

Supplementary information

1-LIST OF REACTIONS	2
2-BEP EQUATIONS FOR MONOALCOHOL DEHYDROGENATION WITH/WITHOUT WATER	3
a) Water-assisted situation	3
b) Non water-assisted situation	4
3-REACTION NETWORK FOR GLYCEROL AND 1,2-PDO DEHYDROGENATION	5
a) Unsaturated species	5
b) Radical species	6
4-STRUCTURES	7
a) Monoalcohols structures	7
b) Glycerol / 1,2-PDO structures	596

1-List of reactions

We present the list of reactions used in the current article to build the BEP relationships for every metallic catalyst in the water-assisted situation.

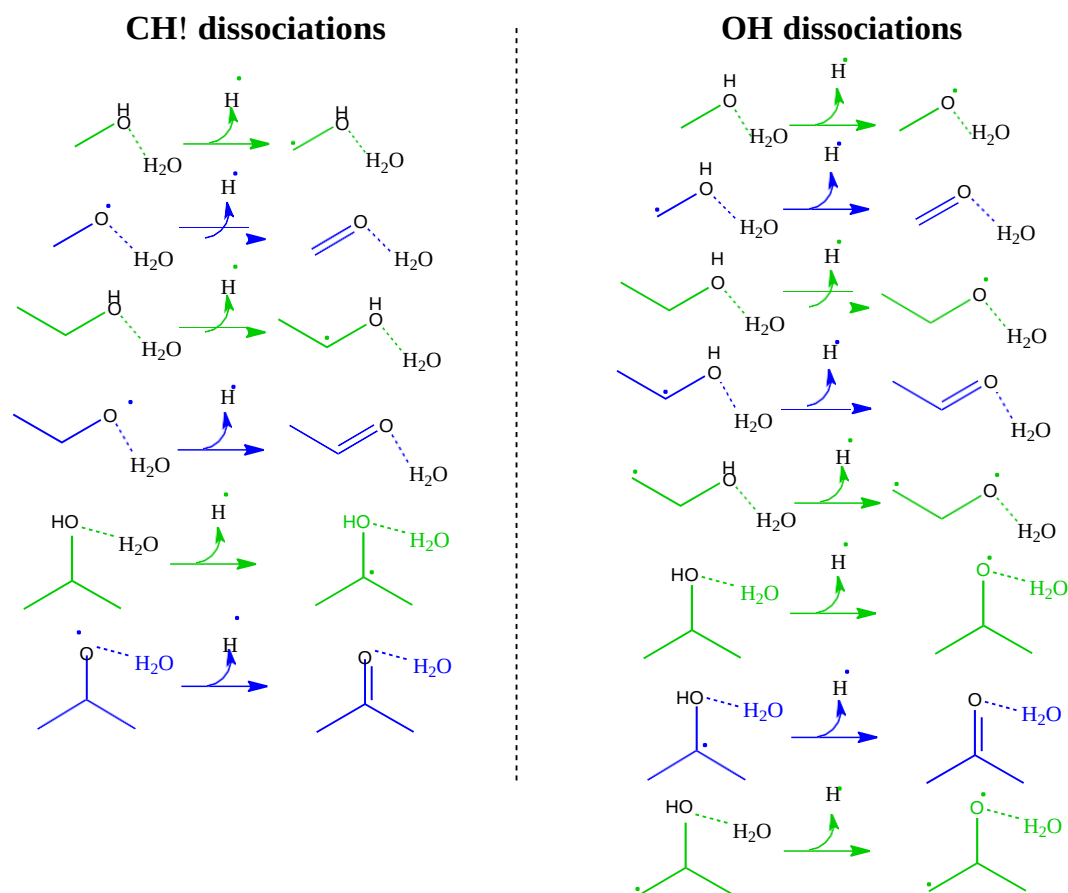


Figure S1: List of reactions used to build the BEP relationships in the water-assisted (WA) situation. Green color refers to reaction producing radicals. And blue color refers to reaction producing ketones.

2-BEP equations for monoalcohol dehydrogenation with/without water

We present here the list of equations for the BEP relationships designed in the current paper for the water-assisted situation. We also recalled the BEP equations we obtained in non water-assisted situation in our previous work.¹

a) Water-assisted situation

Table S1: BEP Correlation parameters (with corresponding confidence interval) for monoalcohol CH dissociations in the water-assisted situation. We present here the metal-dependent relations, specific to each metals. And we also mention the global relationship when considering all the metals together.

CH	slope	intercept
global	0.77 ± 0.04	0.78 ± 0.13
Rh	1.03 ± 0.24	0.75 ± 0.04
Pt	1.39 ± 0.85	0.94 ± 0.23
Ir	1.20 ± 0.34	0.69 ± 0.08
Pd	0.90 ± 0.18	0.96 ± 0.08
Ni	0.88 ± 0.32	0.74 ± 0.10
Ru	1.25 ± 0.79	0.74 ± 0.13
Co	1.33 ± 0.29	0.47 ± 0.13

Table S2: BEP Correlation parameters (with corresponding confidence interval) for monoalcohol OH dissociations in the water-assisted situation. We present here the metal-dependent relations, specific to each metals. And we also mention the global relationship when considering all the metals together.

OH	slope	intercept
tout	0.23 ± 0.02	0.69 ± 0.05
Rh	0.02 ± 0.19	0.59 ± 0.05
Pt	0.29 ± 0.21	0.67 ± 0.08
Ir	0.20 ± 0.27	0.66 ± 0.06
Pd	0.31 ± 0.10	0.78 ± 0.02
Ni	0.13 ± 0.24	0.69 ± 0.10
Ru	-0.25 ± 0.32	0.41 ± 0.16
Co	0.36 ± 0.17	0.78 ± 0.09

¹ Zaffran, J.; Michel, C.; Delbecq, F.; Sautet, P., Trade-Off between Accuracy and Universality in Linear Energy Relations for Alcohol Dehydrogenation on Transition Metals. *The Journal of Physical Chemistry C* **2015**, 119 (23), 12988-12998

b) Non water-assisted situation

Table S3: BEP Correlation parameters (with corresponding confidence interval) for monoalcohol CH dissociations in the non water-assisted situation. We present here the metal-dependent relations, specific to each metals. And we also mention the global relationship when considering all the metals together.

CH	Slope	intercept
tout	0.60 ± 0.03	0.75 ± 0.11
Rh	1.02 ± 0.39	0.80 ± 0.06
Pt	1.05 ± 0.75	0.90 ± 0.28
Ir	0.99 ± 0.35	0.71 ± 0.06
Pd	0.07 ± 0.45	0.64 ± 0.19
Ni	0.80 ± 0.36	0.71 ± 0.08
Ru	0.97 ± 0.31	0.77 ± 0.05
Co	0.87 ± 0.51	0.64 ± 0.19

Table S4: BEP Correlation parameters (with corresponding confidence interval) for monoalcohol OH dissociations in the non water-assisted situation. We present here the metal-dependent relations, specific to each metals. And we also mention the global relationship when considering all the metals together.

OH	slope	intercept
tout	0.11 ± 0.03	0.83 ± 0.07
Rh	0.48 ± 0.59	0.87 ± 0.11
Pt	0.18 ± 0.14	0.80 ± 0.07
Ir	0.21 ± 0.18	0.73 ± 0.05
Pd	0.45 ± 0.33	0.89 ± 0.08
Ni	0.44 ± 0.63	0.98 ± 0.26
Ru	-0.16 ± 0.41	0.67 ± 0.20
Co	-0.07 ± 0.80	0.76 ± 0.49

3- Reaction network for glycerol and 1,2-PDO dehydrogenation

We present here the complete dehydrogenation reaction network for glycerol and 1,2 propanediol (1,2-PDO). We focused on the first and second dissociation, assuming that two successive dehydrogenations cannot happen on the same reactive center.

a) Unsaturated species

We list firstly the reaction leading to unsaturated species.

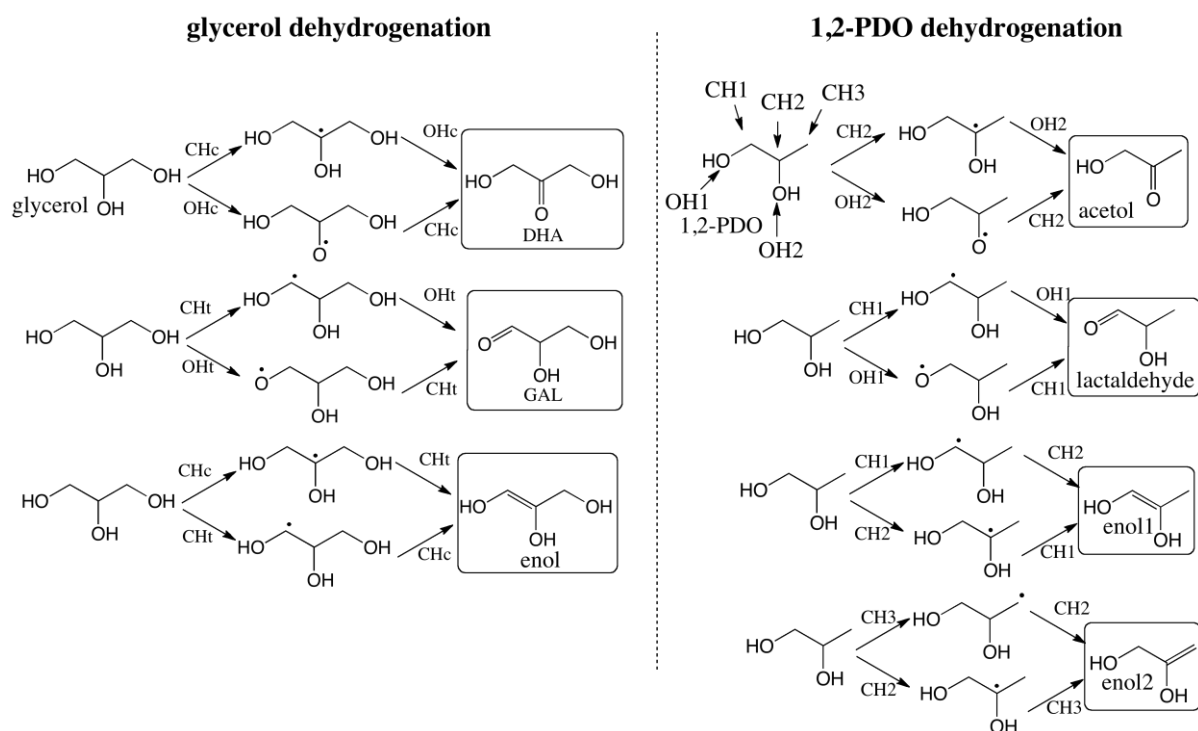


Figure S2: Dehydrogenation reaction network for glycerol (left) and 1,2 propanediol (1,2-PDO) (right). Only reactions leading to unsaturated species are listed here. GAL: Glyceraldehyde; DHA: Dihydroxyacetone.

b) Radical species

We list now the reactions leading to radical species.

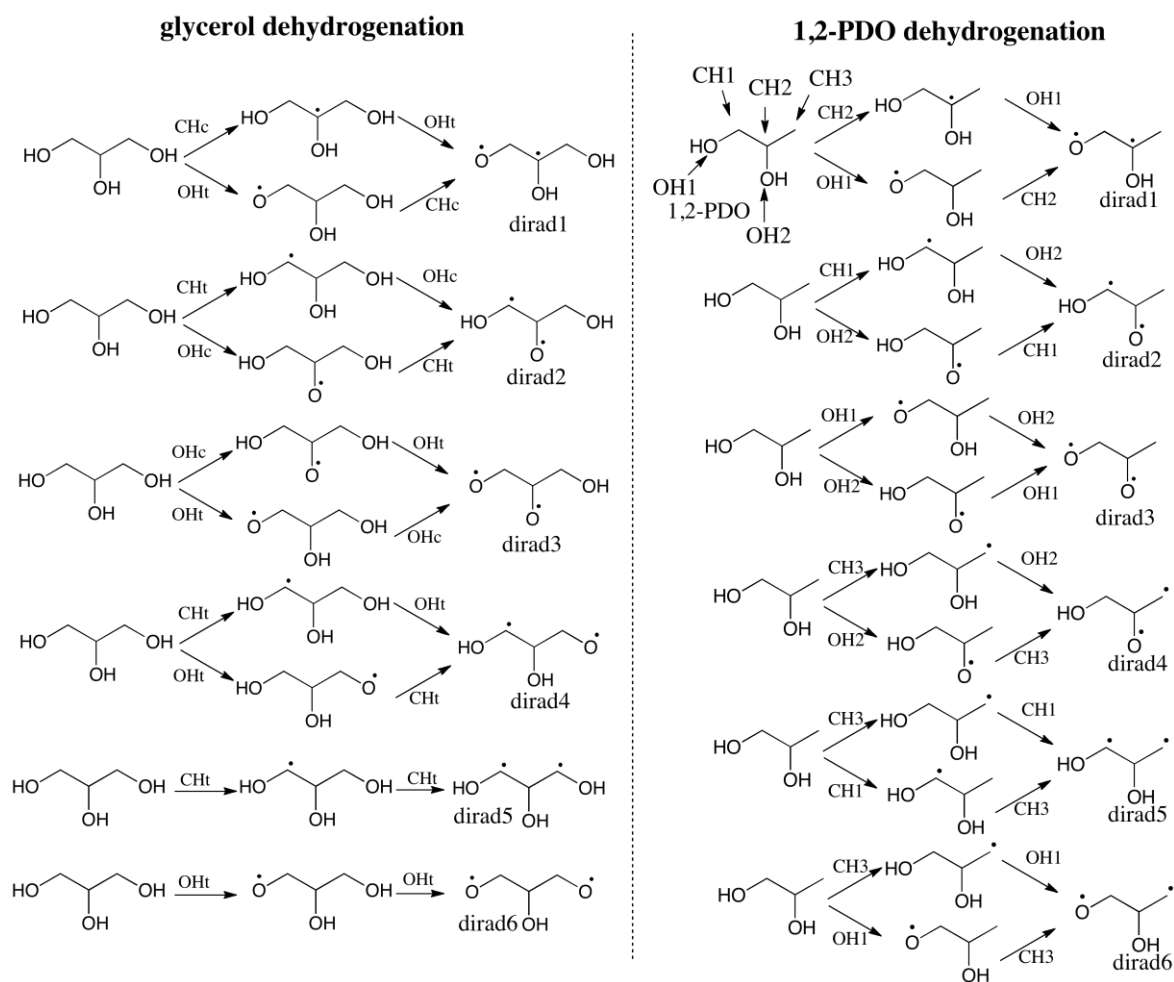


Figure S3: Dehydrogenation reaction network for glycerol (left) and 1,2 propanediol (1,2-PDO) (right). Only reactions leading to radical species are listed here.

4-Structures

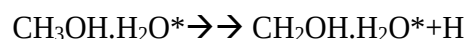
All the structures are presented in POSCAR format (for VASP software). We reported the absolute energy for each of them, and also the chemical nature of each atom kind after the “#” sign.

a) Monoalcohols structures

We list here the monoalcohol structures used in this paper to build the BEP relationships in water-assisted situation. For each reaction initial state (IS), transition state (TS) and final state (FS) are reported.

CH dissociation

Co catalyst



IS: -285.271320 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495310

36 1 2 6 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2233031608003848	0.1139646207601886	0.2245780508903178	T	T	T
0.5548407528349356	0.1103058654013637	0.2227155603509272	T	T	T
0.8884985699328323	0.1108758171868294	0.2229099557765279	T	T	T
0.2234207953641019	0.4425352063823265	0.2247986125105909	T	T	T
0.5519335191860814	0.4426681680409401	0.2245189939929741	T	T	T
0.8889014164582383	0.4443807587991661	0.2229263139659610	T	T	T

0.5550462639887143	0.7773910620800007	0.2232079820693370	T	T	T
0.8886235484334672	0.7769657256350655	0.2228655600742406	T	T	T
0.2212738686213241	0.7770573699261701	0.2231752958510005	T	T	T
0.9964049502489685	0.9965381472886776	0.3286298641792247	T	T	T
0.3324263868225519	0.9970068000005660	0.3289273732043507	T	T	T
0.6665229598964859	-0.0001821153636094	0.3295968166044105	T	T	T
0.3327375751816315	0.3324985911274048	0.3372900578968205	T	T	T
0.6684688679213254	0.3322578422163953	0.3284517667366498	T	T	T
0.9964914275934791	0.3320999947378472	0.3292800305907279	T	T	T
0.3327333334519356	0.6684718896620845	0.3294335362898143	T	T	T
0.6688465254517787	0.6683918876954065	0.3290284504001171	T	T	T
0.9988716484289397	0.6656580088556927	0.3299112487861707	T	T	T
0.6804575529241766	0.1971955492945569	0.5390885873585365	T	T	T
0.6841657417273939	0.3726729664592827	0.5046501074493606	T	T	T
0.3305028873014461	0.3307142283495990	0.4535476677359834	T	T	T
0.7766232276410490	0.4141518289632909	0.4616734149190109	T	T	T
0.5702677744225324	0.1509053130630467	0.5844462842919468	T	T	T
0.2164465311561821	0.1961223672012715	0.4682347317282521	T	T	T
0.4616054286255993	0.3420259452183326	0.4743643844117414	T	T	T
0.8338813590424123	0.2401300956659461	0.5609611538311466	T	T	T
0.6300696937745583	0.0670822341527228	0.5006954553766019	T	T	T

TS: -284.198867 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310
36 1 2 6 # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888856 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222218 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2223787894396154 0.1145782675241672 0.2241668777392769 T T T
0.5562164568233465 0.1095910970227684 0.2235253374270936 T T T
0.8857223598206916 0.1102447371417477 0.2235859605257440 T T T
0.2237743706822615 0.4436190139622807 0.2242451195727132 T T T
0.5523590222190559 0.4436594511025986 0.2242292016169501 T T T
0.8887045413890999 0.4451436249588201 0.2223446542918430 T T T
0.5563440494744503 0.7815024447378546 0.2239468113177721 T T T
0.8884132358844293 0.7780544156673196 0.2226057222488978 T T T
0.2205193379172382 0.7771455755698771 0.2226366315373884 T T T
0.9980305316633518 0.9988508759005079 0.3293815941292987 T T T
0.3287533491846006 0.9959458422195576 0.3274129605335998 T T T
0.6657432629308895 0.0021891222996217 0.3389417193063120 T T T
0.3346443898862632 0.3336245457253865 0.3360985604778477 T T T
0.6699023578811698 0.3363168637441739 0.3277315094523658 T T T
0.0025001866693834 0.3363643026846009 0.3287604656701748 T T T
0.3315592955423790 0.6677445513350061 0.3286012934098126 T T T
0.6695539583767713 0.6700368816558872 0.3285760978145216 T T T
0.9999183943263776 0.6670859809243118 0.3291717916593244 T T T
0.6700172198900429 0.0512445171143523 0.4553230102352374 T T T
0.6815650942130438 0.2440272954456085 0.4730197390135302 T T T
0.3620073417992160 0.3250017174244013 0.4545025984161445 T T T
0.8129992382335983 0.3588203426264100 0.4539006320942711 T T T
0.5079179653861978 0.9287541993623640 0.4601686829747451 T T T
0.2336753063016334 0.2069196738297771 0.4718430216101417 T T T

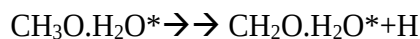
0.4735606987587996	0.2917875561050794	0.4648794355209371	T	T	T
0.7625845072071378	0.0183994992254956	0.4939964714058745	T	T	T
0.8416571900823206	0.1030726629446127	0.3979542776801801	T	T	T

```

FS:          -280.912167 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000002  2.5980762113533200  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495310
36  1  2  5          # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2227992613514497 0.1139159904018214 0.2239809599414575 T T T
0.5571457023379072 0.1105796598687129 0.2243154174819138 T T T
0.8856594918556017 0.1092389554048306 0.2228712248918099 T T T
0.2240822863017631 0.4435085820707376 0.2238505499001351 T T T
0.5534021485378998 0.4420671191473335 0.2255568251524969 T T T
0.8867274323815824 0.4435267513660595 0.2230398808956698 T T T
0.5563485670640874 0.7800153714658125 0.2233549435751910 T T T
0.8880162578331808 0.7768678019800259 0.2225196170298178 T T T
0.2208913457001603 0.7764557082450333 0.2223431060588973 T T T
-0.0041164088678775 0.9966384795403801 0.3281599206748512 T T T
0.3283663001242901 0.9953828274020078 0.3276545842852909 T T T
0.6669342900075347 0.0024038326438037 0.3372775848774295 T T T
0.3303787272225073 0.3331067681476067 0.3357177556262687 T T T
0.6685756134029013 0.3334512305310179 0.3321068563005615 T T T
0.0011421147185103 0.3337498834134064 0.3272177769270590 T T T
0.3323734469331201 0.6683281144351652 0.3286303004341825 T T T
0.6685797109449458 0.6711247794691965 0.3287850030312751 T T T
0.0001888038622468 0.6674089190093154 0.3285835894954139 T T T
0.6463098211864731 0.0606251258340700 0.4417805759290181 T T T
0.6734319974331702 0.2699362966323434 0.4534889075498071 T T T
0.3404213559949547 0.3283410060812142 0.4552947786808342 T T T
0.8214405029652524 0.3713413598396914 0.4572100174788715 T T T
0.4933821426761847 0.9547897262257372 0.4648822016846695 T T T
0.2198098979342411 0.1963202919213016 0.4685230536891260 T T T

```

0.4626645942637280	0.3122984022169616	0.4650649567455661	T	T	T
0.7631864251422936	0.0484878182198392	0.4744442558953448	T	T	T



IS: -281.658732 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2255553871472584	0.1133467603199307	0.2255991899440375	T	T	T
0.5546820948159666	0.1113123226374773	0.2253279968284934	T	T	T
0.8897888034507648	0.1111356375742277	0.2220940570992878	T	T	T
0.2226082928475180	0.4437436245236542	0.2226998281521095	T	T	T
0.5532500527593625	0.4410592326705219	0.2256797233996735	T	T	T
0.8854548405869238	0.4434896445651412	0.2233222306030223	T	T	T
0.5551215412226582	0.7765108291663123	0.2223276355056768	T	T	T
0.8890453675891827	0.7772563020608253	0.2226255659491813	T	T	T
0.2228890167583831	0.7805955158047506	0.2236335293285007	T	T	T
0.9989732014930497	0.9967392563882360	0.3281731045961588	T	T	T
0.3329721187399736	0.9979315789876390	0.3362569546802811	T	T	T
0.6714543791218139	0.9953196710664759	0.3279188026313917	T	T	T
0.3265420580870259	0.3401863465869349	0.3338162474759613	T	T	T
0.6684490875586564	0.3320271569904663	0.3362644112074316	T	T	T
0.9970589790136217	0.3326094337040434	0.3273854085933909	T	T	T
0.3329031797938826	0.6686361779212310	0.3279090792283790	T	T	T
0.6702889988616039	0.6675808134184411	0.3283285510673606	T	T	T
-0.0003373125040976	0.6664634848188908	0.3290416942461308	T	T	T
0.5892547301663273	0.0760936349769279	0.4813429119430632	T	T	T
0.5112731203382783	0.1543215523064063	0.4256356000043882	T	T	T
0.3307702611170873	0.3560649641430222	0.4502891468235757	T	T	T
0.1892483453086485	0.2705286353556917	0.4676141180626691	T	T	T

0.4018137737495376	0.2682539763169724	0.4530987109619931	T	T	T
0.6490412780754158	0.9794209394955591	0.4577872086150454	T	T	T
0.4641389153814758	0.9793147364085749	0.5196578777932257	T	T	T
0.7155351710128682	0.2058575152119810	0.5111180620343443	T	T	T

