0.82489	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.93725	0.84486	0.88263	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.80776	0.76244	0.86197	0.00000	Uiso	1.00
Ti37	Ti	0.02465	0.75301	0.90960	0.00000	Uiso	1.00
Ti38	Ti	0.91501	0.88131	0.96223	0.00000	Uiso	1.00
Ti39	Ti	0.96172	0.86988	0.91638	0.00000	Uiso	1.00
Ti40	Ti	0.85658	0.75123	0.97471	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.97534	0.74958	0.92435	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.87586	0.87575	0.98764	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.91273	0.84326	0.92650	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.80748	0.77843	0.98500	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.89825	0.75237	0.95324	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.01102	0.87443	0.90119	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.96671	0.89331	0.95668	0.00000	Uiso	1.00

O48	O	0.83603	0.72396	0.93847	0.00000	Uiso	1.00
Ti49	Ti	0.75789	0.49767	0.88113	0.00000	Uiso	1.00
Ti50	Ti	0.65669	0.62775	0.92728	0.00000	Uiso	1.00
Ti51	Ti	0.69754	0.62387	0.87701	0.00000	Uiso	1.00
Ti52	Ti	0.59852	0.49924	0.93187	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.70500	0.49557	0.89074	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.60724	0.62128	0.94176	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.64971	0.65404	0.88957	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.54829	0.50812	0.94689	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.64905	0.49933	0.91584	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74537	0.61588	0.86329	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.70664	0.65432	0.91476	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57021	0.52665	0.89867	0.00000	Uiso	1.00
Ti61	Ti	0.78785	0.50392	0.94914	0.00000	Uiso	1.00
Ti62	Ti	0.62877	0.61488	0.85669	0.00000	Uiso	1.00
Ti63	Ti	0.72720	0.62684	0.95065	0.00000	Uiso	1.00
Ti64	Ti	0.56881	0.49415	0.86039	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.73995	0.49686	0.95795	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.57974	0.62007	0.84299	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.67858	0.60840	0.96437	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.51908	0.46727	0.87118	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.61565	0.49407	0.87371	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.77901	0.62650	0.96105	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.67569	0.59471	0.84092	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61902	0.47073	0.96713	0.00000	Uiso	1.00
Ti73	Ti	0.75874	0.74565	0.87511	0.00000	Uiso	1.00
Ti74	Ti	0.65365	0.86865	0.92345	0.00000	Uiso	1.00
Ti75	Ti	0.69812	0.86794	0.87663	0.00000	Uiso	1.00
Ti76	Ti	0.59468	0.74760	0.93685	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.70708	0.74601	0.86471	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.59975	0.87340	0.92421	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.65120	0.83547	0.88673	0.00000	Uiso	1.00
O80	O	0.54177	0.73565	0.94598	0.00000	Uiso	1.00
O81	O	0.64696	0.74973	0.93466	0.00000	Uiso	1.00
O82	O	0.74608	0.87583	0.86690	0.00000	Uiso	1.00
O83	O	0.70325	0.83559	0.91347	0.00000	Uiso	1.00
O84	O	0.57035	0.72015	0.90137	0.00000	Uiso	1.00
Ti85	Ti	0.78778	0.74943	0.94913	0.00000	Uiso	1.00
Ti86	Ti	0.63050	0.87901	0.85551	0.00000	Uiso	1.00
Ti87	Ti	0.72863	0.87498	0.94422	0.00000	Uiso	1.00
Ti88	Ti	0.57209	0.74633	0.86165	0.00000	Uiso	1.00
O89	O	0.74009	0.75679	0.96224	0.00000	Uiso	1.00
O90	O	0.58247	0.87132	0.84372	0.00000	Uiso	1.00
O91	O	0.67930	0.89495	0.95847	0.00000	Uiso	1.00
O92	O	0.52481	0.78308	0.87155	0.00000	Uiso	1.00
O93	O	0.62011	0.74847	0.86902	0.00000	Uiso	1.00
O94	O	0.78143	0.87676	0.93521	0.00000	Uiso	1.00
O95	O	0.67800	0.89934	0.84027	0.00000	Uiso	1.00
O96	O	0.60770	0.77589	0.97472	0.00000	Uiso	1.00
Ti97	Ti	0.52257	0.50186	0.91062	0.00000	Uiso	1.00
Ti98	Ti	0.41295	0.63215	0.96154	0.00000	Uiso	1.00

Ti99	Ti	0.46034	0.61893	0.91591	0.00000	Uiso	1.00
Ti100	Ti	0.35659	0.50118	0.97467	0.00000	Uiso	1.00
O101	O	0.47400	0.49891	0.92566	0.00000	Uiso	1.00
O102	O	0.37427	0.62718	0.98927	0.00000	Uiso	1.00
O103	O	0.41036	0.59436	0.92495	0.00000	Uiso	1.00
O104	O	0.30762	0.47473	0.98502	0.00000	Uiso	1.00
O105	O	0.39805	0.50015	0.95298	0.00000	Uiso	1.00
O106	O	0.50994	0.62347	0.90201	0.00000	Uiso	1.00
O107	O	0.46450	0.64570	0.95607	0.00000	Uiso	1.00
O108	O	0.33643	0.52705	0.93825	0.00000	Uiso	1.00
Ti109	Ti	0.48804	0.49063	0.83909	0.00000	Uiso	1.00
Ti110	Ti	0.39075	0.61722	0.88897	0.00000	Uiso	1.00
Ti111	Ti	0.43584	0.62941	0.84353	0.00000	Uiso	1.00
Ti112	Ti	0.32904	0.50252	0.89943	0.00000	Uiso	1.00
O113	O	0.43722	0.49617	0.83399	0.00000	Uiso	1.00
O114	O	0.33916	0.62516	0.89193	0.00000	Uiso	1.00
O115	O	0.38582	0.63655	0.85040	0.00000	Uiso	1.00
O116	O	0.27936	0.52871	0.91120	0.00000	Uiso	1.00
O117	O	0.37744	0.49607	0.88455	0.00000	Uiso	1.00
O118	O	0.48472	0.62446	0.83354	0.00000	Uiso	1.00
O119	O	0.44068	0.58792	0.88041	0.00000	Uiso	1.00
O120	O	0.30708	0.48227	0.86252	0.00000	Uiso	1.00
Ti121	Ti	0.51997	0.74558	0.90858	0.00000	Uiso	1.00
Ti122	Ti	0.41366	0.87041	0.96165	0.00000	Uiso	1.00
Ti123	Ti	0.46396	0.87860	0.91844	0.00000	Uiso	1.00
Ti124	Ti	0.35517	0.75168	0.97587	0.00000	Uiso	1.00
O125	O	0.46531	0.75074	0.90901	0.00000	Uiso	1.00
O126	O	0.37516	0.87575	0.98735	0.00000	Uiso	1.00
O127	O	0.41458	0.90683	0.92558	0.00000	Uiso	1.00
O128	O	0.30492	0.77437	0.98525	0.00000	Uiso	1.00
O129	O	0.39304	0.75285	0.94952	0.00000	Uiso	1.00
O130	O	0.51791	0.87275	0.91609	0.00000	Uiso	1.00
O131	O	0.46461	0.85460	0.95898	0.00000	Uiso	1.00
O132	O	0.33559	0.71747	0.94109	0.00000	Uiso	1.00
Ti133	Ti	0.49004	0.74930	0.84723	0.00000	Uiso	1.00
Ti134	Ti	0.39092	0.87914	0.89282	0.00000	Uiso	1.00
Ti135	Ti	0.43271	0.86197	0.84407	0.00000	Uiso	1.00
Ti136	Ti	0.33478	0.74473	0.90250	0.00000	Uiso	1.00
O137	O	0.44270	0.74598	0.85973	0.00000	Uiso	1.00
O138	O	0.34024	0.87400	0.90905	0.00000	Uiso	1.00
O139	O	0.38251	0.85558	0.85492	0.00000	Uiso	1.00
O140	O	0.28473	0.71674	0.91099	0.00000	Uiso	1.00
O141	O	0.38930	0.74817	0.89821	0.00000	Uiso	1.00
O142	O	0.47949	0.86645	0.82931	0.00000	Uiso	1.00
O143	O	0.44175	0.90354	0.88121	0.00000	Uiso	1.00
O144	O	0.31353	0.76948	0.86594	0.00000	Uiso	1.00
Ti145	Ti	0.28832	0.50097	0.94888	0.00000	Uiso	1.00
Ti146	Ti	0.13403	0.62434	0.85216	0.00000	Uiso	1.00
Ti147	Ti	0.22582	0.62004	0.95021	0.00000	Uiso	1.00
Ti148	Ti	0.07484	0.49807	0.85956	0.00000	Uiso	1.00
O149	O	0.24147	0.49294	0.96151	0.00000	Uiso	1.00

O150	O	0.08523	0.62385	0.84215	0.00000	Uiso	1.00
O151	O	0.17502	0.60830	0.96145	0.00000	Uiso	1.00
O152	O	0.02600	0.52859	0.86776	0.00000	Uiso	1.00
O153	O	0.12389	0.49870	0.86763	0.00000	Uiso	1.00
O154	O	0.27802	0.62268	0.96007	0.00000	Uiso	1.00
O155	O	0.18147	0.64857	0.83749	0.00000	Uiso	1.00
O156	O	0.11569	0.52577	0.96813	0.00000	Uiso	1.00
Ti157	Ti	0.25768	0.49995	0.87545	0.00000	Uiso	1.00
Ti158	Ti	0.15538	0.62032	0.92275	0.00000	Uiso	1.00
Ti159	Ti	0.20109	0.63091	0.87515	0.00000	Uiso	1.00
Ti160	Ti	0.09661	0.49914	0.93219	0.00000	Uiso	1.00
O161	O	0.20384	0.50022	0.86731	0.00000	Uiso	1.00
O162	O	0.10146	0.62644	0.92379	0.00000	Uiso	1.00
O163	O	0.15389	0.64721	0.88583	0.00000	Uiso	1.00
O164	O	0.04497	0.49052	0.94478	0.00000	Uiso	1.00
O165	O	0.14491	0.49953	0.91681	0.00000	Uiso	1.00
O166	O	0.24880	0.62713	0.86167	0.00000	Uiso	1.00
O167	O	0.20668	0.59941	0.91361	0.00000	Uiso	1.00
O168	O	0.07023	0.47211	0.89872	0.00000	Uiso	1.00
Ti169	Ti	0.28745	0.74540	0.94875	0.00000	Uiso	1.00
Ti170	Ti	0.13237	0.87076	0.85236	0.00000	Uiso	1.00
Ti171	Ti	0.22991	0.87622	0.94394	0.00000	Uiso	1.00
Ti172	Ti	0.07300	0.74780	0.85960	0.00000	Uiso	1.00
O173	O	0.23840	0.75217	0.95756	0.00000	Uiso	1.00
O174	O	0.08262	0.87204	0.84085	0.00000	Uiso	1.00
O175	O	0.18202	0.89154	0.96094	0.00000	Uiso	1.00
O176	O	0.02378	0.72300	0.86964	0.00000	Uiso	1.00
O177	O	0.12049	0.74627	0.86852	0.00000	Uiso	1.00
O178	O	0.28272	0.87379	0.93550	0.00000	Uiso	1.00
O179	O	0.18008	0.84814	0.83802	0.00000	Uiso	1.00
O180	O	0.11560	0.72431	0.97159	0.00000	Uiso	1.00
Ti181	Ti	0.26255	0.74998	0.87747	0.00000	Uiso	1.00
Ti182	Ti	0.15712	0.88103	0.92537	0.00000	Uiso	1.00
Ti183	Ti	0.19905	0.86917	0.87559	0.00000	Uiso	1.00
Ti184	Ti	0.10000	0.75118	0.93434	0.00000	Uiso	1.00
O185	O	0.21177	0.75045	0.88811	0.00000	Uiso	1.00
O186	O	0.10832	0.87540	0.94108	0.00000	Uiso	1.00
O187	O	0.15037	0.85468	0.88774	0.00000	Uiso	1.00
O188	O	0.04833	0.76126	0.94614	0.00000	Uiso	1.00
O189	O	0.15374	0.75002	0.92832	0.00000	Uiso	1.00
O190	O	0.24699	0.87285	0.86446	0.00000	Uiso	1.00
O191	O	0.20508	0.90446	0.91178	0.00000	Uiso	1.00
O192	O	0.07391	0.77655	0.89896	0.00000	Uiso	1.00
Ti193	Ti	-0.00744	0.00325	0.83905	0.00000	Uiso	1.00
Ti194	Ti	0.89034	0.12880	0.88949	0.00000	Uiso	1.00
Ti195	Ti	0.93610	0.12234	0.84667	0.00000	Uiso	1.00
Ti196	Ti	0.83305	0.00420	0.90253	0.00000	Uiso	1.00
O197	O	0.95145	0.00188	0.86092	0.00000	Uiso	1.00
O198	O	0.83861	0.12291	0.89179	0.00000	Uiso	1.00
O199	O	0.88617	0.10904	0.84928	0.00000	Uiso	1.00
O200	O	0.78356	0.03595	0.91226	0.00000	Uiso	1.00

O201	O	0.88730	-0.00105	0.89844	0.00000	Uiso	1.00
O202	O	0.97669	0.12622	0.82282	0.00000	Uiso	1.00
O203	O	0.94112	0.15355	0.88361	0.00000	Uiso	1.00
O204	O	0.80822	-0.02056	0.86713	0.00000	Uiso	1.00
Ti205	Ti	0.02034	-0.00332	0.90717	0.00000	Uiso	1.00
Ti206	Ti	0.91246	0.12069	0.96216	0.00000	Uiso	1.00
Ti207	Ti	0.96388	0.12868	0.91917	0.00000	Uiso	1.00
Ti208	Ti	0.85550	-0.00101	0.97592	0.00000	Uiso	1.00
O209	O	0.96571	0.00115	0.91056	0.00000	Uiso	1.00
O210	O	0.87353	0.12475	0.98944	0.00000	Uiso	1.00
O211	O	0.91259	0.15249	0.92491	0.00000	Uiso	1.00
O212	O	0.80558	-0.02681	0.98536	0.00000	Uiso	1.00
O213	O	0.89392	-0.00118	0.95008	0.00000	Uiso	1.00
O214	O	0.01816	0.12331	0.91575	0.00000	Uiso	1.00
O215	O	0.96378	0.10782	0.96008	0.00000	Uiso	1.00
O216	O	0.83563	0.03115	0.94097	0.00000	Uiso	1.00
Ti217	Ti	-0.00903	0.25062	0.83973	0.00000	Uiso	1.00
Ti218	Ti	0.88826	0.37000	0.89294	0.00000	Uiso	1.00
Ti219	Ti	0.93399	0.38216	0.84665	0.00000	Uiso	1.00
Ti220	Ti	0.82889	0.24506	0.89939	0.00000	Uiso	1.00
O221	O	0.94754	0.25228	0.85815	0.00000	Uiso	1.00
O222	O	0.83761	0.37461	0.90859	0.00000	Uiso	1.00
O223	O	0.88253	0.39385	0.85276	0.00000	Uiso	1.00
O224	O	0.77915	0.21877	0.91136	0.00000	Uiso	1.00
O225	O	0.87741	0.25105	0.88490	0.00000	Uiso	1.00
O226	O	0.97755	0.37777	0.82489	0.00000	Uiso	1.00
O227	O	0.93726	0.34489	0.88262	0.00000	Uiso	1.00
O228	O	0.80784	0.26239	0.86197	0.00000	Uiso	1.00
Ti229	Ti	0.02464	0.25299	0.90959	0.00000	Uiso	1.00
Ti230	Ti	0.91501	0.38131	0.96223	0.00000	Uiso	1.00
Ti231	Ti	0.96172	0.36990	0.91638	0.00000	Uiso	1.00
Ti232	Ti	0.85659	0.25125	0.97471	0.00000	Uiso	1.00
O233	O	0.97533	0.24957	0.92435	0.00000	Uiso	1.00
O234	O	0.87587	0.37576	0.98764	0.00000	Uiso	1.00
O235	O	0.91274	0.34330	0.92649	0.00000	Uiso	1.00
O236	O	0.80748	0.27850	0.98499	0.00000	Uiso	1.00
O237	O	0.89826	0.25237	0.95324	0.00000	Uiso	1.00
O238	O	0.01102	0.37445	0.90119	0.00000	Uiso	1.00
O239	O	0.96672	0.39331	0.95668	0.00000	Uiso	1.00
O240	O	0.83604	0.22394	0.93848	0.00000	Uiso	1.00
Ti241	Ti	0.75789	-0.00246	0.88116	0.00000	Uiso	1.00
Ti242	Ti	0.65660	0.12796	0.92722	0.00000	Uiso	1.00
Ti243	Ti	0.69767	0.12390	0.87701	0.00000	Uiso	1.00
Ti244	Ti	0.59848	-0.00059	0.93203	0.00000	Uiso	1.00
O245	O	0.70500	-0.00436	0.89078	0.00000	Uiso	1.00
O246	O	0.60705	0.12165	0.94156	0.00000	Uiso	1.00
O247	O	0.64981	0.15412	0.88946	0.00000	Uiso	1.00
O248	O	0.54822	0.00812	0.94717	0.00000	Uiso	1.00
O249	O	0.64900	-0.00061	0.91593	0.00000	Uiso	1.00
O250	O	0.74549	0.11582	0.86335	0.00000	Uiso	1.00
O251	O	0.70660	0.15453	0.91478	0.00000	Uiso	1.00

O252	O	0.57031	0.02694	0.89880	0.00000	Uiso	1.00
Ti253	Ti	0.78783	0.00397	0.94916	0.00000	Uiso	1.00
Ti254	Ti	0.62916	0.11474	0.85653	0.00000	Uiso	1.00
Ti255	Ti	0.72714	0.12693	0.95066	0.00000	Uiso	1.00
Ti256	Ti	0.56883	-0.00437	0.86032	0.00000	Uiso	1.00
O257	O	0.73993	-0.00306	0.95797	0.00000	Uiso	1.00
O258	O	0.58047	0.12013	0.84243	0.00000	Uiso	1.00
O259	O	0.67846	0.10883	0.96435	0.00000	Uiso	1.00
O260	O	0.51869	-0.02385	0.87119	0.00000	Uiso	1.00
O261	O	0.61564	-0.00523	0.87376	0.00000	Uiso	1.00
O262	O	0.77898	0.12657	0.96106	0.00000	Uiso	1.00
O263	O	0.67607	0.09449	0.84089	0.00000	Uiso	1.00
O264	O	0.61905	-0.02848	0.96732	0.00000	Uiso	1.00
Ti265	Ti	0.75884	0.24562	0.87512	0.00000	Uiso	1.00
Ti266	Ti	0.65358	0.36865	0.92332	0.00000	Uiso	1.00
Ti267	Ti	0.69825	0.36787	0.87660	0.00000	Uiso	1.00
Ti268	Ti	0.59431	0.24789	0.93645	0.00000	Uiso	1.00
O269	O	0.70722	0.24597	0.86465	0.00000	Uiso	1.00
O270	O	0.59966	0.37356	0.92379	0.00000	Uiso	1.00
O271	O	0.65131	0.33538	0.88659	0.00000	Uiso	1.00
O272	O	0.54116	0.23619	0.94529	0.00000	Uiso	1.00
O273	O	0.64667	0.24989	0.93450	0.00000	Uiso	1.00
O274	O	0.74619	0.37582	0.86696	0.00000	Uiso	1.00
O275	O	0.70321	0.33541	0.91344	0.00000	Uiso	1.00
O276	O	0.57014	0.22093	0.90072	0.00000	Uiso	1.00
Ti277	Ti	0.78779	0.24945	0.94912	0.00000	Uiso	1.00
Ti278	Ti	0.63082	0.37894	0.85531	0.00000	Uiso	1.00
Ti279	Ti	0.72863	0.37495	0.94415	0.00000	Uiso	1.00
Ti280	Ti	0.57249	0.24610	0.86089	0.00000	Uiso	1.00
O281	O	0.74010	0.25686	0.96222	0.00000	Uiso	1.00
O282	O	0.58297	0.37128	0.84324	0.00000	Uiso	1.00
O283	O	0.67929	0.39486	0.95835	0.00000	Uiso	1.00
O284	O	0.52427	0.27825	0.86902	0.00000	Uiso	1.00
O285	O	0.62040	0.24829	0.86865	0.00000	Uiso	1.00
O286	O	0.78144	0.37674	0.93516	0.00000	Uiso	1.00
O287	O	0.67833	0.39941	0.84019	0.00000	Uiso	1.00
O288	O	0.60702	0.27622	0.97438	0.00000	Uiso	1.00
Ti289	Ti	0.52264	0.00293	0.91084	0.00000	Uiso	1.00
Ti290	Ti	0.41258	0.13208	0.96155	0.00000	Uiso	1.00
Ti291	Ti	0.45977	0.11921	0.91615	0.00000	Uiso	1.00
Ti292	Ti	0.35663	0.00091	0.97455	0.00000	Uiso	1.00
O293	O	0.47389	-0.00091	0.92557	0.00000	Uiso	1.00
O294	O	0.37402	0.12690	0.98931	0.00000	Uiso	1.00
O295	O	0.40956	0.09441	0.92489	0.00000	Uiso	1.00
O296	O	0.30770	-0.02557	0.98491	0.00000	Uiso	1.00
O297	O	0.39803	0.00002	0.95282	0.00000	Uiso	1.00
O298	O	0.50950	0.12369	0.90236	0.00000	Uiso	1.00
O299	O	0.46407	0.14523	0.95633	0.00000	Uiso	1.00
O300	O	0.33654	0.02741	0.93812	0.00000	Uiso	1.00
Ti301	Ti	0.48655	-0.00306	0.83970	0.00000	Uiso	1.00
Ti302	Ti	0.38957	0.11909	0.88879	0.00000	Uiso	1.00

Ti303	Ti	0.43370	0.12845	0.84487	0.00000	Uiso	1.00
Ti304	Ti	0.32923	0.00240	0.89925	0.00000	Uiso	1.00
O305	O	0.43536	-0.00474	0.83506	0.00000	Uiso	1.00
O306	O	0.33816	0.12550	0.89169	0.00000	Uiso	1.00
O307	O	0.38424	0.14462	0.84926	0.00000	Uiso	1.00
O308	O	0.27949	0.02793	0.91111	0.00000	Uiso	1.00
O309	O	0.37768	-0.00258	0.88401	0.00000	Uiso	1.00
O310	O	0.47883	0.12595	0.82596	0.00000	Uiso	1.00
O311	O	0.43914	0.08798	0.88105	0.00000	Uiso	1.00
O312	O	0.30712	-0.01841	0.86241	0.00000	Uiso	1.00
Ti313	Ti	0.51958	0.24570	0.90770	0.00000	Uiso	1.00
Ti314	Ti	0.41335	0.37042	0.96192	0.00000	Uiso	1.00
Ti315	Ti	0.46367	0.37854	0.91879	0.00000	Uiso	1.00
Ti316	Ti	0.35484	0.25151	0.97596	0.00000	Uiso	1.00
O317	O	0.46486	0.25093	0.90961	0.00000	Uiso	1.00
O318	O	0.37480	0.37573	0.98751	0.00000	Uiso	1.00
O319	O	0.41394	0.40618	0.92580	0.00000	Uiso	1.00
O320	O	0.30462	0.27417	0.98539	0.00000	Uiso	1.00
O321	O	0.39276	0.25296	0.94973	0.00000	Uiso	1.00
O322	O	0.51768	0.37241	0.91603	0.00000	Uiso	1.00
O323	O	0.46427	0.35473	0.95937	0.00000	Uiso	1.00
O324	O	0.33511	0.21709	0.94119	0.00000	Uiso	1.00
Ti325	Ti	0.49130	0.24832	0.84125	0.00000	Uiso	1.00
Ti326	Ti	0.38921	0.37813	0.89313	0.00000	Uiso	1.00
Ti327	Ti	0.43147	0.36511	0.84672	0.00000	Uiso	1.00
Ti328	Ti	0.33389	0.24459	0.90267	0.00000	Uiso	1.00
O329	O	0.44878	0.24606	0.86064	0.00000	Uiso	1.00
O330	O	0.33882	0.37363	0.90926	0.00000	Uiso	1.00
O331	O	0.38104	0.35207	0.85394	0.00000	Uiso	1.00
O332	O	0.28397	0.21645	0.91116	0.00000	Uiso	1.00
O333	O	0.38821	0.24845	0.89873	0.00000	Uiso	1.00
O334	O	0.47452	0.36493	0.82461	0.00000	Uiso	1.00
O335	O	0.43941	0.40617	0.88287	0.00000	Uiso	1.00
O336	O	0.31298	0.26986	0.86609	0.00000	Uiso	1.00
Ti337	Ti	0.28843	0.00088	0.94879	0.00000	Uiso	1.00
Ti338	Ti	0.13397	0.12430	0.85211	0.00000	Uiso	1.00
Ti339	Ti	0.22572	0.11979	0.95023	0.00000	Uiso	1.00
Ti340	Ti	0.07484	-0.00201	0.85956	0.00000	Uiso	1.00
O341	O	0.24157	-0.00735	0.96142	0.00000	Uiso	1.00
O342	O	0.08518	0.12380	0.84214	0.00000	Uiso	1.00
O343	O	0.17492	0.10803	0.96145	0.00000	Uiso	1.00
O344	O	0.02600	0.02853	0.86776	0.00000	Uiso	1.00
O345	O	0.12390	-0.00131	0.86761	0.00000	Uiso	1.00
O346	O	0.27787	0.12247	0.96012	0.00000	Uiso	1.00
O347	O	0.18140	0.14841	0.83744	0.00000	Uiso	1.00
O348	O	0.11568	0.02570	0.96813	0.00000	Uiso	1.00
Ti349	Ti	0.25773	-0.00014	0.87534	0.00000	Uiso	1.00
Ti350	Ti	0.15534	0.12023	0.92273	0.00000	Uiso	1.00
Ti351	Ti	0.20099	0.13072	0.87511	0.00000	Uiso	1.00
Ti352	Ti	0.09662	-0.00094	0.93218	0.00000	Uiso	1.00
O353	O	0.20388	-0.00002	0.86725	0.00000	Uiso	1.00