TS: -280.949734 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533200	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495310

36 1 2 5 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888856	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222218	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2239095964835586	0.1130114371552662	0.2256368678752637	T	T	T
0.5556167120639823	0.1097091461332351	0.2255371462069143	T	T	T
0.8874787192111410	0.1103537164111793	0.2226871874911220	T	T	T
0.2220653074473035	0.4435081995012796	0.2228627252273056	T	T	T
0.5524906781681456	0.4419251435991740	0.2248975511978848	T	T	T
0.8859149123964516	0.4437227656876112	0.2229898121850354	T	T	T
0.5555606997369625	0.7794229148864497	0.2226809252280607	T	T	T
0.8888114482165607	0.7780459759337210	0.2223948962646490	T	T	T
0.2221365625083376	0.7798948317858905	0.2233677419663540	T	T	T
0.9984880537124160	-0.0026260861868413	0.3294174429158883	T	T	T
0.3292513967198851	-0.0019464165465472	0.3343638640233648	T	T	T
0.6713015532732907	0.9927867177053257	0.3356122609841976	T	T	T
0.3288345112776723	0.3399360431651048	0.3342216101514082	T	T	T
0.6677983889382691	0.3369904456380835	0.3333804859208194	T	T	T
0.9993126183083247	0.3348019760104637	0.3274681624470012	T	T	T
0.3309179251330155	0.6670541138969710	0.3272231721432048	T	T	T
0.6700737329482913	0.6672504452954615	0.3276914009057102	T	T	T
0.9996443721419954	0.6669903360633124	0.3284267973151659	T	T	T
0.6287422609802680	0.0411694524728134	0.4459664322220289	T	T	T
0.5228510062159537	0.1397923602723788	0.4214148514680015	T	T	T
0.3459928285615786	0.3548356327590739	0.4533378433966188	T	T	T
0.5263722443985747	0.8847885322280835	0.4672149960553673	T	T	T
0.2053489887826205	0.2706317279247515	0.4716801796972337	T	T	T
0.4148162259300310	0.2700135609397598	0.4593228516503800	T	T	T

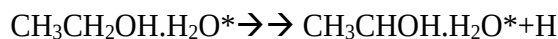
0.7467529035656841	0.1372775843688729	0.4866098267637367	T	T	T
0.8128435129211709	0.0449008516198137	0.4037076565823819	T	T	T

```

FS:          -277.602144 eV
2.490000000000000
  3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000002  2.5980762113533200  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495310
36  1  2  4      # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.44444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.44444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.44444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.77777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.77777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.77777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.00000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.00000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.00000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2245022486988943 0.1134894877766785 0.2251740376918029 T T T
0.5556844975197278 0.1099313969475511 0.2256290827986193 T T T
0.8876388838342265 0.1111162998395425 0.2219777031443069 T T T
0.2221100472251853 0.4438017378653579 0.2231488334965595 T T T
0.5523738321342003 0.4413678249182931 0.2253081434427447 T T T
0.8856613934814065 0.4434895350027762 0.2230486903238049 T T T
0.5547986602268321 0.7783059403009455 0.2223248708877935 T T T
0.8880962769208190 0.7775329555576452 0.2223507693393521 T T T
0.2220742905047123 0.7798802334197241 0.2231633565058952 T T T
0.9969237984311430 0.9964399533599254 0.3277506057311760 T T T
0.3294573706132037 -0.0009193658517042 0.3340536633925665 T T T
0.6731013193638626 0.9927962836125982 0.3338906453963922 T T T
0.3261126997140101 0.3392880972759477 0.3343335933381127 T T T
0.6657664605486523 0.3343260783126617 0.3342285807006577 T T T
-0.0037667621126214 0.3325301044280612 0.3272136617177715 T T T
0.3320073336039792 0.6687122552744421 0.3276382514749356 T T T
0.6692082472608925 0.6683740036714229 0.3280570738753241 T T T
0.9983036265187553 0.6663139409937014 0.3283589274909128 T T T
0.6205071621873363 0.0363256037090443 0.4368310851290375 T T T
0.5161990080634777 0.1446871410614859 0.4212041758783235 T T T
0.3339630544673586 0.3505381423541863 0.4525618742850614 T T T
0.5210160658970945 0.8889025215412449 0.4649015091784410 T T T
0.1931617812882785 0.2663875950717736 0.4707394514373633 T T T
0.4039417382029405 0.2668543806772774 0.4594868374017336 T T T

```

0.7653760253284647 0.1327893385974089 0.4668345920246511 T T T



IS: -301.982096 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2219903285953584	0.1109890232198733	0.2228335807291043	T	T	T
0.5571301690853885	0.1142788609080611	0.2246546344199747	T	T	T
0.8888693868633083	0.1111646513581134	0.2229781832506939	T	T	T
0.2220391304007618	0.4445027249472440	0.2231522633314524	T	T	T
0.5570442931788413	0.4426474062363123	0.2246495005091524	T	T	T
0.8856884193889168	0.4427260163805327	0.2247569115099531	T	T	T
0.5550076468011169	0.7774393209456389	0.2228883925572036	T	T	T
0.8890174122728379	0.7776938320150314	0.2229045023748814	T	T	T
0.2220466801333127	0.7772694612847898	0.2229208683474987	T	T	T
0.9999196727074450	0.9998406107800054	0.3294442424639624	T	T	T
0.3306656177351365	0.9970416248165721	0.3287988341523200	T	T	T
0.6659726314289517	0.9963030999467273	0.3289246141231557	T	T	T
0.3309653148062341	0.3331057092962078	0.3290161713113367	T	T	T
0.6666829567780176	0.3333109329429698	0.3372767157282904	T	T	T
0.0021187482471367	0.3328548909975965	0.3292830036516065	T	T	T
0.3338811517535121	0.6670665239536907	0.3298093664157684	T	T	T
0.6666540969125917	0.6694482787477296	0.3287733745467928	T	T	T
0.0024464955453083	0.6693125383937119	0.3290427910557998	T	T	T
0.6088139164574362	0.7060441443728004	0.5621214382151779	T	T	T
0.8375988174312439	0.8529026716245187	0.5493139371575373	T	T	T
0.6685641702203182	0.3258475636747319	0.4535440711750932	T	T	T
0.5134516982626898	0.5500968945981284	0.5056705128509325	T	T	T

0.5231908968390477	0.7902911003213612	0.5664000188479820	T	T	T
0.6116697788572218	0.4112969889784027	0.4761067875999876	T	T	T
0.4938940830329983	0.6120909056341344	0.4608100569245900	T	T	T
0.9026539807160212	0.9645724361860600	0.5945010985522620	T	T	T
0.9224051674137294	0.7680995266475625	0.5461116868645597	T	T	T
0.8640084543204488	0.9401280173717983	0.4981691217420345	T	T	T
0.5830673598262822	0.6187611965638341	0.6130925738754007	T	T	T
0.5742028255615038	0.1823887194786685	0.4671502731340927	T	T	T

TS: -300.712108 eV
2.490000000000000
3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310
36 2 2 8 # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2214087899945148 0.1130580833764075 0.2239793437197012 T T T
0.5554799855466024 0.1080953872579680 0.2236869217166277 T T T
0.8847722496707296 0.1088158701717935 0.2238199296437147 T T T
0.2228464325572079 0.4422305202238469 0.2241077916400920 T T T
0.5512674785596484 0.4425108833392132 0.2241702986650641 T T T
0.8878267070153089 0.4439152022885843 0.2223466346939858 T T T
0.5556155913229543 0.7806289914196403 0.2242086866357851 T T T
0.8875149717646087 0.7769934626644970 0.2226938132182755 T T T
0.2197556761218431 0.7759183566315366 0.2224639672830694 T T T
0.9969124187726072 0.9966798706786844 0.3294387079323887 T T T
0.3286917739269985 0.9939738257329273 0.3270958469500435 T T T
0.6652960432390094 0.0005351098484283 0.3404442385511210 T T T
0.3330697196052909 0.3309862157015603 0.3358924300217985 T T T
0.6682761694633603 0.3344739183107575 0.3275749667799051 T T T
0.0010197362054274 0.3349058357845278 0.3285281651828289 T T T
0.3306038514895624 0.6657954665765868 0.3284648586374887 T T T
0.6678525339559365 0.6676987906236052 0.3286878184472558 T T T
0.9984704311317619 0.6648969569410534 0.3289286635315807 T T T
0.6957802674931086 0.0666041200620012 0.4632036552539834 T T T
0.5023734803914724 0.8880292607747980 0.4956401180097090 T T T
0.6874920258436042 0.2534255315606019 0.4729290591346780 T T T
0.3414444729362643 0.2949471985085642 0.4546686442601256 T T T
0.8087767052301132 0.3681719338205638 0.4479647296956132 T T T
0.3658898904871278 0.4218153430684448 0.4786321241359858 T T T

0.4643204395527998	0.2797495592253719	0.4652323211751426	T	T	T
0.4924742634352209	0.9181748825097706	0.5542157942312114	T	T	T
0.3602572400167235	0.8613926759377761	0.4681841611659549	T	T	T
0.5119756294783077	0.7465167510350397	0.4912447654778344	T	T	T
0.8299222542890150	0.0823748086908718	0.4938475904562095	T	T	T
0.8455849308876705	0.0990679022672037	0.3977081122262430	T	T	T

```

FS:          -297.533152 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
 36  2  2  7          # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2225200313101227 0.1123787095158838 0.2220462656558883 T T T
0.5579758208109610 0.1109271915993340 0.2237479613536033 T T T
0.8864882546575835 0.1095328484387882 0.2235800096568793 T T T
0.2242992721715955 0.4474243093690625 0.2231134843172893 T T T
0.5561008899742648 0.4455201692312319 0.2225507652316399 T T T
0.8907078807910799 0.4487201706880006 0.2235242024061515 T T T
0.5554855057936354 0.7802629526952398 0.2254234232468208 T T T
0.8907863651132902 0.7773267011867726 0.2231570345465343 T T T
0.2201553943288535 0.7762949381669888 0.2247546324172928 T T T
0.0036490875405959 0.0000512127649667 0.3281888216947300 T T T
0.3329861023651196 0.0046614433688952 0.3275907633334798 T T T
0.6695768432776468 0.0034498615923233 0.3350924763833155 T T T
0.3336446321970601 0.3324526703214802 0.3282847850687822 T T T
0.6669470944422393 0.3367905175744183 0.3285650797332120 T T T
-0.0001904745253131 0.3312717755993034 0.3269961355607881 T T T
0.3321121840963626 0.6654669301098765 0.3322747058424212 T T T
0.6700032240924392 0.6651263923572862 0.3286774227560980 T T T
0.0019667968727246 0.6660606601224249 0.3395639188631711 T T T
0.0618427525862536 0.6426975184082863 0.4451726939942752 T T T
0.0658835779353849 0.8011130822967156 0.4980635053450076 T T T
0.6589736580447015 0.0012909511243851 0.4552400441011624 T T T
0.2697332676794076 0.6562794891755293 0.4507034083019065 T T T
0.9494038881865858 0.4864872429453824 0.4643854113866471 T T T
0.5214830358167912 0.8782062335473724 0.4649311025204571 T T T

```

0.1080026542922558	0.7776017500629308	0.5536588593804290	T	T	T
0.1740798798954785	0.9607345881600295	0.4809718313210175	T	T	T
0.9101264849296157	0.7818213944211668	0.5007019531882837	T	T	T
0.7614792730655258	0.9625831687231157	0.4689398898057377	T	T	T
0.2484949323367569	0.5169619569417985	0.4583512882222066	T	T	T

CH₃CH₂O.H₂O*→→CH₃CHO.H₂O*+H

IS: -298.410449 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2258742710184049	0.1133357615927982	0.2256689732977647	T	T	T
0.5551607719583431	0.1115226996119938	0.2253813924856969	T	T	T
0.8899412137249632	0.1111536117584958	0.2221730807924041	T	T	T
0.2229675397709549	0.4437450408296644	0.2227458153552134	T	T	T
0.5536495457531478	0.4411413780397132	0.2256649603917533	T	T	T
0.8858540200011776	0.4436210397626604	0.2232874091662123	T	T	T
0.5554384660617412	0.7766237689584751	0.2223604143837949	T	T	T
0.8894178721204293	0.7774360413627959	0.2225965539971556	T	T	T
0.2233045957316834	0.7808010700977481	0.2236651322088632	T	T	T
0.9995359684354748	0.9968639163112563	0.3281708985663655	T	T	T
0.3335568636521525	0.9983322701235224	0.3364252894989290	T	T	T
0.6714842585632734	0.9950432899896933	0.3281140279383385	T	T	T
0.3269491375259414	0.3401211142516126	0.3339285842150566	T	T	T
0.6688643757548555	0.3324565031668881	0.3361203736594995	T	T	T
0.9975426942696599	0.3327996052044053	0.3273305334075369	T	T	T
0.3330104709943007	0.6685572040750651	0.3279068850177750	T	T	T
0.6705793336295041	0.6677041772282246	0.3282820552494641	T	T	T
0.0000211914346207	0.6666631586230679	0.3289441507663395	T	T	T
0.5946510417443811	0.0759510571452261	0.4802969632168522	T	T	T
0.7596158147310815	0.2488508561205379	0.5261122114405736	T	T	T
0.5133025368749996	0.1552865694386188	0.4256107518917909	T	T	T
0.3308490248457572	0.3553902924612663	0.4506175045978169	T	T	T
0.1892768940890411	0.2686704077541446	0.4677331982023317	T	T	T

0.4026854428662565	0.2684428523829456	0.4533657812617796	T	T	T
0.6977322100591552	0.3360550844569284	0.5544375530410774	T	T	T
0.8191989845153843	0.1856416046727564	0.5677058122321783	T	T	T
0.8886665375994858	0.3577414482047902	0.4912773564927970	T	T	T
0.6590726959651384	0.9868417315769155	0.4531564514191201	T	T	T
0.4644586594038609	0.9647734898989102	0.5143235709049092	T	T	T

TS: -297.707153 eV
 2.4900000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222215	0.1111111111111146	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555574	0.1111111111111146	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888855	0.1111111111111146	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222291	0.44444444444444514	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555578	0.44444444444444514	0.0000000000000000	F	F	F
0.88888888888888928	0.44444444444444514	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222218	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666647	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2250937976289337	0.1148242958355492	0.2249284779714684	T	T	T
0.5568357905152943	0.1110794405519601	0.2254339664587488	T	T	T
0.8869095374820243	0.1110145371231219	0.2227950943029612	T	T	T
0.2232590140399587	0.4445640449701567	0.2227398396881506	T	T	T
0.5540202654112601	0.4435381747816270	0.2256314833688428	T	T	T
0.8868507705949903	0.4447486791090793	0.2230766011833822	T	T	T
0.5565103582613471	0.7798390869837311	0.2230983882644042	T	T	T
0.8888808789240216	0.7781858757213234	0.2223702989057721	T	T	T
0.2228645134827520	0.7807635293391483	0.2230195159312044	T	T	T
0.0002114563603140	0.9977068463634140	0.3277263339510651	T	T	T
0.3288732041709831	0.9982628037112958	0.3331648886409858	T	T	T
0.6727349184937411	0.9954098185294558	0.3369305325854913	T	T	T
0.3286248384255412	0.3390102543477742	0.3342003267663723	T	T	T
0.6703947312929370	0.3381387553148778	0.3338552732142326	T	T	T
-0.0001208294020546	0.3351256920118123	0.3269093665030869	T	T	T
0.3303591629433632	0.6663042821821086	0.3273985991187879	T	T	T
0.6707899254662117	0.6693743194776183	0.3295772853207619	T	T	T
0.9999691703907916	0.6672104890206104	0.3282529315115723	T	T	T
0.6252928324240615	0.0338445190831201	0.4492924549687913	T	T	T
0.4920503086868682	0.8760061976924279	0.5060652556158701	T	T	T
0.5317241973238515	0.1398999229816028	0.4201968074498205	T	T	T
0.3366974337269405	0.3404564856622723	0.4541688410130435	T	T	T
0.5673537815608142	0.7924763806901768	0.5271644983185885	T	T	T
0.1937549359463613	0.2486546010267896	0.4690180759323249	T	T	T

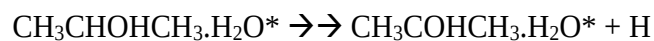
0.4081431095066915	0.2580595588144438	0.4588509263533985	T	T	T
0.7818834630369297	0.1426559687139715	0.4692246261301027	T	T	T
0.3417573763493066	0.7621847624957064	0.4827650243392680	T	T	T
0.4650676373260276	0.9550658766189045	0.5520061474238108	T	T	T
0.6563517399195909	0.8654490026653678	0.4051035907364350	T	T	T


```

FS:          -294.321552 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000002  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  2  2  6          # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222356 0.44444444444444571 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.44444444444444571 0.0000000000000000 F F F
0.88888888888888999 0.44444444444444571 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2251014939411566 0.1138058702988126 0.2252843003117671 T T T
0.5564327474558818 0.1104399101804737 0.2256679863792928 T T T
0.8876863698468034 0.1111752789699194 0.2225562315041264 T T T
0.2224477947275094 0.4438621224471658 0.2230628183731296 T T T
0.5527089171984751 0.4419975443834018 0.2248486369979685 T T T
0.8864810501762845 0.4442373424743050 0.2230140554190027 T T T
0.5553809880816052 0.7790812682269183 0.2221592820929136 T T T
0.8888562726175091 0.7782669852385217 0.2222263985679252 T T T
0.2228666021379941 0.7807454095489188 0.2229459182707031 T T T
0.9979797147725349 0.9967536309040997 0.3279724965076354 T T T
0.3326359781793712 0.0003130740764591 0.3340763105931656 T T T
0.6725395884603763 0.9923811759672171 0.3350785886451115 T T T
0.3268795285717974 0.3394748143028897 0.3341632683285204 T T T
0.6675638970083376 0.3375766865775804 0.3335627926184576 T T T
-0.0023010350104537 0.3339240561555578 0.3273876201213788 T T T
0.3329830027052206 0.6696015805337201 0.3272205609026778 T T T
0.6694997546131553 0.6690746016741879 0.3275278325590182 T T T
0.0001427968974636 0.6682824209194185 0.3281733212810052 T T T
0.6355941219159345 0.0483194875058886 0.4392974847292903 T T T
0.5199432853482679 0.8697652774766763 0.4915983987896409 T T T
0.5263963380457102 0.1503578736905368 0.4210232606147844 T T T
0.3147042397189809 0.3283554857164839 0.4522257261323308 T T T
0.6126405724867996 0.7958184771021659 0.5029644815306483 T T T
0.3945643364944024 0.4693062254278778 0.4708630333718095 T T T

```

0.4015187380677782	0.2618382973203447	0.4590695986669349	T	T	T
0.7904212918496129	0.1597619014162739	0.4603958400709617	T	T	T
0.3675150207917688	0.7550339043808991	0.4695067437237277	T	T	T
0.4929962562830806	0.9258052986197359	0.5440508376349368	T	T	T



IS: -318.752454 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

36 3 2 10 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224524890462407	0.1105805460645720	0.2228711134176894	T	T	T
0.5575972354921389	0.1139555189661540	0.2245981570687462	T	T	T
0.8894494471320162	0.1109432733228961	0.2229992532374403	T	T	T
0.2226076699044358	0.4442006225813537	0.2230807281567701	T	T	T
0.5575663382525690	0.4422246457963668	0.2245902418360496	T	T	T
0.8862790942701095	0.4425035155736280	0.2246808386335235	T	T	T
0.5555647081200821	0.7771472168708993	0.2228229232189636	T	T	T
0.8894301507513180	0.7774607866497197	0.2229011592652212	T	T	T
0.2227456645708515	0.7772371159384304	0.2229093726241469	T	T	T
0.0004135657313546	0.9996317425692095	0.3295585249202208	T	T	T
0.3315276889981761	0.9973163435068637	0.3289834138686379	T	T	T
0.6667007750446090	0.9963577914623897	0.3288113392033962	T	T	T
0.3315651766051471	0.3328269954442288	0.3290016552419972	T	T	T
0.6678012778600747	0.3331159306466260	0.3372225035137787	T	T	T
0.0032237100115460	0.3329387945041035	0.3292716742917874	T	T	T
0.3343924056711644	0.6666568579255989	0.3296626799753507	T	T	T
0.6668890711623736	0.6688743586308687	0.3287018618105929	T	T	T
0.0033942754744359	0.6695650268735017	0.3289534728915416	T	T	T
0.6748503190779871	0.7730226758122440	0.5386242765774670	T	T	T
0.8023075458257789	0.7398727158544527	0.5959121674294888	T	T	T
0.5465786027334818	0.8616646471694578	0.5698153776242609	T	T	T
0.5380545573259503	0.5720085504515614	0.5054339900355892	T	T	T
0.6816145922422332	0.3390945605339446	0.4526490695240802	T	T	T

0.4727530827344912	0.5929586522841755	0.4617134044875530	T	T	T
0.7020226254672158	0.6336264748893865	0.6386661646952297	T	T	T
0.8920821133044838	0.6754915311550577	0.5713273094049026	T	T	T
0.9108310938779862	0.8876161035246019	0.6218653467372410	T	T	T
0.6287469993956638	0.4285779384295020	0.4749269328851725	T	T	T
0.5951525370572062	0.1994117074100899	0.4715255589360281	T	T	T
0.4440847744193336	0.7620697569637094	0.6134635612721381	T	T	T
0.4491138748541514	0.8732663926277671	0.5270286609996908	T	T	T
0.6476488113458392	0.0165924700834044	0.5926081376743887	T	T	T
0.7778685420321992	0.8763139051624180	0.4952825416562626	T	T	T

TS: -317.339776 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310
36 3 2 10 # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2219487538327467 0.1138396855962084 0.2242230189569820 T T T
0.5560676286606402 0.1088475750661801 0.2238507335582522 T T T
0.8850075055635642 0.1091715223931081 0.2239174490490710 T T T
0.2232775332772892 0.4425413426300451 0.2242398737630822 T T T
0.5520419667975568 0.4428660704410288 0.2241469467043052 T T T
0.8885591261723527 0.4443951069144332 0.2223996101461243 T T T
0.5559360170343481 0.7810460165782401 0.2241189893296514 T T T
0.8883160369463575 0.7778588627161866 0.2226047028300226 T T T
0.2204889153511405 0.7767210760043218 0.2224565493754402 T T T
0.9975274745233064 0.9981952200864622 0.3297152930126956 T T T
0.3292370816117790 0.9953382420882607 0.3273525595753982 T T T
0.6646917037186026 0.0004314146997790 0.3405007062618922 T T T
0.3351110407287542 0.3327611006255263 0.3361411974130216 T T T
0.6698212541185403 0.3356540416433704 0.3278065671436737 T T T
0.0015296599749786 0.3349353988902559 0.3288868273594633 T T T
0.3310231507441311 0.6663408301906444 0.3283354108738254 T T T
0.6692467966096852 0.6694441104774427 0.3283181731796418 T T T
0.9995038283650068 0.6662564399506374 0.3287310918272788 T T T
0.6895700911567251 0.0689111516934328 0.4677187659672887 T T T
0.8513488292379562 0.0589778804494287 0.5154259632512075 T T T
0.4736669662238277 0.9107221636941930 0.4927816596452716 T T T
0.7030833308564484 0.2674700295061360 0.4741466169939535 T T T
0.3724260797858890 0.3307596220260283 0.4556000719091536 T T T
0.8310842957101625 0.3733910674406141 0.4496275924049890 T T T