O354	O	0.10143	0.12635	0.92379	0.00000	Uiso	1.00
O355	O	0.15380	0.14683	0.88580	0.00000	Uiso	1.00
O356	O	0.04498	-0.00959	0.94478	0.00000	Uiso	1.00
O357	O	0.14491	-0.00053	0.91678	0.00000	Uiso	1.00
O358	O	0.24871	0.12719	0.86165	0.00000	Uiso	1.00
O359	O	0.20664	0.09944	0.91359	0.00000	Uiso	1.00
O360	O	0.07023	-0.02798	0.89872	0.00000	Uiso	1.00
Ti361	Ti	0.28708	0.24524	0.94891	0.00000	Uiso	1.00
Ti362	Ti	0.13231	0.37080	0.85234	0.00000	Uiso	1.00
Ti363	Ti	0.22968	0.37628	0.94412	0.00000	Uiso	1.00
Ti364	Ti	0.07297	0.24780	0.85959	0.00000	Uiso	1.00
O365	O	0.23809	0.25204	0.95777	0.00000	Uiso	1.00
O366	O	0.08257	0.37210	0.84085	0.00000	Uiso	1.00
O367	O	0.18177	0.39161	0.96102	0.00000	Uiso	1.00
O368	O	0.02376	0.22300	0.86964	0.00000	Uiso	1.00
O369	O	0.12048	0.24626	0.86848	0.00000	Uiso	1.00
O370	O	0.28240	0.37371	0.93571	0.00000	Uiso	1.00
O371	O	0.18003	0.34844	0.83802	0.00000	Uiso	1.00
O372	O	0.11556	0.22432	0.97159	0.00000	Uiso	1.00
Ti373	Ti	0.26217	0.25001	0.87756	0.00000	Uiso	1.00
Ti374	Ti	0.15704	0.38103	0.92539	0.00000	Uiso	1.00
Ti375	Ti	0.19893	0.36938	0.87561	0.00000	Uiso	1.00
Ti376	Ti	0.09995	0.25115	0.93434	0.00000	Uiso	1.00
O377	O	0.21142	0.25044	0.88805	0.00000	Uiso	1.00
O378	O	0.10824	0.37542	0.94106	0.00000	Uiso	1.00
O379	O	0.15023	0.35507	0.88775	0.00000	Uiso	1.00
O380	O	0.04829	0.26122	0.94614	0.00000	Uiso	1.00
O381	O	0.15368	0.24999	0.92831	0.00000	Uiso	1.00
O382	O	0.24686	0.37295	0.86453	0.00000	Uiso	1.00
O383	O	0.20500	0.40434	0.91186	0.00000	Uiso	1.00
O384	O	0.07389	0.27649	0.89896	0.00000	Uiso	1.00
C385	C	-0.60062	-0.22258	0.51138	0.00000	Uiso	1.00
C386	C	-0.59930	-0.24113	0.53623	0.00000	Uiso	1.00
C387	C	-0.59768	-0.26089	0.56338	0.00000	Uiso	1.00
C388	C	-0.59600	-0.27843	0.58820	0.00000	Uiso	1.00
C389	C	-0.59390	-0.29704	0.61545	0.00000	Uiso	1.00
C390	C	-0.59173	-0.31347	0.64041	0.00000	Uiso	1.00
C391	C	-0.58900	-0.33101	0.66829	0.00000	Uiso	1.00
C392	C	-0.58300	-0.41102	0.67846	0.00000	Uiso	1.00
S393	S	-0.59186	-0.24647	0.69471	0.00000	Uiso	1.00
C394	C	-0.58014	-0.41293	0.70737	0.00000	Uiso	1.00
H395	H	-0.58027	-0.46943	0.66543	0.00000	Uiso	1.00
C396	C	-0.58397	-0.33443	0.71981	0.00000	Uiso	1.00
H397	H	-0.57494	-0.47366	0.71873	0.00000	Uiso	1.00
C398	C	-0.58071	-0.32533	0.74897	0.00000	Uiso	1.00
H399	H	-0.57411	-0.38564	0.76011	0.00000	Uiso	1.00
C400	C	-0.58426	-0.25040	0.76463	0.00000	Uiso	1.00
C401	C	-0.59369	-0.17044	0.75342	0.00000	Uiso	1.00
C402	C	-0.57748	-0.25195	0.79515	0.00000	Uiso	1.00
O403	O	-0.57072	-0.32704	0.80660	0.00000	Uiso	1.00
O404	O	-0.57789	-0.18052	0.80759	0.00000	Uiso	1.00

N405	N	-0.60166	-0.10120	0.74480	0.00000	Uiso	1.00
C406	C	-0.60196	-0.20131	0.48365	0.00000	Uiso	1.00
C407	C	-0.61504	-0.12585	0.47427	0.00000	Uiso	1.00
S408	S	-0.58526	-0.27243	0.45649	0.00000	Uiso	1.00
C409	C	-0.61325	-0.11731	0.44543	0.00000	Uiso	1.00
H410	H	-0.62587	-0.07531	0.48784	0.00000	Uiso	1.00
C411	C	-0.59901	-0.18636	0.43260	0.00000	Uiso	1.00
H412	H	-0.62246	-0.05934	0.43436	0.00000	Uiso	1.00
H413	H	-0.59926	-0.13148	0.39262	0.00000	Uiso	1.00
C414	C	-0.57972	-0.26205	0.38963	0.00000	Uiso	1.00
C415	C	-0.56304	-0.25697	0.36542	0.00000	Uiso	1.00
C416	C	-0.55784	-0.34305	0.35628	0.00000	Uiso	1.00
H417	H	-0.55554	-0.19691	0.35468	0.00000	Uiso	1.00
C418	C	-0.57220	-0.39752	0.37487	0.00000	Uiso	1.00
H419	H	-0.54487	-0.36274	0.33711	0.00000	Uiso	1.00
H420	H	-0.57268	-0.46906	0.37322	0.00000	Uiso	1.00
N421	N	-0.59387	-0.18813	0.40438	0.00000	Uiso	1.00
N422	N	-0.58668	-0.35164	0.39608	0.00000	Uiso	1.00
H423	H	-0.60044	-0.37649	0.41321	0.00000	Uiso	1.00
Cl424	Cl	5.00000	5.00000	5.00000	0.00000	Uiso	1.00
H425	H	0.36439	0.66366	0.83637	0.00000	Uiso	1.00

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

_geom_bond_distance

_geom_bond_site_symmetry_2

_ccdc_geom_bond_type

Ti1 O5 1.900 1_455 S

Ti1 O10 2.103 1_455 S

Ti1 O152 1.919 . S

Ti1 O226 2.093 1_455 S

Ti2 O6 2.006 . S

Ti2 O11 2.019 . S

Ti2 O9 2.010 . S

Ti2 O19 1.924 . S

Ti2 O7 1.941 . S

Ti2 O33 1.925 . S

Ti3 O7 1.946 . S

Ti3 O10 1.938 . S

Ti3 O5 2.030 . S

Ti3 O29 2.085 . S

Ti3 O11 1.828 . S

Ti4 O8 2.027 . S

Ti4 O9 2.109 . S

Ti4 O24 1.874 . S

Ti4 O6 1.877 . S

Ti4 O222 1.987 . S

Ti4 O12 1.973 . S

O5 Ti1 1.900 1_655 S

O5 Ti219 2.046 . S

O6 Ti28 1.917 . S

O8	Ti61	1.827	.	S
O8	Ti49	1.873	.	S
O9	Ti218	1.966	.	S
O10	Ti1	2.103	1_655	S
O10	Ti25	2.117	1_655	S
O11	Ti15	1.942	.	S
O12	Ti49	2.077	.	S
Ti13	O17	2.121	1_455	S
Ti13	O168	2.006	.	S
Ti13	O22	1.957	.	S
Ti13	O152	1.946	.	S
Ti13	O164	2.028	.	S
Ti13	O238	1.903	.	S
Ti14	O18	1.988	.	S
Ti14	O23	1.997	.	S
Ti14	O21	2.057	.	S
Ti14	O19	1.834	.	S
Ti14	O45	2.107	.	S
Ti15	O19	2.035	.	S
Ti15	O22	2.108	1_655	S
Ti15	O17	1.970	.	S
Ti15	O41	1.895	.	S
Ti15	O23	1.970	.	S
Ti16	O20	2.020	.	S
Ti16	O21	1.928	.	S
Ti16	O18	2.123	.	S
Ti16	O234	2.097	.	S
Ti16	O24	1.893	.	S
O17	Ti13	2.121	1_655	S
O17	Ti231	2.008	.	S
O18	Ti40	2.138	.	S
O20	Ti61	1.909	.	S
O21	Ti230	2.037	.	S
O22	Ti15	2.108	1_455	S
O22	Ti37	1.996	.	S
O24	Ti61	1.934	.	S
Ti25	O29	1.895	1_455	S
Ti25	O34	2.111	1_455	S
Ti25	O176	1.950	.	S
Ti25	O10	2.117	1_455	S
Ti26	O30	2.097	.	S
Ti26	O35	1.994	.	S
Ti26	O33	1.884	.	S
Ti26	O43	1.898	.	S
Ti26	O31	1.956	.	S
Ti26	O201	1.966	1_565	S
Ti27	O31	2.020	.	S
Ti27	O34	1.978	.	S
Ti27	O29	2.103	.	S
Ti27	O197	2.046	1_565	S
Ti27	O35	1.804	.	S

Ti28	O32	2.046	.	S
Ti28	O33	2.002	.	S
Ti28	O48	1.905	.	S
Ti28	O30	2.033	.	S
Ti28	O36	1.974	.	S
O29	Ti25	1.895	1_655	S
O30	Ti196	1.986	1_565	S
O32	Ti85	1.884	.	S
O32	Ti73	1.937	.	S
O34	Ti25	2.111	1_655	S
O34	Ti193	2.093	1_665	S
O35	Ti39	1.901	.	S
O36	Ti73	2.013	.	S
Ti37	O41	2.033	1_455	S
Ti37	O192	2.003	.	S
Ti37	O46	1.950	.	S
Ti37	O176	1.952	.	S
Ti37	O188	1.967	.	S
Ti38	O42	1.939	.	S
Ti38	O47	2.026	.	S
Ti38	O45	2.096	.	S
Ti38	O43	1.795	.	S
Ti38	O213	2.037	1_565	S
Ti39	O43	1.996	.	S
Ti39	O46	2.041	1_655	S
Ti39	O41	1.930	.	S
Ti39	O209	2.008	1_565	S
Ti39	O47	1.957	.	S
Ti40	O44	2.004	.	S
Ti40	O45	1.908	.	S
Ti40	O42	2.115	.	S
Ti40	O48	1.941	.	S
O41	Ti37	2.033	1_655	S
O42	Ti208	2.097	1_565	S
O44	Ti85	1.918	.	S
O46	Ti39	2.041	1_455	S
O46	Ti205	1.903	1_565	S
O48	Ti85	1.972	.	S
Ti49	O53	2.097	.	S
Ti49	O58	2.035	.	S
Ti49	O274	2.011	.	S
Ti50	O54	2.035	.	S
Ti50	O59	2.061	.	S
Ti50	O57	2.036	.	S
Ti50	O67	1.977	.	S
Ti50	O55	1.855	.	S
Ti50	O81	1.913	.	S
Ti51	O55	1.997	.	S
Ti51	O58	1.966	.	S
Ti51	O71	1.962	.	S
Ti51	O53	2.065	.	S

Ti51	O77	1.970	.	S
Ti51	O59	1.885	.	S
Ti52	O56	2.074	.	S
Ti52	O57	2.098	.	S
Ti52	O72	1.903	.	S
Ti52	O54	1.932	.	S
Ti52	O270	1.937	.	S
Ti52	O60	1.965	.	S
O53	Ti267	2.059	.	S
O54	Ti76	1.983	.	S
O55	Ti62	1.857	.	S
O56	Ti97	1.992	.	S
O57	Ti266	2.013	.	S
O58	Ti73	2.104	.	S
O59	Ti63	1.927	.	S
O60	Ti97	1.965	.	S
O60	Ti64	1.885	.	S
Ti61	O65	1.903	.	S
Ti61	O70	1.966	.	S
Ti61	O286	2.048	.	S
Ti62	O66	2.007	.	S
Ti62	O71	1.987	.	S
Ti62	O69	2.060	.	S
Ti62	O93	2.128	.	S
Ti63	O67	2.010	.	S
Ti63	O70	2.065	.	S
Ti63	O65	2.054	.	S
Ti63	O89	2.099	.	S
Ti64	O68	2.032	.	S
Ti64	O69	1.920	.	S
Ti64	O66	2.116	.	S
Ti64	O282	2.100	.	S
O65	Ti279	2.003	.	S
O66	Ti88	2.124	.	S
O68	Ti97	1.950	.	S
O68	Ti109	1.973	.	S
O69	Ti278	2.033	.	S
O70	Ti85	1.971	.	S
Ti73	O77	2.059	.	S
Ti73	O82	2.064	.	S
Ti74	O78	2.087	.	S
Ti74	O83	2.039	.	S
Ti74	O81	1.891	.	S
Ti74	O91	1.978	.	S
Ti74	O79	1.818	.	S
Ti74	O249	2.015	1_565	S
Ti75	O79	1.941	.	S
Ti75	O82	1.916	.	S
Ti75	O95	1.954	.	S
Ti75	O77	1.958	.	S
Ti75	O245	2.060	1_565	S

Ti75	O83	1.828	.	S
Ti76	O80	2.101	.	S
Ti76	O81	2.025	.	S
Ti76	O96	1.917	.	S
Ti76	O78	2.003	.	S
Ti76	O84	1.975	.	S
O78	Ti244	1.940	1_565	S
O79	Ti86	1.810	.	S
O80	Ti121	1.973	.	S
O82	Ti241	2.012	1_565	S
O83	Ti87	1.858	.	S
O84	Ti121	2.016	.	S
O84	Ti88	1.930	.	S
Ti85	O89	1.950	.	S
Ti85	O94	2.049	.	S
Ti86	O90	1.944	.	S
Ti86	O95	1.999	.	S
Ti86	O93	2.112	.	S
Ti86	O261	2.035	1_565	S
Ti87	O91	2.047	.	S
Ti87	O94	2.087	.	S
Ti87	O89	2.029	.	S
Ti87	O257	2.003	1_565	S
Ti88	O92	1.968	.	S
Ti88	O93	1.891	.	S
Ti88	O90	2.110	.	S
O90	Ti256	2.104	1_565	S
O92	Ti121	1.858	.	S
O92	Ti133	1.845	.	S
O94	Ti253	2.048	1_565	S
Ti97	O101	2.011	.	S
Ti97	O106	1.944	.	S
Ti97	O322	1.981	.	S
Ti98	O102	1.995	.	S
Ti98	O107	2.022	.	S
Ti98	O105	2.115	.	S
Ti98	O103	1.833	.	S
Ti98	O129	2.060	.	S
Ti99	O103	2.015	.	S
Ti99	O106	2.031	.	S
Ti99	O119	1.909	.	S
Ti99	O101	1.944	.	S
Ti99	O125	2.027	.	S
Ti99	O107	1.957	.	S
Ti100	O104	1.998	.	S
Ti100	O105	1.906	.	S
Ti100	O102	2.138	.	S
Ti100	O318	2.112	.	S
Ti100	O108	1.938	.	S
O101	Ti315	1.890	.	S
O102	Ti124	2.118	.	S

O103	Ti110	1.902	.	S
O104	Ti145	1.914	.	S
O105	Ti314	2.090	.	S
O106	Ti121	1.911	.	S
O108	Ti145	1.969	.	S
O108	Ti112	1.903	.	S
Ti109	O113	1.983	.	S
Ti109	O118	2.042	.	S
Ti109	O334	2.086	.	S
Ti110	O114	2.005	.	S
Ti110	O119	2.023	.	S
Ti110	O117	1.913	.	S
Ti110	O141	2.027	.	S
Ti110	O115	1.866	.	S
Ti111	O115	1.966	.	S
Ti111	O118	1.951	.	S
Ti111	O113	2.064	.	S
Ti111	O137	1.940	.	S
Ti111	O119	1.871	.	S
Ti111	O403	1.891	1_665	S
Ti112	O116	2.040	.	S
Ti112	O117	2.004	.	S
Ti112	O114	1.927	.	S
Ti112	O330	2.038	.	S
Ti112	O120	1.973	.	S
O113	Ti327	2.082	.	S
O114	Ti136	1.882	.	S
O115	H425	1.140	.	S
O116	Ti145	1.871	.	S
O116	Ti157	1.944	.	S
O117	Ti326	1.883	.	S
O118	Ti133	2.005	.	S
O120	Ti157	2.025	.	S
Ti121	O125	2.116	.	S
Ti121	O130	1.955	.	S
Ti122	O126	1.928	.	S
Ti122	O131	1.990	.	S
Ti122	O129	2.030	.	S
Ti122	O127	1.800	.	S
Ti122	O297	2.091	1_565	S
Ti123	O127	1.987	.	S
Ti123	O130	2.092	.	S
Ti123	O143	2.002	.	S
Ti123	O125	1.983	.	S
Ti123	O293	1.891	1_565	S
Ti123	O131	1.961	.	S
Ti124	O128	2.024	.	S
Ti124	O129	1.927	.	S
Ti124	O126	2.099	.	S
Ti124	O132	1.890	.	S
O126	Ti292	2.111	1_565	S

O127	Ti134	1.854	.	S
O128	Ti169	1.912	.	S
O130	Ti289	1.990	1_565	S
O132	Ti169	1.944	.	S
O132	Ti136	1.880	.	S
Ti133	O137	1.926	.	S
Ti133	O142	2.006	.	S
Ti134	O138	2.108	.	S
Ti134	O143	2.075	.	S
Ti134	O141	1.996	.	S
Ti134	O139	1.864	.	S
Ti134	O309	1.905	1_565	S
Ti135	O139	2.012	.	S
Ti135	O142	1.942	.	S
Ti135	O137	1.942	.	S
Ti135	O305	2.061	1_565	S
Ti135	O143	1.906	.	S
Ti135	O404	1.893	1_665	S
Ti136	O140	2.023	.	S
Ti136	O141	2.119	.	S
Ti136	O138	1.988	.	S
Ti136	O144	1.958	.	S
O138	Ti304	2.040	1_565	S
O140	Ti169	1.849	.	S
O140	Ti181	1.878	.	S
O142	Ti301	2.050	1_565	S
O144	Ti181	2.068	.	S
Ti145	O149	1.913	.	S
Ti145	O154	1.955	.	S
Ti145	O370	2.034	.	S
Ti146	O150	1.947	.	S
Ti146	O155	1.997	.	S
Ti146	O153	2.072	.	S
Ti146	O163	1.808	.	S
Ti146	O177	2.067	.	S
Ti147	O151	2.044	.	S
Ti147	O154	2.074	.	S
Ti147	O167	1.915	.	S
Ti147	O149	2.084	.	S
Ti147	O173	2.084	.	S
Ti148	O152	1.983	.	S
Ti148	O153	1.936	.	S
Ti148	O168	1.910	.	S
Ti148	O150	2.111	.	S
Ti148	O366	2.121	.	S
O149	Ti363	1.999	.	S
O150	Ti172	2.102	.	S
O151	Ti158	1.998	.	S
O153	Ti362	2.089	.	S
O154	Ti169	1.964	.	S
O155	Ti159	1.962	.	S

O156	Ti160	1.904	.	S
Ti157	O161	2.119	.	S
Ti157	O166	2.058	.	S
Ti157	O382	2.031	.	S
Ti158	O162	2.089	.	S
Ti158	O167	2.056	.	S
Ti158	O165	1.890	.	S
Ti158	O163	1.802	.	S
Ti158	O189	1.978	.	S
Ti159	O163	1.911	.	S
Ti159	O166	1.954	.	S
Ti159	O161	2.012	.	S
Ti159	O185	1.952	.	S
Ti159	O167	1.901	.	S
Ti160	O164	2.090	.	S
Ti160	O165	2.006	.	S
Ti160	O162	1.973	.	S
Ti160	O378	1.968	.	S
Ti160	O168	1.933	.	S
O161	Ti375	2.024	.	S
O162	Ti184	1.951	.	S
O165	Ti374	1.895	.	S
O166	Ti181	2.071	.	S
Ti169	O173	1.946	.	S
Ti169	O178	2.047	.	S
Ti170	O174	2.001	.	S
Ti170	O179	1.997	.	S
Ti170	O177	2.082	.	S
Ti170	O187	1.836	.	S
Ti170	O345	2.089	1_565	S
Ti171	O175	2.034	.	S
Ti171	O178	2.082	.	S
Ti171	O191	1.855	.	S
Ti171	O173	2.009	.	S
Ti171	O341	1.996	1_565	S
Ti172	O176	1.998	.	S
Ti172	O177	1.886	.	S
Ti172	O192	1.921	.	S
Ti172	O174	2.110	.	S
O174	Ti340	2.121	1_565	S
O175	Ti182	1.952	.	S
O178	Ti337	2.033	1_565	S
O179	Ti183	1.956	.	S
O180	Ti184	1.913	.	S
Ti181	O185	2.029	.	S
Ti181	O190	2.047	.	S
Ti182	O186	2.032	.	S
Ti182	O191	1.996	.	S
Ti182	O189	1.988	.	S
Ti182	O187	1.851	.	S
Ti182	O357	1.895	1_565	S

Ti183	O187	1.982	.	S
Ti183	O190	1.929	.	S
Ti183	O185	1.952	.	S
Ti183	O353	2.024	1_565	S
Ti183	O191	1.816	.	S
Ti184	O188	2.082	.	S
Ti184	O189	2.099	.	S
Ti184	O186	1.930	.	S
Ti184	O192	1.998	.	S
O186	Ti352	1.968	1_565	S
O190	Ti349	2.030	1_565	S
Ti193	O197	1.900	1_455	S
Ti193	O202	2.103	1_455	S
Ti193	O344	1.919	.	S
Ti193	O34	2.093	1_445	S
Ti194	O198	2.006	.	S
Ti194	O203	2.019	.	S
Ti194	O201	2.010	.	S
Ti194	O211	1.924	.	S
Ti194	O199	1.941	.	S
Ti194	O225	1.925	.	S
Ti195	O199	1.946	.	S
Ti195	O202	1.938	.	S
Ti195	O197	2.030	.	S
Ti195	O221	2.085	.	S
Ti195	O203	1.828	.	S
Ti196	O200	2.027	.	S
Ti196	O201	2.109	.	S
Ti196	O216	1.874	.	S
Ti196	O198	1.877	.	S
Ti196	O30	1.986	1_545	S
Ti196	O204	1.973	.	S
O197	Ti193	1.900	1_655	S
O197	Ti27	2.046	1_545	S
O198	Ti220	1.917	.	S
O200	Ti253	1.827	.	S
O200	Ti241	1.873	.	S
O201	Ti26	1.966	1_545	S
O202	Ti193	2.103	1_655	S
O202	Ti217	2.117	1_655	S
O203	Ti207	1.942	.	S
O204	Ti241	2.077	.	S
Ti205	O209	2.121	1_455	S
Ti205	O360	2.006	.	S
Ti205	O214	1.957	.	S
Ti205	O344	1.946	.	S
Ti205	O356	2.028	.	S
Ti205	O46	1.903	1_545	S
Ti206	O210	1.988	.	S
Ti206	O215	1.997	.	S
Ti206	O213	2.057	.	S