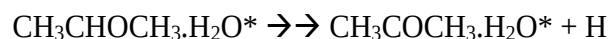
0.4218051563429750	0.4736442403299512	0.4701537559313678	T	T	T
0.4905170361377714	0.3063953592606961	0.4648098593120845	T	T	T
0.8208982528916519	0.0748321871697284	0.5733742014349811	T	T	T
0.8439249873800754	0.9093577669320682	0.5079952464654324	T	T	T
0.0093096674128864	0.1799855572278443	0.5019110518746016	T	T	T
0.4568444484434471	0.9388254162755884	0.5511455556136350	T	T	T
0.3505091078054108	0.9160440064117691	0.4616708052793839	T	T	T
0.4488950098637224	0.7535976140796212	0.4880296042887059	T	T	T
0.8429682155002324	0.1085613911608483	0.3979484541233412	T	T	T

```

FS:          -314.110173 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000000  2.5980762113533200  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495292
36  3  2  9          # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2223308883234978 0.1114587427355076 0.2219127422665039 T T T
0.5578514100558962 0.1101483633718772 0.2240091146259928 T T T
0.8859938915007959 0.1088512807888478 0.2234579797561764 T T T
0.2235878549278496 0.4462988074617797 0.2230303135409315 T T T
0.5558500474722408 0.4446111017662204 0.2223797333284239 T T T
0.8908071355514124 0.4484147587480223 0.2236526987873759 T T T
0.5548588285554246 0.7792510925072875 0.2253206582257334 T T T
0.8906295274966922 0.7762476985310371 0.2232779838015446 T T T
0.2195554575030414 0.7753648327965621 0.2251960631359466 T T T
0.0032151632135538 0.9998417207263728 0.3277538932739930 T T T
0.3341281424350058 0.0044648387023258 0.3278328772029226 T T T
0.6693471959645549 0.0010267308124909 0.3353453704459852 T T T
0.3339223872330379 0.3320598259482352 0.3277747764055192 T T T
0.6682835920642276 0.3365305099903324 0.3285892015456966 T T T
0.9994128268431623 0.3306468424065798 0.3270232260683272 T T T
0.3309493958416638 0.6631597676567011 0.3322557259867907 T T T
0.6699661371933914 0.6638607642747303 0.3283289157110332 T T T
0.0032345765254647 0.6687878252004893 0.3413393841715333 T T T
0.0801024390750271 0.6794922135231971 0.4492941758499427 T T T
0.1606653373236639 0.8873077528152464 0.4871615790226329 T T T
0.9106811979173770 0.5088692873962799 0.4950562997191099 T T T
0.6617112351153267 0.9720204810209196 0.4561165629579236 T T T
0.2644529445509676 0.6475524462813524 0.4511689881061116 T T T
0.9641629169193493 0.5165635374974755 0.5520394950605763 T T T

```

0.5223844759480514	0.8501963304942421	0.4647218897797387	T	T	T
0.2061116032553869	0.8789465569056887	0.5440834015135820	T	T	T
0.2952311712981768	0.0143360086503250	0.4592165353066306	T	T	T
0.0404771807031068	0.9309412767340532	0.4886939354962223	T	T	T
0.7590199817330472	0.9216669004679190	0.4622337813266668	T	T	T
0.8596829023882364	0.3534703682776694	0.4733208209993194	T	T	T
0.7738585884592126	0.5275602989322223	0.4960865701688135	T	T	T
0.2149555214824304	0.4986297863591602	0.4541474565182213	T	T	T



IS: -315.146596 eV

2.490000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 #Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222285	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.88888888888888928	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2255440181667177	0.1129024469560492	0.2256781820026296	T	T	T
0.5549911655339981	0.1111644365410001	0.2253896665177697	T	T	T
0.8898314147268005	0.1110035060175481	0.2223435563344195	T	T	T
0.2225904344309226	0.4432060356227705	0.2226898275973736	T	T	T
0.5531228394786254	0.4405655350242571	0.2255341849871811	T	T	T
0.8856478233461603	0.4431248630278121	0.2234961177517293	T	T	T
0.5555672302168446	0.7766258388877475	0.2221522328256694	T	T	T
0.8893575875552950	0.7772311818840707	0.2225138714279394	T	T	T
0.2228626965625079	0.7807131715136428	0.2233084180783444	T	T	T
0.9993358038438047	0.9959424740043074	0.3282270953182894	T	T	T
0.3343883536715245	0.9979454807590397	0.3362344743468121	T	T	T
0.6713757048043590	0.9944340507310839	0.3283140066349111	T	T	T
0.3269138686463936	0.3394151558995041	0.3340820622518291	T	T	T
0.6688164637171380	0.3332374615582880	0.3360603845966177	T	T	T
0.9985041714648273	0.3333873835966180	0.3276965648294280	T	T	T
0.3334294709270345	0.6686655721433237	0.3272171029710056	T	T	T
0.6699916777059710	0.6670491090539196	0.3279870907523155	T	T	T
0.0003800873331572	0.6667306596580865	0.3288010551570554	T	T	T
0.6007864077567732	0.0721284772423485	0.4787062179817155	T	T	T
0.4264815719247752	0.9054528601375145	0.5240572621605104	T	T	T
0.7639718821647974	0.2478783030633163	0.5244954433998567	T	T	T
0.5158464973751056	0.1534237861908304	0.4254432671880813	T	T	T
0.3139317102590218	0.3350810729381594	0.4509000159333938	T	T	T

0.4873912160082147	0.8363321970881230	0.5627322235611576	T	T	T
0.4003425590446849	0.4771299354826904	0.4676336710051648	T	T	T
0.4017244382221821	0.2644410362740249	0.4538414172100937	T	T	T
0.6941886509738784	0.3210275975226016	0.5570999535313574	T	T	T
0.3114992785875257	0.7833721965727249	0.4884075808771479	T	T	T
0.3475948350443206	0.9708334983788097	0.5557410509890940	T	T	T
0.8379595394931205	0.1898307246307771	0.5621410639229251	T	T	T
0.8841910265681584	0.3656571067498496	0.4891500961181858	T	T	T
0.6781791309799451	0.9996134038055624	0.4479787597139788	T	T	T

TS: -314.399657 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222285	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.88888888888888928	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2229903452483551	0.1115917153730402	0.2252866403770948	T	T	T
0.5554918051056248	0.1091498337347401	0.2248318083160544	T	T	T
0.8853949200084041	0.1081818249755493	0.2237854784218347	T	T	T
0.2220825994834323	0.4416897776862055	0.2224121442558684	T	T	T
0.5526270842174918	0.4415990227735886	0.2253330769773411	T	T	T
0.8859144713314701	0.4425898057169603	0.2230121966561284	T	T	T
0.5564218875827129	0.7792924297729455	0.2236833399212361	T	T	T
0.8883764711916651	0.7764638358374941	0.2224420755905339	T	T	T
0.2217913074321609	0.7785380030809760	0.2228157120693088	T	T	T
0.9972398691922337	0.9942994283387764	0.3292126284842978	T	T	T
0.3255372586231423	0.9918005121879900	0.3322616650888699	T	T	T
0.6685450252232338	0.9948747312643170	0.3387139047910248	T	T	T
0.3285810857441062	0.3344998479479326	0.3341389879482753	T	T	T
0.6713099349308251	0.3384271128528319	0.3325626763917865	T	T	T
0.0014615276468307	0.3345221738397506	0.3271535563873551	T	T	T
0.3294062871603108	0.6617926961292716	0.3267900881631908	T	T	T
0.6698478279310865	0.6668158521201178	0.3291025790520785	T	T	T
0.9991282706317489	0.6647258089815147	0.3280858313783632	T	T	T
0.6361923703577067	0.0246283069807203	0.4539229500513812	T	T	T
0.4833665380032660	0.8376129821243188	0.4974730222877401	T	T	T
0.8225597055889170	0.1774444727910409	0.4974341349600516	T	T	T
0.5399514424779500	0.1191028507389597	0.4176962543469079	T	T	T
0.3333426567394535	0.3170031537367279	0.4556505281552923	T	T	T
0.5602614880091249	0.7584265152911958	0.5213163972517008	T	T	T

0.4271864127900932	0.4598080397291261	0.4703249450492881	T	T	T
0.4157861189091331	0.2461536700183331	0.4575707216312892	T	T	T
0.7705645444379526	0.2302679609856768	0.5450505425430202	T	T	T
0.3519523356904174	0.7292795747194065	0.4633021043624194	T	T	T
0.4216199432613758	0.8875445607931368	0.5429792946331921	T	T	T
0.9124267782060986	0.1075955179573555	0.5171239911615310	T	T	T
0.9249316873631476	0.3131857269043012	0.4640245847280622	T	T	T
0.7431086904088119	0.9182841130325342	0.4060772972788304	T	T	T

```

FS:          -310.994503 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000002  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  3  2  8          # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214  0.11111111111111143  0.0000000000000000  F  F  F
0.5555555555555571  0.11111111111111143  0.0000000000000000  F  F  F
0.8888888888888857  0.11111111111111143  0.0000000000000000  F  F  F
0.2222222222222214  0.4444444444444429  0.0000000000000000  F  F  F
0.5555555555555571  0.4444444444444429  0.0000000000000000  F  F  F
0.8888888888888857  0.4444444444444429  0.0000000000000000  F  F  F
0.5555555555555571  0.7777777777777786  0.0000000000000000  F  F  F
0.8888888888888857  0.7777777777777786  0.0000000000000000  F  F  F
0.2222222222222214  0.7777777777777786  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.11111111111111143  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.11111111111111143  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.11111111111111143  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.11111111111111143  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.11111111111111143  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.11111111111111143  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.11111111111111143  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.11111111111111143  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.11111111111111143  F  F  F
0.2228734664941564  0.1107058334343150  0.2229283352485103  T  T  T
0.5578426196021922  0.1138474893865613  0.2246006993642455  T  T  T
0.8898029930539063  0.1108520131750267  0.2229051215430488  T  T  T
0.2230293627031618  0.4440374547989620  0.2231460562145086  T  T  T
0.5577981847815358  0.4422217044656891  0.2246032933137195  T  T  T
0.8866838055457144  0.4424978754835568  0.2246631164238005  T  T  T
0.5559323069396552  0.7768983174681979  0.2228061981429442  T  T  T
0.8896954168679220  0.7772009987062336  0.2229923432596214  T  T  T
0.2232262252721322  0.7769325110841789  0.2230388985302174  T  T  T
0.0007943961355575  0.9992299766009135  0.3295473528598598  T  T  T
0.3316502043871475  0.9968315858256842  0.3289906856330057  T  T  T
0.6671067454629827  0.9963652790636394  0.3286396934717645  T  T  T
0.3320966608565329  0.3322442690404633  0.3292457295296691  T  T  T
0.6685293708580510  0.3338390908360319  0.3372091341930356  T  T  T
0.0030431301358066  0.3323122423835417  0.3291909476343786  T  T  T
0.3347492734394619  0.6667716955890045  0.3296628434711785  T  T  T
0.6678763098518045  0.6686535975553046  0.3287313706854413  T  T  T
0.0035747313590701  0.6692384903441230  0.3290623815176308  T  T  T
0.6095506187460031  0.7056256921742206  0.5442427989560369  T  T  T
0.8394536526190285  0.8425989340859482  0.5408040368344609  T  T  T
0.4805728914087694  0.8009881730265730  0.5647104766034198  T  T  T
0.6748806148383627  0.3199528277763922  0.4541406298202847  T  T  T
0.5225114028109347  0.5199870365813841  0.5280360277668317  T  T  T
0.6223127995209921  0.4015231192123502  0.4818161847861293  T  T  T

```

0.8772150244893708	0.9604139251919743	0.4979298118953120	T	T	T
0.8981428645359389	0.9271086226892008	0.5925645315626257	T	T	T
0.9166989805169462	0.7546768412649977	0.5278869749290647	T	T	T
0.3454081109563334	0.6913288868153173	0.5965198547560332	T	T	T
0.5682218777714568	0.9481512492737126	0.5938347313184618	T	T	T
0.4216456077364127	0.8284039294719027	0.5129403468986844	T	T	T
0.5760401778463808	0.1745191764208243	0.4636586601903704	T	T	T

Ni catalyst

CH₃OH.H₂O*→→CH₂OH.H₂O*+H

IS: -230.853580 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1114355339782400	0.8898323013881344	0.1101563534253224	T	T	T
0.2233273965744189	0.1137388643483326	0.2234626083229114	T	T	T
0.5551148095296814	0.1107820763645229	0.2212458588458412	T	T	T
0.8889017952967151	0.1112466539676503	0.2216001427922040	T	T	T
0.2231424159312290	0.4429334447875906	0.2234385001202754	T	T	T
0.5528155308122583	0.4431531334491732	0.2230548408215379	T	T	T
0.8889599128139538	0.4447205237826221	0.2211975314400776	T	T	T
0.5553805892073910	0.7776290398651068	0.2213331831473848	T	T	T
0.8892114800503990	0.7779253802187430	0.2211935013571290	T	T	T
0.2213631266314423	0.7779145304474706	0.2208956033089345	T	T	T
0.9972386010941621	0.9978025748762651	0.3308330481802720	T	T	T
0.3331143257899260	0.9975592954956501	0.3305585964610084	T	T	T
0.6660756382804464	0.9995148847789801	0.3313335146488512	T	T	T
0.3330333130890490	0.3328783145284826	0.3410742178883545	T	T	T
0.6683131836823345	0.3323104292693930	0.3300014050199588	T	T	T
0.9972703761292715	0.3330484858324225	0.3310316253691429	T	T	T
0.3332096661680569	0.6689859060223545	0.3304801505870463	T	T	T
0.6680032607154560	0.6686282667060712	0.3305263284704528	T	T	T
0.9993594422761655	0.6658968984615586	0.3312762069180757	T	T	T
0.6712467047892007	0.1908790617749617	0.5374610637194468	T	T	T
0.6844975164303703	0.3719783925210794	0.5039431965091552	T	T	T
0.3363946061236988	0.3388303495038247	0.4539680430811789	T	T	T

0.7725309179424737	0.4077793136488536	0.4598971942530410	T	T	T
0.5620187402184972	0.1483046055041806	0.5829426995793674	T	T	T
0.3362560524394175	0.4648815421783419	0.4679348801242687	T	T	T
0.4692075493222057	0.3515728791563055	0.4741634129807634	T	T	T
0.8227792077179424	0.2251543365764331	0.5587089143884771	T	T	T
0.6146257382507132	0.0617309942066169	0.4983601102119475	T	T	T

TS: -229.804946 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333360	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225465736463600	0.1111391756776402	0.2205094191591141	T	T	T
0.5554765890906502	0.1123795896663111	0.2219293621082883	T	T	T
0.8887787372379790	0.1110613759109323	0.2209242018787656	T	T	T
0.2223006773346774	0.4445323092267545	0.2207730129788097	T	T	T
0.5591537857014374	0.4465250211663629	0.2254104100232706	T	T	T
0.8858452884682417	0.4429627312203308	0.2236615982026730	T	T	T
0.5566736014849212	0.7749324464527324	0.2229122147122330	T	T	T
0.8876880027877734	0.7767791328538320	0.2221624151472924	T	T	T
0.2209044968867215	0.7769282501406691	0.2209072873374749	T	T	T
0.0034150888934455	0.0035543817341246	0.3300834808361582	T	T	T
0.3299113845669195	0.9966576008710656	0.3295337945932053	T	T	T
0.6657742352590437	-0.0000156927558970	0.3285159541442058	T	T	T
0.3293060613415307	0.3318773034786764	0.3298078906342449	T	T	T
0.6648269974504911	0.3262828864008189	0.3401003613320614	T	T	T
0.0026586388741802	0.3329072968467299	0.3309199344685280	T	T	T
0.3289944616332001	0.6646661415385233	0.3302554416629171	T	T	T
0.6683190924910372	0.6725836882509194	0.3430688466264434	T	T	T
0.9999773291335788	0.6671128915649802	0.3324100833929052	T	T	T
0.6876886160407926	0.7123916187375329	0.4578301571099660	T	T	T
0.5117718820767299	0.5379280569705300	0.4873039058293596	T	T	T
0.6422023908980798	0.2749787965075217	0.4549071782132269	T	T	T
0.3936551124841176	0.5063660232178930	0.4545767387068854	T	T	T
0.6705208242339102	0.8500570035963040	0.4542571528977940	T	T	T
0.5742506102894933	0.3524401714800124	0.4740802169418625	T	T	T

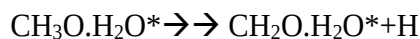
0.5398668965667875	0.1281184231952564	0.4595245203945471	T	T	T
0.8176847792317515	0.7462239417137021	0.4940984015093313	T	T	T
0.8275745880325717	0.6839580069213478	0.4003160255509688	T	T	T

```

FS:          -226.549135 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  5          # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2226241973876768  0.1116025376233662  0.2207364714139352  T  T  T
0.5561872839703554  0.1130803412748951  0.2225313630812862  T  T  T
0.8888124900194369  0.1112906914951733  0.2209125780458950  T  T  T
0.2223770982214778  0.4445993020783177  0.2207723120043015  T  T  T
0.5587083924241196  0.4465206773731154  0.2249650303477287  T  T  T
0.8856483572448836  0.4429540531964853  0.2232802245643093  T  T  T
0.5561980262787763  0.7763076608559000  0.2218389065406567  T  T  T
0.8866443030875995  0.7765993654177654  0.2224734666186836  T  T  T
0.2214518544612580  0.7774555210318947  0.2208053884799170  T  T  T
0.0021011837894839  0.0014383987727709  0.3302583778612745  T  T  T
0.3300924783548242  0.9973790025118077  0.3297463550960981  T  T  T
0.6665161899851402  0.9986023366770385  0.3291987761444962  T  T  T
0.3305054080937274  0.3324655078039057  0.3299040491342934  T  T  T
0.6664412568312410  0.3307265683689775  0.3398188631020226  T  T  T
0.0026033702770154  0.3334728366146537  0.3305630936472098  T  T  T
0.3312769114016041  0.6659008232753629  0.3301085486244770  T  T  T
0.6683330221537778  0.6741166438716741  0.3424089935803580  T  T  T
0.0011694663439714  0.6680063555956087  0.3305564046863297  T  T  T
0.6737953853735630  0.7238779851405828  0.4475662652925179  T  T  T
0.5134687746446722  0.5469837287842503  0.4855134609739082  T  T  T
0.6528650496220905  0.2984548659067375  0.4525502388352862  T  T  T
0.3809207458966854  0.5109114501758666  0.4621498737480380  T  T  T
0.5821817136888601  0.3757822337035310  0.4707530028754807  T  T  T
0.5592000147534527  0.1522704768348504  0.4628096159314072  T  T  T

```

0.6593002888562948	0.8607734136193933	0.4590760124282585	T	T	T
0.8208828587478121	0.7482177799701093	0.4697097123925701	T	T	T



IS: -226.950616 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2238306762886006	0.1142799502722386	0.2228942886301822	T	T	T
0.5559691966384974	0.1125392707804852	0.2219449091958899	T	T	T
0.8895597470750320	0.1106825158929859	0.2205620418511149	T	T	T
0.2233017426903678	0.4445835663187670	0.2214376172055273	T	T	T
0.5558286223157010	0.4442643095405374	0.2236895688718311	T	T	T
0.8873444567599017	0.4439687457901711	0.2222095628496195	T	T	T
0.5554894264883576	0.7765777644788417	0.2214248668639807	T	T	T
0.8857118270301355	0.7760242199011269	0.2230288411457942	T	T	T
0.2238563050838869	0.7759545251431688	0.2223451549176855	T	T	T
0.0004743913448399	0.9995785550805278	0.3312368784088072	T	T	T
0.3319937683814714	0.9984650212409020	0.3301959963118637	T	T	T
0.6698112892496405	0.0024260433389049	0.3287217189732038	T	T	T
0.3263126132924372	0.3248269059465019	0.3354267958938620	T	T	T
0.6719300356527192	0.3312994526558627	0.3359235992408142	T	T	T
0.9978431661624411	0.3300979134601806	0.3290241211325657	T	T	T
0.3306786221420875	0.6695433803841175	0.3335354978352429	T	T	T
0.6750352413254478	0.6737058065433649	0.3357034647884851	T	T	T
0.0021809159634305	0.6689149137878522	0.3305163940406811	T	T	T
0.4116395420113261	0.5952537347238035	0.4850410821737709	T	T	T
0.6555195528208007	0.3193917997503107	0.4550615564220748	T	T	T
0.4422913556956475	0.5583551535984566	0.4099581741817130	T	T	T
0.5553154300673151	0.3677631706414713	0.4579306773621308	T	T	T

0.5730303289590292	0.1689479259116981	0.4606641311396344	T	T	T
0.4761092696783729	0.7619946055810878	0.4938100719325622	T	T	T
0.4912263452396669	0.5414753225113267	0.5222323864211750	T	T	T
0.2455321664133207	0.5132693988474055	0.4975801121096083	T	T	T

TS: -226.299297 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333360	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2243586833695704	0.1122279304998688	0.2236900089844154	T	T	T
0.5566901092599604	0.1104807900682518	0.2222922942070601	T	T	T
0.8894110399607503	0.1108784622299106	0.2207456070759295	T	T	T
0.2229030605234835	0.4428236832455271	0.2213784745861610	T	T	T
0.5539474385406812	0.4425582180038122	0.2227704465568847	T	T	T
0.8864319634640844	0.4435648351143559	0.2225703849437285	T	T	T
0.5569532754434610	0.7796788384942314	0.2219307825800776	T	T	T
0.8899676958712872	0.7782551944792561	0.2204246770165545	T	T	T
0.2233899677815679	0.7812805223354190	0.2221579759801859	T	T	T
0.0003698995611292	0.9972842523904496	0.3307060071150724	T	T	T
0.3347004770719693	0.9964998069048783	0.3357550434214175	T	T	T
0.6724814945103644	0.9916123791516273	0.3356862693809959	T	T	T
0.3297513065105635	0.3400173734045424	0.3371100434705072	T	T	T
0.6666158612751267	0.3337613078025204	0.3343560296140597	T	T	T
0.9993872145998324	0.3328496851636212	0.3299408545891483	T	T	T
0.3286198181853801	0.6635477193834559	0.3285829629790218	T	T	T
0.6697791901034402	0.6642057896570079	0.3293017051925187	T	T	T
0.0004759906410208	0.6670524871026092	0.3306323379625957	T	T	T
0.6365374657801868	0.0511978784093575	0.4450854901375605	T	T	T
0.5215733401113785	0.1408568121939714	0.4233072002793715	T	T	T
0.3388645149102654	0.3479726537370275	0.4526303372509388	T	T	T
0.5437959871140461	0.8882878493228636	0.4617207406489839	T	T	T
0.1963389506257186	0.2567648722098991	0.4680817845548750	T	T	T
0.4123498795606757	0.2674990247034466	0.4592463413902529	T	T	T