Ti206	O211	1.834	.	S
Ti206	O237	2.107	.	S
Ti207	O211	2.035	.	S
Ti207	O214	2.108	1_655	S
Ti207	O209	1.970	.	S
Ti207	O233	1.895	.	S
Ti207	O215	1.970	.	S
Ti208	O212	2.020	.	S
Ti208	O213	1.928	.	S
Ti208	O210	2.123	.	S
Ti208	O42	2.097	1_545	S
Ti208	O216	1.893	.	S
O209	Ti205	2.121	1_655	S
O209	Ti39	2.008	1_545	S
O210	Ti232	2.138	.	S
O212	Ti253	1.909	.	S
O213	Ti38	2.037	1_545	S
O214	Ti207	2.108	1_455	S
O214	Ti229	1.996	.	S
O216	Ti253	1.934	.	S
Ti217	O221	1.895	1_455	S
Ti217	O226	2.111	1_455	S
Ti217	O368	1.950	.	S
Ti217	O202	2.117	1_455	S
Ti218	O222	2.097	.	S
Ti218	O227	1.994	.	S
Ti218	O225	1.884	.	S
Ti218	O235	1.898	.	S
Ti218	O223	1.956	.	S
Ti219	O223	2.020	.	S
Ti219	O226	1.978	.	S
Ti219	O221	2.103	.	S
Ti219	O227	1.804	.	S
Ti220	O224	2.046	.	S
Ti220	O225	2.002	.	S
Ti220	O240	1.905	.	S
Ti220	O222	2.033	.	S
Ti220	O228	1.973	.	S
O221	Ti217	1.895	1_655	S
O224	Ti277	1.883	.	S
O224	Ti265	1.936	.	S
O226	Ti217	2.111	1_655	S
O226	Ti1	2.093	1_655	S
O227	Ti231	1.901	.	S
O228	Ti265	2.012	.	S
Ti229	O233	2.033	1_455	S
Ti229	O384	2.003	.	S
Ti229	O238	1.950	.	S
Ti229	O368	1.952	.	S
Ti229	O380	1.967	.	S
Ti230	O234	1.939	.	S

Ti230	O239	2.026	.	S
Ti230	O237	2.096	.	S
Ti230	O235	1.795	.	S
Ti231	O235	1.996	.	S
Ti231	O238	2.041	1_655	S
Ti231	O233	1.930	.	S
Ti231	O239	1.957	.	S
Ti232	O236	2.004	.	S
Ti232	O237	1.908	.	S
Ti232	O234	2.114	.	S
Ti232	O240	1.941	.	S
O233	Ti229	2.033	1_655	S
O236	Ti277	1.918	.	S
O238	Ti231	2.041	1_455	S
O240	Ti277	1.972	.	S
Ti241	O245	2.097	.	S
Ti241	O250	2.034	.	S
Ti241	O82	2.012	1_545	S
Ti242	O246	2.037	.	S
Ti242	O251	2.062	.	S
Ti242	O249	2.036	.	S
Ti242	O259	1.978	.	S
Ti242	O247	1.856	.	S
Ti242	O273	1.913	.	S
Ti243	O247	1.997	.	S
Ti243	O250	1.964	.	S
Ti243	O263	1.960	.	S
Ti243	O245	2.064	.	S
Ti243	O269	1.970	.	S
Ti243	O251	1.885	.	S
Ti244	O248	2.078	.	S
Ti244	O249	2.099	.	S
Ti244	O264	1.904	.	S
Ti244	O246	1.930	.	S
Ti244	O78	1.940	1_545	S
Ti244	O252	1.963	.	S
O245	Ti75	2.060	1_545	S
O246	Ti268	1.984	.	S
O247	Ti254	1.855	.	S
O248	Ti289	1.991	.	S
O249	Ti74	2.015	1_545	S
O250	Ti265	2.103	.	S
O251	Ti255	1.927	.	S
O252	Ti289	1.965	.	S
O252	Ti256	1.890	.	S
Ti253	O257	1.903	.	S
Ti253	O262	1.966	.	S
Ti253	O94	2.048	1_545	S
Ti254	O258	2.001	.	S
Ti254	O263	1.985	.	S
Ti254	O261	2.056	.	S

Ti254	O285	2.125	.	S
Ti255	O259	2.011	.	S
Ti255	O262	2.065	.	S
Ti255	O257	2.054	.	S
Ti255	O281	2.099	.	S
Ti256	O260	2.029	.	S
Ti256	O261	1.920	.	S
Ti256	O258	2.112	.	S
Ti256	O90	2.104	1_545	S
O257	Ti87	2.003	1_545	S
O258	Ti280	2.118	.	S
O260	Ti289	1.933	.	S
O260	Ti301	1.971	.	S
O261	Ti86	2.035	1_545	S
O262	Ti277	1.971	.	S
Ti265	O269	2.058	.	S
Ti265	O274	2.063	.	S
Ti266	O270	2.087	.	S
Ti266	O275	2.040	.	S
Ti266	O273	1.890	.	S
Ti266	O283	1.979	.	S
Ti266	O271	1.818	.	S
Ti267	O271	1.940	.	S
Ti267	O274	1.915	.	S
Ti267	O287	1.953	.	S
Ti267	O269	1.958	.	S
Ti267	O275	1.828	.	S
Ti268	O272	2.106	.	S
Ti268	O273	2.028	.	S
Ti268	O288	1.917	.	S
Ti268	O270	2.002	.	S
Ti268	O276	1.981	.	S
O271	Ti278	1.809	.	S
O272	Ti313	1.977	.	S
O275	Ti279	1.858	.	S
O276	Ti313	2.019	.	S
O276	Ti280	1.933	.	S
Ti277	O281	1.950	.	S
Ti277	O286	2.049	.	S
Ti278	O282	1.942	.	S
Ti278	O287	1.998	.	S
Ti278	O285	2.111	.	S
Ti279	O283	2.047	.	S
Ti279	O286	2.087	.	S
Ti279	O281	2.029	.	S
Ti280	O284	1.966	.	S
Ti280	O285	1.890	.	S
Ti280	O282	2.108	.	S
O284	Ti313	1.911	.	S
O284	Ti325	1.890	.	S
Ti289	O293	2.012	.	S

Ti289	O298	1.936	.	S
Ti289	O130	1.990	1_545	S
Ti290	O294	1.993	.	S
Ti290	O299	2.017	.	S
Ti290	O297	2.114	.	S
Ti290	O295	1.836	.	S
Ti290	O321	2.058	.	S
Ti291	O295	2.022	.	S
Ti291	O298	2.033	.	S
Ti291	O311	1.908	.	S
Ti291	O293	1.947	.	S
Ti291	O317	2.023	.	S
Ti291	O299	1.956	.	S
Ti292	O296	1.997	.	S
Ti292	O297	1.905	.	S
Ti292	O294	2.137	.	S
Ti292	O126	2.111	1_545	S
Ti292	O300	1.939	.	S
O293	Ti123	1.891	1_545	S
O294	Ti316	2.120	.	S
O295	Ti302	1.918	.	S
O296	Ti337	1.914	.	S
O297	Ti122	2.091	1_545	S
O298	Ti313	1.901	.	S
O300	Ti337	1.970	.	S
O300	Ti304	1.907	.	S
Ti301	O305	1.993	.	S
Ti301	O310	2.077	.	S
Ti301	O142	2.050	1_545	S
Ti302	O306	1.996	.	S
Ti302	O311	2.008	.	S
Ti302	O309	1.908	.	S
Ti302	O307	1.929	.	S
Ti302	O333	2.011	.	S
Ti303	O307	1.940	.	S
Ti303	O310	1.964	.	S
Ti303	O305	2.066	.	S
Ti303	O329	2.014	.	S
Ti303	O311	1.837	.	S
Ti304	O308	2.042	.	S
Ti304	O309	2.011	.	S
Ti304	O306	1.925	.	S
Ti304	O138	2.040	1_545	S
Ti304	O312	1.973	.	S
O305	Ti135	2.061	1_545	S
O306	Ti328	1.880	.	S
O308	Ti337	1.869	.	S
O308	Ti349	1.943	.	S
O309	Ti134	1.905	1_545	S
O310	Ti325	2.044	.	S
O312	Ti349	2.026	.	S

Ti313	O317	2.120	.	S
Ti313	O322	1.956	.	S
Ti314	O318	1.926	.	S
Ti314	O323	1.988	.	S
Ti314	O321	2.029	.	S
Ti314	O319	1.799	.	S
Ti315	O319	1.997	.	S
Ti315	O322	2.096	.	S
Ti315	O335	1.992	.	S
Ti315	O317	1.977	.	S
Ti315	O323	1.962	.	S
Ti316	O320	2.023	.	S
Ti316	O321	1.925	.	S
Ti316	O318	2.102	.	S
Ti316	O324	1.893	.	S
O319	Ti326	1.872	.	S
O320	Ti361	1.912	.	S
O324	Ti361	1.941	.	S
O324	Ti328	1.878	.	S
Ti325	O329	1.886	.	S
Ti325	O334	2.037	.	S
Ti326	O330	2.096	.	S
Ti326	O335	2.046	.	S
Ti326	O333	1.977	.	S
Ti326	O331	1.930	.	S
Ti327	O331	1.991	.	S
Ti327	O334	1.969	.	S
Ti327	O329	2.030	.	S
Ti327	O335	1.852	.	S
Ti328	O332	2.018	.	S
Ti328	O333	2.111	.	S
Ti328	O330	1.983	.	S
Ti328	O336	1.955	.	S
O332	Ti361	1.850	.	S
O332	Ti373	1.876	.	S
O336	Ti373	2.062	.	S
Ti337	O341	1.914	.	S
Ti337	O346	1.957	.	S
Ti337	O178	2.033	1_545	S
Ti338	O342	1.946	.	S
Ti338	O347	1.997	.	S
Ti338	O345	2.072	.	S
Ti338	O355	1.808	.	S
Ti338	O369	2.067	.	S
Ti339	O343	2.044	.	S
Ti339	O346	2.072	.	S
Ti339	O359	1.916	.	S
Ti339	O341	2.085	.	S
Ti339	O365	2.085	.	S
Ti340	O344	1.984	.	S
Ti340	O345	1.936	.	S

Ti340	O360	1.910	.	S
Ti340	O342	2.111	.	S
Ti340	O174	2.121	1_545	S
O341	Ti171	1.996	1_545	S
O342	Ti364	2.102	.	S
O343	Ti350	1.998	.	S
O345	Ti170	2.089	1_545	S
O346	Ti361	1.962	.	S
O347	Ti351	1.962	.	S
O348	Ti352	1.904	.	S
Ti349	O353	2.119	.	S
Ti349	O358	2.060	.	S
Ti349	O190	2.030	1_545	S
Ti350	O354	2.088	.	S
Ti350	O359	2.056	.	S
Ti350	O357	1.889	.	S
Ti350	O355	1.801	.	S
Ti350	O381	1.979	.	S
Ti351	O355	1.911	.	S
Ti351	O358	1.954	.	S
Ti351	O353	2.013	.	S
Ti351	O377	1.952	.	S
Ti351	O359	1.901	.	S
Ti352	O356	2.090	.	S
Ti352	O357	2.006	.	S
Ti352	O354	1.972	.	S
Ti352	O186	1.968	1_545	S
Ti352	O360	1.933	.	S
O353	Ti183	2.024	1_545	S
O354	Ti376	1.951	.	S
O357	Ti182	1.895	1_545	S
O358	Ti373	2.070	.	S
Ti361	O365	1.944	.	S
Ti361	O370	2.047	.	S
Ti362	O366	2.000	.	S
Ti362	O371	1.996	.	S
Ti362	O369	2.082	.	S
Ti362	O379	1.835	.	S
Ti363	O367	2.033	.	S
Ti363	O370	2.079	.	S
Ti363	O383	1.855	.	S
Ti363	O365	2.012	.	S
Ti364	O368	1.998	.	S
Ti364	O369	1.886	.	S
Ti364	O384	1.921	.	S
Ti364	O366	2.111	.	S
O367	Ti374	1.951	.	S
O371	Ti375	1.956	.	S
O372	Ti376	1.913	.	S
Ti373	O377	2.026	.	S
Ti373	O382	2.045	.	S

Ti374	O378	2.031	.	S
Ti374	O383	1.995	.	S
Ti374	O381	1.988	.	S
Ti374	O379	1.850	.	S
Ti375	O379	1.982	.	S
Ti375	O382	1.929	.	S
Ti375	O377	1.952	.	S
Ti375	O383	1.817	.	S
Ti376	O380	2.081	.	S
Ti376	O381	2.098	.	S
Ti376	O378	1.931	.	S
Ti376	O384	1.998	.	S
C385	C386	1.214	.	T
C385	C406	1.358	.	A
C386	C387	1.326	.	D
C387	C388	1.211	.	T
C388	C389	1.327	.	D
C389	C390	1.215	.	T
C390	C391	1.355	.	A
C391	C392	1.322	.	D
C391	S393	1.794	.	S
C392	C394	1.379	.	A
C392	H395	1.083	.	S
S393	C396	1.811	.	S
C394	C396	1.333	.	D
C394	H397	1.083	.	S
C396	C398	1.398	.	A
C398	H399	1.084	.	S
C398	C400	1.361	.	D
C400	C401	1.369	.	A
C400	C402	1.474	.	S
C401	N405	1.165	.	T
C402	O403	1.285	.	A
C402	O404	1.230	.	D
O403	Ti111	1.891	1_445	S
O404	Ti135	1.893	1_445	S
C406	C407	1.324	.	D
C406	S408	1.799	.	S
C407	C409	1.379	.	A
C407	H410	1.083	.	S
S408	C411	1.806	.	S
C409	C411	1.328	.	D
C409	H412	1.082	.	S
C411	N421	1.356	.	A
H413	N421	1.043	.	S
C414	C415	1.321	.	D
C414	N421	1.427	.	S
C414	N422	1.413	.	S
C415	C416	1.385	.	A
C415	H417	1.080	.	S
C416	C418	1.329	.	D

C416 H419 1.082 . S
C418 H420 1.084 . S
C418 N422 1.345 . A
N422 H423 1.043 . S

data_TiO2@PY4PO3

_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 38.6882

_cell_length_b 15.1040

_cell_length_c 47.5200

_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

Ti1	Ti	-0.00693	0.50280	0.83872	0.00000	Uiso	1.00
Ti2	Ti	0.89087	0.62857	0.88919	0.00000	Uiso	1.00
Ti3	Ti	0.93662	0.62189	0.84637	0.00000	Uiso	1.00
Ti4	Ti	0.83359	0.50400	0.90225	0.00000	Uiso	1.00
O5	O	0.95198	0.50143	0.86061	0.00000	Uiso	1.00
O6	O	0.83913	0.62270	0.89149	0.00000	Uiso	1.00
O7	O	0.88669	0.60874	0.84898	0.00000	Uiso	1.00
O8	O	0.78410	0.53581	0.91198	0.00000	Uiso	1.00
O9	O	0.88783	0.49873	0.89814	0.00000	Uiso	1.00
O10	O	0.97719	0.62576	0.82250	0.00000	Uiso	1.00
O11	O	0.94165	0.65327	0.88330	0.00000	Uiso	1.00
O12	O	0.80878	0.47929	0.86683	0.00000	Uiso	1.00
Ti13	Ti	0.02089	0.49637	0.90684	0.00000	Uiso	1.00
Ti14	Ti	0.91301	0.62057	0.96185	0.00000	Uiso	1.00
Ti15	Ti	0.96444	0.62842	0.91885	0.00000	Uiso	1.00
Ti16	Ti	0.85606	0.49885	0.97562	0.00000	Uiso	1.00
O17	O	0.96626	0.50087	0.91026	0.00000	Uiso	1.00
O18	O	0.87409	0.62463	0.98913	0.00000	Uiso	1.00
O19	O	0.91315	0.65229	0.92459	0.00000	Uiso	1.00
O20	O	0.80614	0.47300	0.98507	0.00000	Uiso	1.00
O21	O	0.89447	0.49869	0.94978	0.00000	Uiso	1.00
O22	O	0.01872	0.62300	0.91542	0.00000	Uiso	1.00
O23	O	0.96433	0.60766	0.95977	0.00000	Uiso	1.00

O24	O	0.83618	0.53099	0.94068	0.00000	Uiso	1.00
Ti25	Ti	-0.00850	0.75017	0.83938	0.00000	Uiso	1.00
Ti26	Ti	0.88880	0.86973	0.89266	0.00000	Uiso	1.00
Ti27	Ti	0.93450	0.88172	0.84635	0.00000	Uiso	1.00
Ti28	Ti	0.82940	0.74485	0.89910	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.94808	0.75184	0.85783	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.83815	0.87436	0.90834	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.88305	0.89356	0.85248	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.77965	0.71859	0.91107	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.87792	0.75082	0.88460	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.97804	0.87732	0.82456	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.93778	0.84457	0.88232	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.80832	0.76222	0.86169	0.00000	Uiso	1.00
Ti37	Ti	0.02521	0.75267	0.90924	0.00000	Uiso	1.00
Ti38	Ti	0.91557	0.88115	0.96192	0.00000	Uiso	1.00
Ti39	Ti	0.96227	0.86958	0.91606	0.00000	Uiso	1.00
Ti40	Ti	0.85713	0.75110	0.97441	0.00000	Uiso	1.00
O41	O	0.97590	0.74928	0.92402	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.87643	0.87560	0.98734	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.91329	0.84298	0.92620	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.80802	0.77831	0.98470	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.89879	0.75225	0.95292	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.01156	0.87411	0.90083	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.96728	0.89304	0.95636	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.83656	0.72371	0.93818	0.00000	Uiso	1.00
Ti49	Ti	0.75845	0.49744	0.88087	0.00000	Uiso	1.00
Ti50	Ti	0.65717	0.62761	0.92692	0.00000	Uiso	1.00
Ti51	Ti	0.69812	0.62363	0.87670	0.00000	Uiso	1.00
Ti52	Ti	0.59905	0.49911	0.93157	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.70557	0.49536	0.89046	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.60768	0.62120	0.94128	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.65027	0.65379	0.88919	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.54882	0.50839	0.94654	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.64960	0.49908	0.91557	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74596	0.61563	0.86301	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.70715	0.65417	0.91446	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57080	0.52616	0.89835	0.00000	Uiso	1.00
Ti61	Ti	0.78838	0.50377	0.94888	0.00000	Uiso	1.00
Ti62	Ti	0.62937	0.61449	0.85630	0.00000	Uiso	1.00
Ti63	Ti	0.72769	0.62668	0.95036	0.00000	Uiso	1.00
Ti64	Ti	0.56954	0.49360	0.86009	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.74047	0.49672	0.95769	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.58039	0.61934	0.84248	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.67903	0.60840	0.96404	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.51993	0.46612	0.87091	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.61635	0.49374	0.87339	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.77951	0.62635	0.96077	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.67632	0.59442	0.84058	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61954	0.47109	0.96689	0.00000	Uiso	1.00
Ti73	Ti	0.75931	0.74540	0.87483	0.00000	Uiso	1.00
Ti74	Ti	0.65412	0.86840	0.92308	0.00000	Uiso	1.00

Ti75	Ti	0.69870	0.86766	0.87631	0.00000	Uiso	1.00
Ti76	Ti	0.59499	0.74742	0.93627	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.70767	0.74575	0.86438	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.60021	0.87320	0.92362	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.65177	0.83520	0.88636	0.00000	Uiso	1.00
O80	O	0.54194	0.73532	0.94517	0.00000	Uiso	1.00
O81	O	0.64732	0.74955	0.93425	0.00000	Uiso	1.00
O82	O	0.74666	0.87557	0.86662	0.00000	Uiso	1.00
O83	O	0.70375	0.83528	0.91316	0.00000	Uiso	1.00
O84	O	0.57085	0.72007	0.90062	0.00000	Uiso	1.00
Ti85	Ti	0.78831	0.74924	0.94884	0.00000	Uiso	1.00
Ti86	Ti	0.63110	0.87864	0.85511	0.00000	Uiso	1.00
Ti87	Ti	0.72915	0.87476	0.94390	0.00000	Uiso	1.00
Ti88	Ti	0.57244	0.74596	0.86087	0.00000	Uiso	1.00
O89	O	0.74062	0.75663	0.96194	0.00000	Uiso	1.00
O90	O	0.58307	0.87138	0.84323	0.00000	Uiso	1.00
O91	O	0.67981	0.89462	0.95811	0.00000	Uiso	1.00
O92	O	0.52471	0.78111	0.87044	0.00000	Uiso	1.00
O93	O	0.62046	0.74807	0.86845	0.00000	Uiso	1.00
O94	O	0.78196	0.87655	0.93490	0.00000	Uiso	1.00
O95	O	0.67862	0.89902	0.83992	0.00000	Uiso	1.00
O96	O	0.60776	0.77572	0.97419	0.00000	Uiso	1.00
Ti97	Ti	0.52311	0.50164	0.91027	0.00000	Uiso	1.00
Ti98	Ti	0.41363	0.63181	0.96103	0.00000	Uiso	1.00
Ti99	Ti	0.46091	0.61925	0.91515	0.00000	Uiso	1.00
Ti100	Ti	0.35720	0.50089	0.97422	0.00000	Uiso	1.00
O101	O	0.47443	0.49916	0.92522	0.00000	Uiso	1.00
O102	O	0.37485	0.62709	0.98865	0.00000	Uiso	1.00
O103	O	0.41095	0.59710	0.92428	0.00000	Uiso	1.00
O104	O	0.30822	0.47476	0.98469	0.00000	Uiso	1.00
O105	O	0.39877	0.49962	0.95262	0.00000	Uiso	1.00
O106	O	0.51049	0.62294	0.90125	0.00000	Uiso	1.00
O107	O	0.46517	0.64615	0.95531	0.00000	Uiso	1.00
O108	O	0.33690	0.52699	0.93791	0.00000	Uiso	1.00
Ti109	Ti	0.48927	0.48936	0.83871	0.00000	Uiso	1.00
Ti110	Ti	0.39099	0.61536	0.88821	0.00000	Uiso	1.00
Ti111	Ti	0.43569	0.62408	0.84196	0.00000	Uiso	1.00
Ti112	Ti	0.32954	0.50132	0.89927	0.00000	Uiso	1.00
O113	O	0.43867	0.49173	0.83410	0.00000	Uiso	1.00
O114	O	0.33938	0.62366	0.89128	0.00000	Uiso	1.00
O115	O	0.38576	0.62436	0.84957	0.00000	Uiso	1.00
O116	O	0.27982	0.52774	0.91083	0.00000	Uiso	1.00
O117	O	0.37810	0.49443	0.88506	0.00000	Uiso	1.00
O118	O	0.48489	0.62302	0.83264	0.00000	Uiso	1.00
O119	O	0.44099	0.58850	0.87970	0.00000	Uiso	1.00
O120	O	0.30776	0.48019	0.86235	0.00000	Uiso	1.00
Ti121	Ti	0.52045	0.74512	0.90764	0.00000	Uiso	1.00
Ti122	Ti	0.41429	0.86978	0.96088	0.00000	Uiso	1.00
Ti123	Ti	0.46450	0.87747	0.91743	0.00000	Uiso	1.00
Ti124	Ti	0.35582	0.75125	0.97502	0.00000	Uiso	1.00
O125	O	0.46583	0.75021	0.90766	0.00000	Uiso	1.00