0.7504528684527776	0.1439058230364892	0.4873493598136588	T	T	T
0.8282331434583614	0.0974655120288159	0.3994409467825049	T	T	T


```

FS:          -223.062779 eV
2.4900000000000000
  3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  4          # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1121175078655341  0.8892588397134702  0.1098721785789749  F  F  F
0.2241651127650947  0.1130902017359390  0.2233331053832099  T  T  T
0.5559571267691518  0.1109263579913322  0.2221768052767160  T  T  T
0.8881986350442403  0.1111969363914299  0.2211858001675886  T  T  T
0.2229706567906715  0.4440123241063613  0.2214219441054239  T  T  T
0.5537318637126080  0.4427569457292772  0.2237086366887180  T  T  T
0.8853081258324825  0.4437947943681524  0.2224415873123396  T  T  T
0.5560372850331445  0.7788437694597476  0.2212437925335831  T  T  T
0.8892609612227065  0.7783751179162622  0.2202573827819651  T  T  T
0.2230973164940712  0.7817241660994898  0.2222361941558082  T  T  T
0.9990547333170009  0.9975070300549507  0.3297446910715358  T  T  T
0.3338973361370439  -0.0010143076092556  0.3354613458520041  T  T  T
0.6737480787400181  0.9943861581903921  0.3363654868179051  T  T  T
0.3271313801150184  0.3406758720864153  0.3371353457190331  T  T  T
0.6678155717546427  0.3323320700083864  0.3358223481482160  T  T  T
-0.0007324414819889  0.3344888352921526  0.3288223049199320  T  T  T
0.3322921344561940  0.6678071431795831  0.3289106216742552  T  T  T
0.6701682771634438  0.6683751809782242  0.3299279942547014  T  T  T
0.9995721609629832  0.6672869662741007  0.3304692812076732  T  T  T
0.6221037641132358  0.0409231121583591  0.4369441974009115  T  T  T
0.5166392803810613  0.1470258586687242  0.4222649680268664  T  T  T
0.3267550436903129  0.3458418425764579  0.4522865981887760  T  T  T
0.5245887610612712  0.8911870637796273  0.4639133789555581  T  T  T
0.1834935489356274  0.2557069145118389  0.4672437672747045  T  T  T
0.3991481411037835  0.2648695434789202  0.4598216004035814  T  T  T

```

0.7692466474012200 0.1381288019636838 0.4655473966118316 T T T

CH₃CH₂OH.H₂O*→→ CH₃CHOH.H₂O*+H

IS: -226.950616 eV

2.490000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224357159753835	0.1113954703449824	0.2213682952277123	T	T	T
0.5570109354657999	0.1142284084275768	0.2236289473535130	T	T	T
0.8887556161770458	0.1115128723644969	0.2215616941348622	T	T	T
0.2221315924752960	0.4448876064544446	0.2212564242043178	T	T	T
0.5566838068222881	0.4433744064199827	0.2232072611996750	T	T	T
0.8859667228674111	0.4432847685866442	0.2236836440008366	T	T	T
0.5553059545440970	0.7781834773041338	0.2211513335227774	T	T	T
0.8889398976445977	0.7780035319460881	0.2213452554969475	T	T	T
0.2224085389997108	0.7778749925679549	0.2210503885305997	T	T	T
0.0001729454755592	0.0002860743261056	0.3314660639057717	T	T	T
0.3309664266598479	0.9984746126889943	0.3306245771780379	T	T	T
0.6671586484439614	0.9986577659244767	0.3310100392066100	T	T	T
0.3309102817644745	0.3328251923678629	0.3305557295734521	T	T	T
0.6671740629787209	0.3343965302296262	0.3418070979770162	T	T	T
0.0019095006680247	0.3332515439330881	0.3309921601990554	T	T	T
0.3334535790705530	0.6670473234089914	0.3310942355384689	T	T	T
0.6673303464365374	0.6696063010904744	0.3302467041483239	T	T	T
0.0024476551517489	0.6699042391760740	0.3305713146710480	T	T	T
0.6934993715223789	0.7928403868816246	0.5428308010595719	T	T	T
0.6899229435975756	0.7336309511382679	0.6221382774140058	T	T	T
0.6600246442870142	0.3341970631425821	0.4551072291587394	T	T	T
0.8119980955204628	0.7219575319985873	0.5013013033608918	T	T	T
0.7670280521824211	0.9616346818798442	0.5367103483777522	T	T	T

0.7107806722880570	0.4781631324050669	0.4756736127327194	T	T	T
0.8473533265015148	0.7919926299891293	0.4531121603016429	T	T	T
0.6004348161991349	0.7853886104708341	0.6545998688904309	T	T	T
0.6176082113753946	0.5653125796516532	0.6285876987423075	T	T	T
0.8470482927063298	0.8056335745680444	0.6446588179252624	T	T	T
0.5357478671699657	0.7232519613713286	0.5202662521641302	T	T	T
0.5142347175013704	0.2507933017354666	0.4681986207449875	T	T	T

TS: -226.299297 eV
 2.4900000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224648799468787	0.1111951215312543	0.2204145525714871	T	T	T
0.5553571336403115	0.1124407426059216	0.2217748221374978	T	T	T
0.8887818420737889	0.1111754759609394	0.2208264283586241	T	T	T
0.2223084228241756	0.4446636673519803	0.2207378612968476	T	T	T
0.5590000374905316	0.4461868500954506	0.2250837288595036	T	T	T
0.8858657635554253	0.4430047773166496	0.2237028088575717	T	T	T
0.5567633652714535	0.7748967443866943	0.2229027703785681	T	T	T
0.8878549309652762	0.7768779898469736	0.2221917943472262	T	T	T
0.2207972120973331	0.7769121753164296	0.2209335397053427	T	T	T
0.0035893431515315	0.0039535215695709	0.3298819309649424	T	T	T
0.3297287327041030	0.9966819674939151	0.3293295184291911	T	T	T
0.6661401732773617	1.0002837582966155	0.3283210023635006	T	T	T
0.3296239502497013	0.3321266434586662	0.3296223326089202	T	T	T
0.6652565584690963	0.3265081315170906	0.3401124172903052	T	T	T
0.0030210961409507	0.3330267036186425	0.3309438882634997	T	T	T
0.3291022019524022	0.6648497158594764	0.3301974495513722	T	T	T
0.6692349881944113	0.6727350462073688	0.3425038060726096	T	T	T
0.9998301565564589	0.6669589034102531	0.3327064089188422	T	T	T
0.6839479439086433	0.7097720898777423	0.4600767961857917	T	T	T
0.8589030325681958	0.7764062767754388	0.5140443542467589	T	T	T
0.5071346052896269	0.5306529886015480	0.4861202646094864	T	T	T
0.6371038711846638	0.2652613104860345	0.4550522240515649	T	T	T
0.3924976849347698	0.4992312521995804	0.4514131602580230	T	T	T
0.8118921931551117	0.8100014162581024	0.5669863416333519	T	T	T

0.9011464315962372	0.6565711199642688	0.5223625689791331	T	T	T
0.9955357759899083	0.9170279214671057	0.4941922359314718	T	T	T
0.6503722767147216	0.8350646684504190	0.4488758958997665	T	T	T
0.5693761698132255	0.3430937161869612	0.4738807756873505	T	T	T
0.5312327528705892	0.1186679116636371	0.4564001440279476	T	T	T
0.8180905177290271	0.6645248989461070	0.3997656969219050	T	T	T

FS: -223.062779 eV
 2.4900000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

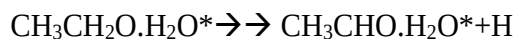
36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1104986591139287	0.8886667824038629	0.1093905277633733	T	T	T
0.2219964406677098	0.1108826478086878	0.2203264687642430	T	T	T
0.5560276891216510	0.1130033866273896	0.2221838513628207	T	T	T
0.8888080216612613	0.1110939106673831	0.2208520781999273	T	T	T
0.2224111772870466	0.4444543153203398	0.2206304949939845	T	T	T
0.5589953568813288	0.4466402781120851	0.2251828228226867	T	T	T
0.8857018056694201	0.4428317515783823	0.2232256101479764	T	T	T
0.5563798800028259	0.7759733204659598	0.2219872352804197	T	T	T
0.8866923027827539	0.7765028397441550	0.2224939932497887	T	T	T
0.2211387865775170	0.7774575523788034	0.2202159922827900	T	T	T
0.0016045639434415	0.0012731530998484	0.3302586729693088	T	T	T
0.3296367721882529	-0.0030727971032908	0.3290698369669275	T	T	T
0.6665698644099972	-0.0013852961649435	0.3287846593695925	T	T	T
0.3304930898756454	0.3325843177516671	0.3296625024338978	T	T	T
0.6663063915227333	0.3307630686984747	0.3397516082343505	T	T	T
0.0025589085802516	0.3333461439475156	0.3305631547593534	T	T	T
0.3307702968457629	0.6655589097986754	0.3297103162647410	T	T	T
0.6687006914219157	0.6742661840164778	0.3450142886248207	T	T	T
0.0007557578256659	0.6676031470394586	0.3303841622221617	T	T	T
0.6629618210407918	0.7230966674444509	0.4513066104775365	T	T	T
0.8601997860011354	0.7896220912012972	0.4936173561397513	T	T	T
0.5017405637392240	0.5365792955645492	0.4844887877032392	T	T	T
0.6462114756832484	0.2886025311253121	0.4527531198267646	T	T	T
0.3736545763850558	0.4956271866668464	0.4566151135730957	T	T	T
0.8324498212180587	0.8007570522842482	0.5523012576349622	T	T	T

0.9181486129674264	0.6811568441729057	0.4875269022898412	T	T	T
0.9810358010951629	0.9424214399879054	0.4745969917866911	T	T	T
0.6170031383929923	0.8422451802555998	0.4545183807086742	T	T	T
0.5769930377728955	0.3673070676002475	0.4706700394802216	T	T	T
0.5470092122793947	0.1419086070781274	0.4600573146863906	T	T	T



IS: -247.57000 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2251206476561048	0.1125970910666411	0.2238180215732527	T	T	T
0.5555463927724785	0.1114343933059672	0.2224506365524312	T	T	T
0.8905614101938447	0.1118493443081435	0.2204553408735299	T	T	T
0.2228440467599523	0.4439321161080541	0.2211397008289643	T	T	T
0.5540279535100974	0.4415522936024922	0.2239453107794755	T	T	T
0.8853581391510665	0.4437233006812356	0.2231212710224577	T	T	T
0.5554161938033867	0.7766684817056947	0.2202148729563224	T	T	T
0.8897810465122207	0.7781360803438068	0.2203945339979710	T	T	T
0.2231629187140956	0.7821266635617498	0.2228203635367331	T	T	T
-0.0005733077485227	0.9964943137354347	0.3298889688441717	T	T	T
0.3379313465499481	0.9981819656488177	0.3386668564589563	T	T	T
0.6729642094340613	0.9939618448409568	0.3285059254356310	T	T	T
0.3258378033774758	0.3406661529490005	0.3364042195451870	T	T	T
0.6699027029103353	0.3303205857922774	0.3383359484440022	T	T	T
-0.0007327293806019	0.3344322335357742	0.3292652117715084	T	T	T
0.3336215628628373	0.6689249793581964	0.3287227626365954	T	T	T
0.6701966785284138	0.6677878336511452	0.3297359133093163	T	T	T
0.0004610483558903	0.6676666231568607	0.3310363672304967	T	T	T
0.5949892569180568	0.0837600514267881	0.4805199061822215	T	T	T
0.4262143907159653	0.9286793975766524	0.5301755860807700	T	T	T
0.5111622723093447	0.1609357430442846	0.4258342346976148	T	T	T
0.3124862315100302	0.3432462428728501	0.4498943568532913	T	T	T

0.4929631496331726	0.8732207868656436	0.5719172182878760	T	T	T
0.3998813568716555	0.4869454598349728	0.4648415452094722	T	T	T
0.4004088826696783	0.2720674157960617	0.4531586389937401	T	T	T
0.3108833136031722	0.7957058265013194	0.4984217536950105	T	T	T
0.3461067413329462	-0.0017655426302334	0.5585161497341778	T	T	T
0.7126616630237416	0.2175231658188188	0.5115672082405918	T	T	T
0.6765815804987009	0.0121617484023027	0.4529805281377317	T	T	T

TS: -246.496167 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 2 2 7 # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333360 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
-0.0000000000000002 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777789 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777789 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.8888888888888856 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888856 0.11111111111111072 F F F
0.1121175078655341 0.8892588397134702 0.1098721785789749 F F F
0.2239818140834648 0.1127937030814868 0.2225652470271288 T T T
0.5563436591772647 0.1104818220884071 0.2222819036699461 T T T
0.8872755963607387 0.1103599877626566 0.2219524168346358 T T T
0.2239302873650270 0.4438936605891114 0.2213457618652821 T T T
0.5544481800670694 0.4425562916612940 0.2240587432736680 T T T
0.8859563758491498 0.4436630883773102 0.2223645710248432 T T T
0.5561362714517666 0.7776869564485593 0.2207229800538457 T T T
0.8893913854929878 0.7778393370367450 0.2205025363032315 T T T
0.2232374158641807 0.7807588447115679 0.2223307758239686 T T T
0.0026867190901570 0.9974352334962280 0.3293005503939678 T T T
0.3332430370113225 1.0000907494546392 0.3340338511230798 T T T
0.6746483869719847 0.9946017092225908 0.3356024509328776 T T T
0.3266551990847832 0.3365873467343302 0.3370635540407003 T T T
0.6704488884691460 0.3320351575632466 0.3359741900742834 T T T
0.0032614584516862 0.3383271563287704 0.3286647082680814 T T T
0.3340565962994119 0.6675226430632268 0.3298840732041494 T T T
0.6695107800876161 0.6669758680911123 0.3309768598943020 T T T
-0.0000783491675979 0.6666582858778771 0.3306859121332861 T T T
0.6151239861200084 0.0297174680309914 0.4477081051593363 T T T
0.4983982674098190 0.8861310147188052 0.5105299921283087 T T T
0.5269243241031256 0.1438609505313137 0.4237053957042675 T T T
0.3156192061642862 0.3243776450413929 0.4525813403142238 T T T
0.5751086083603745 0.8001841155996070 0.5279391552931963 T T T
0.4021238478125359 0.4673039858883201 0.4685367985134964 T T T

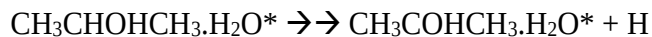
0.3995662528285511	0.2546246744660683	0.4591880395077699	T	T	T
0.3369672170945670	0.7772076654930883	0.4956251266745499	T	T	T
0.4986907935240926	0.9786704220073620	0.5574761138517054	T	T	T
0.7818031107527327	0.1261147783824945	0.4589029250071245	T	T	T
0.5721564145599451	0.8383520983496031	0.3991140003625041	T	T	T

```

FS:          -243.19000 eV
2.490000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36  2  2  6      # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2232387348337888 0.1125343092541206 0.2221038057533663 T T T
0.5561846830314884 0.1106659002277833 0.2205605249918640 T T T
0.8903083792515276 0.1146752567458657 0.2229349530995867 T T T
0.2231096763879090 0.4434238195047959 0.2235511490748944 T T T
0.5547184982683764 0.4439700401037205 0.2221116433819688 T T T
0.8908228844729944 0.4460193166762141 0.2220712498347522 T T T
0.5510712544859705 0.7756012720760935 0.2230514714307926 T T T
0.8891303280850604 0.7772511229374964 0.2209277180527141 T T T
0.2202204796228377 0.7758747033644131 0.2219195284091466 T T T
0.9987971261479388 0.9967551326207029 0.3297201815405166 T T T
0.3370019126273889 -0.0019155232809345 0.3287616620290780 T T T
0.6674634502729027 0.9986470354047138 0.3308295396670781 T T T
0.3426200588252272 0.3269271865270971 0.3367427106177657 T T T
0.6696703294245827 0.3300222418245804 0.3288098308206959 T T T
0.0008920927876016 0.3282867273482775 0.3354336557977325 T T T
0.3351927349950960 0.6656039857152636 0.3360365513717159 T T T
0.6705217040412432 0.6689962491227727 0.3298714465087224 T T T
0.9968415325520474 0.6727004969824288 0.3376754127385173 T T T
0.0334853127487766 0.6171875563839583 0.4398151826075768 T T T
0.1476669815175398 0.7967973275176994 0.4916326325777163 T T T
0.3539385504486479 0.3364645264309654 0.4519858975839579 T T T
0.1414182888500434 0.5152246941904750 0.4219254349530722 T T T
0.2680099761793328 0.4034708997877220 0.4592892347699142 T T T
0.1706785129981297 0.7406561510002606 0.5447249446966372 T T T

```

0.3012834324984253	0.9097651894745348	0.4700889218497125	T	T	T
0.0553012825140285	0.8718500170181473	0.5014438657619846	T	T	T
0.2718219568567395	0.1940688232328675	0.4691249574498460	T	T	T
0.8760407446326263	0.5069137686070005	0.4589916970629416	T	T	T



IS: -243.738521 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223716890816850	0.1108244747224050	0.2214926241051150	T	T	T
0.5568561741366427	0.1135034952785547	0.2236165184933986	T	T	T
0.8885965121497441	0.1107735914056358	0.2215185090257283	T	T	T
0.2224317131153954	0.4444532383869998	0.2211016390711203	T	T	T
0.5569206770017826	0.4426862036667412	0.2234089667814798	T	T	T
0.8862613198769861	0.4427763663773968	0.2232630148130473	T	T	T
0.5553025586584951	0.7774265516152871	0.2213174524413458	T	T	T
0.8888215669861554	0.7772985471776841	0.2214413254451589	T	T	T
0.2222972577964703	0.7774660374205490	0.2212384200478860	T	T	T
-0.0003263335794459	0.9992998023013113	0.3313534180372864	T	T	T
0.3303545851822685	0.9971302931925474	0.3308844356864544	T	T	T
0.6669076843932989	0.9972082756750117	0.3309643699043764	T	T	T
0.3305237157418521	0.3323120238743211	0.3305545410780176	T	T	T
0.6656953376003009	0.3319352252302908	0.3414642652572240	T	T	T
0.0020331022840044	0.3326065222557211	0.3304646882171670	T	T	T
0.3330471665894588	0.6659714158670575	0.3312809902325994	T	T	T
0.6667337066367113	0.6682015361707897	0.3306610752949797	T	T	T
0.0015307744246601	0.6679291469091361	0.3306704840667722	T	T	T
0.5588733721475282	0.6744362562086553	0.5655180290668753	T	T	T
0.7795014985664750	0.8494934581184520	0.5533439405048448	T	T	T
0.4060808378024885	0.7504269382579595	0.5769205371191558	T	T	T

0.6737819214365522	0.3279432497549811	0.4546300985056540	T	T	T
0.4898284816080656	0.5263356544619716	0.5054699752521604	T	T	T
0.6105026019874227	0.4085119474181517	0.4768269504489177	T	T	T
0.4701255788322007	0.5898019850309719	0.4610335951631075	T	T	T
0.8332598786292333	0.9541673801294058	0.6006949012767026	T	T	T
0.8860343026529239	0.7897858373245165	0.5456444223429013	T	T	T
0.7886498426450557	0.9401130723563369	0.5046103183998115	T	T	T
0.5541939616479197	0.5817078468274333	0.6130124484181864	T	T	T
0.8206649925933591	0.4026105459892301	0.4668932764945607	T	T	T
0.2492550347472169	0.6195879418597681	0.5852227036931021	T	T	T
0.4488947790915142	0.8511417590740711	0.6251913931141099	T	T	T
0.4053406213818887	0.8403739725554393	0.5293686859573419	T	T	T

TS: -262.98000 eV
2.490000000000000
3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310
36 3 2 10 # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111143 F F F
0.4444444444444428 0.2222222222222214 0.1111111111111143 F F F
0.7777777777777783 0.2222222222222214 0.1111111111111143 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111143 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111143 F F F
0.1111111111111142 0.5555555555555571 0.1111111111111143 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111143 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111143 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.1111111111111143 F F F
0.2221958147102369 0.1133561257612443 0.2225392416016927 T T T
0.5565036057354560 0.1095145124850862 0.2226778661900996 T T T
0.8870082756401311 0.1106394787701605 0.2221631958012502 T T T
0.2233049649625996 0.4423783108584174 0.2232197992181685 T T T
0.5531848574066803 0.4440691703498830 0.2219474089247566 T T T
0.8891061086203466 0.4442715628419334 0.2208498317105405 T T T
0.5572178963469059 0.7820748072720141 0.2239566916107992 T T T
0.8888411783909872 0.7780496863095042 0.2212345119122399 T T T
0.2216390556265602 0.7769262244468927 0.2204473874686783 T T T
0.9962174643774818 0.9979100914795012 0.3309402752178328 T T T
0.3279090645319369 0.9954204884708824 0.3287545708370639 T T T
0.6635290374688377 0.0004751677039029 0.3450661942010274 T T T
0.3351441059239626 0.3338800749186439 0.3393904663313622 T T T
0.6678339401856184 0.3365926437273352 0.3284142820163049 T T T
0.9982665228969421 0.3330507630780476 0.3316063111152224 T T T
0.3296712942777785 0.6663898898342109 0.3300817179728767 T T T
0.6673930916701359 0.6671121499859262 0.3302620861183381 T T T
0.9987368373213239 0.6660485772184913 0.3309797590955592 T T T
0.6975761524400782 0.0694662808043491 0.4700917971783215 T T T
0.8711600695021349 0.0789485512160004 0.5165961037072366 T T T
0.4904990798669299 0.8891723587329641 0.4924916673633288 T T T
0.6893944066337592 0.2554199340812058 0.4784821011565999 T T T
0.3640912610129715 0.3198722103908839 0.4543753949545178 T T T
0.8103162221242117 0.3691356245049089 0.4532080423250581 T T T

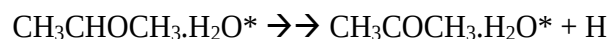
0.2368975300388422	0.1944549219152421	0.4682488769208570	T	T	T
0.4784630364931239	0.2899530260699894	0.4640158205968803	T	T	T
0.8282515391108402	0.0656711567295145	0.5748215411743199	T	T	T
0.8976517490752506	0.9508306905160552	0.5026125626655890	T	T	T
0.0142823544064614	0.2275038953598137	0.5092628952453223	T	T	T
0.4658695709976258	0.9071045168538006	0.5511382570013813	T	T	T
0.3612388326407815	0.8810489057580935	0.4610078575578187	T	T	T
0.4878156435729972	0.7419133523544544	0.4857504675601681	T	T	T
0.8474612600795679	0.1229730146168438	0.3985585813840139	T	T	T

```

FS:          -259.774676 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533200  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495292
36 3 2 9          #Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2221917447243107 0.1113060036895040 0.2205969957604741 T T T
0.5577407433749011 0.1103267230663559 0.2226782156861258 T T T
0.8857015749756422 0.1091145351235727 0.2230307614537626 T T T
0.2220901865655213 0.4442385139666418 0.2205176044897190 T T T
0.5559372624559725 0.4444104408145050 0.2209192139183741 T T T
0.8911044201585842 0.4482080110122730 0.2230210278180860 T T T
0.5573125436126047 0.7797726974261131 0.2226155799795306 T T T
0.8909419800046744 0.7765349076426888 0.2229616166946397 T T T
0.2198488177845312 0.7769527293658590 0.2223876530717342 T T T
0.0020396287893266 0.0002773975387485 0.3301756046071754 T T T
0.3335272690733077 0.0029310682210277 0.3291477918533057 T T T
0.6665481520875758 0.9985704970475610 0.3402051564894899 T T T
0.3340931530096530 0.3342675873452102 0.3302921635112423 T T T
0.6683397389547480 0.3359729072970609 0.3300722701605459 T T T
0.0012816258339430 0.3335210864206134 0.3298738452535397 T T T
0.3313009038001353 0.6634486892546804 0.3290596339793165 T T T
0.6690763707784491 0.6644447739961483 0.3301336276108825 T T T
0.0064323348860330 0.6705245260843575 0.3483761166309401 T T T
0.0525139309533026 0.6870800973544681 0.4568862815157249 T T T
0.1069823993213689 0.8947041127329842 0.4898578875666148 T T T
0.8618021136021061 0.5134437500015405 0.4939054705108537 T T T
0.6285269921048714 0.9560059679270224 0.4543059762676948 T T T
0.2276751324053793 0.6579702557294694 0.4730345153671334 T T T
0.8873666608334921 0.5199087312497014 0.5536138741686294 T T T