O126	O	0.37584	0.87495	0.98663	0.00000	Uiso	1.00
O127	O	0.41508	0.90331	0.92459	0.00000	Uiso	1.00
O128	O	0.30565	0.77412	0.98448	0.00000	Uiso	1.00
O129	O	0.39368	0.75219	0.94865	0.00000	Uiso	1.00
O130	O	0.51844	0.87226	0.91503	0.00000	Uiso	1.00
O131	O	0.46525	0.85363	0.95801	0.00000	Uiso	1.00
O132	O	0.33630	0.71748	0.94013	0.00000	Uiso	1.00
Ti133	Ti	0.48946	0.74948	0.84579	0.00000	Uiso	1.00
Ti134	Ti	0.39110	0.87912	0.89164	0.00000	Uiso	1.00
Ti135	Ti	0.43284	0.86818	0.84202	0.00000	Uiso	1.00
Ti136	Ti	0.33502	0.74400	0.90141	0.00000	Uiso	1.00
O137	O	0.44108	0.74640	0.85610	0.00000	Uiso	1.00
O138	O	0.34049	0.87372	0.90792	0.00000	Uiso	1.00
O139	O	0.38251	0.86481	0.85322	0.00000	Uiso	1.00
O140	O	0.28510	0.71614	0.91033	0.00000	Uiso	1.00
O141	O	0.38924	0.74751	0.89594	0.00000	Uiso	1.00
O142	O	0.48023	0.86938	0.82837	0.00000	Uiso	1.00
O143	O	0.44189	0.90106	0.88026	0.00000	Uiso	1.00
O144	O	0.31363	0.76844	0.86499	0.00000	Uiso	1.00
Ti145	Ti	0.28886	0.50060	0.94853	0.00000	Uiso	1.00
Ti146	Ti	0.13452	0.62384	0.85178	0.00000	Uiso	1.00
Ti147	Ti	0.22642	0.61962	0.94976	0.00000	Uiso	1.00
Ti148	Ti	0.07536	0.49761	0.85922	0.00000	Uiso	1.00
O149	O	0.24202	0.49254	0.96117	0.00000	Uiso	1.00
O150	O	0.08572	0.62336	0.84179	0.00000	Uiso	1.00
O151	O	0.17563	0.60804	0.96105	0.00000	Uiso	1.00
O152	O	0.02652	0.52817	0.86743	0.00000	Uiso	1.00
O153	O	0.12440	0.49828	0.86730	0.00000	Uiso	1.00
O154	O	0.27866	0.62243	0.95951	0.00000	Uiso	1.00
O155	O	0.18194	0.64773	0.83706	0.00000	Uiso	1.00
O156	O	0.11629	0.52538	0.96777	0.00000	Uiso	1.00
Ti157	Ti	0.25827	0.49917	0.87502	0.00000	Uiso	1.00
Ti158	Ti	0.15595	0.61985	0.92235	0.00000	Uiso	1.00
Ti159	Ti	0.20160	0.63018	0.87471	0.00000	Uiso	1.00
Ti160	Ti	0.09719	0.49871	0.93183	0.00000	Uiso	1.00
O161	O	0.20439	0.49944	0.86697	0.00000	Uiso	1.00
O162	O	0.10204	0.62598	0.92340	0.00000	Uiso	1.00
O163	O	0.15443	0.64650	0.88543	0.00000	Uiso	1.00
O164	O	0.04555	0.49017	0.94444	0.00000	Uiso	1.00
O165	O	0.14549	0.49902	0.91645	0.00000	Uiso	1.00
O166	O	0.24926	0.62629	0.86119	0.00000	Uiso	1.00
O167	O	0.20725	0.59896	0.91318	0.00000	Uiso	1.00
O168	O	0.07077	0.47167	0.89838	0.00000	Uiso	1.00
Ti169	Ti	0.28810	0.74506	0.94804	0.00000	Uiso	1.00
Ti170	Ti	0.13286	0.87036	0.85195	0.00000	Uiso	1.00
Ti171	Ti	0.23049	0.87570	0.94343	0.00000	Uiso	1.00
Ti172	Ti	0.07352	0.74737	0.85922	0.00000	Uiso	1.00
O173	O	0.23909	0.75173	0.95703	0.00000	Uiso	1.00
O174	O	0.08311	0.87164	0.84048	0.00000	Uiso	1.00
O175	O	0.18262	0.89099	0.96048	0.00000	Uiso	1.00
O176	O	0.02431	0.72262	0.86929	0.00000	Uiso	1.00

O177	O	0.12102	0.74585	0.86813	0.00000	Uiso	1.00
O178	O	0.28325	0.87337	0.93480	0.00000	Uiso	1.00
O179	O	0.18055	0.84782	0.83757	0.00000	Uiso	1.00
O180	O	0.11620	0.72390	0.97118	0.00000	Uiso	1.00
Ti181	Ti	0.26291	0.74930	0.87684	0.00000	Uiso	1.00
Ti182	Ti	0.15768	0.88057	0.92493	0.00000	Uiso	1.00
Ti183	Ti	0.19957	0.86878	0.87512	0.00000	Uiso	1.00
Ti184	Ti	0.10057	0.75075	0.93394	0.00000	Uiso	1.00
O185	O	0.21219	0.74988	0.88755	0.00000	Uiso	1.00
O186	O	0.10889	0.87494	0.94066	0.00000	Uiso	1.00
O187	O	0.15089	0.85433	0.88731	0.00000	Uiso	1.00
O188	O	0.04891	0.76087	0.94577	0.00000	Uiso	1.00
O189	O	0.15430	0.74957	0.92786	0.00000	Uiso	1.00
O190	O	0.24748	0.87242	0.86399	0.00000	Uiso	1.00
O191	O	0.20562	0.90395	0.91131	0.00000	Uiso	1.00
O192	O	0.07446	0.77614	0.89858	0.00000	Uiso	1.00
Ti193	Ti	-0.00693	0.00280	0.83872	0.00000	Uiso	1.00
Ti194	Ti	0.89088	0.12854	0.88920	0.00000	Uiso	1.00
Ti195	Ti	0.93662	0.12188	0.84637	0.00000	Uiso	1.00
Ti196	Ti	0.83360	0.00397	0.90226	0.00000	Uiso	1.00
O197	O	0.95198	0.00142	0.86061	0.00000	Uiso	1.00
O198	O	0.83915	0.12268	0.89151	0.00000	Uiso	1.00
O199	O	0.88669	0.10872	0.84899	0.00000	Uiso	1.00
O200	O	0.78410	0.03575	0.91199	0.00000	Uiso	1.00
O201	O	0.88783	-0.00130	0.89815	0.00000	Uiso	1.00
O202	O	0.97719	0.12577	0.82250	0.00000	Uiso	1.00
O203	O	0.94166	0.15323	0.88330	0.00000	Uiso	1.00
O204	O	0.80878	-0.02082	0.86685	0.00000	Uiso	1.00
Ti205	Ti	0.02089	-0.00366	0.90683	0.00000	Uiso	1.00
Ti206	Ti	0.91302	0.12056	0.96186	0.00000	Uiso	1.00
Ti207	Ti	0.96444	0.12839	0.91885	0.00000	Uiso	1.00
Ti208	Ti	0.85606	-0.00116	0.97563	0.00000	Uiso	1.00
O209	O	0.96626	0.00085	0.91025	0.00000	Uiso	1.00
O210	O	0.87410	0.12461	0.98915	0.00000	Uiso	1.00
O211	O	0.91315	0.15225	0.92460	0.00000	Uiso	1.00
O212	O	0.80615	-0.02705	0.98508	0.00000	Uiso	1.00
O213	O	0.89447	-0.00132	0.94978	0.00000	Uiso	1.00
O214	O	0.01872	0.12297	0.91543	0.00000	Uiso	1.00
O215	O	0.96433	0.10762	0.95977	0.00000	Uiso	1.00
O216	O	0.83618	0.03096	0.94069	0.00000	Uiso	1.00
Ti217	Ti	-0.00851	0.25017	0.83939	0.00000	Uiso	1.00
Ti218	Ti	0.88880	0.36975	0.89266	0.00000	Uiso	1.00
Ti219	Ti	0.93450	0.38172	0.84635	0.00000	Uiso	1.00
Ti220	Ti	0.82944	0.24483	0.89913	0.00000	Uiso	1.00
O221	O	0.94807	0.25183	0.85783	0.00000	Uiso	1.00
O222	O	0.83816	0.37437	0.90834	0.00000	Uiso	1.00
O223	O	0.88305	0.39354	0.85248	0.00000	Uiso	1.00
O224	O	0.77970	0.21854	0.91111	0.00000	Uiso	1.00
O225	O	0.87795	0.25080	0.88462	0.00000	Uiso	1.00
O226	O	0.97804	0.37733	0.82456	0.00000	Uiso	1.00
O227	O	0.93778	0.34460	0.88233	0.00000	Uiso	1.00

O228	O	0.80839	0.26218	0.86171	0.00000	Uiso	1.00
Ti229	Ti	0.02519	0.25264	0.90926	0.00000	Uiso	1.00
Ti230	Ti	0.91557	0.38117	0.96193	0.00000	Uiso	1.00
Ti231	Ti	0.96227	0.36960	0.91607	0.00000	Uiso	1.00
Ti232	Ti	0.85715	0.25111	0.97443	0.00000	Uiso	1.00
O233	O	0.97588	0.24927	0.92402	0.00000	Uiso	1.00
O234	O	0.87644	0.37563	0.98735	0.00000	Uiso	1.00
O235	O	0.91329	0.34303	0.92621	0.00000	Uiso	1.00
O236	O	0.80805	0.27833	0.98473	0.00000	Uiso	1.00
O237	O	0.89880	0.25225	0.95294	0.00000	Uiso	1.00
O238	O	0.01157	0.37411	0.90086	0.00000	Uiso	1.00
O239	O	0.96728	0.39306	0.95637	0.00000	Uiso	1.00
O240	O	0.83659	0.22372	0.93821	0.00000	Uiso	1.00
Ti241	Ti	0.75845	-0.00272	0.88089	0.00000	Uiso	1.00
Ti242	Ti	0.65717	0.12760	0.92697	0.00000	Uiso	1.00
Ti243	Ti	0.69826	0.12364	0.87676	0.00000	Uiso	1.00
Ti244	Ti	0.59899	-0.00101	0.93167	0.00000	Uiso	1.00
O245	O	0.70556	-0.00465	0.89048	0.00000	Uiso	1.00
O246	O	0.60763	0.12119	0.94138	0.00000	Uiso	1.00
O247	O	0.65039	0.15381	0.88920	0.00000	Uiso	1.00
O248	O	0.54868	0.00723	0.94675	0.00000	Uiso	1.00
O249	O	0.64954	-0.00088	0.91563	0.00000	Uiso	1.00
O250	O	0.74607	0.11559	0.86310	0.00000	Uiso	1.00
O251	O	0.70716	0.15419	0.91453	0.00000	Uiso	1.00
O252	O	0.57092	0.02716	0.89846	0.00000	Uiso	1.00
Ti253	Ti	0.78838	0.00373	0.94889	0.00000	Uiso	1.00
Ti254	Ti	0.62985	0.11452	0.85622	0.00000	Uiso	1.00
Ti255	Ti	0.72770	0.12667	0.95041	0.00000	Uiso	1.00
Ti256	Ti	0.56960	-0.00436	0.86000	0.00000	Uiso	1.00
O257	O	0.74047	-0.00332	0.95770	0.00000	Uiso	1.00
O258	O	0.58117	0.12013	0.84216	0.00000	Uiso	1.00
O259	O	0.67903	0.10841	0.96410	0.00000	Uiso	1.00
O260	O	0.51955	-0.02372	0.87075	0.00000	Uiso	1.00
O261	O	0.61636	-0.00556	0.87340	0.00000	Uiso	1.00
O262	O	0.77954	0.12633	0.96080	0.00000	Uiso	1.00
O263	O	0.67675	0.09431	0.84060	0.00000	Uiso	1.00
O264	O	0.61948	-0.02954	0.96694	0.00000	Uiso	1.00
Ti265	Ti	0.75941	0.24539	0.87487	0.00000	Uiso	1.00
Ti266	Ti	0.65416	0.36838	0.92308	0.00000	Uiso	1.00
Ti267	Ti	0.69884	0.36762	0.87635	0.00000	Uiso	1.00
Ti268	Ti	0.59498	0.24751	0.93629	0.00000	Uiso	1.00
O269	O	0.70780	0.24572	0.86442	0.00000	Uiso	1.00
O270	O	0.60026	0.37325	0.92367	0.00000	Uiso	1.00
O271	O	0.65189	0.33513	0.88634	0.00000	Uiso	1.00
O272	O	0.54188	0.23578	0.94520	0.00000	Uiso	1.00
O273	O	0.64731	0.24956	0.93427	0.00000	Uiso	1.00
O274	O	0.74677	0.37557	0.86672	0.00000	Uiso	1.00
O275	O	0.70380	0.33523	0.91320	0.00000	Uiso	1.00
O276	O	0.57084	0.22065	0.90058	0.00000	Uiso	1.00
Ti277	Ti	0.78834	0.24924	0.94887	0.00000	Uiso	1.00
Ti278	Ti	0.63152	0.37864	0.85502	0.00000	Uiso	1.00

Ti279	Ti	0.72917	0.37475	0.94392	0.00000	Uiso	1.00
Ti280	Ti	0.57330	0.24591	0.86075	0.00000	Uiso	1.00
O281	O	0.74065	0.25663	0.96197	0.00000	Uiso	1.00
O282	O	0.58370	0.37081	0.84295	0.00000	Uiso	1.00
O283	O	0.67982	0.39465	0.95812	0.00000	Uiso	1.00
O284	O	0.52526	0.27887	0.86898	0.00000	Uiso	1.00
O285	O	0.62122	0.24805	0.86842	0.00000	Uiso	1.00
O286	O	0.78198	0.37655	0.93492	0.00000	Uiso	1.00
O287	O	0.67901	0.39911	0.83992	0.00000	Uiso	1.00
O288	O	0.60774	0.27573	0.97421	0.00000	Uiso	1.00
Ti289	Ti	0.52320	0.00267	0.91035	0.00000	Uiso	1.00
Ti290	Ti	0.41327	0.13138	0.96129	0.00000	Uiso	1.00
Ti291	Ti	0.46041	0.11891	0.91590	0.00000	Uiso	1.00
Ti292	Ti	0.35727	0.00018	0.97401	0.00000	Uiso	1.00
O293	O	0.47428	-0.00182	0.92477	0.00000	Uiso	1.00
O294	O	0.37461	0.12607	0.98894	0.00000	Uiso	1.00
O295	O	0.41021	0.09408	0.92462	0.00000	Uiso	1.00
O296	O	0.30834	-0.02656	0.98435	0.00000	Uiso	1.00
O297	O	0.39869	-0.00042	0.95226	0.00000	Uiso	1.00
O298	O	0.51013	0.12363	0.90215	0.00000	Uiso	1.00
O299	O	0.46479	0.14376	0.95615	0.00000	Uiso	1.00
O300	O	0.33710	0.02669	0.93763	0.00000	Uiso	1.00
Ti301	Ti	0.48793	-0.00064	0.83933	0.00000	Uiso	1.00
Ti302	Ti	0.39027	0.11943	0.88856	0.00000	Uiso	1.00
Ti303	Ti	0.43473	0.13188	0.84484	0.00000	Uiso	1.00
Ti304	Ti	0.32982	0.00256	0.89873	0.00000	Uiso	1.00
O305	O	0.43704	0.00063	0.83563	0.00000	Uiso	1.00
O306	O	0.33882	0.12558	0.89138	0.00000	Uiso	1.00
O307	O	0.38513	0.14603	0.84906	0.00000	Uiso	1.00
O308	O	0.28004	0.02775	0.91058	0.00000	Uiso	1.00
O309	O	0.37844	-0.00190	0.88394	0.00000	Uiso	1.00
O310	O	0.47972	0.12790	0.82558	0.00000	Uiso	1.00
O311	O	0.43983	0.08896	0.88074	0.00000	Uiso	1.00
O312	O	0.30780	-0.01761	0.86185	0.00000	Uiso	1.00
Ti313	Ti	0.52029	0.24561	0.90764	0.00000	Uiso	1.00
Ti314	Ti	0.41403	0.37008	0.96185	0.00000	Uiso	1.00
Ti315	Ti	0.46435	0.37843	0.91875	0.00000	Uiso	1.00
Ti316	Ti	0.35547	0.25087	0.97565	0.00000	Uiso	1.00
O317	O	0.46561	0.25079	0.90989	0.00000	Uiso	1.00
O318	O	0.37528	0.37539	0.98722	0.00000	Uiso	1.00
O319	O	0.41462	0.40564	0.92577	0.00000	Uiso	1.00
O320	O	0.30524	0.27339	0.98512	0.00000	Uiso	1.00
O321	O	0.39359	0.25252	0.94958	0.00000	Uiso	1.00
O322	O	0.51837	0.37236	0.91609	0.00000	Uiso	1.00
O323	O	0.46498	0.35521	0.95937	0.00000	Uiso	1.00
O324	O	0.33569	0.21621	0.94093	0.00000	Uiso	1.00
Ti325	Ti	0.49257	0.24890	0.84114	0.00000	Uiso	1.00
Ti326	Ti	0.38985	0.37722	0.89321	0.00000	Uiso	1.00
Ti327	Ti	0.43241	0.36296	0.84694	0.00000	Uiso	1.00
Ti328	Ti	0.33451	0.24423	0.90250	0.00000	Uiso	1.00
O329	O	0.45049	0.24648	0.86113	0.00000	Uiso	1.00

O330	O	0.33946	0.37281	0.90939	0.00000	Uiso	1.00
O331	O	0.38187	0.35098	0.85399	0.00000	Uiso	1.00
O332	O	0.28456	0.21599	0.91088	0.00000	Uiso	1.00
O333	O	0.38887	0.24808	0.89870	0.00000	Uiso	1.00
O334	O	0.47526	0.36411	0.82442	0.00000	Uiso	1.00
O335	O	0.43998	0.40553	0.88289	0.00000	Uiso	1.00
O336	O	0.31364	0.26997	0.86593	0.00000	Uiso	1.00
Ti337	Ti	0.28901	0.00026	0.94826	0.00000	Uiso	1.00
Ti338	Ti	0.13451	0.12391	0.85178	0.00000	Uiso	1.00
Ti339	Ti	0.22630	0.11922	0.94984	0.00000	Uiso	1.00
Ti340	Ti	0.07536	-0.00239	0.85919	0.00000	Uiso	1.00
O341	O	0.24217	-0.00798	0.96093	0.00000	Uiso	1.00
O342	O	0.08572	0.12342	0.84179	0.00000	Uiso	1.00
O343	O	0.17552	0.10738	0.96108	0.00000	Uiso	1.00
O344	O	0.02653	0.02818	0.86741	0.00000	Uiso	1.00
O345	O	0.12442	-0.00175	0.86724	0.00000	Uiso	1.00
O346	O	0.27845	0.12175	0.95976	0.00000	Uiso	1.00
O347	O	0.18193	0.14819	0.83711	0.00000	Uiso	1.00
O348	O	0.11628	0.02516	0.96775	0.00000	Uiso	1.00
Ti349	Ti	0.25834	-0.00051	0.87481	0.00000	Uiso	1.00
Ti350	Ti	0.15592	0.11975	0.92238	0.00000	Uiso	1.00
Ti351	Ti	0.20156	0.13034	0.87475	0.00000	Uiso	1.00
Ti352	Ti	0.09719	-0.00139	0.93180	0.00000	Uiso	1.00
O353	O	0.20445	-0.00034	0.86681	0.00000	Uiso	1.00
O354	O	0.10200	0.12592	0.92345	0.00000	Uiso	1.00
O355	O	0.15437	0.14649	0.88546	0.00000	Uiso	1.00
O356	O	0.04556	-0.01002	0.94443	0.00000	Uiso	1.00
O357	O	0.14547	-0.00097	0.91637	0.00000	Uiso	1.00
O358	O	0.24926	0.12690	0.86126	0.00000	Uiso	1.00
O359	O	0.20721	0.09891	0.91322	0.00000	Uiso	1.00
O360	O	0.07077	-0.02833	0.89835	0.00000	Uiso	1.00
Ti361	Ti	0.28767	0.24458	0.94863	0.00000	Uiso	1.00
Ti362	Ti	0.13284	0.37035	0.85205	0.00000	Uiso	1.00
Ti363	Ti	0.23026	0.37575	0.94382	0.00000	Uiso	1.00
Ti364	Ti	0.07350	0.24737	0.85925	0.00000	Uiso	1.00
O365	O	0.23866	0.25146	0.95746	0.00000	Uiso	1.00
O366	O	0.08311	0.37164	0.84052	0.00000	Uiso	1.00
O367	O	0.18234	0.39121	0.96070	0.00000	Uiso	1.00
O368	O	0.02429	0.22264	0.86930	0.00000	Uiso	1.00
O369	O	0.12099	0.24582	0.86818	0.00000	Uiso	1.00
O370	O	0.28299	0.37317	0.93549	0.00000	Uiso	1.00
O371	O	0.18054	0.34779	0.83772	0.00000	Uiso	1.00
O372	O	0.11609	0.22386	0.97126	0.00000	Uiso	1.00
Ti373	Ti	0.26278	0.24955	0.87724	0.00000	Uiso	1.00
Ti374	Ti	0.15762	0.38053	0.92507	0.00000	Uiso	1.00
Ti375	Ti	0.19947	0.36871	0.87529	0.00000	Uiso	1.00
Ti376	Ti	0.10052	0.25071	0.93401	0.00000	Uiso	1.00
O377	O	0.21203	0.24992	0.88777	0.00000	Uiso	1.00
O378	O	0.10881	0.37498	0.94073	0.00000	Uiso	1.00
O379	O	0.15079	0.35437	0.88744	0.00000	Uiso	1.00
O380	O	0.04885	0.26084	0.94580	0.00000	Uiso	1.00

O381	O	0.15426	0.24950	0.92802	0.00000	Uiso	1.00
O382	O	0.24736	0.37226	0.86415	0.00000	Uiso	1.00
O383	O	0.20559	0.40375	0.91153	0.00000	Uiso	1.00
O384	O	0.07445	0.27608	0.89862	0.00000	Uiso	1.00
C385	C	-0.61686	-0.38008	0.51593	0.00000	Uiso	1.00
C386	C	-0.60832	-0.35971	0.53971	0.00000	Uiso	1.00
C387	C	-0.59916	-0.33782	0.56575	0.00000	Uiso	1.00
C388	C	-0.59110	-0.31764	0.58962	0.00000	Uiso	1.00
C389	C	-0.58278	-0.29487	0.61577	0.00000	Uiso	1.00
C390	C	-0.57581	-0.27278	0.63973	0.00000	Uiso	1.00
C391	C	-0.56899	-0.24599	0.66643	0.00000	Uiso	1.00
C392	C	-0.57122	-0.16224	0.67429	0.00000	Uiso	1.00
S393	S	-0.55997	-0.32121	0.69486	0.00000	Uiso	1.00
C394	C	-0.56657	-0.14989	0.70273	0.00000	Uiso	1.00
H395	H	-0.57723	-0.10856	0.65999	0.00000	Uiso	1.00
C396	C	-0.56065	-0.22397	0.71715	0.00000	Uiso	1.00
H397	H	-0.56871	-0.08518	0.71241	0.00000	Uiso	1.00
C398	C	-0.55898	-0.22295	0.74639	0.00000	Uiso	1.00
H399	H	-0.56468	-0.15995	0.75626	0.00000	Uiso	1.00
C400	C	-0.55272	-0.29155	0.76389	0.00000	Uiso	1.00
C401	C	-0.54189	-0.37341	0.75557	0.00000	Uiso	1.00
P402	P	-0.56023	-0.27557	0.80182	0.00000	Uiso	1.00
O403	O	-0.57531	-0.16909	0.80868	0.00000	Uiso	1.00
O404	O	-0.58954	-0.35239	0.81414	0.00000	Uiso	1.00
N405	N	-0.53246	-0.44372	0.74919	0.00000	Uiso	1.00
C406	C	-0.64463	-0.45363	0.44067	0.00000	Uiso	1.00
C407	C	-0.64380	-0.53648	0.43160	0.00000	Uiso	1.00
S408	S	-0.65992	-0.37527	0.41499	0.00000	Uiso	1.00
C409	C	-0.65472	-0.54574	0.40416	0.00000	Uiso	1.00
H410	H	-0.63550	-0.59183	0.44443	0.00000	Uiso	1.00
C411	C	-0.66370	-0.47002	0.39199	0.00000	Uiso	1.00
H412	H	-0.65585	-0.60909	0.39359	0.00000	Uiso	1.00
H413	H	-0.68113	-0.52639	0.35487	0.00000	Uiso	1.00
C414	C	-0.68411	-0.38722	0.35056	0.00000	Uiso	1.00
C415	C	-0.70730	-0.38093	0.33023	0.00000	Uiso	1.00
C416	C	-0.70375	-0.29735	0.31858	0.00000	Uiso	1.00
H417	H	-0.72499	-0.43223	0.32363	0.00000	Uiso	1.00
C418	C	-0.67803	-0.25630	0.33173	0.00000	Uiso	1.00
H419	H	-0.71877	-0.27056	0.30137	0.00000	Uiso	1.00
H420	H	-0.66884	-0.19024	0.32691	0.00000	Uiso	1.00
N421	N	-0.67606	-0.46701	0.36529	0.00000	Uiso	1.00
N422	N	-0.66428	-0.30868	0.35171	0.00000	Uiso	1.00
H423	H	-0.64319	-0.29509	0.36464	0.00000	Uiso	1.00
O424	O	0.47320	0.70801	0.81840	0.00000	Uiso	1.00
C425	C	0.37378	0.59763	0.48989	0.00000	Uiso	1.00
C426	C	0.36526	0.57733	0.46618	0.00000	Uiso	1.00
H427	H	0.35992	0.83607	0.84083	0.00000	Uiso	1.00
H428	H	0.36243	0.63196	0.83511	0.00000	Uiso	1.00