```

0.4803063628686465	0.8482649950612855	0.4633654265668494	T	T	T
0.1331303158301122	0.8920678504368431	0.5492903342705617	T	T	T
0.2470710993629587	0.0229171126997546	0.4652956345173989	T	T	T
-0.0202677215282285	0.9263463023650048	0.4818686950696301	T	T	T
0.6477557524708075	0.0825291598924341	0.4771342525433949	T	T	T
0.8336047380520062	0.3630969616385512	0.4735655590334648	T	T	T
0.7242449563634199	0.5262363796356455	0.4827148365203893	T	T	T
0.2006243745035593	0.5267079397539020	0.4502330076364272	T	T	T



IS: -260.474738 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2251463848228962	0.1126659169129016	0.2236974575206678	T	T	T
0.5554492222014158	0.1113031774563095	0.2224528807750691	T	T	T
0.8901104372173351	0.1114451112986342	0.2203486337180237	T	T	T
0.2228843260804976	0.4437647681146338	0.2211874411493426	T	T	T
0.5540656709141502	0.4415753293102119	0.2240538695401331	T	T	T
0.8851756281558789	0.4437529340364531	0.2230463454311452	T	T	T
0.5551012352307467	0.7763961117933358	0.2203911742160280	T	T	T
0.8896113125792571	0.7779134969066550	0.2204020947227578	T	T	T
0.2231319887600342	0.7817500572156793	0.2228591251896730	T	T	T
-0.0002553288555841	0.9970242478479892	0.3296985375154310	T	T	T
0.3372578309592709	0.9979643619648060	0.3381737719435277	T	T	T
0.6732249797035837	0.9940303816007712	0.3286910711736044	T	T	T
0.3270001983866137	0.3412986972712633	0.3365741370902200	T	T	T
0.6695702117428161	0.3292171267054622	0.3387091802688806	T	T	T
-0.0010731970958552	0.3336448499199958	0.3288886604290289	T	T	T
0.3326189203587120	0.6679635754327108	0.3291117205451001	T	T	T
0.6708262637132351	0.6677525002854269	0.3298358224279023	T	T	T
-0.0000864917780209	0.6670798529942565	0.3310345987493412	T	T	T
0.5888728224822587	0.0709736660734870	0.4800902316471721	T	T	T
0.4113420151084069	0.9119674557127132	0.5263739609761356	T	T	T
0.7562539969265762	0.2468924272574433	0.5246818035575798	T	T	T
0.5089254829494141	0.1554174939153881	0.4258655252480107	T	T	T
0.3244361178592494	0.3526671244644384	0.4500912751238462	T	T	T

0.4675911549658274	0.8395443878074094	0.5654525924255379	T	T	T
0.1808125660713162	0.2638892137180476	0.4648882701903495	T	T	T
0.3966684557079115	0.2658846103012476	0.4534857523831087	T	T	T
0.6922219922994732	0.3295120288354463	0.5548727395641909	T	T	T
0.2934151135964926	0.7900275680466866	0.4915941804045670	T	T	T
0.3390677414600397	0.9851684242625524	0.5575617106194806	T	T	T
0.8230795692871815	0.1867997871165811	0.5646518784866132	T	T	T
0.8799095201188173	0.3583995492255725	0.4886948690472763	T	T	T
0.6591232698935544	0.9911124858435882	0.4499641790734206	T	T	T

TS: -259.69000 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 3 2 9 # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333360 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
-0.0000000000000002 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777789 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777789 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.8888888888888856 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888856 0.11111111111111072 F F F
0.1121175078655341 0.8892588397134702 0.1098721785789749 F F F
0.2234689110300764 0.1117499585267513 0.2236125000441616 T T T
0.5570361892576031 0.1100986887777413 0.2228163019479062 T T T
0.8878215244652516 0.1102253971330563 0.2215412715682589 T T T
0.2239118099260002 0.4429826908136230 0.2208866509480276 T T T
0.5548217788209842 0.4429567763794323 0.2238351292054782 T T T
0.8862936014597131 0.4439166662609840 0.2219312698180744 T T T
0.5569035481033794 0.7789492394381056 0.2215282178469440 T T T
0.8895558791947645 0.7780836619912861 0.2203578756380998 T T T
0.2229394203522876 0.7807970822688393 0.2216964045504885 T T T
0.9994531307802281 -0.0031796146103584 0.3307127768218607 T T T
0.3334367515099942 -0.0029731045687258 0.3348301736570145 T T T
0.6720086461057205 0.9944755586657841 0.3376976358203048 T T T
0.3298364432015548 0.3385673013292587 0.3368772421409535 T T T
0.6704610653877102 0.3330179990382904 0.3352563209851706 T T T
1.0026525839543408 0.3366129981674543 0.3280870941286774 T T T
0.3295828026027247 0.6641323452865344 0.3281109316173351 T T T
0.6706922921601999 0.6671912516255810 0.3307273050742796 T T T
1.0001884514750021 0.6666854275152470 0.3302091851350882 T T T
0.6250589517569173 0.0340334498735667 0.4527016827591847 T T T
0.4732947473288416 0.8424251658527078 0.4945839056434824 T T T
0.8122816851816125 0.1814619277625862 0.4977141840381188 T T T
0.5288682564681053 0.1357806761893635 0.4221057122293402 T T T
0.3355003768377271 0.3359178495516874 0.4527604149974460 T T T
0.5448025905994243 0.7528666335059607 0.5129224949547546 T T T

0.1914164079590734	0.2441972114913240	0.4665419190367985	T	T	T
0.4067355593799017	0.2530674724029445	0.4577069429403647	T	T	T
0.7611447055163588	0.2383220599299392	0.5443556396198741	T	T	T
0.3386455305122508	0.7411693348972263	0.4604897806852625	T	T	T
0.4184463250317952	0.8896688014605870	0.5428978548729948	T	T	T
0.8905113807510366	0.1015425044207317	0.5198074965812999	T	T	T
0.9210759423906079	0.3158214144353828	0.4648636457411056	T	T	T
0.7368361464554645	0.9307676442599828	0.4072680183785637	T	T	T


```

FS:          -256.598458 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 8          # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.2225561998829821  0.1110980356563952  0.2216053219090849  T T T
0.5571123240088794  0.1138577684316234  0.2236220542084268  T T T
0.8888583510421751  0.1109096044789988  0.2213735956358650  T T T
0.2229316797254071  0.4446861747427435  0.2211194819472465  T T T
0.5570491257405169  0.4427900133970462  0.2236663276678901  T T T
0.8867595026978504  0.4431764387062778  0.2232311500903145  T T T
0.5556031023587086  0.7776059628011321  0.2213409601183923  T T T
0.8889163722421135  0.7774263699317659  0.2214897499766723  T T T
0.2226827041260979  0.7777577317416301  0.2213345834337483  T T T
0.9999182755165673  0.9998731382865341  0.3314369667608891  T T T
0.3310497864464657  0.9980529496322756  0.3310073065274273  T T T
0.6674036311357799  0.9981148692774074  0.3307787436620755  T T T
0.3312705487019181  0.3328573702372628  0.3310523988125799  T T T
0.6659332307562243  0.3331013240678655  0.3417300257947304  T T T
0.0024315949970608  0.3327134010169351  0.3302486972486314  T T T
0.3332447935851297  0.6664013456613671  0.3312279238298187  T T T
0.6671416893998386  0.6685802628166964  0.3308129622495413  T T T
0.0018479954226200  0.6685160642847574  0.3306708674675697  T T T
0.6749369620602922  0.7447385479080915  0.5530481097075021  T T T
0.9021214686235386  0.8777484372940794  0.5382628987739210  T T T
0.5650095448835147  0.8456030306294647  0.5872537476802637  T T T
0.6901061364300852  0.3302939807101498  0.4562304224840541  T T T
0.5786263079997529  0.5596728441270075  0.5358596969538316  T T T
0.6550223181018385  0.4250957814130932  0.4844283634162810  T T T

```

0.9196253361960046	0.9479991252171057	0.4834795367025066	T	T	T
0.9788583153843202	0.0045868990682002	0.5776982032580376	T	T	T
0.9791138500342613	0.7856564510607935	0.5364425768447614	T	T	T
0.6336132370339842	0.9107051100055824	0.6408293603270778	T	T	T
0.5866907066025584	0.9763551403765872	0.5529798249437567	T	T	T
0.4000226769816115	0.7345105021648580	0.5934562126613917	T	T	T
0.8390729896808222	0.3869114489964500	0.4617004054309801	T	T	T

Ru catalyst



IS: -356.553624 eV

2.70000000000000018

3.0000000000000004	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533200	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495310

36 1 2 6 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.2222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2223847717961597	.1116980918450733	.2189965154616298	T	T	T
.5550835249215450	.1109195606357108	.2182860084502744	T	T	T
.8893064594518734	.1113615106406152	.2184306065576610	T	T	T
.2224416136285211	.4441183051916839	.2190722614617268	T	T	T
.5549094173742701	.4442279498477847	.2188692849322269	T	T	T
.8885714678344676	.4439492225578365	.2190366543665722	T	T	T
.5551313531321317	.7772454062591493	.2185792574034958	T	T	T
.8885869895064042	.7778100318651424	.2189362675043897	T	T	T
.2226587455261578	.7779081697313854	.2190606564134484	T	T	T
.9969141815352388	.9971608478806594	.3245401051943537	T	T	T
.3330771115813319	.9973068649734460	.3245665080036965	T	T	T
.6665672848333077	.0000361683798458	.3252450905628690	T	T	T
.3331020316382080	.3332808545739112	.3284753148837453	T	T	T
.6687158975922329	.3329164744972921	.3243304345229800	T	T	T
.9969108894319966	.3328536419017856	.3247734825476228	T	T	T
.3332404970794276	.6690212648706848	.3247179135643862	T	T	T
.6689149576695672	.6691141599702786	.3246283902269310	T	T	T
.9994341888612723	.6662061093550157	.3250734416366823	T	T	T
.6574280466263321	.2248310632997651	.5254021531980092	T	T	T
.6521010372083379	.3809418432800734	.4924454192650963	T	T	T

.3286249718169965	.3315210518779773	.4411466886058387	T	T	T
.7437921495150553	.4270568810196378	.4546576044437332	T	T	T
.5522339914384320	.1769181567884676	.5661980673631487	T	T	T
.2238953184317386	.2055892714701846	.4534556521615015	T	T	T
.4502626799343887	.3443186243061289	.4612138757590216	T	T	T
.7992256079639589	.2731949967163317	.5470793136331912	T	T	T
.6207252530896087	.1061492693369944	.4902620715121323	T	T	T

TS: -355.69456 eV
2.700000000000000
3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301
36 1 2 6 # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222215 0.4444444444444430 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444430 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444430 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777789 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777789 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777789 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333358 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666644 0.3333333333333358 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000001 0.3333333333333358 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333358 0.6666666666666645 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666645 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000001 0.6666666666666645 0.1111111111111143 F F F
0.2222223308749665 0.1113158448100696 0.2194472931060363 T T T
0.5555314356879758 0.1112781998427194 0.2181329614406433 T T T
0.8888404492656281 0.1113017420853306 0.2182548442916340 T T T
0.2219409136829069 0.4444765011507095 0.2195711499175352 T T T
0.5560872979857407 0.4452251663371565 0.2200672246326805 T T T
0.8879178977997214 0.4430438071798747 0.2188026818695157 T T T
0.5559264135265526 0.7777848889923319 0.2184738335002324 T T T
0.8874725074510829 0.7781951114747044 0.2185634111830399 T T T
0.2237264833507135 0.7784340847854704 0.2186453484237800 T T T
0.0003038666416084 0.9983618346119822 0.3251942655349737 T T T
0.3260251937928926 0.9943015875677513 0.3233744433521928 T T T
0.6660622842426320 0.0015938032246143 0.3308382644299901 T T T
0.3337711074147462 0.3346659799912334 0.3270986187905365 T T T
0.6685542313748196 0.3350079714814223 0.3249950252308147 T T T
0.0050650390334335 0.3385182073472848 0.3243901893226106 T T T
0.3314651487412887 0.6672866976781499 0.3241229216521153 T T T
0.6706063827020929 0.6707708980906603 0.3243842198595268 T T T
0.0006179320712192 0.6676765119134980 0.3250170617554817 T T T
0.6621876384933454 0.0802064911055243 0.4419919329939754 T T T
0.6731345029081898 0.2647846402058132 0.4440862224009737 T T T
0.3502251162791313 0.3212112006928471 0.4427558233716714 T T T
0.8085831659219521 0.3667712879865501 0.4443436842673214 T T T
0.5118367616648781 0.9717195668017951 0.4479574310985527 T T T
0.2392210979951871 0.1941702417957930 0.4500111469911950 T T T

0.4629804271287196	0.3070076776637119	0.4511369730047023	T	T	T
0.7436513742036739	0.0682942880210758	0.4841514066042707	T	T	T
0.8186556295773458	0.1025813313170643	0.3971167605862331	T	T	T

```

FS:          -352.553425 eV
1.0000000000000000
 8.1000000000000014  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-4.0500000000000007  7.0148057706539646  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  19.8408669165437317
36  1  2  5          # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.1111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.1111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.1111111111111143 F F F
0.2212409756135909 0.1091033885359457 0.2190002315544709 T T T
0.5558220595189880 0.1106516028339903 0.2194222814028734 T T T
0.8889655120823895 0.1107519773879651 0.2197119743513687 T T T
0.2216657204652052 0.4447510637754816 0.2188608348211210 T T T
0.5573739953984573 0.4457601606121913 0.2185580731922274 T T T
0.8894433082488493 0.4451507824807874 0.2181167776519464 T T T
0.5554444341814516 0.7769983722556532 0.2199552123613971 T T T
0.8877217581777211 0.7766748442748923 0.2176646421136372 T T T
0.2210934720401983 0.7768537337725955 0.2183613448303876 T T T
0.0026320365285134 0.0004722785737658 0.3241436804986196 T T T
0.3353604247123989 0.0072073567154158 0.3236817418997552 T T T
0.6684282032536685 0.0003482289090429 0.3269852639686127 T T T
0.3337517649561614 0.3319882493743613 0.3246897216332103 T T T
0.6668598933069119 0.3349738390492766 0.3248191786495825 T T T
0.9994229648953628 0.3288264501174247 0.3237728247901388 T T T
0.3327709554995844 0.6638460918274488 0.3256055791237824 T T T
0.6690414589330952 0.6622025469086641 0.3246353677610572 T T T
0.0039299396863306 0.6657527227904858 0.3312303197497508 T T T
0.0922823999538339 0.6804440715202346 0.4331574013803928 T T T
0.6412859960859059 0.9825130032401364 0.4422964356140670 T T T
0.2708353804004534 0.6681260625567418 0.4382547103034365 T T T
0.9825081455814336 0.5644261795665828 0.4636499551631429 T T T
0.5119142601931832 0.8724134588521401 0.4505677206322785 T T T
0.1304264213974423 0.8181238630075041 0.4561816583958255 T T T

```

0.6330194797420049 0.0969197054879063 0.4516949423088096 T T T

CH₃O.H₂O*→→CH₂O.H₂O*+H

IS: -352.981117 eV

2.700000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310

36 1 2 5 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2230692399676649	0.1113579056853304	0.2191544396422686	T	T	T
0.5553869437067624	0.1113117396136612	0.2182018130458877	T	T	T
0.8894864543978679	0.1117847594222045	0.2183302924583727	T	T	T
0.2218860479242139	0.4448532266425438	0.2185687749332443	T	T	T
0.5554210921749416	0.4436490935789582	0.2190559675296803	T	T	T
0.8879002252521407	0.4448374998801681	0.2196122980503373	T	T	T
0.5549951565213959	0.7772923599572081	0.2183347889283593	T	T	T
0.8891064667253655	0.7773186438358464	0.2186628112366380	T	T	T
0.2218797748700268	0.7785288152432652	0.2197375903460887	T	T	T
0.9978076022441773	0.9974245511950430	0.3243357475598263	T	T	T
0.3387455495563818	0.0009703514081318	0.3277490609985230	T	T	T
0.6717971005331415	0.9954849066587604	0.3236983272170016	T	T	T
0.3286305695176353	0.3382278942909258	0.3258102349477600	T	T	T
0.6656000919500157	0.3275009960684325	0.3277295622309051	T	T	T
0.9977990583188722	0.3330299237318582	0.3236988355114847	T	T	T
0.3332279559758102	0.6685515967286358	0.3237418015224545	T	T	T
0.6697991550535177	0.6690287769081160	0.3243356843128273	T	T	T
0.9997042386481407	0.6670431276102832	0.3249023617931127	T	T	T
0.5704212623970447	0.0886549478051591	0.4694830309897883	T	T	T
0.5000976524213218	0.1623115762304290	0.4181828337116756	T	T	T
0.3356654207218028	0.3463566310280413	0.4371201675129333	T	T	T
0.4501114700012017	0.9815506812141979	0.4994609289430608	T	T	T
0.2035010351298314	0.2681972406985650	0.4518069973166582	T	T	T

0.4014853630539859	0.2640497014789150	0.4407377960979227	T	T	T
0.6706271886946134	0.2065435128438762	0.5019576992054480	T	T	T
0.6461713368751454	0.0193700905532279	0.4473645663128532	T	T	T

TS: -352.394442 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 1 2 5 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222215	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222201	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2220801088331145	0.1103921297305832	0.2200729569216004	T	T	T
0.5551655658231704	0.1115749745632051	0.2172436469123350	T	T	T
0.8894503256498431	0.1116480635766646	0.2182733282229080	T	T	T
0.2217700842093237	0.4447955859042027	0.2191993911722639	T	T	T
0.5560124539468745	0.4443349480067399	0.2199397272762160	T	T	T
0.8871904301953764	0.4430543250390405	0.2192508595860967	T	T	T
0.5548858128867407	0.7772849391163490	0.2183247302643571	T	T	T
0.8882462657369559	0.7782312155164386	0.2182795415858469	T	T	T
0.2231560930249110	0.7787642606294387	0.2192467710744676	T	T	T
-0.0005406418120572	0.9983409760046009	0.3245630353490359	T	T	T
0.3364309496729868	0.0017366551898460	0.3263741385282523	T	T	T
0.6700565231033544	0.9963305419536884	0.3305735186104550	T	T	T
0.3300623377674092	0.3375980076193167	0.3263253473854321	T	T	T
0.6662112128837808	0.3319877357582349	0.3264412650219631	T	T	T
0.0015058790530318	0.3369216961353825	0.3238871973119882	T	T	T
0.3311647810859529	0.6659998980903524	0.3235622599215262	T	T	T
0.6696003640752708	0.6679812789061089	0.3241643704021855	T	T	T
0.9995727047856793	0.6678250117258960	0.3246520655958207	T	T	T
0.6054012721935450	0.0532812103812336	0.4368848703039723	T	T	T
0.5097785653044585	0.1495738432420595	0.4152660669821128	T	T	T
0.3400576745811795	0.3394998064744962	0.4402007077737546	T	T	T
0.5061755790042759	0.9114499667872736	0.4571919655986419	T	T	T
0.2073115775265696	0.2587375704636991	0.4539270523995081	T	T	T
0.4050367683953736	0.2622640672605383	0.4468613661346266	T	T	T

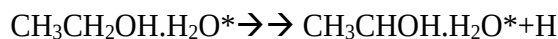
0.7120454093039932	0.1414902589314263	0.4751987214926662	T	T	T
0.7722964351099697	0.0450701741944422	0.4061461698693377	T	T	T

```

FS:          -349.166685 eV
2.700000000000000
 3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000002  2.5980762113533200  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495301
36  1  2  4          # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2227056117479961 0.1111385405335650 0.2198199406331610 T T T
0.5561890030507598 0.1106403549291623 0.2179830416496409 T T T
0.8892918012647835 0.1115522065194915 0.2177026131837287 T T T
0.2218629647554718 0.4446537421586941 0.2191787969048263 T T T
0.5556414972839118 0.4439288218198163 0.2196813428348555 T T T
0.8877654379306197 0.4438757274670651 0.2193056981170945 T T T
0.5551395316558090 0.7775498981129914 0.2178785969416363 T T T
0.8883662150449666 0.7780046664163612 0.2185008755488601 T T T
0.2226790801177976 0.7786762615654700 0.2194706450175795 T T T
0.9964370896080958 0.9973619615505924 0.3244571141536287 T T T
0.3340840703611496 0.0017109341359614 0.3265792482010270 T T T
0.6701081525385931 0.9966436719206120 0.3289163517581193 T T T
0.3291052947944382 0.3373226426361531 0.3262915572432407 T T T
0.6648450832858682 0.3319082483852218 0.3266532870928930 T T T
-0.0000012271569648 0.3355702391278460 0.3236940838683190 T T T
0.3302907305108419 0.6660116438340423 0.3237325554280590 T T T
0.6695346489519267 0.6700073295567535 0.3245017680140599 T T T
0.9989722103314348 0.6674097058860726 0.3246815948660686 T T T
0.6091918192343957 0.0527897358912045 0.4283131969425999 T T T
0.5108923429065925 0.1533647161728720 0.4140871719260081 T T T
0.3388916340937846 0.3385481084059261 0.4396137944219244 T T T
0.5161682960242192 0.9200665870760522 0.4557878346207517 T T T
0.2069500571326163 0.2583645800106014 0.4542489113233423 T T T
0.4048954919847370 0.2620588719963582 0.4463760044004866 T T T

```

0.7411552647831383 0.1443674986938628 0.4564030431441158 T T T



IS: -373.267605 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2227567895108597	0.1114597557573784	0.2184733642306765	T	T	T
0.5560006713325097	0.1119300100347139	0.2190101819526004	T	T	T
0.8888452148010779	0.1116185576952964	0.2184513885021246	T	T	T
0.2220477215174843	0.4440963564863314	0.2190747866669563	T	T	T
0.5559027882986033	0.4443188443602049	0.2190160626870958	T	T	T
0.8884502173038635	0.4443495288084990	0.2189984558368050	T	T	T
0.5559421904716524	0.7781173698818559	0.2190379645773410	T	T	T
0.8891386459486695	0.7776556503285600	0.2182824593787534	T	T	T
0.2220809442591564	0.7783151367889160	0.2188603489045590	T	T	T
0.0001788853193677	0.0003945267576855	0.3251258611272438	T	T	T
0.3312775497978201	0.9979099926568019	0.3246601281690703	T	T	T
0.6666825122647531	0.9977187446237346	0.3246935048478098	T	T	T
0.3308906996518168	0.3332996560347808	0.3246522645206237	T	T	T
0.6675469331135581	0.3347340336710657	0.3285811232999668	T	T	T
0.0024972843798880	0.3334031929923530	0.3246473891746297	T	T	T
0.3338381448604056	0.6670494243685854	0.3250438636321429	T	T	T
0.6670179588081144	0.6699948481154832	0.3244798184743614	T	T	T
0.0029441266042346	0.6698689320508727	0.3244833379286676	T	T	T
0.6124611004037255	0.6825668327832148	0.5448271893957997	T	T	T
0.8213651220260102	0.8282385596766210	0.5342963507908998	T	T	T
0.6724880064692647	0.3346640420948119	0.4415466819411307	T	T	T
0.5330810313556824	0.5417100405621593	0.4913859379705385	T	T	T

0.5255125943544307	0.7517619758238439	0.5492222914329291	T	T	T
0.6229357297401903	0.4168288570367696	0.4620776833363858	T	T	T
0.5060134083046638	0.5965189672426973	0.4512521484303972	T	T	T
0.8746861251520459	0.9285189439888826	0.5768992297340658	T	T	T
0.9077012395074380	0.7586300011295691	0.5306821652905092	T	T	T
0.8425715216146310	0.9106576868533196	0.4878759842421039	T	T	T
0.5915951571340252	0.5999169309535294	0.5910992255880426	T	T	T
0.5823333061657457	0.2028946928562403	0.4540361682740308	T	T	T

TS: -372.357047 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222223	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555558	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888844	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222225	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888851	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222199	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224984705819842	0.1117611363687288	0.2183211657950879	T	T	T
0.5559702166089364	0.1111922103326315	0.2194138861614220	T	T	T
0.8879273501649315	0.1096949998154885	0.2179081335826616	T	T	T
0.2231628649312073	0.4445213804310202	0.2185027303423848	T	T	T
0.5561953815378801	0.4449891164644073	0.2192781532460177	T	T	T
0.8876272383430006	0.4446117171315670	0.2189407223382928	T	T	T
0.5553752068048056	0.7771829984583302	0.2186072482445320	T	T	T
0.8886574977915659	0.7770907689294495	0.2184516951986921	T	T	T
0.2219233285514949	0.7776128934434871	0.2194090958302972	T	T	T
0.0037676986356205	0.0045386809781549	0.3245077978167087	T	T	T
0.3305506859532412	0.9969760631413586	0.3239099736973712	T	T	T
0.6676455606295200	0.9996088874124108	0.3236097159059876	T	T	T
0.3283691931996547	0.3314329430979728	0.3240005643633069	T	T	T
0.6656647206296236	0.3280550644216628	0.3276070939732467	T	T	T
0.0020357290635555	0.3331600063223330	0.3246461754928941	T	T	T
0.3297074324366456	0.6657458851279323	0.3243337601773583	T	T	T
0.6677214748461802	0.6693976157460324	0.3316930794915415	T	T	T
0.0033843449106124	0.6675113603684981	0.3253046853443938	T	T	T
0.6611547914230361	0.6956453152102787	0.4510202744971077	T	T	T
0.8255629563207380	0.7710833451729235	0.5003703954624097	T	T	T
0.5109497870330256	0.5189141842661559	0.4754435523804220	T	T	T
0.6530342889193006	0.2997997253234199	0.4412383165117525	T	T	T
0.3988590662005408	0.4825834599625999	0.4459970923411633	T	T	T
0.7761341864950009	0.7888476250306915	0.5501211975835063	T	T	T

0.8834271697865521	0.6746033058548215	0.5058368120134760	T	T	T
0.9409290339318064	0.9102692906105573	0.4832168179731544	T	T	T
0.6114608764193138	0.7982485765871828	0.4440416752771630	T	T	T
0.5839709432165046	0.3655790624925172	0.4591100253052288	T	T	T
0.5693695537047674	0.1628015884346126	0.4481664614366075	T	T	T
0.8017139366686183	0.6747932724544335	0.3972224718715608	T	T	T

FS: -369.085335 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

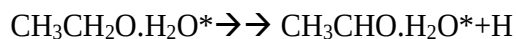
36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.00000000000000000	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.00000000000000000	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.00000000000000000	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.2227244574322830	0.1119225935104123	0.2185932741579131	T	T	T
0.5562951341952213	0.1117202234437846	0.2194605877569817	T	T	T
0.8883657236336669	0.1106073337802802	0.2181341104858385	T	T	T
0.2231028104853275	0.4446883542853740	0.2187497703138018	T	T	T
0.5566290531792712	0.4453913651662748	0.2185893063431830	T	T	T
0.8880864131792158	0.4449239912137192	0.2190342024534905	T	T	T
0.5564340375812719	0.7766396695577440	0.2188674640034380	T	T	T
0.8876582312027885	0.7768208286524315	0.2183744175816004	T	T	T
0.2225719635292271	0.7785199619530571	0.2193327148877062	T	T	T
0.0031204551512301	0.0036197325155024	0.3244407220444747	T	T	T
0.3309498297258490	0.9974189941433443	0.3235554770129758	T	T	T
0.6668314519676216	0.0009738928638977	0.3240354935922804	T	T	T
0.3293160917324349	0.3325953338093492	0.3241342668547014	T	T	T
0.6672276011541682	0.3323801519172709	0.3279577855110488	T	T	T
0.0025932338674834	0.3338233970575067	0.3245679713921749	T	T	T
0.3298096233366161	0.6663019903006215	0.3243284138613243	T	T	T
0.6677022367733310	0.6723444709922848	0.3309079093794016	T	T	T
0.0030391753940426	0.6684632049144428	0.3244272035934979	T	T	T
0.6669941450309633	0.7132833862266782	0.4395936805322928	T	T	T
0.8520932049908339	0.7783414607253735	0.4772520842294225	T	T	T
0.5236083166808294	0.5388549863277723	0.4726062699515594	T	T	T
0.6554885694727425	0.3158994950943014	0.4398016760305068	T	T	T
0.4017171434762918	0.4986423155181063	0.4492865282097561	T	T	T
0.8301758560276898	0.7847941507256723	0.5319179673375639	T	T	T

0.9106005695847923	0.6830396221161156	0.4692373832829891	T	T	T
0.9597809115599266	0.9220203981012404	0.4603360843531349	T	T	T
0.5918439321227350	0.3899616083773846	0.4565997825312103	T	T	T
0.5701733418431454	0.1813255523630337	0.4501554477667518	T	T	T
0.6213634858202018	0.8202594313256756	0.4459398381062118	T	T	T



IS: -369.741174 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2230568175208193	0.1114232893884250	0.2191774293838572	T	T	T
0.5554196554299266	0.1114312388661065	0.2182161872290092	T	T	T
0.8894659915860467	0.1118286583400186	0.2183721440835594	T	T	T
0.2218808106546863	0.4449612023251496	0.2186200220875976	T	T	T
0.5554601698582193	0.4438169376037348	0.2190714849139541	T	T	T
0.8880435610412410	0.4450102727646308	0.2195197950425724	T	T	T
0.5550255081029266	0.7773731295820688	0.2183632613074562	T	T	T
0.8890841084571630	0.7773778243379020	0.2185931628237033	T	T	T
0.2219105424675115	0.7785977427817911	0.2196853953919964	T	T	T
0.9978462760875019	0.9974489042313904	0.3243336647407710	T	T	T
0.3386349469039418	0.0012724683882342	0.3277397572247589	T	T	T
0.6717899355965888	0.9956987687544319	0.3238700569324742	T	T	T
0.3285415321145920	0.3383237521077672	0.3258964947617667	T	T	T
0.6654859755444777	0.3279628341637505	0.3276756394858482	T	T	T
0.9980037243948203	0.3332609558014116	0.3236781584856367	T	T	T
0.3330372294740309	0.6684687881239454	0.3237439568275252	T	T	T
0.6697315196647461	0.6690687888726142	0.3242957526022753	T	T	T
0.9997869394086778	0.6672366962173772	0.3248821747077451	T	T	T
0.5765133467020890	0.0877703272576784	0.4674918382088215	T	T	T
0.7225019801072886	0.2446594242135454	0.5120481010747616	T	T	T
0.5015994128091238	0.1628724982846945	0.4178281426077184	T	T	T
0.3331507023281726	0.3442711209848909	0.4376110876284457	T	T	T

0.2002889547220109	0.2636211211360562	0.4512191074800853	T	T	T
0.4002277184974485	0.2637319141657024	0.4413473998165460	T	T	T
0.6596498160402485	0.3179486502848122	0.5393790210786960	T	T	T
0.7778014081231447	0.1840925275047957	0.5493790157787092	T	T	T
0.8422270955636230	0.3504957364239122	0.4815229457144071	T	T	T
0.6419855635832431	0.0123080127866601	0.4414491110410760	T	T	T
0.4550154385303204	0.9787455947294826	0.4967283412932982	T	T	T

TS: -369.125513 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222223	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555558	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888844	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222225	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888851	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222199	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224482457187122	0.1106678530258742	0.2200969349068606	T	T	T
0.5552803495433470	0.1117752565822411	0.2170657122655517	T	T	T
0.8893601188903579	0.1119202494637834	0.2183584510556768	T	T	T
0.2218032870565905	0.4445546056823296	0.2192152154751218	T	T	T
0.5566041116552618	0.4445766451149977	0.2199682436890359	T	T	T
0.8878719739463379	0.4433848683432432	0.2191444602297625	T	T	T
0.5550979573099024	0.7773604795137246	0.2184404577785832	T	T	T
0.8884343156692456	0.7780778430323568	0.2182091759714649	T	T	T
0.2237184296485555	0.7790745554649943	0.2193785963156512	T	T	T
-0.0002657938307469	0.9978668979794862	0.3241645594911889	T	T	T
0.3354145873111838	1.0005000755817677	0.3264321595493372	T	T	T
0.6707122161006200	0.9960661537112059	0.3307000802275030	T	T	T
0.3298626106039571	0.3369140688179250	0.3263377293860231	T	T	T
0.6656372117649663	0.3297094291441894	0.3264630155134292	T	T	T
0.0006449552174940	0.3347759257714518	0.3237027349242421	T	T	T
0.3296196387703941	0.6648067370197909	0.3238070852808344	T	T	T
0.6691851445918156	0.6671934593541466	0.3244076221826488	T	T	T
0.9992088804468739	0.6672033163817042	0.3246171289232651	T	T	T
0.6114684427130603	0.0582073021706414	0.4395885201960547	T	T	T
0.4915539543190026	0.9122134704608749	0.4927301629672817	T	T	T
0.5169320574741108	0.1533405189218919	0.4151293624570758	T	T	T
0.3387999965257246	0.3363109440696386	0.4404260570584827	T	T	T
0.5679475094740163	0.8441217375416237	0.5140630720658457	T	T	T
0.2053734100799064	0.2524660963371569	0.4528380025282661	T	T	T

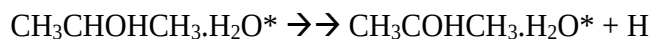
0.4051841830640562	0.2602138400740837	0.4465074385912161	T	T	T
0.7531156212000266	0.1640020233320023	0.4585280500350970	T	T	T
0.3566822486592202	0.8002325133954091	0.4709729830552458	T	T	T
0.4591488776416174	0.9832637686071356	0.5337335309171188	T	T	T
0.6585298220337965	0.9135846639949706	0.4076970463261471	T	T	T


```

FS:          -365.815477eV
2.700000000000000
 3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000002  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  2  2  6      # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2212898980776971 0.1103996276622102 0.2190685180925336 T T T
0.5555629967679052 0.1110157247065521 0.2187782706414772 T T T
0.8889849376304960 0.1112075956730214 0.2193684020102115 T T T
0.2221900106947085 0.4446248080364712 0.2184154842201408 T T T
0.5562873889301380 0.4453010464397045 0.2189960706982781 T T T
0.8893298706519192 0.4450405285735787 0.2187445096988011 T T T
0.5548624804651562 0.7772312062510234 0.2194035756357975 T T T
0.8877721080242768 0.7786559277702793 0.2173526344280803 T T T
0.2219290959825310 0.7776096081497056 0.2187175994643948 T T T
0.9977780303912420 0.9966687596401406 0.3241484046477420 T T T
0.3365238674193133 0.0007116024558741 0.3242647235446262 T T T
0.6668968759044173 -0.0000301833836670 0.3244929211835664 T T T
0.3368555235282370 0.3290307203879250 0.3273645872484050 T T T
0.6658473715060453 0.3300630728253411 0.3241148597768874 T T T
0.0025215095947818 0.3354146911170033 0.3261754404857805 T T T
0.3318041324279663 0.6639590537813255 0.3264153601926187 T T T
0.6694087848483767 0.6676850265170123 0.3243673127581967 T T T
0.9981415655446655 0.6682848244413828 0.3278304058604528 T T T
0.0454268679817758 0.6119057736151223 0.4300230019577795 T T T
0.1551543920501575 0.7794878026067135 0.4766564743687290 T T T
0.3239120161323539 0.3340497004572189 0.4406916584905710 T T T
0.1465908231503990 0.5139137380110398 0.4149910431754034 T T T
0.2544869467900543 0.4078331713649089 0.4464536058794351 T T T
0.1832624321759214 0.7314652864558040 0.5252545611352415 T T T

```

0.2938505388545667	0.8850459377524241	0.4548648424266333	T	T	T
0.0735612487852344	0.8517773158861245	0.4865777756389543	T	T	T
0.4557151937903774	0.4190619016619842	0.4545212020988094	T	T	T
0.9056060286311510	0.5084027801157683	0.4514847141419942	T	T	T



IS: -390.018826 eV

2.700000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2226241960751279	0.1111596161353736	0.2184486404059392	T	T	T
0.5558475306967885	0.1116899845117335	0.2190501317705674	T	T	T
0.8885600695994970	0.1112800872239674	0.2184261112794034	T	T	T
0.2221083123112636	0.4441357544126242	0.2189335348648835	T	T	T
0.5557087379430967	0.4440754976632632	0.2189264243096659	T	T	T
0.8882493047586681	0.4440640618195536	0.2189928516215090	T	T	T
0.5559944105969680	0.7780088915704718	0.2190679025176344	T	T	T
0.8888598242968756	0.7774322894766835	0.2183703665959426	T	T	T
0.2218941869782026	0.7781228675535568	0.2189672961580920	T	T	T
-0.0001652872857474	-0.0000602373607088	0.3252079305763799	T	T	T
0.3308114593839894	0.9975771412192486	0.3246590895535453	T	T	T
0.6669681828732432	0.9976568959108066	0.3246623131278305	T	T	T
0.3304331834345375	0.3330537991174786	0.3245408784075005	T	T	T
0.6664231953628981	0.3330985094545813	0.3285545470225451	T	T	T
0.0028221860340244	0.3333071805639234	0.3245768073504054	T	T	T
0.3333593207598513	0.6664472109094639	0.3250165477608459	T	T	T
0.6667346153540326	0.6690422400611642	0.3244479043383035	T	T	T
0.0027087790328338	0.6691148966727180	0.3245801911807690	T	T	T
0.6859059808544139	0.7477450899241104	0.5227612838501031	T	T	T
0.7956227178379156	0.7112046567806264	0.5770635258003237	T	T	T
0.5689497094703173	0.8328885267666890	0.5496372240985915	T	T	T
0.5595592550967696	0.5641704258345908	0.4907302379783319	T	T	T

0.6705574243802345	0.3330657389662787	0.4412303673047734	T	T	T
0.4958397452637991	0.5856258064635211	0.4519782117765925	T	T	T
0.6978742661040255	0.6101760626137256	0.6147495216682568	T	T	T
0.8814519779315175	0.6535413230452033	0.5555954601462321	T	T	T
0.8934407737872115	0.8451880570933380	0.6027471171806482	T	T	T
0.6358630616858615	0.4278460053040565	0.4613286544518865	T	T	T
0.8034210421203004	0.3775097445954727	0.4529748326873252	T	T	T
0.4660183554558120	0.7385547026741022	0.5875624005791847	T	T	T
0.4908311690048952	0.8555617085724379	0.5087273377942955	T	T	T
0.6627048464621832	0.9719776623101635	0.5731647998094832	T	T	T
0.7859819271173143	0.8431409939532827	0.4839276647774662	T	T	T

TS: -388.828879 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 2 10 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222215	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222201	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2220832453552703	0.1112487017157004	0.2194737363575020	T	T	T
0.5555325262467016	0.1108407429995631	0.2183038548410381	T	T	T
0.8883967439402018	0.1109947144958301	0.2181747127631848	T	T	T
0.2219672260847207	0.4444647870773931	0.2195737508430866	T	T	T
0.5559332729879329	0.4450690425652063	0.2200092992797830	T	T	T
0.8877058766940638	0.4431489540339900	0.2187903428691058	T	T	T
0.5560998303318710	0.7784373742340267	0.2186129134033162	T	T	T
0.8873984220029230	0.7781782813043263	0.2184720499504782	T	T	T
0.2231059240999727	0.7780887356409998	0.2186213257546881	T	T	T
-0.0003026641955570	0.9981157490509990	0.3251998400613361	T	T	T
0.3261665639779610	0.9946783780567128	0.3234645039780135	T	T	T
0.6655876497051315	0.0016507517453277	0.3315679836206049	T	T	T
0.3335314505772877	0.3349820505720894	0.3269730685815482	T	T	T
0.6681343551896343	0.3346212172171698	0.3250560637384844	T	T	T
0.0046396034563432	0.3382419176929378	0.3241519712007586	T	T	T
0.3312835769546376	0.6663073759441958	0.3237790207311840	T	T	T
0.6706132169572173	0.6710493399157264	0.3244315021136296	T	T	T
0.9997617542892812	0.6673990578000409	0.3247817393008519	T	T	T
0.6799277513607382	0.0953401772150075	0.4509219106215714	T	T	T
0.8336250669677875	0.1238290477805524	0.5016630163429470	T	T	T
0.4858508991203853	0.9457364671298206	0.4767719314926248	T	T	T
0.6777493003483381	0.2744320924042083	0.4443742148723733	T	T	T
0.3510676426664326	0.3226166009003733	0.4434061113325285	T	T	T
0.8106349169068177	0.3818074249987554	0.4419433107543906	T	T	T

0.2431026495815932	0.1927687338106764	0.4489266909539732	T	T	T
0.4663183508030672	0.3121766075209741	0.4511011774434346	T	T	T
0.7967826338183532	0.1538771077717150	0.5519199772119543	T	T	T
0.8430021293128842	0.9933165876677510	0.5047064067012387	T	T	T
0.9746958249693454	0.2422349092594312	0.4872370335842143	T	T	T
0.4665919464794415	0.9822589244900169	0.5288519987288528	T	T	T
0.3676012270215108	0.9329827739052141	0.4454253155245856	T	T	T
0.4746876313214676	0.8050581125194703	0.4772752608011832	T	T	T
0.8216332667692265	0.1070603239093365	0.3955679796637152	T	T	T

FS: -385.760883 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

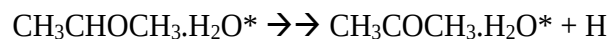
36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.2212824125448919	0.1095994260290963	0.2189881462997631	T	T	T
0.5559352909000086	0.1108008701497752	0.2194602628044915	T	T	T
0.8888756464892922	0.1108189120709400	0.2197068203852502	T	T	T
0.2219205988389047	0.4450540409595082	0.2188983410719414	T	T	T
0.5576121784901780	0.4459653687137400	0.2184623568264710	T	T	T
0.8896400416109470	0.4458200329624017	0.2180614408567586	T	T	T
0.5555902888139526	0.7772117410821446	0.2199127472481135	T	T	T
0.8883775954739936	0.7767169464515259	0.2177490745620797	T	T	T
0.2207161041812473	0.7769210733818565	0.2185241699729824	T	T	T
0.0019442985665644	0.0007843609696925	0.3237546728032789	T	T	T
0.3358564566593202	0.0078763473542035	0.3237549677420317	T	T	T
0.6690548153690801	0.0007283123438594	0.3268352088800034	T	T	T
0.3343110481060253	0.3330131327984880	0.3243227016149478	T	T	T
0.6671388816958056	0.3356290900149669	0.3245636366472878	T	T	T
0.9998299365255490	0.3294796702224626	0.3235629782694237	T	T	T
0.3326733589510519	0.6641696532685640	0.3256137090142264	T	T	T
0.6693429121239315	0.6623441339925993	0.3246400691342805	T	T	T
0.0046116022546987	0.6666562921873056	0.3332052201514184	T	T	T
0.0905453369476724	0.6785565553566075	0.4384592180884548	T	T	T
0.1466518327146103	0.8664859944785261	0.4733413913050215	T	T	T
0.9509361658381803	0.5134581374591186	0.4823712365809975	T	T	T
0.6433374573953475	0.9798759899532479	0.4425847603933127	T	T	T
0.2749158023857855	0.6696695053166903	0.4376227248633248	T	T	T
0.0046147451605257	0.5301382357094355	0.5346810487934905	T	T	T

0.5139709125416833	0.8686558082925434	0.4501518765645328	T	T	T
0.1957095379591913	0.8668436551100227	0.5254328950326614	T	T	T
0.2608565180890335	0.9907691998452887	0.4463401855193636	T	T	T
0.0238349622728559	0.8890859212539221	0.4752906057931038	T	T	T
0.6331234342120522	0.0925474548145122	0.4530095528292563	T	T	T
0.9253252601055441	0.3756466873495360	0.4624911445533983	T	T	T
0.8133555043677482	0.5093709806061475	0.4834940766124465	T	T	T
0.2434557076816510	0.5377783458245131	0.4467639031083833	T	T	T



IS: -386.478028 eV

2.700000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2230860479267822	0.1113769987282286	0.2191900642789071	T	T	T
0.5554796530626651	0.1113846547797737	0.2182254011334381	T	T	T
0.8895432607759681	0.1117562488896184	0.2183729833729351	T	T	T
0.2219677414126592	0.4448434514240756	0.2186629325408336	T	T	T
0.5555457289818265	0.4437549103620649	0.2191136297248091	T	T	T
0.8880832956740976	0.4449033622651622	0.2194829579815350	T	T	T
0.5551074691403499	0.7773059002054697	0.2183811447096975	T	T	T
0.8891446509214413	0.7773586888646319	0.2185521285945351	T	T	T
0.2219440925060161	0.7785283093795974	0.2196494474980320	T	T	T
0.9980649372635925	0.9973963744101692	0.3243000013456582	T	T	T
0.3386774486282581	0.0012701927331535	0.3277258199227046	T	T	T
0.6717580541049255	0.9955077739877441	0.3239550209784170	T	T	T
0.3288046851561069	0.3382380001152752	0.3260054408643410	T	T	T
0.6655270054038224	0.3278040136650745	0.3277328086173865	T	T	T
0.9983088961985477	0.3332566342079372	0.3236659384666048	T	T	T
0.3330537895175181	0.6682005646499272	0.3236986863763018	T	T	T
0.6698380777028746	0.6688651262949080	0.3243002618941163	T	T	T
-0.0001911661936316	0.6670555714395385	0.3248389210342275	T	T	T
0.5783523554781164	0.0846193937582807	0.4672774588952329	T	T	T
0.4156102576612625	0.9353530427544894	0.5095071419798142	T	T	T
0.7328431515862922	0.2461751174406271	0.5084234468459703	T	T	T
0.5031310325194005	0.1622013504261638	0.4178962582736547	T	T	T

0.3338406643089417	0.3436870081129929	0.4378737184897527	T	T	T
0.4690404822762032	0.8688909890200928	0.5450621084762424	T	T	T
0.2008998569630942	0.2622742130663097	0.4512196633894954	T	T	T
0.4010620509582376	0.2635187645322997	0.4417068761289264	T	T	T
0.6738378919859762	0.3218716795691570	0.5365889269419976	T	T	T
0.3075683692170098	0.8232804411719913	0.4771211054648606	T	T	T
0.3476231190193257	0.0006040153096850	0.5387747308629561	T	T	T
0.7944074415473603	0.1897299998005028	0.5448745605351761	T	T	T
0.8470785206649140	0.3489245634924547	0.4753375384823150	T	T	T
0.6445379039754112	0.0124741024007250	0.4388548749240732	T	T	T