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

```

_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_ccdc_geom_bond_type
Ti1 O5 1.900 1_455 S
Ti1 O10 2.103 1_455 S
Ti1 O152 1.919 . S
Ti1 O226 2.093 1_455 S
Ti2 O6 2.006 . S
Ti2 O11 2.019 . S
Ti2 O9 2.010 . S
Ti2 O19 1.924 . S
Ti2 O7 1.941 . S
Ti2 O33 1.925 . S
Ti3 O7 1.946 . S
Ti3 O10 1.938 . S
Ti3 O5 2.030 . S
Ti3 O29 2.085 . S
Ti3 O11 1.828 . S
Ti4 O8 2.028 . S
Ti4 O9 2.109 . S
Ti4 O24 1.874 . S
Ti4 O6 1.877 . S
Ti4 O222 1.987 . S
Ti4 O12 1.973 . S
O5 Ti1 1.900 1_655 S
O5 Ti219 2.046 . S
O6 Ti28 1.917 . S
O8 Ti61 1.827 . S
O8 Ti49 1.872 . S
O9 Ti218 1.966 . S
O10 Ti1 2.103 1_655 S
O10 Ti25 2.117 1_655 S
O11 Ti15 1.942 . S
O12 Ti49 2.076 . S
Ti13 O17 2.121 1_455 S
Ti13 O168 2.006 . S
Ti13 O22 1.957 . S
Ti13 O152 1.946 . S
Ti13 O164 2.028 . S
Ti13 O238 1.903 . S
Ti14 O18 1.988 . S
Ti14 O23 1.997 . S
Ti14 O21 2.057 . S
Ti14 O19 1.834 . S
Ti14 O45 2.107 . S
Ti15 O19 2.035 . S
Ti15 O22 2.108 1_655 S
Ti15 O17 1.971 . S
Ti15 O41 1.895 . S
Ti15 O23 1.970 . S
Ti16 O20 2.021 . S

```

Ti16	O21	1.928	.	S
Ti16	O18	2.123	.	S
Ti16	O234	2.097	.	S
Ti16	O24	1.893	.	S
O17	Ti13	2.121	1_655	S
O17	Ti231	2.008	.	S
O18	Ti40	2.138	.	S
O20	Ti61	1.909	.	S
O21	Ti230	2.037	.	S
O22	Ti15	2.108	1_455	S
O22	Ti37	1.996	.	S
O24	Ti61	1.934	.	S
Ti25	O29	1.895	1_455	S
Ti25	O34	2.111	1_455	S
Ti25	O176	1.950	.	S
Ti25	O10	2.117	1_455	S
Ti26	O30	2.097	.	S
Ti26	O35	1.994	.	S
Ti26	O33	1.884	.	S
Ti26	O43	1.898	.	S
Ti26	O31	1.956	.	S
Ti26	O201	1.966	1_565	S
Ti27	O31	2.020	.	S
Ti27	O34	1.978	.	S
Ti27	O29	2.103	.	S
Ti27	O197	2.046	1_565	S
Ti27	O35	1.804	.	S
Ti28	O32	2.046	.	S
Ti28	O33	2.002	.	S
Ti28	O48	1.905	.	S
Ti28	O30	2.033	.	S
Ti28	O36	1.974	.	S
O29	Ti25	1.895	1_655	S
O30	Ti196	1.987	1_565	S
O32	Ti85	1.884	.	S
O32	Ti73	1.936	.	S
O34	Ti25	2.111	1_655	S
O34	Ti193	2.093	1_665	S
O35	Ti39	1.900	.	S
O36	Ti73	2.012	.	S
Ti37	O41	2.033	1_455	S
Ti37	O192	2.003	.	S
Ti37	O46	1.950	.	S
Ti37	O176	1.952	.	S
Ti37	O188	1.967	.	S
Ti38	O42	1.939	.	S
Ti38	O47	2.026	.	S
Ti38	O45	2.096	.	S
Ti38	O43	1.795	.	S
Ti38	O213	2.037	1_565	S
Ti39	O43	1.996	.	S

Ti39	O46	2.041	1_655	S
Ti39	O41	1.929	.	S
Ti39	O209	2.008	1_565	S
Ti39	O47	1.957	.	S
Ti40	O44	2.005	.	S
Ti40	O45	1.908	.	S
Ti40	O42	2.114	.	S
Ti40	O48	1.941	.	S
O41	Ti37	2.033	1_655	S
O42	Ti208	2.097	1_565	S
O44	Ti85	1.918	.	S
O46	Ti39	2.041	1_455	S
O46	Ti205	1.903	1_565	S
O48	Ti85	1.972	.	S
Ti49	O53	2.096	.	S
Ti49	O58	2.035	.	S
Ti49	O274	2.011	.	S
Ti50	O54	2.035	.	S
Ti50	O59	2.062	.	S
Ti50	O57	2.036	.	S
Ti50	O67	1.977	.	S
Ti50	O55	1.855	.	S
Ti50	O81	1.913	.	S
Ti51	O55	1.997	.	S
Ti51	O58	1.965	.	S
Ti51	O71	1.962	.	S
Ti51	O53	2.065	.	S
Ti51	O77	1.970	.	S
Ti51	O59	1.886	.	S
Ti52	O56	2.074	.	S
Ti52	O57	2.098	.	S
Ti52	O72	1.903	.	S
Ti52	O54	1.930	.	S
Ti52	O270	1.938	.	S
Ti52	O60	1.963	.	S
O53	Ti267	2.059	.	S
O54	Ti76	1.983	.	S
O55	Ti62	1.857	.	S
O56	Ti97	1.993	.	S
O57	Ti266	2.014	.	S
O58	Ti73	2.103	.	S
O59	Ti63	1.927	.	S
O60	Ti97	1.965	.	S
O60	Ti64	1.884	.	S
Ti61	O65	1.903	.	S
Ti61	O70	1.966	.	S
Ti61	O286	2.048	.	S
Ti62	O66	2.007	.	S
Ti62	O71	1.987	.	S
Ti62	O69	2.059	.	S
Ti62	O93	2.127	.	S

Ti63	O67	2.011	.	S
Ti63	O70	2.065	.	S
Ti63	O65	2.054	.	S
Ti63	O89	2.099	.	S
Ti64	O68	2.030	.	S
Ti64	O69	1.918	.	S
Ti64	O66	2.117	.	S
Ti64	O282	2.098	.	S
O65	Ti279	2.003	.	S
O66	Ti88	2.125	.	S
O68	Ti97	1.950	.	S
O68	Ti109	1.967	.	S
O69	Ti278	2.032	.	S
O70	Ti85	1.970	.	S
Ti73	O77	2.059	.	S
Ti73	O82	2.063	.	S
Ti74	O78	2.087	.	S
Ti74	O83	2.040	.	S
Ti74	O81	1.890	.	S
Ti74	O91	1.979	.	S
Ti74	O79	1.818	.	S
Ti74	O249	2.014	1_565	S
Ti75	O79	1.940	.	S
Ti75	O82	1.915	.	S
Ti75	O95	1.954	.	S
Ti75	O77	1.958	.	S
Ti75	O245	2.060	1_565	S
Ti75	O83	1.828	.	S
Ti76	O80	2.103	.	S
Ti76	O81	2.027	.	S
Ti76	O96	1.917	.	S
Ti76	O78	2.003	.	S
Ti76	O84	1.978	.	S
O78	Ti244	1.939	1_565	S
O79	Ti86	1.810	.	S
O80	Ti121	1.973	.	S
O82	Ti241	2.012	1_565	S
O83	Ti87	1.859	.	S
O84	Ti121	2.014	.	S
O84	Ti88	1.930	.	S
Ti85	O89	1.951	.	S
Ti85	O94	2.049	.	S
Ti86	O90	1.945	.	S
Ti86	O95	1.999	.	S
Ti86	O93	2.112	.	S
Ti86	O261	2.035	1_565	S
Ti87	O91	2.047	.	S
Ti87	O94	2.087	.	S
Ti87	O89	2.029	.	S
Ti87	O257	2.003	1_565	S
Ti88	O92	1.975	.	S

Ti88	O93	1.893	.	S
Ti88	O90	2.112	.	S
O90	Ti256	2.104	1_565	S
O92	Ti121	1.856	.	S
O92	Ti133	1.860	.	S
O94	Ti253	2.048	1_565	S
Ti97	O101	2.013	.	S
Ti97	O106	1.944	.	S
Ti97	O322	1.981	.	S
Ti98	O102	1.995	.	S
Ti98	O107	2.024	.	S
Ti98	O105	2.116	.	S
Ti98	O103	1.827	.	S
Ti98	O129	2.061	.	S
Ti99	O103	2.009	.	S
Ti99	O106	2.029	.	S
Ti99	O119	1.910	.	S
Ti99	O101	1.948	.	S
Ti99	O125	2.019	.	S
Ti99	O107	1.958	.	S
Ti100	O104	1.998	.	S
Ti100	O105	1.908	.	S
Ti100	O102	2.138	.	S
Ti100	O318	2.113	.	S
Ti100	O108	1.936	.	S
O101	Ti315	1.890	.	S
O102	Ti124	2.116	.	S
O103	Ti110	1.900	.	S
O104	Ti145	1.915	.	S
O105	Ti314	2.090	.	S
O106	Ti121	1.909	.	S
O108	Ti145	1.967	.	S
O108	Ti112	1.898	.	S
Ti109	O113	1.970	.	S
Ti109	O118	2.046	.	S
Ti109	O334	2.082	.	S
Ti110	O114	2.006	.	S
Ti110	O119	2.017	.	S
Ti110	O117	1.899	.	S
Ti110	O141	2.031	.	S
Ti110	O115	1.852	.	S
Ti111	O115	1.966	.	S
Ti111	O118	1.954	.	S
Ti111	O113	2.037	.	S
Ti111	O137	1.977	.	S
Ti111	O119	1.883	.	S
Ti111	O404	1.681	1_665	S
Ti112	O116	2.040	.	S
Ti112	O117	1.999	.	S
Ti112	O114	1.924	.	S
Ti112	O330	2.036	.	S

Ti112	O120	1.972	.	S
O113	Ti327	2.053	.	S
O114	Ti136	1.888	.	S
O115	H428	1.140	.	S
O116	Ti145	1.871	.	S
O116	Ti157	1.944	.	S
O117	Ti326	1.868	.	S
O118	Ti133	2.018	.	S
O120	Ti157	2.028	.	S
Ti121	O125	2.115	.	S
Ti121	O130	1.954	.	S
Ti122	O126	1.928	.	S
Ti122	O131	1.991	.	S
Ti122	O129	2.032	.	S
Ti122	O127	1.797	.	S
Ti122	O297	2.092	1_565	S
Ti123	O127	1.981	.	S
Ti123	O130	2.091	.	S
Ti123	O143	2.003	.	S
Ti123	O125	1.978	.	S
Ti123	O293	1.894	1_565	S
Ti123	O131	1.962	.	S
Ti124	O128	2.022	.	S
Ti124	O129	1.928	.	S
Ti124	O126	2.097	.	S
Ti124	O132	1.892	.	S
O126	Ti292	2.110	1_565	S
O127	Ti134	1.856	.	S
O128	Ti169	1.911	.	S
O130	Ti289	1.991	1_565	S
O132	Ti169	1.947	.	S
O132	Ti136	1.884	.	S
Ti133	O137	1.935	.	S
Ti133	O142	2.023	.	S
Ti134	O138	2.107	.	S
Ti134	O143	2.065	.	S
Ti134	O141	1.999	.	S
Ti134	O309	1.898	1_565	S
Ti134	O139	1.868	.	S
Ti135	O139	2.019	.	S
Ti135	O142	1.945	.	S
Ti135	O137	1.983	.	S
Ti135	O305	2.030	1_565	S
Ti135	O143	1.916	.	S
Ti135	O403	1.711	1_665	S
Ti136	O140	2.022	.	S
Ti136	O141	2.114	.	S
Ti136	O138	1.995	.	S
Ti136	O144	1.953	.	S
O138	Ti304	2.037	1_565	S
O139	H427	1.140	.	S

O140	Ti169	1.848	.	S
O140	Ti181	1.876	.	S
O142	Ti301	2.053	1_565	S
O144	Ti181	2.062	.	S
Ti145	O149	1.913	.	S
Ti145	O154	1.953	.	S
Ti145	O370	2.035	.	S
Ti146	O150	1.947	.	S
Ti146	O155	1.997	.	S
Ti146	O153	2.072	.	S
Ti146	O163	1.808	.	S
Ti146	O177	2.067	.	S
Ti147	O151	2.044	.	S
Ti147	O154	2.074	.	S
Ti147	O167	1.915	.	S
Ti147	O149	2.084	.	S
Ti147	O173	2.083	.	S
Ti148	O152	1.984	.	S
Ti148	O153	1.936	.	S
Ti148	O168	1.910	.	S
Ti148	O150	2.111	.	S
Ti148	O366	2.121	.	S
O149	Ti363	2.000	.	S
O150	Ti172	2.102	.	S
O151	Ti158	1.998	.	S
O153	Ti362	2.089	.	S
O154	Ti169	1.965	.	S
O155	Ti159	1.962	.	S
O156	Ti160	1.904	.	S
Ti157	O161	2.119	.	S
Ti157	O166	2.059	.	S
Ti157	O382	2.029	.	S
Ti158	O162	2.089	.	S
Ti158	O167	2.056	.	S
Ti158	O165	1.890	.	S
Ti158	O163	1.801	.	S
Ti158	O189	1.978	.	S
Ti159	O163	1.911	.	S
Ti159	O166	1.953	.	S
Ti159	O161	2.012	.	S
Ti159	O185	1.952	.	S
Ti159	O167	1.901	.	S
Ti160	O164	2.090	.	S
Ti160	O165	2.006	.	S
Ti160	O162	1.973	.	S
Ti160	O378	1.968	.	S
Ti160	O168	1.934	.	S
O161	Ti375	2.023	.	S
O162	Ti184	1.951	.	S
O165	Ti374	1.895	.	S
O166	Ti181	2.070	.	S

Ti169	O173	1.946	.	S
Ti169	O178	2.046	.	S
Ti170	O174	2.001	.	S
Ti170	O179	1.997	.	S
Ti170	O177	2.083	.	S
Ti170	O187	1.835	.	S
Ti170	O345	2.090	1_565	S
Ti171	O175	2.035	.	S
Ti171	O178	2.082	.	S
Ti171	O191	1.854	.	S
Ti171	O173	2.009	.	S
Ti171	O341	1.996	1_565	S
Ti172	O176	1.998	.	S
Ti172	O177	1.886	.	S
Ti172	O192	1.921	.	S
Ti172	O174	2.110	.	S
O174	Ti340	2.121	1_565	S
O175	Ti182	1.951	.	S
O178	Ti337	2.033	1_565	S
O179	Ti183	1.956	.	S
O180	Ti184	1.913	.	S
Ti181	O185	2.027	.	S
Ti181	O190	2.046	.	S
Ti182	O186	2.032	.	S
Ti182	O191	1.996	.	S
Ti182	O189	1.988	.	S
Ti182	O187	1.850	.	S
Ti182	O357	1.895	1_565	S
Ti183	O187	1.982	.	S
Ti183	O190	1.928	.	S
Ti183	O185	1.953	.	S
Ti183	O353	2.025	1_565	S
Ti183	O191	1.815	.	S
Ti184	O188	2.082	.	S
Ti184	O189	2.099	.	S
Ti184	O186	1.930	.	S
Ti184	O192	1.998	.	S
O186	Ti352	1.968	1_565	S
O190	Ti349	2.031	1_565	S
Ti193	O197	1.900	1_455	S
Ti193	O202	2.103	1_455	S
Ti193	O344	1.919	.	S
Ti193	O34	2.093	1_445	S
Ti194	O198	2.006	.	S
Ti194	O203	2.019	.	S
Ti194	O201	2.010	.	S
Ti194	O211	1.924	.	S
Ti194	O199	1.941	.	S
Ti194	O225	1.926	.	S
Ti195	O199	1.946	.	S
Ti195	O202	1.938	.	S

Ti195	O197	2.030	.	S
Ti195	O221	2.085	.	S
Ti195	O203	1.828	.	S
Ti196	O200	2.028	.	S
Ti196	O201	2.109	.	S
Ti196	O216	1.874	.	S
Ti196	O198	1.877	.	S
Ti196	O30	1.987	1_545	S
Ti196	O204	1.973	.	S
O197	Ti193	1.900	1_655	S
O197	Ti27	2.046	1_545	S
O198	Ti220	1.917	.	S
O200	Ti253	1.826	.	S
O200	Ti241	1.872	.	S
O201	Ti26	1.966	1_545	S
O202	Ti193	2.103	1_655	S
O202	Ti217	2.117	1_655	S
O203	Ti207	1.942	.	S
O204	Ti241	2.076	.	S
Ti205	O209	2.121	1_455	S
Ti205	O360	2.006	.	S
Ti205	O214	1.958	.	S
Ti205	O344	1.946	.	S
Ti205	O356	2.028	.	S
Ti205	O46	1.903	1_545	S
Ti206	O210	1.988	.	S
Ti206	O215	1.997	.	S
Ti206	O213	2.057	.	S
Ti206	O211	1.834	.	S
Ti206	O237	2.107	.	S
Ti207	O211	2.035	.	S
Ti207	O214	2.108	1_655	S
Ti207	O209	1.971	.	S
Ti207	O233	1.895	.	S
Ti207	O215	1.970	.	S
Ti208	O212	2.021	.	S
Ti208	O213	1.928	.	S
Ti208	O210	2.123	.	S
Ti208	O42	2.097	1_545	S
Ti208	O216	1.893	.	S
O209	Ti205	2.121	1_655	S
O209	Ti39	2.008	1_545	S
O210	Ti232	2.138	.	S
O212	Ti253	1.909	.	S
O213	Ti38	2.037	1_545	S
O214	Ti207	2.108	1_455	S
O214	Ti229	1.996	.	S
O216	Ti253	1.934	.	S
Ti217	O221	1.895	1_455	S
Ti217	O226	2.111	1_455	S
Ti217	O368	1.950	.	S

Ti217	O202	2.117	1_455	S
Ti218	O222	2.097	.	S
Ti218	O227	1.994	.	S
Ti218	O225	1.884	.	S
Ti218	O235	1.898	.	S
Ti218	O223	1.956	.	S
Ti219	O223	2.020	.	S
Ti219	O226	1.978	.	S
Ti219	O221	2.103	.	S
Ti219	O227	1.804	.	S
Ti220	O224	2.046	.	S
Ti220	O225	2.002	.	S
Ti220	O240	1.904	.	S
Ti220	O222	2.033	.	S
Ti220	O228	1.973	.	S
O221	Ti217	1.895	1_655	S
O224	Ti277	1.883	.	S
O224	Ti265	1.935	.	S
O226	Ti217	2.111	1_655	S
O226	Ti1	2.093	1_655	S
O227	Ti231	1.900	.	S
O228	Ti265	2.011	.	S
Ti229	O233	2.033	1_455	S
Ti229	O384	2.003	.	S
Ti229	O238	1.950	.	S
Ti229	O368	1.952	.	S
Ti229	O380	1.967	.	S
Ti230	O234	1.939	.	S
Ti230	O239	2.026	.	S
Ti230	O237	2.096	.	S
Ti230	O235	1.795	.	S
Ti231	O235	1.996	.	S
Ti231	O238	2.041	1_655	S
Ti231	O233	1.930	.	S
Ti231	O239	1.957	.	S
Ti232	O236	2.004	.	S
Ti232	O237	1.908	.	S
Ti232	O234	2.114	.	S
Ti232	O240	1.941	.	S
O233	Ti229	2.033	1_655	S
O236	Ti277	1.918	.	S
O238	Ti231	2.041	1_455	S
O240	Ti277	1.972	.	S
Ti241	O245	2.097	.	S
Ti241	O250	2.034	.	S
Ti241	O82	2.012	1_545	S
Ti242	O246	2.038	.	S
Ti242	O251	2.062	.	S
Ti242	O249	2.036	.	S
Ti242	O259	1.978	.	S
Ti242	O247	1.857	.	S

Ti242	O273	1.913	.	S
Ti243	O247	1.997	.	S
Ti243	O250	1.964	.	S
Ti243	O263	1.960	.	S
Ti243	O245	2.064	.	S
Ti243	O269	1.970	.	S
Ti243	O251	1.885	.	S
Ti244	O248	2.078	.	S
Ti244	O249	2.099	.	S
Ti244	O264	1.903	.	S
Ti244	O246	1.932	.	S
Ti244	O78	1.939	1_545	S
Ti244	O252	1.962	.	S
O245	Ti75	2.060	1_545	S
O246	Ti268	1.984	.	S
O247	Ti254	1.855	.	S
O248	Ti289	1.992	.	S
O249	Ti74	2.014	1_545	S
O250	Ti265	2.103	.	S
O251	Ti255	1.927	.	S
O252	Ti289	1.966	.	S
O252	Ti256	1.889	.	S
Ti253	O257	1.903	.	S
Ti253	O262	1.966	.	S
Ti253	O94	2.048	1_545	S
Ti254	O258	2.000	.	S
Ti254	O263	1.984	.	S
Ti254	O261	2.056	.	S
Ti254	O285	2.125	.	S
Ti255	O259	2.011	.	S
Ti255	O262	2.065	.	S
Ti255	O257	2.054	.	S
Ti255	O281	2.099	.	S
Ti256	O260	2.024	.	S
Ti256	O261	1.918	.	S
Ti256	O258	2.111	.	S
Ti256	O90	2.104	1_545	S
O257	Ti87	2.003	1_545	S
O258	Ti280	2.117	.	S
O260	Ti289	1.929	.	S
O260	Ti301	1.961	.	S
O261	Ti86	2.035	1_545	S
O262	Ti277	1.971	.	S
Ti265	O269	2.058	.	S
Ti265	O274	2.063	.	S
Ti266	O270	2.087	.	S
Ti266	O275	2.039	.	S
Ti266	O273	1.891	.	S
Ti266	O283	1.979	.	S
Ti266	O271	1.819	.	S
Ti267	O271	1.940	.	S

Ti267	O274	1.914	.	S
Ti267	O287	1.952	.	S
Ti267	O269	1.957	.	S
Ti267	O275	1.828	.	S
Ti268	O272	2.105	.	S
Ti268	O273	2.027	.	S
Ti268	O288	1.917	.	S
Ti268	O270	2.002	.	S
Ti268	O276	1.979	.	S
O271	Ti278	1.808	.	S
O272	Ti313	1.976	.	S
O275	Ti279	1.858	.	S
O276	Ti313	2.020	.	S
O276	Ti280	1.933	.	S
Ti277	O281	1.951	.	S
Ti277	O286	2.049	.	S
Ti278	O282	1.940	.	S
Ti278	O287	1.997	.	S
Ti278	O285	2.111	.	S
Ti279	O283	2.047	.	S
Ti279	O286	2.087	.	S
Ti279	O281	2.029	.	S
Ti280	O284	1.964	.	S
Ti280	O285	1.889	.	S
Ti280	O282	2.106	.	S
O284	Ti313	1.914	.	S
O284	Ti325	1.885	.	S
Ti289	O293	2.014	.	S
Ti289	O298	1.935	.	S
Ti289	O130	1.991	1_545	S
Ti290	O294	1.992	.	S
Ti290	O299	2.017	.	S
Ti290	O297	2.113	.	S
Ti290	O295	1.836	.	S
Ti290	O321	2.058	.	S
Ti291	O295	2.021	.	S
Ti291	O298	2.033	.	S
Ti291	O311	1.906	.	S
Ti291	O293	1.947	.	S
Ti291	O317	2.022	.	S
Ti291	O299	1.956	.	S
Ti292	O296	1.997	.	S
Ti292	O297	1.907	.	S
Ti292	O294	2.137	.	S
Ti292	O126	2.110	1_545	S
Ti292	O300	1.938	.	S
O293	Ti123	1.894	1_545	S
O294	Ti316	2.121	.	S
O295	Ti302	1.918	.	S
O296	Ti337	1.914	.	S
O297	Ti122	2.092	1_545	S