TS: -385.760225 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222223	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555558	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888844	0.1111111111111150	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222225	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888851	0.4444444444444450	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222199	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2222934088725896	0.1103776233147795	0.2201743061545303	T	T	T
0.5552757924656401	0.1116013157973679	0.2169322160430341	T	T	T
0.8889947140306957	0.1115404365030853	0.2185312236883309	T	T	T
0.2220123467537402	0.4445194838183990	0.2193054611237323	T	T	T
0.5564619524473793	0.4443150189915570	0.2200477105193452	T	T	T
0.8876478968294832	0.4429846480404652	0.2192134802072782	T	T	T
0.5552231425619341	0.7777015238275590	0.2185935963081296	T	T	T
0.8884761634783511	0.7779094430349188	0.2181387483492366	T	T	T
0.2236832156636950	0.7788470120908056	0.2193611427435818	T	T	T
0.0000263690129412	0.9977754859308053	0.3242625939542114	T	T	T
0.3363269830346801	0.0006992279333675	0.3263840556371711	T	T	T
0.6712510366541709	0.9955916895166581	0.3314443994628054	T	T	T
0.3302027893425532	0.3368622102610449	0.3263914306638830	T	T	T
0.6660481875313912	0.3298507055832829	0.3264953782628289	T	T	T
0.0011787383274339	0.3352753864662451	0.3237358451358452	T	T	T
0.3307348695070464	0.6650977343215703	0.3237151875307911	T	T	T
0.6694010688236682	0.6667546489605731	0.3242331861761186	T	T	T
0.9993079671605947	0.6672997854007189	0.3244165499675910	T	T	T
0.6079209720570076	0.0541504621584149	0.4427405192422639	T	T	T
0.4667610983736940	0.8814349495616312	0.4833056469483802	T	T	T
0.7773963915907881	0.1933708709711303	0.4850970956433814	T	T	T
0.5151191605475823	0.1488506712993852	0.4153295621475003	T	T	T
0.3396105035269665	0.3350865237589748	0.4405761584375100	T	T	T
0.5332404286523740	0.8015358708816688	0.5026657219208563	T	T	T

0.2060693514690653	0.2515686426095279	0.4529228543854365	T	T	T
0.4052354343472866	0.2579654081196656	0.4461436605559225	T	T	T
0.7263305435540106	0.2460731975740771	0.5268551368391553	T	T	T
0.3429082131345469	0.7840957800023520	0.4523825954781341	T	T	T
0.4152702089860924	0.9294605332242272	0.5263457940907500	T	T	T
0.8510977632263679	0.1229342731263353	0.5067859726495744	T	T	T
0.8794901597642339	0.3166378045865047	0.4549451405774821	T	T	T
0.7123632279237624	0.9549193483174674	0.4094223580265270	T	T	T

```

FS:          -382.431397 eV
2.700000000000000
 3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000002  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 8          # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2213245037049908 0.1103196747815304 0.2191514118565221 T T T
0.5553873171545958 0.1109322749993420 0.2188560256631019 T T T
0.8889741933188664 0.1113532309374646 0.2193838185488686 T T T
0.2220804681989040 0.4445011949059747 0.2185082984898994 T T T
0.5559937758186549 0.4449997069624522 0.2191039447638819 T T T
0.8891925352012645 0.4450876182958090 0.2186577603161540 T T T
0.5550560654556846 0.7774330695978726 0.2192331423276524 T T T
0.8878973694182278 0.7783754807100686 0.2176320511525563 T T T
0.2213259746729790 0.7771591424365984 0.2187482524186746 T T T
0.9973060577370624 0.9970389804395630 0.3242029148651084 T T T
0.3363030469990681 0.0004208575056434 0.3243140161396516 T T T
0.6667960570272785 0.9994381240997986 0.3243045005290579 T T T
0.3364050715561144 0.3288743042166907 0.3274612275186338 T T T
0.6658369763314477 0.3301367381240754 0.3242063776746549 T T T
0.0027276433182466 0.3353950971817577 0.3260722174794195 T T T
0.3313847984035687 0.6634279346448791 0.3260615811749425 T T T
0.6688462587008746 0.6682649936623984 0.3242376258043720 T T T
0.9972312021682010 0.6681787949444433 0.3282869853802873 T T T
0.0487875303067902 0.6203155613236074 0.4323300167165239 T T T
0.1791846021478975 0.8004783519599201 0.4716321779230295 T T T
0.8718441712100603 0.4916338354865360 0.4735171059139791 T T T
0.3211584052167113 0.3347045536023336 0.4408231314666445 T T T
0.1478037124078378 0.5200410961299453 0.4150539519134621 T T T
0.9127610541007778 0.4511631531453766 0.5212872111314647 T T T

```

0.2546582882408760	0.4115755071789717	0.4461267109092189	T	T	T
0.2165028466004049	0.7633794014213763	0.5208479693056447	T	T	T
0.3144536330900901	0.8916656864067314	0.4446413186875437	T	T	T
0.1097398500994594	0.8849649853784595	0.4809913835259317	T	T	T
0.4526128699340151	0.4160696783260148	0.4556799859998024	T	T	T
0.7743982476352408	0.3583960212002815	0.4465815431689977	T	T	T
0.7947886381163719	0.5672616311545616	0.4859234767884034	T	T	T

Rh catalyst



IS: -290.948332 eV

1.0000000000000000

8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0800000000000001 7.0667672948810303 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107005

36 1 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1113720458786949	0.8896670096004858	0.1098073175399383	T	T	T
0.2231950083374946	0.1131918511940945	0.2206054321345248	T	T	T
0.5553625637147057	0.1109355849522346	0.2190511335692045	T	T	T
0.8893309393615327	0.1115583291627930	0.2194416149475283	T	T	T
0.2233697357111745	0.4437271695137961	0.2207914906949503	T	T	T
0.5538126777821831	0.4439572627144519	0.2205315575656316	T	T	T
0.8891955239332036	0.4447047939227309	0.2191516772336816	T	T	T
0.5555570886150750	0.7777348564367489	0.2193983319039909	T	T	T
0.8896361005172165	0.7781839930400495	0.2190996974114147	T	T	T
0.2218683801562447	0.7782510979144915	0.2188509752814383	T	T	T
0.9977025943215767	0.9980450225498840	0.3283931248679752	T	T	T
0.3338308419308286	0.9974614061652888	0.3281949977952975	T	T	T
0.6668489075917355	-0.0000566269765738	0.3291313587046345	T	T	T
0.3341259455104605	0.3318983234934791	0.3344007594993544	T	T	T
0.6698208451188810	0.3331037196289677	0.3279903782769373	T	T	T
0.9976972281653861	0.3338892042957685	0.3288931747018189	T	T	T
0.3340320015494985	0.6697896685183193	0.3285090251146744	T	T	T
0.6689217512890981	0.6701047098910773	0.3283745228686956	T	T	T
0.0001934181430190	0.6663170101187231	0.3287150353695886	T	T	T
0.6429539681685961	0.1931108383509766	0.5185066578288428	T	T	T

0.6541303187423523	0.3604723459392480	0.4896057046916706	T	T	T
0.3372281352739539	0.3348879380503392	0.4447877318238824	T	T	T
0.7427432565525129	0.4025801198902572	0.4513407240660202	T	T	T
0.5355465850017863	0.1452700298239404	0.5579459582295053	T	T	T
0.3431193864259710	0.4538137124089675	0.4566542209678400	T	T	T
0.4591897872102237	0.3442315309440208	0.4618593006966756	T	T	T
0.7795785922201693	0.2265691645362655	0.5405831311732378	T	T	T
0.6009062708858387	0.0805294417847366	0.4808346620272814	T	T	T

TS: 290.215016 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.11111111111111213	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.2224265870337135	0.1106899407671897	0.2187383753903694	T	T	T
0.5559159950046176	0.1116564920042089	0.2200307455847718	T	T	T
0.8884439061626118	0.1109375641779550	0.2190223562772587	T	T	T
0.2223448092237495	0.4444655746671652	0.2188953602654939	T	T	T
0.5573132109673175	0.4461433067145909	0.2217310066377551	T	T	T
0.8862653357945151	0.4437996953363272	0.2209735445275279	T	T	T
0.5566981027455553	0.7758324796795287	0.2208196899340319	T	T	T
0.8876186208768804	0.7769167241737653	0.2200584959937038	T	T	T
0.2217700096050552	0.7775372686737634	0.2189320048613490	T	T	T
0.0027977845942099	0.0036824739389740	0.3284604976063582	T	T	T
0.3307880377772467	0.9976639158423163	0.3277188910360579	T	T	T
0.6667886291526116	0.0004378191455909	0.3274277554221901	T	T	T
0.3279087729867645	0.3312160639062486	0.3279636130902108	T	T	T
0.6660077802539268	0.3277660424095932	0.3331923113155523	T	T	T
0.0028707931393448	0.3329347583999451	0.3288400694164794	T	T	T
0.3279568647629653	0.6640318602460784	0.3283676710993469	T	T	T
0.6685398811564445	0.6704029456561451	0.3384017245812447	T	T	T
0.0043711243044781	0.6689522140528708	0.3298273943434097	T	T	T
0.6608019804701584	0.6900326704288665	0.4503845471145886	T	T	T
0.5102808444225262	0.5180625730342919	0.4756345502021698	T	T	T
0.6472337919953376	0.2917348640258906	0.4447535603560774	T	T	T
0.3997774206107942	0.4818079462133373	0.4460544827680477	T	T	T
0.6260915249399556	0.8037493674072238	0.4479053385045930	T	T	T
0.5810109737908740	0.3603729013017162	0.4610952777283741	T	T	T

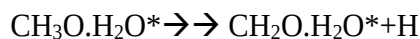
0.5566918671228890	0.1564618085518991	0.4494085558387864	T	T	T
0.7803293985276878	0.7333041038922172	0.4848252318014826	T	T	T
0.7981988418437239	0.6760674559649988	0.4019653299636873	T	T	T

```

FS:          -286.983188 eV
2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  5      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2223350233233078 0.1110705406330800 0.2192111342354853 T T T
0.5557685342067542 0.1121298910279758 0.2204546016183357 T T T
0.8884262186404346 0.1108585947133614 0.2189325201180678 T T T
0.2225765178380436 0.4446065820486130 0.2189474415683763 T T T
0.5575867304863334 0.4459908798183702 0.2215775153123927 T T T
0.8858142994965827 0.4433753849954816 0.2206912103062239 T T T
0.5566227486357527 0.7763731973473026 0.2201107386896581 T T T
0.8860857473361259 0.7760755619995178 0.2203138010283991 T T T
0.2216874044374816 0.7777670540693179 0.2192348549891349 T T T
0.0005548922125125 0.0010058757432859 0.3285556209887030 T T T
0.3299411143195227 0.9978822309830888 0.3279117441820834 T T T
0.6672318646898056 -0.0002990200329335 0.3278466881154389 T T T
0.3292796736802125 0.3321167971703464 0.3282304123424973 T T T
0.6681441041386131 0.3324887386130571 0.3336870239839428 T T T
0.0021714958960559 0.3332804597581019 0.3282224777866361 T T T
0.3306610190067442 0.6648954449527432 0.3283492628262673 T T T
0.6667320577639290 0.6721683479948677 0.3390652153589597 T T T
0.0033375374275406 0.6690456034923258 0.3286257502504728 T T T
0.6650775347644622 0.6980862771842706 0.4426411483826403 T T T
0.5205743979565743 0.5300518932482818 0.4751087054355510 T T T
0.6560327685309281 0.3093092161802941 0.4440403999778989 T T T
0.3989282747263048 0.4971290946894537 0.4540134229696171 T T T
0.5887602721673311 0.3788724360024792 0.4596558004316757 T T T
0.5703509994872554 0.1748636547197754 0.4525381682473362 T T T

```

0.6447060166590048	0.8186387585386236	0.4541345449978259	T	T	T
0.8002384908750971	0.7224492117727290	0.4630650392881365	T	T	T



IS: -287.118266 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224156789429882	0.1111152053493936	0.2188979699595095	T	T	T
0.5570542563143847	0.1134064682993350	0.2207061502146358	T	T	T
0.8885743655046578	0.1109116873567024	0.2190016948718762	T	T	T
0.2226526585481909	0.4443785161015278	0.2186806503780010	T	T	T
0.5569943004124597	0.4451528268540492	0.2213190151525138	T	T	T
0.8866528963013107	0.4434163240582237	0.2202368831015071	T	T	T
0.5565722448938315	0.7763127113179303	0.2206706766494582	T	T	T
0.8851690359704979	0.7755044005331881	0.2208029807973062	T	T	T
0.2220321546683468	0.7778644712142494	0.2187656975363597	T	T	T
0.0021621147186056	0.0019202630409485	0.3284271908781061	T	T	T
0.3304544032993013	0.9976226910230945	0.3279414793782175	T	T	T
0.6674806200296397	0.0009633161653328	0.3281242265892068	T	T	T
0.3270527425855119	0.3297410535995860	0.3280269302440692	T	T	T
0.6660426985498712	0.3287629930721841	0.3333086061217662	T	T	T
0.0026895209595033	0.3335173672829461	0.3282664669250550	T	T	T
0.3297116050420901	0.6652782588400346	0.3279192030640478	T	T	T
0.6681346698468602	0.6724450505116899	0.3345726526204751	T	T	T
0.0054394738468726	0.6689791257681583	0.3281868457876873	T	T	T
0.7108806323588664	0.7918775188434488	0.4809600468715267	T	T	T
0.6693898628959726	0.3506755024440119	0.4411470359332352	T	T	T
0.6435770677965121	0.6371737499443184	0.4358860886544408	T	T	T
0.6436920139108223	0.8777705201619388	0.4705890180005260	T	T	T

0.6656798653607439	0.4802641584491220	0.4464141666186016	T	T	T
0.6735308629529474	0.7356273269573667	0.5323192908018870	T	T	T
0.8659513408562951	0.8847050984993712	0.4775914925237080	T	T	T
0.7943182435636837	0.3755066219344179	0.4552158199996951	T	T	T

TS: -286.540053 eV

1.0000000000000000

8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0800000000000001 7.0667672948810303 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107005

36 1 2 5 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655340	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2231639303145955	0.1122213401511498	0.2204771506702107	T	T	T
0.5562962473489489	0.1108018129003626	0.2186991676598023	T	T	T
0.8881790335698890	0.1108480010980857	0.2196778067471621	T	T	T
0.2229125897070799	0.4440517718323791	0.2196382120922738	T	T	T
0.5551316766709896	0.4443605013354152	0.2205313871096502	T	T	T
0.8864562122916692	0.4440958956373828	0.2208674358610518	T	T	T
0.5574458018908688	0.7807910515801966	0.2205235829674639	T	T	T
0.8895845232595765	0.7784625299731167	0.2184780104744632	T	T	T
0.2231463384510360	0.7813732712887651	0.2205741795368583	T	T	T
-0.0003572272817243	0.9969801616486981	0.3285351723882863	T	T	T
0.3386414776434134	-0.0002439523771534	0.3309597518369727	T	T	T
0.6710197364865899	0.9960287358602699	0.3359541739917787	T	T	T
0.3313582144729493	0.3392722888842469	0.3313403001709790	T	T	T
0.6674970710609944	0.3299391658153498	0.3308986323667429	T	T	T
0.0039835969048274	0.3372539877741693	0.3280208391223919	T	T	T
0.3285210638269249	0.6634311625885060	0.3275405353500329	T	T	T
0.6721567193990969	0.6677729461857733	0.3279829744114379	T	T	T
0.0004154955084998	0.6683902463722643	0.3285881583030362	T	T	T
0.6033903862589798	0.0489314342497867	0.4398134471040892	T	T	T
0.5089293279771784	0.1432527928292929	0.4192120865488835	T	T	T
0.3367531979631644	0.3328667343836622	0.4439041706399877	T	T	T
0.5070315713545747	0.9045573703627430	0.4575712839773252	T	T	T
0.2040333422698023	0.2455975098072564	0.4546761873356116	T	T	T
0.4036716067573995	0.2586304633726902	0.4492248741059640	T	T	T

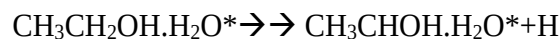
0.7084903047099357	0.1333191015427127	0.4785281324458504	T	T	T
0.7734369307566673	0.0516505371918814	0.4082361025612849	T	T	T


```

FS:          -283.350805 eV
1.0000000000000000
 8.1600000000000001  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-4.0800000000000001  7.0667672948810303  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  19.9878363011107005
36  1  2  4      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1121175078655341  0.8892588397134702  0.1098721785789749  F  F  F
0.2228192034795900  0.1125293762134726  0.2207126647102677  T  T  T
0.5557041438239583  0.1108628598969805  0.2189118365398514  T  T  T
0.8872673376785233  0.1109259985796245  0.2196115487817489  T  T  T
0.2222252601977899  0.4443213372885390  0.2200940301148427  T  T  T
0.5543594170077131  0.4439596400077582  0.2209011693289661  T  T  T
0.8855597103256841  0.4438039093988912  0.2207936042029910  T  T  T
0.5559211249273499  0.7795351501806848  0.2196315043727930  T  T  T
0.8888953456435944  0.7783778594187249  0.2184179847710037  T  T  T
0.2228813276868645  0.7812387076787003  0.2206060819345424  T  T  T
0.9964761667868113  0.9967684558122839  0.3283616994487914  T  T  T
0.3363800777795019  -0.0001609538450563  0.3314274683759890  T  T  T
0.6707636311169332  0.9962843348585376  0.3350607702236070  T  T  T
0.3286697055596040  0.3386347346603095  0.3317351115161077  T  T  T
0.6664494313798673  0.3296133206637609  0.3315907597689599  T  T  T
0.0009423974257099  0.3357295145865608  0.3277853329435734  T  T  T
0.3303908456550234  0.6655262093210089  0.3276757503552560  T  T  T
0.6707555382522861  0.6705316590171083  0.3282651207916035  T  T  T
0.9990638863016407  0.6679305603875700  0.3282704108447250  T  T  T
0.6111254512477232  0.0516544633188375  0.4311663226974035  T  T  T
0.5139505747815082  0.1493224167013016  0.4181769077718251  T  T  T
0.3362394069610303  0.3334666540457509  0.4438532836196477  T  T  T
0.5203945456884749  0.9159350275011637  0.4565136309982802  T  T  T
0.2046514363880658  0.2491451291792135  0.4567020905031681  T  T  T
0.4028308186054894  0.2591339113579411  0.4494848067282934  T  T  T

```

0.7451118818044155 0.1417194647972545 0.4576120253742195 T T T



IS: -307.657319 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226776307640728	0.1113287945541208	0.2194338823986063	T	T	T
0.5565110409494723	0.1130786043219437	0.2207377933529810	T	T	T
0.8887084311823225	0.1114249789025623	0.2194653709884343	T	T	T
0.2222370961963436	0.4445199818611817	0.2193713655916698	T	T	T
0.5564506555649200	0.4435647729487284	0.2207552676468917	T	T	T
0.8867282403019336	0.4433216935056827	0.2208725208566676	T	T	T
0.5555447844356669	0.7777739988636094	0.2191911934502027	T	T	T
0.8891397520912819	0.7776231694710455	0.2191745994528065	T	T	T
0.2222428534293315	0.7777762428642437	0.2191102372612112	T	T	T
0.0002126180030262	0.0002605412776959	0.3289514375310864	T	T	T
0.3308884597536943	0.9977746420434526	0.3286647389290573	T	T	T
0.6667041232303653	0.9974398449210220	0.3288195310088282	T	T	T
0.3301290328003059	0.3321970798766845	0.3285304731233765	T	T	T
0.6684873506389815	0.3355164550982652	0.3345011222317986	T	T	T
0.0025414315109458	0.3331285453803557	0.3286611511352559	T	T	T
0.3340812886726323	0.6674221900411423	0.3288795755201542	T	T	T
0.6675370114210577	0.6707007265410601	0.3284072746532614	T	T	T
0.0031468763870796	0.6699196078464473	0.3284262883166587	T	T	T
0.6159246022603354	0.6946845101741347	0.5381462746014015	T	T	T
0.8244083903506048	0.8337038549713012	0.5267741371618185	T	T	T
0.6658957773627671	0.3300890934690558	0.4450198571506824	T	T	T
0.5339268814663064	0.5479152967048848	0.4875986077121883	T	T	T

0.5332418469830996	0.7676456288899002	0.5400150277506726	T	T	T
0.6194671025549116	0.4163985345822491	0.4630495762708298	T	T	T
0.5101201835225366	0.5986114415922965	0.4460247998775882	T	T	T
0.8797882459779161	0.9380043077810918	0.5676042906954536	T	T	T
0.9066099911392104	0.7605972521097202	0.5253901504404942	T	T	T
0.8472856322636056	0.9106720908774193	0.4793424919562630	T	T	T
0.5935440524205039	0.6187062807487690	0.5856705793755920	T	T	T
0.5677390333346163	0.2007498889349071	0.4555352770164584	T	T	T

TS: -306.901260 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.11111111111111213	0.88888888888888999	0.11111111111111076	F	F	F
0.2224366285592961	0.1106315935661873	0.2187093999543194	T	T	T
0.5558418750014958	0.1116403465967515	0.2200012663380653	T	T	T
0.8884307801475696	0.1108511107122189	0.2190000155842909	T	T	T
0.2224106135513423	0.4443459377602529	0.2189000368981652	T	T	T
0.5573204358120445	0.4460973562373113	0.2217104813866906	T	T	T
0.8863778434702381	0.4437828554697242	0.2209508412731583	T	T	T
0.5567179969143512	0.7757375313512680	0.2209351115802022	T	T	T
0.8874028706261088	0.7767579745172637	0.2200825327092077	T	T	T
0.2217410106016684	0.7774595919431606	0.2189471386379276	T	T	T
0.0027659462703939	0.0035976099324571	0.3284016411687812	T	T	T
0.3307940382532498	0.9975940272243141	0.3277076978998205	T	T	T
0.6669571594162051	0.0006749014323474	0.3274454387093355	T	T	T
0.3281288911222493	0.3313787029327778	0.3280175662948350	T	T	T
0.6661105819959537	0.3279761956999134	0.3332183086236061	T	T	T
0.0029230137402554	0.3327702116618427	0.3288094645012165	T	T	T
0.3277421904341989	0.6639355157337657	0.3283730101716659	T	T	T
0.6691201555590265	0.6706072904571859	0.3387253064831806	T	T	T
0.0041569410140356	0.6689766583863046	0.3298133825278837	T	T	T
0.6575603415021094	0.6919915219884484	0.4528035697989558	T	T	T
0.8167405434994780	0.7667840162804694	0.5035082060037506	T	T	T
0.5079515532951675	0.5155443143076398	0.4753422994893569	T	T	T
0.6465649596785848	0.2892191978037980	0.4449192181427066	T	T	T
0.4003198119362081	0.4780600905974881	0.4440197090297887	T	T	T
0.7633643630617896	0.7855978071213914	0.5518118051041818	T	T	T

0.8722345557670099	0.6700942996443428	0.5108589042568530	T	T	T
0.9331346530501337	0.9042363767627424	0.4869228673238465	T	T	T
0.6082095754143814	0.7935699397613674	0.4446042585641209	T	T	T
0.5812366351407846	0.3587112677101543	0.4611757826367146	T	T	T
0.5542016918702617	0.1540693804863779	0.4485476865329332	T	T	T
0.7944811951664305	0.6698372582157589	0.4018792282574443	T	T	T