O298	Ti313	1.902	.	S
O300	Ti337	1.969	.	S
O300	Ti304	1.905	.	S
Ti301	O305	1.977	.	S
Ti301	O310	2.073	.	S
Ti301	O142	2.053	1_545	S
Ti302	O306	1.997	.	S
Ti302	O311	2.006	.	S
Ti302	O309	1.902	.	S
Ti302	O307	1.930	.	S
Ti302	O333	2.003	.	S
Ti303	O307	1.941	.	S
Ti303	O310	1.967	.	S
Ti303	O305	2.032	.	S
Ti303	O329	1.992	.	S
Ti303	O311	1.835	.	S
Ti304	O308	2.042	.	S
Ti304	O309	2.009	.	S
Ti304	O306	1.923	.	S
Ti304	O138	2.037	1_545	S
Ti304	O312	1.972	.	S
O305	Ti135	2.030	1_545	S
O306	Ti328	1.876	.	S
O308	Ti337	1.871	.	S
O308	Ti349	1.943	.	S
O309	Ti134	1.898	1_545	S
O310	Ti325	2.033	.	S
O312	Ti349	2.027	.	S
Ti313	O317	2.120	.	S
Ti313	O322	1.958	.	S
Ti314	O318	1.925	.	S
Ti314	O323	1.987	.	S
Ti314	O321	2.029	.	S
Ti314	O319	1.797	.	S
Ti315	O319	1.995	.	S
Ti315	O322	2.096	.	S
Ti315	O335	1.990	.	S
Ti315	O317	1.974	.	S
Ti315	O323	1.962	.	S
Ti316	O320	2.023	.	S
Ti316	O321	1.926	.	S
Ti316	O318	2.104	.	S
Ti316	O324	1.892	.	S
O319	Ti326	1.870	.	S
O320	Ti361	1.913	.	S
O324	Ti361	1.941	.	S
O324	Ti328	1.875	.	S
Ti325	O329	1.885	.	S
Ti325	O334	2.027	.	S
Ti326	O330	2.097	.	S
Ti326	O335	2.045	.	S

Ti326	O333	1.968	.	S
Ti326	O331	1.930	.	S
Ti327	O331	1.992	.	S
Ti327	O334	1.973	.	S
Ti327	O329	2.010	.	S
Ti327	O335	1.849	.	S
Ti328	O332	2.018	.	S
Ti328	O333	2.112	.	S
Ti328	O330	1.979	.	S
Ti328	O336	1.955	.	S
O332	Ti361	1.849	.	S
O332	Ti373	1.877	.	S
O336	Ti373	2.063	.	S
Ti337	O341	1.913	.	S
Ti337	O346	1.958	.	S
Ti337	O178	2.033	1_545	S
Ti338	O342	1.947	.	S
Ti338	O347	1.997	.	S
Ti338	O345	2.072	.	S
Ti338	O355	1.808	.	S
Ti338	O369	2.067	.	S
Ti339	O343	2.044	.	S
Ti339	O346	2.072	.	S
Ti339	O359	1.915	.	S
Ti339	O341	2.085	.	S
Ti339	O365	2.085	.	S
Ti340	O344	1.984	.	S
Ti340	O345	1.936	.	S
Ti340	O360	1.910	.	S
Ti340	O342	2.111	.	S
Ti340	O174	2.121	1_545	S
O341	Ti171	1.996	1_545	S
O342	Ti364	2.102	.	S
O343	Ti350	1.998	.	S
O345	Ti170	2.090	1_545	S
O346	Ti361	1.962	.	S
O347	Ti351	1.962	.	S
O348	Ti352	1.904	.	S
Ti349	O353	2.119	.	S
Ti349	O358	2.059	.	S
Ti349	O190	2.031	1_545	S
Ti350	O354	2.089	.	S
Ti350	O359	2.056	.	S
Ti350	O357	1.889	.	S
Ti350	O355	1.801	.	S
Ti350	O381	1.979	.	S
Ti351	O355	1.911	.	S
Ti351	O358	1.954	.	S
Ti351	O353	2.013	.	S
Ti351	O377	1.952	.	S
Ti351	O359	1.901	.	S

Ti352	O356	2.090	.	S
Ti352	O357	2.007	.	S
Ti352	O354	1.972	.	S
Ti352	O186	1.968	1_545	S
Ti352	O360	1.933	.	S
O353	Ti183	2.025	1_545	S
O354	Ti376	1.951	.	S
O357	Ti182	1.895	1_545	S
O358	Ti373	2.069	.	S
Ti361	O365	1.945	.	S
Ti361	O370	2.048	.	S
Ti362	O366	2.001	.	S
Ti362	O371	1.996	.	S
Ti362	O369	2.082	.	S
Ti362	O379	1.836	.	S
Ti363	O367	2.033	.	S
Ti363	O370	2.079	.	S
Ti363	O383	1.856	.	S
Ti363	O365	2.013	.	S
Ti364	O368	1.998	.	S
Ti364	O369	1.886	.	S
Ti364	O384	1.921	.	S
Ti364	O366	2.110	.	S
O367	Ti374	1.951	.	S
O371	Ti375	1.956	.	S
O372	Ti376	1.914	.	S
Ti373	O377	2.026	.	S
Ti373	O382	2.044	.	S
Ti374	O378	2.032	.	S
Ti374	O383	1.995	.	S
Ti374	O381	1.988	.	S
Ti374	O379	1.850	.	S
Ti375	O379	1.982	.	S
Ti375	O382	1.928	.	S
Ti375	O377	1.951	.	S
Ti375	O383	1.817	.	S
Ti376	O380	2.082	.	S
Ti376	O381	2.099	.	S
Ti376	O378	1.931	.	S
Ti376	O384	1.998	.	S
C385	C386	1.217	.	T
C385	C425	1.332	1_445	A
C386	C387	1.329	.	D
C387	C388	1.215	.	T
C388	C389	1.329	.	D
C389	C390	1.217	.	T
C390	C391	1.357	.	A
C391	C392	1.322	.	D
C391	S393	1.800	.	S
C392	C394	1.376	.	A
C392	H395	1.083	.	S

S393	C396	1.811	.	S
C394	C396	1.332	.	D
C394	H397	1.083	.	S
C396	C398	1.391	.	A
C398	H399	1.083	.	S
C398	C400	1.351	.	D
C400	C401	1.364	.	A
C400	P402	1.842	.	S
C401	N405	1.163	.	T
P402	O424	1.535	1_445	D
P402	O404	1.725	.	S
P402	O403	1.742	.	S
O403	Ti135	1.711	1_445	S
O404	Ti111	1.681	1_445	S
C406	C407	1.324	.	D
C406	S408	1.800	.	S
C406	C426	1.354	1_445	A
C407	C409	1.378	.	A
C407	H410	1.083	.	S
S408	C411	1.807	.	S
C409	C411	1.328	.	D
C409	H412	1.082	.	S
C411	N421	1.357	.	A
H413	N421	1.043	.	S
C414	C415	1.322	.	D
C414	N421	1.428	.	S
C414	N422	1.414	.	S
C415	C416	1.385	.	A
C415	H417	1.081	.	S
C416	C418	1.329	.	D
C416	H419	1.082	.	S
C418	H420	1.084	.	S
C418	N422	1.346	.	A
N422	H423	1.042	.	S
O424	P402	1.535	1_665	D
C425	C385	1.332	1_665	A
C425	C426	1.213	.	T
C426	C406	1.354	1_665	A

data_TiO2@PY3PO3

_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	38.6882
_cell_length_b	15.1040
_cell_length_c	47.5200
_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

Ti1	Ti	-0.00691	0.50279	0.83874	0.00000	Uiso	1.00
Ti2	Ti	0.89089	0.62857	0.88920	0.00000	Uiso	1.00
Ti3	Ti	0.93664	0.62188	0.84638	0.00000	Uiso	1.00
Ti4	Ti	0.83361	0.50400	0.90226	0.00000	Uiso	1.00
O5	O	0.95200	0.50143	0.86062	0.00000	Uiso	1.00
O6	O	0.83916	0.62269	0.89150	0.00000	Uiso	1.00
O7	O	0.88671	0.60873	0.84899	0.00000	Uiso	1.00
O8	O	0.78412	0.53581	0.91199	0.00000	Uiso	1.00
O9	O	0.88785	0.49873	0.89815	0.00000	Uiso	1.00
O10	O	0.97722	0.62576	0.82251	0.00000	Uiso	1.00
O11	O	0.94167	0.65327	0.88331	0.00000	Uiso	1.00
O12	O	0.80880	0.47929	0.86685	0.00000	Uiso	1.00
Ti13	Ti	0.02091	0.49636	0.90685	0.00000	Uiso	1.00
Ti14	Ti	0.91303	0.62057	0.96186	0.00000	Uiso	1.00
Ti15	Ti	0.96446	0.62842	0.91886	0.00000	Uiso	1.00
Ti16	Ti	0.85608	0.49885	0.97563	0.00000	Uiso	1.00
O17	O	0.96628	0.50087	0.91027	0.00000	Uiso	1.00
O18	O	0.87411	0.62462	0.98915	0.00000	Uiso	1.00
O19	O	0.91317	0.65229	0.92461	0.00000	Uiso	1.00
O20	O	0.80617	0.47299	0.98508	0.00000	Uiso	1.00
O21	O	0.89449	0.49868	0.94979	0.00000	Uiso	1.00
O22	O	0.01874	0.62300	0.91543	0.00000	Uiso	1.00
O23	O	0.96435	0.60765	0.95978	0.00000	Uiso	1.00
O24	O	0.83620	0.53098	0.94069	0.00000	Uiso	1.00
Ti25	Ti	-0.00848	0.75017	0.83939	0.00000	Uiso	1.00
Ti26	Ti	0.88882	0.86972	0.89267	0.00000	Uiso	1.00
Ti27	Ti	0.93453	0.88171	0.84636	0.00000	Uiso	1.00
Ti28	Ti	0.82942	0.74484	0.89912	0.00000	Uiso	1.00
O29	O	0.94810	0.75183	0.85784	0.00000	Uiso	1.00
O30	O	0.83818	0.87435	0.90836	0.00000	Uiso	1.00
O31	O	0.88308	0.89355	0.85249	0.00000	Uiso	1.00
O32	O	0.77967	0.71858	0.91108	0.00000	Uiso	1.00
O33	O	0.87794	0.75081	0.88461	0.00000	Uiso	1.00
O34	O	0.97806	0.87732	0.82457	0.00000	Uiso	1.00
O35	O	0.93780	0.84456	0.88234	0.00000	Uiso	1.00
O36	O	0.80834	0.76221	0.86170	0.00000	Uiso	1.00
Ti37	Ti	0.02523	0.75266	0.90925	0.00000	Uiso	1.00
Ti38	Ti	0.91559	0.88115	0.96193	0.00000	Uiso	1.00
Ti39	Ti	0.96230	0.86958	0.91608	0.00000	Uiso	1.00
Ti40	Ti	0.85716	0.75110	0.97442	0.00000	Uiso	1.00

O41	O	0.97593	0.74927	0.92403	0.00000	Uiso	1.00
O42	O	0.87646	0.87559	0.98736	0.00000	Uiso	1.00
O43	O	0.91332	0.84298	0.92622	0.00000	Uiso	1.00
O44	O	0.80805	0.77830	0.98472	0.00000	Uiso	1.00
O45	O	0.89881	0.75224	0.95293	0.00000	Uiso	1.00
O46	O	0.01159	0.87410	0.90085	0.00000	Uiso	1.00
O47	O	0.96730	0.89304	0.95637	0.00000	Uiso	1.00
O48	O	0.83659	0.72371	0.93820	0.00000	Uiso	1.00
Ti49	Ti	0.75848	0.49744	0.88088	0.00000	Uiso	1.00
Ti50	Ti	0.65720	0.62760	0.92694	0.00000	Uiso	1.00
Ti51	Ti	0.69814	0.62363	0.87671	0.00000	Uiso	1.00
Ti52	Ti	0.59908	0.49910	0.93159	0.00000	Uiso	1.00
O53	O	0.70559	0.49535	0.89047	0.00000	Uiso	1.00
O54	O	0.60770	0.62120	0.94129	0.00000	Uiso	1.00
O55	O	0.65029	0.65378	0.88920	0.00000	Uiso	1.00
O56	O	0.54885	0.50839	0.94656	0.00000	Uiso	1.00
O57	O	0.64963	0.49907	0.91559	0.00000	Uiso	1.00
O58	O	0.74598	0.61562	0.86303	0.00000	Uiso	1.00
O59	O	0.70717	0.65417	0.91447	0.00000	Uiso	1.00
O60	O	0.57082	0.52615	0.89837	0.00000	Uiso	1.00
Ti61	Ti	0.78840	0.50376	0.94889	0.00000	Uiso	1.00
Ti62	Ti	0.62940	0.61449	0.85632	0.00000	Uiso	1.00
Ti63	Ti	0.72771	0.62667	0.95037	0.00000	Uiso	1.00
Ti64	Ti	0.56956	0.49359	0.86010	0.00000	Uiso	1.00
O65	O	0.74050	0.49671	0.95770	0.00000	Uiso	1.00
O66	O	0.58041	0.61933	0.84249	0.00000	Uiso	1.00
O67	O	0.67905	0.60840	0.96405	0.00000	Uiso	1.00
O68	O	0.51996	0.46612	0.87092	0.00000	Uiso	1.00
O69	O	0.61638	0.49374	0.87341	0.00000	Uiso	1.00
O70	O	0.77954	0.62635	0.96079	0.00000	Uiso	1.00
O71	O	0.67635	0.59441	0.84060	0.00000	Uiso	1.00
O72	O	0.61956	0.47108	0.96690	0.00000	Uiso	1.00
Ti73	Ti	0.75933	0.74540	0.87484	0.00000	Uiso	1.00
Ti74	Ti	0.65414	0.86839	0.92309	0.00000	Uiso	1.00
Ti75	Ti	0.69873	0.86766	0.87633	0.00000	Uiso	1.00
Ti76	Ti	0.59502	0.74741	0.93628	0.00000	Uiso	1.00
O77	O	0.70769	0.74574	0.86439	0.00000	Uiso	1.00
O78	O	0.60023	0.87319	0.92364	0.00000	Uiso	1.00
O79	O	0.65180	0.83520	0.88637	0.00000	Uiso	1.00
O80	O	0.54197	0.73532	0.94518	0.00000	Uiso	1.00
O81	O	0.64734	0.74955	0.93427	0.00000	Uiso	1.00
O82	O	0.74668	0.87557	0.86664	0.00000	Uiso	1.00
O83	O	0.70377	0.83528	0.91317	0.00000	Uiso	1.00
O84	O	0.57087	0.72007	0.90064	0.00000	Uiso	1.00
Ti85	Ti	0.78834	0.74924	0.94885	0.00000	Uiso	1.00
Ti86	Ti	0.63112	0.87864	0.85512	0.00000	Uiso	1.00
Ti87	Ti	0.72918	0.87476	0.94391	0.00000	Uiso	1.00
Ti88	Ti	0.57247	0.74595	0.86088	0.00000	Uiso	1.00
O89	O	0.74064	0.75662	0.96195	0.00000	Uiso	1.00
O90	O	0.58309	0.87137	0.84325	0.00000	Uiso	1.00
O91	O	0.67984	0.89462	0.95812	0.00000	Uiso	1.00

O92	O	0.52474	0.78110	0.87046	0.00000	Uiso	1.00
O93	O	0.62049	0.74807	0.86846	0.00000	Uiso	1.00
O94	O	0.78199	0.87655	0.93492	0.00000	Uiso	1.00
O95	O	0.67865	0.89901	0.83993	0.00000	Uiso	1.00
O96	O	0.60778	0.77571	0.97420	0.00000	Uiso	1.00
Ti97	Ti	0.52314	0.50164	0.91029	0.00000	Uiso	1.00
Ti98	Ti	0.41366	0.63180	0.96105	0.00000	Uiso	1.00
Ti99	Ti	0.46093	0.61925	0.91517	0.00000	Uiso	1.00
Ti100	Ti	0.35722	0.50088	0.97424	0.00000	Uiso	1.00
O101	O	0.47445	0.49915	0.92524	0.00000	Uiso	1.00
O102	O	0.37488	0.62709	0.98867	0.00000	Uiso	1.00
O103	O	0.41098	0.59710	0.92429	0.00000	Uiso	1.00
O104	O	0.30825	0.47476	0.98471	0.00000	Uiso	1.00
O105	O	0.39879	0.49961	0.95263	0.00000	Uiso	1.00
O106	O	0.51051	0.62293	0.90127	0.00000	Uiso	1.00
O107	O	0.46519	0.64615	0.95533	0.00000	Uiso	1.00
O108	O	0.33692	0.52699	0.93793	0.00000	Uiso	1.00
Ti109	Ti	0.48930	0.48935	0.83873	0.00000	Uiso	1.00
Ti110	Ti	0.39101	0.61535	0.88823	0.00000	Uiso	1.00
Ti111	Ti	0.43572	0.62407	0.84197	0.00000	Uiso	1.00
Ti112	Ti	0.32957	0.50132	0.89929	0.00000	Uiso	1.00
O113	O	0.43869	0.49172	0.83411	0.00000	Uiso	1.00
O114	O	0.33941	0.62366	0.89129	0.00000	Uiso	1.00
O115	O	0.38578	0.62436	0.84959	0.00000	Uiso	1.00
O116	O	0.27985	0.52774	0.91085	0.00000	Uiso	1.00
O117	O	0.37813	0.49442	0.88507	0.00000	Uiso	1.00
O118	O	0.48491	0.62301	0.83266	0.00000	Uiso	1.00
O119	O	0.44101	0.58849	0.87971	0.00000	Uiso	1.00
O120	O	0.30779	0.48018	0.86237	0.00000	Uiso	1.00
Ti121	Ti	0.52047	0.74512	0.90765	0.00000	Uiso	1.00
Ti122	Ti	0.41431	0.86977	0.96089	0.00000	Uiso	1.00
Ti123	Ti	0.46453	0.87746	0.91744	0.00000	Uiso	1.00
Ti124	Ti	0.35584	0.75125	0.97503	0.00000	Uiso	1.00
O125	O	0.46585	0.75021	0.90767	0.00000	Uiso	1.00
O126	O	0.37587	0.87495	0.98664	0.00000	Uiso	1.00
O127	O	0.41510	0.90331	0.92461	0.00000	Uiso	1.00
O128	O	0.30568	0.77412	0.98449	0.00000	Uiso	1.00
O129	O	0.39370	0.75219	0.94866	0.00000	Uiso	1.00
O130	O	0.51847	0.87225	0.91504	0.00000	Uiso	1.00
O131	O	0.46527	0.85362	0.95802	0.00000	Uiso	1.00
O132	O	0.33633	0.71748	0.94014	0.00000	Uiso	1.00
Ti133	Ti	0.48948	0.74948	0.84581	0.00000	Uiso	1.00
Ti134	Ti	0.39113	0.87911	0.89166	0.00000	Uiso	1.00
Ti135	Ti	0.43286	0.86817	0.84203	0.00000	Uiso	1.00
Ti136	Ti	0.33505	0.74399	0.90142	0.00000	Uiso	1.00
O137	O	0.44111	0.74640	0.85611	0.00000	Uiso	1.00
O138	O	0.34051	0.87372	0.90793	0.00000	Uiso	1.00
O139	O	0.38254	0.86481	0.85324	0.00000	Uiso	1.00
O140	O	0.28512	0.71613	0.91034	0.00000	Uiso	1.00
O141	O	0.38926	0.74751	0.89595	0.00000	Uiso	1.00
O142	O	0.48025	0.86937	0.82839	0.00000	Uiso	1.00

O143	O	0.44191	0.90105	0.88027	0.00000	Uiso	1.00
O144	O	0.31365	0.76843	0.86501	0.00000	Uiso	1.00
Ti145	Ti	0.28888	0.50060	0.94855	0.00000	Uiso	1.00
Ti146	Ti	0.13454	0.62383	0.85179	0.00000	Uiso	1.00
Ti147	Ti	0.22645	0.61962	0.94978	0.00000	Uiso	1.00
Ti148	Ti	0.07538	0.49760	0.85923	0.00000	Uiso	1.00
O149	O	0.24205	0.49253	0.96118	0.00000	Uiso	1.00
O150	O	0.08575	0.62336	0.84180	0.00000	Uiso	1.00
O151	O	0.17565	0.60804	0.96106	0.00000	Uiso	1.00
O152	O	0.02655	0.52817	0.86744	0.00000	Uiso	1.00
O153	O	0.12442	0.49827	0.86732	0.00000	Uiso	1.00
O154	O	0.27868	0.62243	0.95952	0.00000	Uiso	1.00
O155	O	0.18197	0.64773	0.83707	0.00000	Uiso	1.00
O156	O	0.11632	0.52538	0.96778	0.00000	Uiso	1.00
Ti157	Ti	0.25829	0.49917	0.87503	0.00000	Uiso	1.00
Ti158	Ti	0.15598	0.61985	0.92236	0.00000	Uiso	1.00
Ti159	Ti	0.20162	0.63018	0.87472	0.00000	Uiso	1.00
Ti160	Ti	0.09722	0.49870	0.93184	0.00000	Uiso	1.00
O161	O	0.20441	0.49943	0.86699	0.00000	Uiso	1.00
O162	O	0.10206	0.62597	0.92341	0.00000	Uiso	1.00
O163	O	0.15445	0.64650	0.88544	0.00000	Uiso	1.00
O164	O	0.04558	0.49016	0.94446	0.00000	Uiso	1.00
O165	O	0.14551	0.49902	0.91647	0.00000	Uiso	1.00
O166	O	0.24928	0.62628	0.86120	0.00000	Uiso	1.00
O167	O	0.20728	0.59895	0.91320	0.00000	Uiso	1.00
O168	O	0.07080	0.47167	0.89839	0.00000	Uiso	1.00
Ti169	Ti	0.28813	0.74506	0.94805	0.00000	Uiso	1.00
Ti170	Ti	0.13289	0.87035	0.85196	0.00000	Uiso	1.00
Ti171	Ti	0.23051	0.87569	0.94345	0.00000	Uiso	1.00
Ti172	Ti	0.07354	0.74736	0.85923	0.00000	Uiso	1.00
O173	O	0.23911	0.75172	0.95705	0.00000	Uiso	1.00
O174	O	0.08313	0.87163	0.84050	0.00000	Uiso	1.00
O175	O	0.18264	0.89098	0.96049	0.00000	Uiso	1.00
O176	O	0.02433	0.72261	0.86930	0.00000	Uiso	1.00
O177	O	0.12104	0.74584	0.86814	0.00000	Uiso	1.00
O178	O	0.28328	0.87337	0.93482	0.00000	Uiso	1.00
O179	O	0.18058	0.84782	0.83759	0.00000	Uiso	1.00
O180	O	0.11622	0.72390	0.97119	0.00000	Uiso	1.00
Ti181	Ti	0.26293	0.74929	0.87685	0.00000	Uiso	1.00
Ti182	Ti	0.15771	0.88056	0.92495	0.00000	Uiso	1.00
Ti183	Ti	0.19959	0.86877	0.87513	0.00000	Uiso	1.00
Ti184	Ti	0.10059	0.75074	0.93395	0.00000	Uiso	1.00
O185	O	0.21221	0.74987	0.88757	0.00000	Uiso	1.00
O186	O	0.10892	0.87494	0.94068	0.00000	Uiso	1.00
O187	O	0.15092	0.85433	0.88732	0.00000	Uiso	1.00
O188	O	0.04894	0.76087	0.94578	0.00000	Uiso	1.00
O189	O	0.15432	0.74957	0.92787	0.00000	Uiso	1.00
O190	O	0.24750	0.87242	0.86401	0.00000	Uiso	1.00
O191	O	0.20564	0.90394	0.91133	0.00000	Uiso	1.00
O192	O	0.07448	0.77613	0.89859	0.00000	Uiso	1.00
Ti193	Ti	-0.00691	0.00279	0.83873	0.00000	Uiso	1.00

Ti194	Ti	0.89090	0.12854	0.88921	0.00000	Uiso	1.00
Ti195	Ti	0.93664	0.12188	0.84638	0.00000	Uiso	1.00
Ti196	Ti	0.83362	0.00396	0.90227	0.00000	Uiso	1.00
O197	O	0.95200	0.00142	0.86062	0.00000	Uiso	1.00
O198	O	0.83917	0.12267	0.89152	0.00000	Uiso	1.00
O199	O	0.88671	0.10872	0.84900	0.00000	Uiso	1.00
O200	O	0.78413	0.03574	0.91200	0.00000	Uiso	1.00
O201	O	0.88786	-0.00131	0.89816	0.00000	Uiso	1.00
O202	O	0.97721	0.12576	0.82251	0.00000	Uiso	1.00
O203	O	0.94168	0.15322	0.88331	0.00000	Uiso	1.00
O204	O	0.80880	-0.02083	0.86687	0.00000	Uiso	1.00
Ti205	Ti	0.02092	-0.00366	0.90684	0.00000	Uiso	1.00
Ti206	Ti	0.91304	0.12055	0.96187	0.00000	Uiso	1.00
Ti207	Ti	0.96446	0.12839	0.91887	0.00000	Uiso	1.00
Ti208	Ti	0.85608	-0.00117	0.97564	0.00000	Uiso	1.00
O209	O	0.96629	0.00084	0.91027	0.00000	Uiso	1.00
O210	O	0.87412	0.12460	0.98916	0.00000	Uiso	1.00
O211	O	0.91317	0.15225	0.92462	0.00000	Uiso	1.00
O212	O	0.80617	-0.02705	0.98509	0.00000	Uiso	1.00
O213	O	0.89450	-0.00132	0.94980	0.00000	Uiso	1.00
O214	O	0.01874	0.12297	0.91544	0.00000	Uiso	1.00
O215	O	0.96436	0.10762	0.95979	0.00000	Uiso	1.00
O216	O	0.83620	0.03096	0.94070	0.00000	Uiso	1.00
Ti217	Ti	-0.00849	0.25017	0.83940	0.00000	Uiso	1.00
Ti218	Ti	0.88883	0.36974	0.89267	0.00000	Uiso	1.00
Ti219	Ti	0.93453	0.38171	0.84636	0.00000	Uiso	1.00
Ti220	Ti	0.82946	0.24482	0.89914	0.00000	Uiso	1.00
O221	O	0.94809	0.25183	0.85784	0.00000	Uiso	1.00
O222	O	0.83818	0.37437	0.90835	0.00000	Uiso	1.00
O223	O	0.88308	0.39354	0.85249	0.00000	Uiso	1.00
O224	O	0.77972	0.21854	0.91112	0.00000	Uiso	1.00
O225	O	0.87797	0.25080	0.88464	0.00000	Uiso	1.00
O226	O	0.97806	0.37732	0.82458	0.00000	Uiso	1.00
O227	O	0.93781	0.34460	0.88234	0.00000	Uiso	1.00
O228	O	0.80841	0.26218	0.86173	0.00000	Uiso	1.00
Ti229	Ti	0.02521	0.25264	0.90927	0.00000	Uiso	1.00
Ti230	Ti	0.91559	0.38117	0.96194	0.00000	Uiso	1.00
Ti231	Ti	0.96230	0.36960	0.91609	0.00000	Uiso	1.00
Ti232	Ti	0.85718	0.25110	0.97444	0.00000	Uiso	1.00
O233	O	0.97591	0.24926	0.92403	0.00000	Uiso	1.00
O234	O	0.87646	0.37563	0.98737	0.00000	Uiso	1.00
O235	O	0.91331	0.34303	0.92622	0.00000	Uiso	1.00
O236	O	0.80807	0.27832	0.98474	0.00000	Uiso	1.00
O237	O	0.89883	0.25224	0.95295	0.00000	Uiso	1.00
O238	O	0.01159	0.37411	0.90088	0.00000	Uiso	1.00
O239	O	0.96730	0.39305	0.95638	0.00000	Uiso	1.00
O240	O	0.83661	0.22371	0.93822	0.00000	Uiso	1.00
Ti241	Ti	0.75848	-0.00273	0.88091	0.00000	Uiso	1.00
Ti242	Ti	0.65720	0.12760	0.92699	0.00000	Uiso	1.00
Ti243	Ti	0.69828	0.12364	0.87677	0.00000	Uiso	1.00
Ti244	Ti	0.59902	-0.00101	0.93168	0.00000	Uiso	1.00

O245	O	0.70559	-0.00465	0.89049	0.00000	Uiso	1.00
O246	O	0.60765	0.12118	0.94139	0.00000	Uiso	1.00
O247	O	0.65041	0.15381	0.88922	0.00000	Uiso	1.00
O248	O	0.54870	0.00723	0.94676	0.00000	Uiso	1.00
O249	O	0.64957	-0.00088	0.91564	0.00000	Uiso	1.00
O250	O	0.74610	0.11559	0.86311	0.00000	Uiso	1.00
O251	O	0.70718	0.15418	0.91455	0.00000	Uiso	1.00
O252	O	0.57094	0.02716	0.89847	0.00000	Uiso	1.00
Ti253	Ti	0.78841	0.00373	0.94890	0.00000	Uiso	1.00
Ti254	Ti	0.62988	0.11452	0.85624	0.00000	Uiso	1.00
Ti255	Ti	0.72773	0.12667	0.95042	0.00000	Uiso	1.00
Ti256	Ti	0.56962	-0.00437	0.86001	0.00000	Uiso	1.00
O257	O	0.74050	-0.00333	0.95771	0.00000	Uiso	1.00
O258	O	0.58120	0.12012	0.84217	0.00000	Uiso	1.00
O259	O	0.67906	0.10840	0.96411	0.00000	Uiso	1.00
O260	O	0.51957	-0.02372	0.87077	0.00000	Uiso	1.00
O261	O	0.61639	-0.00556	0.87341	0.00000	Uiso	1.00
O262	O	0.77956	0.12633	0.96082	0.00000	Uiso	1.00
O263	O	0.67677	0.09430	0.84061	0.00000	Uiso	1.00
O264	O	0.61950	-0.02955	0.96695	0.00000	Uiso	1.00
Ti265	Ti	0.75944	0.24538	0.87489	0.00000	Uiso	1.00
Ti266	Ti	0.65419	0.36838	0.92309	0.00000	Uiso	1.00
Ti267	Ti	0.69886	0.36761	0.87637	0.00000	Uiso	1.00
Ti268	Ti	0.59500	0.24750	0.93630	0.00000	Uiso	1.00
O269	O	0.70782	0.24572	0.86443	0.00000	Uiso	1.00
O270	O	0.60028	0.37324	0.92368	0.00000	Uiso	1.00
O271	O	0.65191	0.33513	0.88635	0.00000	Uiso	1.00
O272	O	0.54191	0.23577	0.94521	0.00000	Uiso	1.00
O273	O	0.64734	0.24956	0.93429	0.00000	Uiso	1.00
O274	O	0.74680	0.37556	0.86673	0.00000	Uiso	1.00
O275	O	0.70382	0.33522	0.91321	0.00000	Uiso	1.00
O276	O	0.57086	0.22065	0.90059	0.00000	Uiso	1.00
Ti277	Ti	0.78836	0.24924	0.94888	0.00000	Uiso	1.00
Ti278	Ti	0.63154	0.37864	0.85503	0.00000	Uiso	1.00
Ti279	Ti	0.72920	0.37475	0.94394	0.00000	Uiso	1.00
Ti280	Ti	0.57333	0.24591	0.86077	0.00000	Uiso	1.00
O281	O	0.74067	0.25662	0.96199	0.00000	Uiso	1.00
O282	O	0.58373	0.37080	0.84296	0.00000	Uiso	1.00
O283	O	0.67984	0.39465	0.95813	0.00000	Uiso	1.00
O284	O	0.52528	0.27886	0.86899	0.00000	Uiso	1.00
O285	O	0.62124	0.24804	0.86843	0.00000	Uiso	1.00
O286	O	0.78200	0.37655	0.93493	0.00000	Uiso	1.00
O287	O	0.67903	0.39910	0.83993	0.00000	Uiso	1.00
O288	O	0.60777	0.27573	0.97423	0.00000	Uiso	1.00
Ti289	Ti	0.52323	0.00267	0.91036	0.00000	Uiso	1.00
Ti290	Ti	0.41329	0.13138	0.96131	0.00000	Uiso	1.00
Ti291	Ti	0.46044	0.11890	0.91592	0.00000	Uiso	1.00
Ti292	Ti	0.35730	0.00018	0.97402	0.00000	Uiso	1.00
O293	O	0.47430	-0.00183	0.92478	0.00000	Uiso	1.00
O294	O	0.37463	0.12606	0.98895	0.00000	Uiso	1.00
O295	O	0.41023	0.09408	0.92463	0.00000	Uiso	1.00

O296	O	0.30836	-0.02657	0.98436	0.00000	Uiso	1.00
O297	O	0.39871	-0.00042	0.95228	0.00000	Uiso	1.00
O298	O	0.51016	0.12362	0.90216	0.00000	Uiso	1.00
O299	O	0.46481	0.14375	0.95616	0.00000	Uiso	1.00
O300	O	0.33712	0.02669	0.93765	0.00000	Uiso	1.00
Ti301	Ti	0.48796	-0.00065	0.83935	0.00000	Uiso	1.00
Ti302	Ti	0.39030	0.11943	0.88857	0.00000	Uiso	1.00
Ti303	Ti	0.43475	0.13188	0.84485	0.00000	Uiso	1.00
Ti304	Ti	0.32984	0.00255	0.89875	0.00000	Uiso	1.00
O305	O	0.43706	0.00062	0.83564	0.00000	Uiso	1.00
O306	O	0.33885	0.12558	0.89139	0.00000	Uiso	1.00
O307	O	0.38515	0.14603	0.84908	0.00000	Uiso	1.00
O308	O	0.28006	0.02774	0.91060	0.00000	Uiso	1.00
O309	O	0.37846	-0.00191	0.88395	0.00000	Uiso	1.00
O310	O	0.47974	0.12790	0.82559	0.00000	Uiso	1.00
O311	O	0.43985	0.08896	0.88075	0.00000	Uiso	1.00
O312	O	0.30783	-0.01761	0.86186	0.00000	Uiso	1.00
Ti313	Ti	0.52032	0.24560	0.90765	0.00000	Uiso	1.00
Ti314	Ti	0.41405	0.37007	0.96186	0.00000	Uiso	1.00
Ti315	Ti	0.46437	0.37843	0.91877	0.00000	Uiso	1.00
Ti316	Ti	0.35549	0.25087	0.97566	0.00000	Uiso	1.00
O317	O	0.46564	0.25078	0.90991	0.00000	Uiso	1.00
O318	O	0.37530	0.37538	0.98723	0.00000	Uiso	1.00
O319	O	0.41465	0.40564	0.92578	0.00000	Uiso	1.00
O320	O	0.30526	0.27338	0.98514	0.00000	Uiso	1.00
O321	O	0.39361	0.25252	0.94959	0.00000	Uiso	1.00
O322	O	0.51839	0.37235	0.91610	0.00000	Uiso	1.00
O323	O	0.46500	0.35520	0.95938	0.00000	Uiso	1.00
O324	O	0.33571	0.21620	0.94095	0.00000	Uiso	1.00
Ti325	Ti	0.49259	0.24890	0.84116	0.00000	Uiso	1.00
Ti326	Ti	0.38988	0.37721	0.89322	0.00000	Uiso	1.00
Ti327	Ti	0.43243	0.36295	0.84695	0.00000	Uiso	1.00
Ti328	Ti	0.33453	0.24422	0.90251	0.00000	Uiso	1.00
O329	O	0.45051	0.24647	0.86114	0.00000	Uiso	1.00
O330	O	0.33948	0.37280	0.90940	0.00000	Uiso	1.00
O331	O	0.38189	0.35098	0.85401	0.00000	Uiso	1.00
O332	O	0.28458	0.21598	0.91089	0.00000	Uiso	1.00
O333	O	0.38889	0.24808	0.89871	0.00000	Uiso	1.00
O334	O	0.47528	0.36410	0.82444	0.00000	Uiso	1.00
O335	O	0.44000	0.40553	0.88291	0.00000	Uiso	1.00
O336	O	0.31366	0.26996	0.86594	0.00000	Uiso	1.00
Ti337	Ti	0.28903	0.00025	0.94828	0.00000	Uiso	1.00
Ti338	Ti	0.13453	0.12390	0.85179	0.00000	Uiso	1.00
Ti339	Ti	0.22633	0.11922	0.94986	0.00000	Uiso	1.00
Ti340	Ti	0.07538	-0.00240	0.85921	0.00000	Uiso	1.00
O341	O	0.24220	-0.00798	0.96095	0.00000	Uiso	1.00
O342	O	0.08574	0.12341	0.84180	0.00000	Uiso	1.00
O343	O	0.17554	0.10738	0.96109	0.00000	Uiso	1.00
O344	O	0.02655	0.02818	0.86743	0.00000	Uiso	1.00
O345	O	0.12444	-0.00175	0.86726	0.00000	Uiso	1.00
O346	O	0.27847	0.12174	0.95977	0.00000	Uiso	1.00

O347	O	0.18196	0.14818	0.83712	0.00000	Uiso	1.00
O348	O	0.11631	0.02515	0.96777	0.00000	Uiso	1.00
Ti349	Ti	0.25837	-0.00051	0.87483	0.00000	Uiso	1.00
Ti350	Ti	0.15594	0.11975	0.92239	0.00000	Uiso	1.00
Ti351	Ti	0.20159	0.13033	0.87477	0.00000	Uiso	1.00
Ti352	Ti	0.09722	-0.00139	0.93182	0.00000	Uiso	1.00
O353	O	0.20447	-0.00035	0.86683	0.00000	Uiso	1.00
O354	O	0.10203	0.12591	0.92346	0.00000	Uiso	1.00
O355	O	0.15439	0.14649	0.88548	0.00000	Uiso	1.00
O356	O	0.04558	-0.01002	0.94444	0.00000	Uiso	1.00
O357	O	0.14550	-0.00097	0.91639	0.00000	Uiso	1.00
O358	O	0.24928	0.12689	0.86128	0.00000	Uiso	1.00
O359	O	0.20724	0.09891	0.91323	0.00000	Uiso	1.00
O360	O	0.07079	-0.02834	0.89837	0.00000	Uiso	1.00
Ti361	Ti	0.28769	0.24457	0.94864	0.00000	Uiso	1.00
Ti362	Ti	0.13287	0.37034	0.85206	0.00000	Uiso	1.00
Ti363	Ti	0.23028	0.37575	0.94383	0.00000	Uiso	1.00
Ti364	Ti	0.07353	0.24736	0.85926	0.00000	Uiso	1.00
O365	O	0.23869	0.25145	0.95748	0.00000	Uiso	1.00
O366	O	0.08314	0.37163	0.84053	0.00000	Uiso	1.00
O367	O	0.18236	0.39120	0.96071	0.00000	Uiso	1.00
O368	O	0.02431	0.22263	0.86932	0.00000	Uiso	1.00
O369	O	0.12101	0.24581	0.86820	0.00000	Uiso	1.00
O370	O	0.28301	0.37317	0.93550	0.00000	Uiso	1.00
O371	O	0.18056	0.34778	0.83773	0.00000	Uiso	1.00
O372	O	0.11611	0.22386	0.97128	0.00000	Uiso	1.00
Ti373	Ti	0.26280	0.24955	0.87725	0.00000	Uiso	1.00
Ti374	Ti	0.15764	0.38053	0.92508	0.00000	Uiso	1.00
Ti375	Ti	0.19950	0.36870	0.87531	0.00000	Uiso	1.00
Ti376	Ti	0.10054	0.25070	0.93402	0.00000	Uiso	1.00
O377	O	0.21205	0.24992	0.88779	0.00000	Uiso	1.00
O378	O	0.10883	0.37498	0.94075	0.00000	Uiso	1.00
O379	O	0.15081	0.35436	0.88746	0.00000	Uiso	1.00
O380	O	0.04887	0.26084	0.94581	0.00000	Uiso	1.00
O381	O	0.15428	0.24949	0.92803	0.00000	Uiso	1.00
O382	O	0.24739	0.37226	0.86417	0.00000	Uiso	1.00
O383	O	0.20561	0.40374	0.91154	0.00000	Uiso	1.00
O384	O	0.07447	0.27608	0.89863	0.00000	Uiso	1.00
C385	C	-0.57423	-0.24920	0.50346	0.00000	Uiso	1.00
C386	C	-0.56850	-0.23552	0.52828	0.00000	Uiso	1.00
C387	C	-0.56239	-0.22102	0.55545	0.00000	Uiso	1.00
C388	C	-0.55714	-0.20781	0.58028	0.00000	Uiso	1.00
C389	C	-0.55195	-0.19293	0.60748	0.00000	Uiso	1.00
C390	C	-0.54790	-0.17837	0.63248	0.00000	Uiso	1.00
C391	C	-0.54449	-0.16045	0.66041	0.00000	Uiso	1.00
C392	C	-0.55326	-0.08331	0.67144	0.00000	Uiso	1.00
S393	S	-0.53143	-0.24161	0.68602	0.00000	Uiso	1.00
C394	C	-0.55099	-0.08125	0.70033	0.00000	Uiso	1.00
H395	H	-0.56244	-0.02774	0.65911	0.00000	Uiso	1.00
C396	C	-0.54039	-0.15677	0.71195	0.00000	Uiso	1.00
H397	H	-0.55835	-0.02338	0.71239	0.00000	Uiso	1.00

C398	C	-0.54024	-0.16744	0.74091	0.00000	Uiso	1.00
H399	H	-0.55099	-0.11300	0.75291	0.00000	Uiso	1.00
C400	C	-0.52986	-0.23879	0.75581	0.00000	Uiso	1.00
C401	C	-0.51277	-0.30986	0.74486	0.00000	Uiso	1.00
P402	P	-0.54025	-0.24295	0.79361	0.00000	Uiso	1.00
O403	O	-0.56134	-0.14675	0.80426	0.00000	Uiso	1.00
O404	O	-0.56575	-0.33379	0.80090	0.00000	Uiso	1.00
N405	N	-0.49804	-0.37096	0.73626	0.00000	Uiso	1.00
C406	C	-0.58059	-0.26534	0.47583	0.00000	Uiso	1.00
C407	C	-0.57320	-0.34175	0.46358	0.00000	Uiso	1.00
S408	S	-0.60017	-0.18525	0.45274	0.00000	Uiso	1.00
C409	C	-0.58190	-0.34416	0.43547	0.00000	Uiso	1.00
H410	H	-0.56158	-0.39724	0.47450	0.00000	Uiso	1.00
C411	C	-0.59574	-0.26945	0.42598	0.00000	Uiso	1.00
H412	H	-0.57780	-0.40186	0.42241	0.00000	Uiso	1.00
H413	H	-0.60641	-0.31637	0.38596	0.00000	Uiso	1.00
C414	C	-0.62045	-0.18111	0.38736	0.00000	Uiso	1.00
C415	C	-0.64266	-0.17783	0.36625	0.00000	Uiso	1.00
C416	C	-0.64545	-0.08977	0.35842	0.00000	Uiso	1.00
H417	H	-0.65546	-0.23370	0.35660	0.00000	Uiso	1.00
C418	C	-0.62428	-0.04264	0.37455	0.00000	Uiso	1.00
H419	H	-0.66150	-0.06383	0.34170	0.00000	Uiso	1.00
H420	H	-0.62046	0.02828	0.37306	0.00000	Uiso	1.00
N421	N	-0.60679	-0.26090	0.39903	0.00000	Uiso	1.00
N422	N	-0.60754	-0.09529	0.39288	0.00000	Uiso	1.00
H423	H	-0.58864	-0.07706	0.40740	0.00000	Uiso	1.00
O424	O	0.49276	0.74464	0.81102	0.00000	Uiso	1.00
H425	H	0.36416	0.64822	0.83516	0.00000	Uiso	1.00
H426	H	0.35853	0.85864	0.83946	0.00000	Uiso	1.00

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

_geom_bond_distance

_geom_bond_site_symmetry_2

_ccdc_geom_bond_type

Ti1	O5	1.900	1_455	S
Ti1	O10	2.103	1_455	S
Ti1	O152	1.919	.	S
Ti1	O226	2.093	1_455	S
Ti2	O6	2.006	.	S
Ti2	O11	2.019	.	S
Ti2	O9	2.010	.	S
Ti2	O19	1.924	.	S
Ti2	O7	1.941	.	S
Ti2	O33	1.925	.	S
Ti3	O7	1.946	.	S
Ti3	O10	1.938	.	S
Ti3	O5	2.030	.	S
Ti3	O29	2.085	.	S
Ti3	O11	1.828	.	S
Ti4	O8	2.028	.	S

Ti4	O9	2.109	.	S
Ti4	O24	1.874	.	S
Ti4	O6	1.877	.	S
Ti4	O222	1.987	.	S
Ti4	O12	1.973	.	S
O5	Ti1	1.900	1_655	S
O5	Ti219	2.046	.	S
O6	Ti28	1.917	.	S
O8	Ti61	1.827	.	S
O8	Ti49	1.872	.	S
O9	Ti218	1.966	.	S
O10	Ti1	2.103	1_655	S
O10	Ti25	2.117	1_655	S
O11	Ti15	1.942	.	S
O12	Ti49	2.076	.	S
Ti13	O17	2.121	1_455	S
Ti13	O168	2.006	.	S
Ti13	O22	1.957	.	S
Ti13	O152	1.946	.	S
Ti13	O164	2.028	.	S
Ti13	O238	1.903	.	S
Ti14	O18	1.988	.	S
Ti14	O23	1.997	.	S
Ti14	O21	2.057	.	S
Ti14	O19	1.834	.	S
Ti14	O45	2.107	.	S
Ti15	O19	2.035	.	S
Ti15	O22	2.108	1_655	S
Ti15	O17	1.971	.	S
Ti15	O41	1.895	.	S
Ti15	O23	1.970	.	S
Ti16	O20	2.021	.	S
Ti16	O21	1.928	.	S
Ti16	O18	2.123	.	S
Ti16	O234	2.097	.	S
Ti16	O24	1.893	.	S
O17	Ti13	2.121	1_655	S
O17	Ti231	2.008	.	S
O18	Ti40	2.138	.	S
O20	Ti61	1.909	.	S
O21	Ti230	2.037	.	S
O22	Ti15	2.108	1_455	S
O22	Ti37	1.996	.	S
O24	Ti61	1.934	.	S
Ti25	O29	1.895	1_455	S
Ti25	O34	2.111	1_455	S
Ti25	O176	1.950	.	S
Ti25	O10	2.117	1_455	S
Ti26	O30	2.097	.	S
Ti26	O35	1.994	.	S
Ti26	O33	1.884	.	S

Ti26	O43	1.898	.	S
Ti26	O31	1.956	.	S
Ti26	O201	1.966	1_565	S
Ti27	O31	2.020	.	S
Ti27	O34	1.978	.	S
Ti27	O29	2.103	.	S
Ti27	O197	2.046	1_565	S
Ti27	O35	1.804	.	S
Ti28	O32	2.046	.	S
Ti28	O33	2.002	.	S
Ti28	O48	1.905	.	S
Ti28	O30	2.033	.	S
Ti28	O36	1.974	.	S
O29	Ti25	1.895	1_655	S
O30	Ti196	1.987	1_565	S
O32	Ti85	1.884	.	S
O32	Ti73	1.936	.	S
O34	Ti25	2.111	1_655	S
O34	Ti193	2.093	1_665	S
O35	Ti39	1.900	.	S
O36	Ti73	2.012	.	S
Ti37	O41	2.033	1_455	S
Ti37	O192	2.003	.	S
Ti37	O46	1.950	.	S
Ti37	O176	1.952	.	S
Ti37	O188	1.967	.	S
Ti38	O42	1.939	.	S
Ti38	O47	2.026	.	S
Ti38	O45	2.096	.	S
Ti38	O43	1.795	.	S
Ti38	O213	2.037	1_565	S
Ti39	O43	1.996	.	S
Ti39	O46	2.041	1_655	S
Ti39	O41	1.929	.	S
Ti39	O209	2.008	1_565	S
Ti39	O47	1.957	.	S
Ti40	O44	2.005	.	S
Ti40	O45	1.908	.	S
Ti40	O42	2.114	.	S
Ti40	O48	1.941	.	S
O41	Ti37	2.033	1_655	S
O42	Ti208	2.097	1_565	S
O44	Ti85	1.918	.	S
O46	Ti39	2.041	1_455	S
O46	Ti205	1.903	1_565	S
O48	Ti85	1.972	.	S
Ti49	O53	2.096	.	S
Ti49	O58	2.035	.	S
Ti49	O274	2.011	.	S
Ti50	O54	2.035	.	S
Ti50	O59	2.062	.	S

Ti50	O57	2.036	.	S
Ti50	O67	1.977	.	S
Ti50	O55	1.855	.	S
Ti50	O81	1.913	.	S
Ti51	O55	1.997	.	S
Ti51	O58	1.965	.	S
Ti51	O71	1.962	.	S
Ti51	O53	2.065	.	S
Ti51	O77	1.970	.	S
Ti51	O59	1.886	.	S
Ti52	O56	2.074	.	S
Ti52	O57	2.098	.	S
Ti52	O72	1.903	.	S
Ti52	O54	1.930	.	S
Ti52	O270	1.938	.	S
Ti52	O60	1.963	.	S
O53	Ti267	2.059	.	S
O54	Ti76	1.983	.	S
O55	Ti62	1.857	.	S
O56	Ti97	1.993	.	S
O57	Ti266	2.014	.	S
O58	Ti73	2.103	.	S
O59	Ti63	1.927	.	S
O60	Ti97	1.965	.	S
O60	Ti64	1.884	.	S
Ti61	O65	1.903	.	S
Ti61	O70	1.966	.	S
Ti61	O286	2.048	.	S
Ti62	O66	2.007	.	S
Ti62	O71	1.987	.	S
Ti62	O69	2.059	.	S
Ti62	O93	2.127	.	S
Ti63	O67	2.011	.	S
Ti63	O70	2.065	.	S
Ti63	O65	2.054	.	S
Ti63	O89	2.099	.	S
Ti64	O68	2.030	.	S
Ti64	O69	1.918	.	S
Ti64	O66	2.117	.	S
Ti64	O282	2.098	.	S
O65	Ti279	2.003	.	S
O66	Ti88	2.125	.	S
O68	Ti97	1.950	.	S
O68	Ti109	1.967	.	S
O69	Ti278	2.032	.	S
O70	Ti85	1.970	.	S
Ti73	O77	2.059	.	S
Ti73	O82	2.063	.	S
Ti74	O78	2.087	.	S
Ti74	O83	2.040	.	S
Ti74	O81	1.890	.	S

Ti74	O91	1.979	.	S
Ti74	O79	1.818	.	S
Ti74	O249	2.014	1_565	S
Ti75	O79	1.940	.	S
Ti75	O82	1.915	.	S
Ti75	O95	1.954	.	S
Ti75	O77	1.958	.	S
Ti75	O245	2.060	1_565	S
Ti75	O83	1.828	.	S
Ti76	O80	2.103	.	S
Ti76	O81	2.027	.	S
Ti76	O96	1.917	.	S
Ti76	O78	2.003	.	S
Ti76	O84	1.978	.	S
O78	Ti244	1.939	1_565	S
O79	Ti86	1.810	.	S
O80	Ti121	1.973	.	S
O82	Ti241	2.012	1_565	S
O83	Ti87	1.859	.	S
O84	Ti121	2.014	.	S
O84	Ti88	1.930	.	S
Ti85	O89	1.951	.	S
Ti85	O94	2.049	.	S
Ti86	O90	1.945	.	S
Ti86	O95	1.999	.	S
Ti86	O93	2.112	.	S
Ti86	O261	2.035	1_565	S
Ti87	O91	2.047	.	S
Ti87	O94	2.087	.	S
Ti87	O89	2.029	.	S
Ti87	O257	2.003	1_565	S
Ti88	O92	1.975	.	S
Ti88	O93	1.893	.	S
Ti88	O90	2.112	.	S
O90	Ti256	2.104	1_565	S
O92	Ti121	1.856	.	S
O92	Ti133	1.860	.	S
O94	Ti253	2.048	1_565	S
Ti97	O101	2.013	.	S
Ti97	O106	1.944	.	S
Ti97	O322	1.981	.	S
Ti98	O102	1.995	.	S
Ti98	O107	2.024	.	S
Ti98	O105	2.116	.	S
Ti98	O103	1.827	.	S
Ti98	O129	2.061	.	S
Ti99	O103	2.009	.	S
Ti99	O106	2.029	.	S
Ti99	O119	1.910	.	S
Ti99	O101	1.948	.	S
Ti99	O125	2.019	.	S

Ti99	O107	1.958	.	S
Ti100	O104	1.998	.	S
Ti100	O105	1.908	.	S
Ti100	O102	2.138	.	S
Ti100	O318	2.113	.	S
Ti100	O108	1.936	.	S
O101	Ti315	1.890	.	S
O102	Ti124	2.116	.	S
O103	Ti110	1.900	.	S
O104	Ti145	1.915	.	S
O105	Ti314	2.090	.	S
O106	Ti121	1.909	.	S
O108	Ti145	1.967	.	S
O108	Ti112	1.898	.	S
Ti109	O113	1.970	.	S
Ti109	O118	2.046	.	S
Ti109	O334	2.082	.	S
Ti110	O114	2.006	.	S
Ti110	O119	2.017	.	S
Ti110	O117	1.899	.	S
Ti110	O141	2.031	.	S
Ti110	O115	1.852	.	S
Ti111	O115	1.966	.	S
Ti111	O118	1.954	.	S
Ti111	O113	2.037	.	S
Ti111	O137	1.977	.	S
Ti111	O119	1.883	.	S
Ti111	O404	2.054	1_665	S
Ti112	O116	2.040	.	S
Ti112	O117	1.999	.	S
Ti112	O114	1.924	.	S
Ti112	O330	2.036	.	S
Ti112	O120	1.972	.	S
O113	Ti327	2.053	.	S
O114	Ti136	1.888	.	S
O115	H425	1.140	.	S
O116	Ti145	1.871	.	S
O116	Ti157	1.944	.	S
O117	Ti326	1.868	.	S
O118	Ti133	2.018	.	S
O120	Ti157	2.028	.	S
Ti121	O125	2.115	.	S
Ti121	O130	1.954	.	S
Ti122	O126	1.928	.	S
Ti122	O131	1.991	.	S
Ti122	O129	2.032	.	S
Ti122	O127	1.797	.	S
Ti122	O297	2.092	1_565	S
Ti123	O127	1.981	.	S
Ti123	O130	2.091	.	S
Ti123	O143	2.003	.	S

Ti123	O125	1.978	.	S
Ti123	O293	1.894	1_565	S
Ti123	O131	1.962	.	S
Ti124	O128	2.022	.	S
Ti124	O129	1.928	.	S
Ti124	O126	2.097	.	S
Ti124	O132	1.892	.	S
O126	Ti292	2.110	1_565	S
O127	Ti134	1.856	.	S
O128	Ti169	1.911	.	S
O130	Ti289	1.991	1_565	S
O132	Ti169	1.947	.	S
O132	Ti136	1.884	.	S
Ti133	O137	1.935	.	S
Ti133	O142	2.023	.	S
Ti134	O138	2.107	.	S
Ti134	O143	2.065	.	S
Ti134	O141	1.999	.	S
Ti134	O309	1.898	1_565	S
Ti134	O139	1.868	.	S
Ti135	O139	2.019	.	S
Ti135	O142	1.945	.	S
Ti135	O137	1.983	.	S
Ti135	O305	2.030	1_565	S
Ti135	O143	1.916	.	S
Ti135	O403	1.823	1_665	S
Ti136	O140	2.022	.	S
Ti136	O141	2.114	.	S
Ti136	O138	1.995	.	S
Ti136	O144	1.953	.	S
O138	Ti304	2.037	1_565	S
O139	H426	1.140	.	S
O140	Ti169	1.848	.	S
O140	Ti181	1.876	.	S
O142	Ti301	2.053	1_565	S
O144	Ti181	2.062	.	S
Ti145	O149	1.913	.	S
Ti145	O154	1.953	.	S
Ti145	O370	2.035	.	S
Ti146	O150	1.947	.	S
Ti146	O155	1.997	.	S
Ti146	O153	2.072	.	S
Ti146	O163	1.808	.	S
Ti146	O177	2.067	.	S
Ti147	O151	2.044	.	S
Ti147	O154	2.074	.	S
Ti147	O167	1.915	.	S
Ti147	O149	2.084	.	S
Ti147	O173	2.083	.	S
Ti148	O152	1.984	.	S
Ti148	O153	1.936	.	S

Ti148	O168	1.910	.	S
Ti148	O150	2.111	.	S
Ti148	O366	2.121	.	S
O149	Ti363	2.000	.	S
O150	Ti172	2.102	.	S
O151	Ti158	1.998	.	S
O153	Ti362	2.089	.	S
O154	Ti169	1.965	.	S
O155	Ti159	1.962	.	S
O156	Ti160	1.904	.	S
Ti157	O161	2.119	.	S
Ti157	O166	2.059	.	S
Ti157	O382	2.029	.	S
Ti158	O162	2.089	.	S
Ti158	O167	2.056	.	S
Ti158	O165	1.890	.	S
Ti158	O163	1.801	.	S
Ti158	O189	1.978	.	S
Ti159	O163	1.911	.	S
Ti159	O166	1.953	.	S
Ti159	O161	2.012	.	S
Ti159	O185	1.952	.	S
Ti159	O167	1.901	.	S
Ti160	O164	2.090	.	S
Ti160	O165	2.006	.	S
Ti160	O162	1.973	.	S
Ti160	O378	1.968	.	S
Ti160	O168	1.934	.	S
O161	Ti375	2.023	.	S
O162	Ti184	1.951	.	S
O165	Ti374	1.895	.	S
O166	Ti181	2.070	.	S
Ti169	O173	1.946	.	S
Ti169	O178	2.046	.	S
Ti170	O174	2.001	.	S
Ti170	O179	1.997	.	S
Ti170	O177	2.083	.	S
Ti170	O187	1.835	.	S
Ti170	O345	2.090	1_565	S
Ti171	O175	2.035	.	S
Ti171	O178	2.082	.	S
Ti171	O191	1.854	.	S
Ti171	O173	2.009	.	S
Ti171	O341	1.996	1_565	S
Ti172	O176	1.998	.	S
Ti172	O177	1.886	.	S
Ti172	O192	1.921	.	S
Ti172	O174	2.110	.	S
O174	Ti340	2.121	1_565	S
O175	Ti182	1.951	.	S
O178	Ti337	2.033	1_565	S

O179	Ti183	1.956	.	S
O180	Ti184	1.913	.	S
Ti181	O185	2.027	.	S
Ti181	O190	2.046	.	S
Ti182	O186	2.032	.	S
Ti182	O191	1.996	.	S
Ti182	O189	1.988	.	S
Ti182	O187	1.850	.	S
Ti182	O357	1.895	1_565	S
Ti183	O187	1.982	.	S
Ti183	O190	1.928	.	S
Ti183	O185	1.953	.	S
Ti183	O353	2.025	1_565	S
Ti183	O191	1.815	.	S
Ti184	O188	2.082	.	S
Ti184	O189	2.099	.	S
Ti184	O186	1.930	.	S
Ti184	O192	1.998	.	S
O186	Ti352	1.968	1_565	S
O190	Ti349	2.031	1_565	S
Ti193	O197	1.900	1_455	S
Ti193	O202	2.103	1_455	S
Ti193	O344	1.919	.	S
Ti193	O34	2.093	1_445	S
Ti194	O198	2.006	.	S
Ti194	O203	2.019	.	S
Ti194	O201	2.010	.	S
Ti194	O211	1.924	.	S
Ti194	O199	1.941	.	S
Ti194	O225	1.926	.	S
Ti195	O199	1.946	.	S
Ti195	O202	1.938	.	S
Ti195	O197	2.030	.	S
Ti195	O221	2.085	.	S
Ti195	O203	1.828	.	S
Ti196	O200	2.028	.	S
Ti196	O201	2.109	.	S
Ti196	O216	1.874	.	S
Ti196	O198	1.877	.	S
Ti196	O30	1.987	1_545	S
Ti196	O204	1.973	.	S
O197	Ti193	1.900	1_655	S
O197	Ti27	2.046	1_545	S
O198	Ti220	1.917	.	S
O200	Ti253	1.826	.	S
O200	Ti241	1.872	.	S
O201	Ti26	1.966	1_545	S
O202	Ti193	2.103	1_655	S
O202	Ti217	2.117	1_655	S
O203	Ti207	1.942	.	S
O204	Ti241	2.076	.	S

Ti205	O209	2.121	1_455	S
Ti205	O360	2.006	.	S
Ti205	O214	1.958	.	S
Ti205	O344	1.946	.	S
Ti205	O356	2.028	.	S
Ti205	O46	1.903	1_545	S
Ti206	O210	1.988	.	S
Ti206	O215	1.997	.	S
Ti206	O213	2.057	.	S
Ti206	O211	1.834	.	S
Ti206	O237	2.107	.	S
Ti207	O211	2.035	.	S
Ti207	O214	2.108	1_655	S
Ti207	O209	1.971	.	S
Ti207	O233	1.895	.	S
Ti207	O215	1.970	.	S
Ti208	O212	2.021	.	S
Ti208	O213	1.928	.	S
Ti208	O210	2.123	.	S
Ti208	O42	2.097	1_545	S
Ti208	O216	1.893	.	S
O209	Ti205	2.121	1_655	S
O209	Ti39	2.008	1_545	S
O210	Ti232	2.138	.	S
O212	Ti253	1.909	.	S
O213	Ti38	2.037	1_545	S
O214	Ti207	2.108	1_455	S
O214	Ti229	1.996	.	S
O216	Ti253	1.934	.	S
Ti217	O221	1.895	1_455	S
Ti217	O226	2.111	1_455	S
Ti217	O368	1.950	.	S
Ti217	O202	2.117	1_455	S
Ti218	O222	2.097	.	S
Ti218	O227	1.994	.	S
Ti218	O225	1.884	.	S
Ti218	O235	1.898	.	S
Ti218	O223	1.956	.	S
Ti219	O223	2.020	.	S
Ti219	O226	1.978	.	S
Ti219	O221	2.103	.	S
Ti219	O227	1.804	.	S
Ti220	O224	2.046	.	S
Ti220	O225	2.002	.	S
Ti220	O240	1.904	.	S
Ti220	O222	2.033	.	S
Ti220	O228	1.973	.	S
O221	Ti217	1.895	1_655	S
O224	Ti277	1.883	.	S
O224	Ti265	1.935	.	S
O226	Ti217	2.111	1_655	S

O226	Ti1	2.093	1_655	S
O227	Ti231	1.900	.	S
O228	Ti265	2.011	.	S
Ti229	O233	2.033	1_455	S
Ti229	O384	2.003	.	S
Ti229	O238	1.950	.	S
Ti229	O368	1.952	.	S
Ti229	O380	1.967	.	S
Ti230	O234	1.939	.	S
Ti230	O239	2.026	.	S
Ti230	O237	2.096	.	S
Ti230	O235	1.795	.	S
Ti231	O235	1.996	.	S
Ti231	O238	2.041	1_655	S
Ti231	O233	1.930	.	S
Ti231	O239	1.957	.	S
Ti232	O236	2.004	.	S
Ti232	O237	1.908	.	S
Ti232	O234	2.114	.	S
Ti232	O240	1.941	.	S
O233	Ti229	2.033	1_655	S
O236	Ti277	1.918	.	S
O238	Ti231	2.041	1_455	S
O240	Ti277	1.972	.	S
Ti241	O245	2.097	.	S
Ti241	O250	2.034	.	S
Ti241	O82	2.012	1_545	S
Ti242	O246	2.038	.	S
Ti242	O251	2.062	.	S
Ti242	O249	2.036	.	S
Ti242	O259	1.978	.	S
Ti242	O247	1.857	.	S
Ti242	O273	1.913	.	S
Ti243	O247	1.997	.	S
Ti243	O250	1.964	.	S
Ti243	O263	1.960	.	S
Ti243	O245	2.064	.	S
Ti243	O269	1.970	.	S
Ti243	O251	1.885	.	S
Ti244	O248	2.078	.	S
Ti244	O249	2.099	.	S
Ti244	O264	1.903	.	S
Ti244	O246	1.932	.	S
Ti244	O78	1.939	1_545	S
Ti244	O252	1.962	.	S
O245	Ti75	2.060	1_545	S
O246	Ti268	1.984	.	S
O247	Ti254	1.855	.	S
O248	Ti289	1.992	.	S
O249	Ti74	2.014	1_545	S
O250	Ti265	2.103	.	S

O251	Ti255	1.927	.	S
O252	Ti289	1.966	.	S
O252	Ti256	1.889	.	S
Ti253	O257	1.903	.	S
Ti253	O262	1.966	.	S
Ti253	O94	2.048	1_545	S
Ti254	O258	2.000	.	S
Ti254	O263	1.984	.	S
Ti254	O261	2.056	.	S
Ti254	O285	2.125	.	S
Ti255	O259	2.011	.	S
Ti255	O262	2.065	.	S
Ti255	O257	2.054	.	S
Ti255	O281	2.099	.	S
Ti256	O260	2.024	.	S
Ti256	O261	1.918	.	S
Ti256	O258	2.111	.	S
Ti256	O90	2.104	1_545	S
O257	Ti87	2.003	1_545	S
O258	Ti280	2.117	.	S
O260	Ti289	1.929	.	S
O260	Ti301	1.961	.	S
O261	Ti86	2.035	1_545	S
O262	Ti277	1.971	.	S
Ti265	O269	2.058	.	S
Ti265	O274	2.063	.	S
Ti266	O270	2.087	.	S
Ti266	O275	2.039	.	S
Ti266	O273	1.891	.	S
Ti266	O283	1.979	.	S
Ti266	O271	1.819	.	S
Ti267	O271	1.940	.	S
Ti267	O274	1.914	.	S
Ti267	O287	1.952	.	S
Ti267	O269	1.957	.	S
Ti267	O275	1.828	.	S
Ti268	O272	2.105	.	S
Ti268	O273	2.027	.	S
Ti268	O288	1.917	.	S
Ti268	O270	2.002	.	S
Ti268	O276	1.979	.	S
O271	Ti278	1.808	.	S
O272	Ti313	1.976	.	S
O275	Ti279	1.858	.	S
O276	Ti313	2.020	.	S
O276	Ti280	1.933	.	S
Ti277	O281	1.951	.	S
Ti277	O286	2.049	.	S
Ti278	O282	1.940	.	S
Ti278	O287	1.997	.	S
Ti278	O285	2.111	.	S

Ti279	O283	2.047	.	S
Ti279	O286	2.087	.	S
Ti279	O281	2.029	.	S
Ti280	O284	1.964	.	S
Ti280	O285	1.889	.	S
Ti280	O282	2.106	.	S
O284	Ti313	1.914	.	S
O284	Ti325	1.885	.	S
Ti289	O293	2.014	.	S
Ti289	O298	1.935	.	S
Ti289	O130	1.991	1_545	S
Ti290	O294	1.992	.	S
Ti290	O299	2.017	.	S
Ti290	O297	2.113	.	S
Ti290	O295	1.836	.	S
Ti290	O321	2.058	.	S
Ti291	O295	2.021	.	S
Ti291	O298	2.033	.	S
Ti291	O311	1.906	.	S
Ti291	O293	1.947	.	S
Ti291	O317	2.022	.	S
Ti291	O299	1.956	.	S
Ti292	O296	1.997	.	S
Ti292	O297	1.907	.	S
Ti292	O294	2.137	.	S
Ti292	O126	2.110	1_545	S
Ti292	O300	1.938	.	S
O293	Ti123	1.894	1_545	S
O294	Ti316	2.121	.	S
O295	Ti302	1.918	.	S
O296	Ti337	1.914	.	S
O297	Ti122	2.092	1_545	S
O298	Ti313	1.902	.	S
O300	Ti337	1.969	.	S
O300	Ti304	1.905	.	S
Ti301	O305	1.977	.	S
Ti301	O310	2.073	.	S
Ti301	O142	2.053	1_545	S
Ti302	O306	1.997	.	S
Ti302	O311	2.006	.	S
Ti302	O309	1.902	.	S
Ti302	O307	1.930	.	S
Ti302	O333	2.003	.	S
Ti303	O307	1.941	.	S
Ti303	O310	1.967	.	S
Ti303	O305	2.032	.	S
Ti303	O329	1.992	.	S
Ti303	O311	1.835	.	S
Ti304	O308	2.042	.	S
Ti304	O309	2.009	.	S
Ti304	O306	1.923	.	S

Ti304	O138	2.037	1_545	S
Ti304	O312	1.972	.	S
O305	Ti135	2.030	1_545	S
O306	Ti328	1.876	.	S
O308	Ti337	1.871	.	S
O308	Ti349	1.943	.	S
O309	Ti134	1.898	1_545	S
O310	Ti325	2.033	.	S
O312	Ti349	2.027	.	S
Ti313	O317	2.120	.	S
Ti313	O322	1.958	.	S
Ti314	O318	1.925	.	S
Ti314	O323	1.987	.	S
Ti314	O321	2.029	.	S
Ti314	O319	1.797	.	S
Ti315	O319	1.995	.	S
Ti315	O322	2.096	.	S
Ti315	O335	1.990	.	S
Ti315	O317	1.974	.	S
Ti315	O323	1.962	.	S
Ti316	O320	2.023	.	S
Ti316	O321	1.926	.	S
Ti316	O318	2.104	.	S
Ti316	O324	1.892	.	S
O319	Ti326	1.870	.	S
O320	Ti361	1.913	.	S
O324	Ti361	1.941	.	S
O324	Ti328	1.875	.	S
Ti325	O329	1.885	.	S
Ti325	O334	2.027	.	S
Ti326	O330	2.097	.	S
Ti326	O335	2.045	.	S
Ti326	O333	1.968	.	S
Ti326	O331	1.930	.	S
Ti327	O331	1.992	.	S
Ti327	O334	1.973	.	S
Ti327	O329	2.010	.	S
Ti327	O335	1.849	.	S
Ti328	O332	2.018	.	S
Ti328	O333	2.112	.	S
Ti328	O330	1.979	.	S
Ti328	O336	1.955	.	S
O332	Ti361	1.849	.	S
O332	Ti373	1.877	.	S
O336	Ti373	2.063	.	S
Ti337	O341	1.913	.	S
Ti337	O346	1.958	.	S
Ti337	O178	2.033	1_545	S
Ti338	O342	1.947	.	S
Ti338	O347	1.997	.	S
Ti338	O345	2.072	.	S

Ti338	O355	1.808	.	S
Ti338	O369	2.067	.	S
Ti339	O343	2.044	.	S
Ti339	O346	2.072	.	S
Ti339	O359	1.915	.	S
Ti339	O341	2.085	.	S
Ti339	O365	2.085	.	S
Ti340	O344	1.984	.	S
Ti340	O345	1.936	.	S
Ti340	O360	1.910	.	S
Ti340	O342	2.111	.	S
Ti340	O174	2.121	1_545	S
O341	Ti171	1.996	1_545	S
O342	Ti364	2.102	.	S
O343	Ti350	1.998	.	S
O345	Ti170	2.090	1_545	S
O346	Ti361	1.962	.	S
O347	Ti351	1.962	.	S
O348	Ti352	1.904	.	S
Ti349	O353	2.119	.	S
Ti349	O358	2.059	.	S
Ti349	O190	2.031	1_545	S
Ti350	O354	2.089	.	S
Ti350	O359	2.056	.	S
Ti350	O357	1.889	.	S
Ti350	O355	1.801	.	S
Ti350	O381	1.979	.	S
Ti351	O355	1.911	.	S
Ti351	O358	1.954	.	S
Ti351	O353	2.013	.	S
Ti351	O377	1.952	.	S
Ti351	O359	1.901	.	S
Ti352	O356	2.090	.	S
Ti352	O357	2.007	.	S
Ti352	O354	1.972	.	S
Ti352	O186	1.968	1_545	S
Ti352	O360	1.933	.	S
O353	Ti183	2.025	1_545	S
O354	Ti376	1.951	.	S
O357	Ti182	1.895	1_545	S
O358	Ti373	2.069	.	S
Ti361	O365	1.945	.	S
Ti361	O370	2.048	.	S
Ti362	O366	2.001	.	S
Ti362	O371	1.996	.	S
Ti362	O369	2.082	.	S
Ti362	O379	1.836	.	S
Ti363	O367	2.033	.	S
Ti363	O370	2.079	.	S
Ti363	O383	1.856	.	S
Ti363	O365	2.013	.	S

Ti364	O368	1.998	.	S
Ti364	O369	1.886	.	S
Ti364	O384	1.921	.	S
Ti364	O366	2.110	.	S
O367	Ti374	1.951	.	S
O371	Ti375	1.956	.	S
O372	Ti376	1.914	.	S
Ti373	O377	2.026	.	S
Ti373	O382	2.044	.	S
Ti374	O378	2.032	.	S
Ti374	O383	1.995	.	S
Ti374	O381	1.988	.	S
Ti374	O379	1.850	.	S
Ti375	O379	1.982	.	S
Ti375	O382	1.928	.	S
Ti375	O377	1.951	.	S
Ti375	O383	1.817	.	S
Ti376	O380	2.082	.	S
Ti376	O381	2.099	.	S
Ti376	O378	1.931	.	S
Ti376	O384	1.998	.	S
C385	C386	1.218	.	T
C385	C406	1.358	.	A
C386	C387	1.330	.	D
C387	C388	1.214	.	T
C388	C389	1.327	.	D
C389	C390	1.218	.	T
C390	C391	1.361	.	A
C391	C392	1.322	.	D
C391	S393	1.800	.	S
C392	C394	1.376	.	A
C392	H395	1.083	.	S
S393	C396	1.811	.	S
C394	C396	1.332	.	D
C394	H397	1.083	.	S
C396	C398	1.386	.	A
C398	H399	1.083	.	S
C398	C400	1.351	.	D
C400	C401	1.364	.	A
C400	P402	1.842	.	S
C401	N405	1.159	.	T
P402	O424	1.533	1_445	D
P402	O404	1.725	.	S
P402	O403	1.742	.	S
O403	Ti135	1.823	1_445	S
O404	Ti111	2.054	1_445	S
C406	C407	1.324	.	D
C406	S408	1.800	.	S
C407	C409	1.378	.	A
C407	H410	1.083	.	S
S408	C411	1.807	.	S

C409	C411	1.328	.	D
C409	H412	1.082	.	S
C411	N421	1.357	.	A
H413	N421	1.043	.	S
C414	C415	1.322	.	D
C414	N421	1.428	.	S
C414	N422	1.414	.	S
C415	C416	1.385	.	A
C415	H417	1.081	.	S
C416	C418	1.329	.	D
C416	H419	1.082	.	S
C418	H420	1.084	.	S
C418	N422	1.346	.	A
N422	H423	1.042	.	S
O424	P402	1.533	1_665	D