FS: -303.659066 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

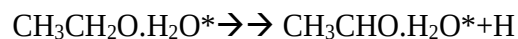
36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225299317095943	0.1110856069175774	0.2192036707299665	T	T	T
0.5559199924546545	0.1122511664810657	0.2202961147516420	T	T	T
0.8885956402139674	0.1109574392949142	0.2188653329208391	T	T	T
0.2228195481720797	0.4447508149680398	0.2189247552543742	T	T	T
0.5578176433758278	0.4464499760689517	0.2216797684996161	T	T	T
0.8859984259886546	0.4435371955074235	0.2206738080690595	T	T	T
0.5568682856704572	0.7763471057841037	0.2201678629567696	T	T	T
0.8861222296768508	0.7761509493474745	0.2202733649906967	T	T	T
0.2218666786325954	0.7779437271333056	0.2192199542796972	T	T	T
0.0008764109057055	0.0017448297200792	0.3284542369644109	T	T	T
0.3305740193591599	0.9980165124683290	0.3277410194430566	T	T	T
0.6674454625768330	0.0000077971618425	0.3278359269545702	T	T	T
0.3298438731977641	0.3328298715821003	0.3282098602435399	T	T	T
0.6679949379220711	0.3326052695501461	0.3335719651810811	T	T	T
0.0026431427683131	0.3335661771906724	0.3281457624689205	T	T	T
0.3310180000477791	0.6647710164799504	0.3282840633857088	T	T	T
0.6693431769772126	0.6736422169341741	0.3409293714208635	T	T	T
0.0032021022243315	0.6687692546798185	0.3285933317048005	T	T	T
0.6640874684693471	0.7054128073930482	0.4451918543022039	T	T	T
0.8466061392226234	0.7661390914283958	0.4824477060654425	T	T	T
0.5198032543516968	0.5308762967304892	0.4747174185606114	T	T	T
0.6502753792776161	0.3031082035390674	0.4440248235680433	T	T	T
0.4014418387224682	0.4934894618307727	0.4500694365725082	T	T	T
0.8240007650151419	0.7718627990627209	0.5366753451006194	T	T	T

0.9013760703924224	0.6689169647075954	0.4743872784750060	T	T	T
0.9551879779335819	0.9079363890897705	0.4658635201160968	T	T	T
0.5887264828414017	0.3780452575606589	0.4596094648339205	T	T	T
0.5573395291809157	0.1693693930796055	0.4506527692420730	T	T	T
0.6189320804949148	0.8118683583063423	0.4499925920376066	T	T	T



IS: -303.832782 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222712022835348	0.1113229388339151	0.2188914072819953	T	T	T
0.5571163895359927	0.1136591894502358	0.2206376719246289	T	T	T
0.8884960661829172	0.1110068283994224	0.2190632264298786	T	T	T
0.2225065747469525	0.4445338789990069	0.2186949870815748	T	T	T
0.5569080964795213	0.4454518960635659	0.2213141337923046	T	T	T
0.8865631794513286	0.4435602076690426	0.2202099021165687	T	T	T
0.5564702059957216	0.7764846996374376	0.2205570777090243	T	T	T
0.8849381558140816	0.7756098020412877	0.2209328444710435	T	T	T
0.2219425275307172	0.7780127795913887	0.2186992260077779	T	T	T
0.0025909900689243	0.0026640563472125	0.3285939874516829	T	T	T
0.3305429185940577	0.9978838592829629	0.3278414904972051	T	T	T
0.6670145825881237	0.0010338914468440	0.3282628177706811	T	T	T
0.3271502480301687	0.3304301317366011	0.3280147849917052	T	T	T
0.6654796108713883	0.3289005914480104	0.3333674561183118	T	T	T
0.0023772743157783	0.3338797445327013	0.3283040376473081	T	T	T
0.3294123247224510	0.6654529242938456	0.3278689967274985	T	T	T
0.6683826740780096	0.6726478305443140	0.3344437781842357	T	T	T
0.0054830018533914	0.6690019722324250	0.3281286205065433	T	T	T
0.6825969955374686	0.7852015575461703	0.4823826333469756	T	T	T
0.8896387309555751	0.8932358268589454	0.5027235644379893	T	T	T
0.6668729896687896	0.3496343354931453	0.4416989558006846	T	T	T
0.6407494938380228	0.6374538064864141	0.4356766700420917	T	T	T

0.6398288496881492	0.8829866893903076	0.4604881638289609	T	T	T
0.6616721944138469	0.4772162097941950	0.4471719132295350	T	T	T
0.9148544664615371	0.0036591188008786	0.5395317622700044	T	T	T
0.9343076099404655	0.7985934788182636	0.5249482147840957	T	T	T
0.9805795792152477	0.9628355670140230	0.4587834554590521	T	T	T
0.5917489439273917	0.7189038118395296	0.5266011626507220	T	T	T
0.7926273239372115	0.3765226496545806	0.4555608911794450	T	T	T

TS: -303.268590 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134704	0.1098721785789753	F	F	F
0.2227270464597949	0.1114306728752455	0.2204257656037957	T	T	T
0.5561170177073533	0.1103235105098039	0.2187824217071582	T	T	T
0.8865760533380748	0.1097213991777954	0.2202783568570655	T	T	T
0.2227016618122106	0.4434884653616482	0.2196161704004768	T	T	T
0.5549540172407900	0.4434811119197558	0.2206701668754353	T	T	T
0.8859443091223345	0.4436258201625637	0.2207847269862122	T	T	T
0.5563889602524746	0.7788345401335184	0.2198346589512412	T	T	T
0.8891104975674180	0.7777602775318092	0.2184291015793276	T	T	T
0.2226883605021018	0.7803846531582691	0.2205455821369550	T	T	T
0.9995298510384877	0.9955729791453722	0.3281932437139414	T	T	T
0.3378148255825256	0.9987823874146127	0.3310457316383792	T	T	T
0.6710906559778190	0.9950115998557761	0.3361505675722429	T	T	T
0.3300723734271160	0.3372299668663066	0.3311821957146526	T	T	T
0.6675337179603751	0.3274831333872177	0.3310673366201835	T	T	T
0.0036147476292101	0.3364652142640221	0.3277677226032426	T	T	T
0.3288883193395794	0.6624205678214246	0.3275425710789444	T	T	T
0.6715016719195464	0.6670361871319062	0.3283020368619833	T	T	T
0.9998209387608679	0.6672130022684912	0.3285303368641738	T	T	T
0.6120784295168339	0.0576295677515388	0.4429962588448046	T	T	T
0.4907248928576646	0.9078814571437865	0.4941002259743283	T	T	T
0.5204179841590861	0.1517340054596232	0.4187221316485980	T	T	T
0.3347680276961043	0.3288714153919549	0.4440645379904471	T	T	T
0.5653777801140066	0.8385532816587802	0.5148087720470219	T	T	T
0.2023535661016899	0.2378388625690953	0.4539041488945368	T	T	T

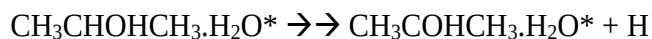
0.4048030289100962	0.2574847332703806	0.4487048489774592	T	T	T
0.7526673757453145	0.1611168372481158	0.4623038719868841	T	T	T
0.3581985653676154	0.7987729302924150	0.4711954545154720	T	T	T
0.4565913230103491	0.9754446760004041	0.5352851490071699	T	T	T
0.6659922238053132	0.9210751874626009	0.4109369569710202	T	T	T

```

FS:          -300.078611 eV
2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36  2  2  6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1121175078655341  0.8892588397134702  0.1098721785789749  F  F  F
0.2229803972000990  0.1124514017279449  0.2207614996984863  T  T  T
0.5560242528838393  0.1108702441275085  0.2189824704380653  T  T  T
0.8874258109771870  0.1109838367323527  0.2195743070611698  T  T  T
0.2226228469445482  0.4446306281659998  0.2201101022694971  T  T  T
0.5543518069576696  0.4439929223527690  0.2208802925518865  T  T  T
0.8856424227524359  0.4439084972436144  0.2207746130947877  T  T  T
0.5561959636252161  0.7797649994564613  0.2195426593833385  T  T  T
0.8890242659647095  0.7784493309894592  0.2183755951000565  T  T  T
0.2228751945777318  0.7811259331898638  0.2204239933281832  T  T  T
0.9961433613130458  0.9967358629730743  0.3284021919427207  T  T  T
0.3367920860864327  0.0006039581235515  0.3314633043060520  T  T  T
0.6696976532449989  0.9956909800001311  0.3357979138050360  T  T  T
0.3288212168571867  0.3385882929097728  0.3316647848847773  T  T  T
0.6668669858179731  0.3297501968107608  0.3312992920480892  T  T  T
0.0010141866349442  0.3356616198978183  0.3276766608662124  T  T  T
0.3305916923623038  0.6657026435187271  0.3276470175006411  T  T  T
0.6713024933846610  0.6707824856683469  0.3281598291946128  T  T  T
-0.0006269277961112  0.6685236268685711  0.3281431095038925  T  T  T
0.6157554034548421  0.0548013897706492  0.4332148050004431  T  T  T
0.5065396375525896  0.8856167384127231  0.4782113332787116  T  T  T
0.5186840080773668  0.1519651204577957  0.4183971354665925  T  T  T
0.3355916094383845  0.3310841749219000  0.4440487890220804  T  T  T
0.5860897227029953  0.8116859591467017  0.4863912212267962  T  T  T
0.2037793766362408  0.2430284419823911  0.4556741079666582  T  T  T

```

0.4044913683292829	0.2587313518329893	0.4491843610297528	T	T	T
0.7576403957650507	0.1553744104759119	0.4528793636683053	T	T	T
0.3678133666746550	0.7841875274001430	0.4565864985167279	T	T	T
0.4814550410022980	0.9317818422124273	0.5272364241885863	T	T	T



IS: -324.418112 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

36 3 2 10 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224987119492948	0.1110115659242016	0.2193581356732572	T	T	T
0.5564281192231346	0.1128705794822261	0.2207454561233952	T	T	T
0.8887119983828083	0.1113313208168608	0.2194697258384480	T	T	T
0.2222732344503604	0.4445142156972189	0.2193628006500397	T	T	T
0.5563046928802641	0.4432053957883621	0.2207046946523077	T	T	T
0.8867947564547943	0.4432707793817054	0.2208807310228093	T	T	T
0.5555039962028072	0.7776661464140118	0.2191404934224076	T	T	T
0.8889418204939072	0.7775107423569982	0.2192632039681603	T	T	T
0.2221482188854034	0.7776869771448034	0.2191125487333658	T	T	T
0.0001070465468544	0.0000542767823123	0.3290775800284255	T	T	T
0.3307837226740423	0.9975743348443418	0.3286804088484819	T	T	T
0.6665999589668866	0.9970863006524970	0.3287132903731390	T	T	T
0.3300509147222317	0.3321135252863872	0.3285244646094003	T	T	T
0.6681219393077130	0.3345911809689958	0.3344148155729822	T	T	T
0.0027071879240280	0.3329512169590738	0.3287112161789640	T	T	T
0.3337032799763137	0.6668920136107142	0.3288617487815211	T	T	T
0.6673098545776786	0.6697971373815597	0.3282064980026304	T	T	T
0.0030369678532246	0.6699049489193154	0.3284529272985454	T	T	T
0.6828355865875013	0.7431367579724438	0.5170509328011670	T	T	T
0.8005604585918767	0.7118887196283197	0.5687767097557431	T	T	T
0.5734851007879124	0.8330945372932477	0.5455591226560190	T	T	T
0.5502097377886215	0.5575647600503766	0.4889153442011565	T	T	T

0.6703030825446777	0.3329210663356231	0.4444467305256294	T	T	T
0.4873477280349016	0.5757962007403136	0.4496510627144894	T	T	T
0.7101243920094387	0.6187449615541076	0.6090337515805502	T	T	T
0.8778260391592362	0.6477951348551040	0.5461070303556576	T	T	T
0.9044367225362655	0.8475967262327109	0.5911326553816413	T	T	T
0.6253971659672418	0.4209773572355059	0.4624867986901402	T	T	T
0.5748558141868518	0.2044460004653934	0.4571001300030792	T	T	T
0.4812919937518492	0.7474972123258071	0.5868100115204452	T	T	T
0.4847099207050122	0.8455947649459200	0.5067290448769157	T	T	T
0.6718700994591864	0.9757247304007551	0.5645802964609368	T	T	T
0.7751856132917203	0.8320598205780307	0.4759457921437387	T	T	T

TS: -323.379600 eV
2.7200000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 3 2 10 # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666651 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666644 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333359 0.6666666666666646 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666647 0.6666666666666646 0.0000000000000000 F F F
-0.0000000000000002 0.6666666666666646 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444433 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444430 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.1111111111111137 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.1111111111111130 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.2226136316264830 0.1109456280288748 0.2186830738543934 T T T
0.5558338331980911 0.1121423769952445 0.2198791390491745 T T T
0.8888935449372356 0.1107013197861830 0.2190422376041301 T T T
0.2225334216669014 0.4444935161651875 0.2187388056108913 T T T
0.5582713265698510 0.4478511828899058 0.2230039879778591 T T T
0.8860220867220705 0.4431991954383753 0.2207525697580399 T T T
0.5565088877014259 0.7763257103479159 0.2200324267546978 T T T
0.8877513332534926 0.7771619848724206 0.2202487076108950 T T T
0.2217287674143653 0.7774055976451005 0.2187200264330835 T T T
0.0028830329802798 0.0029955385331570 0.3301366197570719 T T T
0.3303632302556787 0.9973330750295574 0.3273928917275407 T T T
0.6665693809002808 0.0006837965408601 0.3268930693413170 T T T
0.3268501351496047 0.3301332140390466 0.3281687915509728 T T T
0.6671744386079848 0.3300354028381992 0.3328180686562149 T T T
0.0031238626253269 0.3339210546802076 0.3285935817559629 T T T
0.3299938553010093 0.6639169175116241 0.3283606954842825 T T T
0.6684404210343843 0.6710618761012458 0.3397429852919361 T T T
0.0054777863182865 0.6677279191080702 0.3284244754183762 T T T
0.6831857699806093 0.7097635773125707 0.4620064445580570 T T T
0.8519339913810666 0.7241294019569576 0.4992988855192402 T T T
0.6344435153479681 0.8585191493993406 0.4834178059197602 T T T
0.5266828929070058 0.5246883248840829 0.4749846053306235 T T T
0.6422578011562836 0.2853528409856404 0.4436276083044755 T T T
0.4209990136966836 0.5044891486810722 0.4451508437593802 T T T

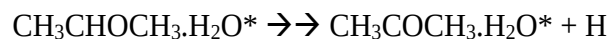
0.8148320390968178	0.6936169897735120	0.5526639143288486	T	T	T
0.8927651375385088	0.6236519066634167	0.4800356434166334	T	T	T
0.9741412359753358	0.8673881612400185	0.4946888974008286	T	T	T
0.5869968610246212	0.3657725408790323	0.4587729533839048	T	T	T
0.5388710795518157	0.1538417570187583	0.4454928957681047	T	T	T
0.6114316992987978	0.8482865180890972	0.5380237008823584	T	T	T
0.5042653910541295	0.8359873238298868	0.4586419686948712	T	T	T
0.7496147723693138	0.0015774675925447	0.4712745643446352	T	T	T
0.8108747062588266	0.8096677394005801	0.3992090251504987	T	T	T

```

FS:          -320.212106 eV
2.7200000000000000
 3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 9          # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2224444875034512 0.1109144917078402 0.2189546029245002 T T T
0.5552999805754181 0.1114496918526304 0.2201381252023296 T T T
0.8885593396991315 0.1108755856279139 0.2186593419888209 T T T
0.2228406571551918 0.4446281482271995 0.2187341015875170 T T T
0.5583151165577465 0.4469080582117685 0.2219909865796797 T T T
0.8856997122857471 0.4433770814139810 0.2206167188750279 T T T
0.5569187858740245 0.7759382108106272 0.2201424827725226 T T T
0.8854277357710006 0.7756001291003281 0.2205784805563593 T T T
0.2217129246341747 0.7776398809693182 0.2192578279581550 T T T
0.0008361411486405 0.0013094507370435 0.3284390401269989 T T T
0.3292760161140220 -0.0020291374052846 0.3272580750974106 T T T
0.6689229787645851 0.0000385731752435 0.3275765170231642 T T T
0.3301589576749841 0.3325896934485811 0.3282163493856541 T T T
0.6679489207229039 0.3315788525913062 0.3332576402936660 T T T
0.0029834512404954 0.3339525586745633 0.3278112834904847 T T T
0.3316350029587894 0.6642340910805855 0.3282986585709856 T T T
0.6675887126960748 0.6749417038146833 0.3451018423634219 T T T
0.0025486342054118 0.6681792182624011 0.3287081609935625 T T T
0.6640140635588759 0.6962065163762554 0.4511672192285594 T T T
0.8498005988086097 0.7344822183367189 0.4822756500870501 T T T
0.6116992203513403 0.8416294100439559 0.4747112702830354 T T T
0.5195890930876488 0.5115548137881505 0.4760366084108649 T T T
0.6475556538131951 0.2888828832933671 0.4431814998211706 T T T
0.4015074112418692 0.4785516388831432 0.4519724464010718 T T T

```

0.8350528316810953	0.7235900661075215	0.5373392019237209	T	T	T
0.8944060405815415	0.6346287879801156	0.4652837852418416	T	T	T
0.9620819844224094	0.8782966379005637	0.4695422610792456	T	T	T
0.5867948990280536	0.3648820368489584	0.4592561677667548	T	T	T
0.5521988148156868	0.1552678652632013	0.4482140470603801	T	T	T
0.6133474082096440	0.8465605814949260	0.5300170976550288	T	T	T
0.4694930050910963	0.8064425585091559	0.4575523335509296	T	T	T
0.7155225259825447	0.9838557085729334	0.4562614566918748	T	T	T



IS: -320.549926 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223982025405583	0.1113964380063466	0.2188045577221888	T	T	T
0.5573190565831826	0.1137571641788852	0.2207684972229708	T	T	T
0.8884560135769508	0.1110478274884641	0.2191054544859155	T	T	T
0.2225179453748515	0.4445821676236544	0.2186947319742521	T	T	T
0.5568854219603429	0.4454985403289718	0.2212770313876874	T	T	T
0.8866134657467406	0.4436069314081451	0.2202746437488808	T	T	T
0.5564505460824569	0.7766254709843573	0.2205305600687287	T	T	T
0.8849567114831300	0.7756565652236024	0.2208838087366687	T	T	T
0.2220116659480708	0.7781007099445636	0.2187109268001604	T	T	T
0.0030816351495144	0.0028179414799805	0.3283901269986121	T	T	T
0.3306002039008406	0.9980627934256258	0.3279042463402477	T	T	T
0.6671302351834068	0.0011198039769816	0.3286202289363175	T	T	T
0.3272264639366293	0.3304197139683831	0.3280119987664266	T	T	T
0.6653912719007138	0.3296318671610293	0.3336066342125407	T	T	T
0.0024169885674019	0.3338971028003769	0.3283398156216245	T	T	T
0.3291927325802552	0.6654068497167164	0.3278219109187366	T	T	T
0.6688358202051889	0.6728340651678923	0.3340570186093521	T	T	T
0.0056379635656823	0.6691590914256466	0.3281660477794713	T	T	T
0.6800703622185036	0.7961601708269712	0.4799748849803529	T	T	T
0.8825735807751540	0.8901247096390523	0.5060543728947922	T	T	T
0.5324158447840981	0.7195063258913910	0.5356161686355272	T	T	T
0.6675860472145981	0.3533942542973150	0.4423356207198562	T	T	T

0.6430831819150470	0.6444491538779095	0.4351660568827199	T	T	T
0.6625975650625430	0.4797571288905265	0.4477805305121784	T	T	T
0.9134388797057691	0.0109300361428167	0.5385521651545044	T	T	T
0.9059203406177125	0.7890742364156341	0.5351425583709567	T	T	T
0.9840685391635792	0.9423955529144685	0.4641113958685967	T	T	T
0.5430942366217341	0.6107848639505329	0.5646872269142036	T	T	T
0.5535074401815443	0.8338381601152779	0.5698799642047055	T	T	T
0.3893339623740504	0.6561006628122255	0.5144707868942434	T	T	T
0.7940150277269126	0.3814236295528500	0.4558213130306030	T	T	T
0.6623521320148374	0.9029716576162824	0.4508559587679235	T	T	T

TS: -319.944825 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134704	0.1098721785789753	F	F	F
0.2229555473223459	0.1116270488785613	0.2204891397877967	T	T	T
0.5563743869417622	0.1105215030346112	0.2188777949269313	T	T	T
0.8871317641163615	0.1100967709924519	0.2200100924786838	T	T	T
0.2228841465613940	0.4437675263432637	0.2195952857209753	T	T	T
0.5552250867627637	0.4438461047559412	0.2206643118110418	T	T	T
0.8863931024314040	0.4440077612834556	0.2206550975548333	T	T	T
0.5568763914990714	0.7797422831672793	0.2200030428186631	T	T	T
0.8893764974747191	0.7779922370062342	0.2183510581420632	T	T	T
0.2228506806929500	0.7807607343870107	0.2204233360225892	T	T	T
0.9994044849516956	0.9959060564800818	0.3283098209358516	T	T	T
0.3386841905103080	0.9994912342905682	0.3308916486196093	T	T	T
0.6713532042041190	0.9954334714881080	0.3368585720806255	T	T	T
0.3308006105476361	0.3378968845339522	0.3310801706696181	T	T	T
0.6674115430297772	0.3281848280785738	0.3310245542645758	T	T	T
0.0038551176119782	0.3363867867159590	0.3275992814877888	T	T	T
0.3294828935913287	0.6631026621542134	0.3274239605064926	T	T	T
0.6721129005945181	0.6676857465693367	0.3281312105342722	T	T	T
0.0000754073573200	0.6676442564867793	0.3283519378610895	T	T	T
0.6073848034278592	0.0548695506870697	0.4461111490185727	T	T	T
0.4680793474900908	0.8801649281318713	0.4851432369947709	T	T	T
0.7782555991704048	0.1922770056271454	0.4873052717483901	T	T	T
0.5169057045510977	0.1474748994581353	0.4191748196047982	T	T	T
0.3343378195733160	0.3286372034925056	0.4441503178677271	T	T	T
0.5346433607463728	0.8004733411134113	0.5033818421147045	T	T	T

0.2013959600881360	0.2382497083373409	0.4535133827917887	T	T	T
0.4030930048525413	0.2558188046795275	0.4485051384110850	T	T	T
0.7297848246823365	0.2456095663562600	0.5291038431707097	T	T	T
0.3461572893331540	0.7854043690291209	0.4537579647080125	T	T	T
0.4161777642134082	0.9249444993280419	0.5284506800432225	T	T	T
0.8515539792916991	0.1218405316034093	0.5082178263629367	T	T	T
0.8783347609929029	0.3135157237010296	0.4567177259861844	T	T	T
0.7120620078268343	0.9586729158483275	0.4121861059915659	T	T	T

FS: -316.713461 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Rh C O H

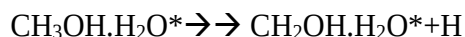
Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2228733870111128	0.1125791688138353	0.2206967422299403	T	T	T
0.5560231959542082	0.1107301644021699	0.2190466627811158	T	T	T
0.8868602605129551	0.1105557660084923	0.2195610830151799	T	T	T
0.2223163442216393	0.4445528729601549	0.2201819765620135	T	T	T
0.5544361329934654	0.4439560983240127	0.2208855178779003	T	T	T
0.8857328595785073	0.4439276605341320	0.2205359351650542	T	T	T
0.5564083486834139	0.7800453981425900	0.2195506009778173	T	T	T
0.8889779093594659	0.7783859143071468	0.2181971918403155	T	T	T
0.2228989577054091	0.7812755292901866	0.2203591696118237	T	T	T
0.9957963441440478	0.9961788115624814	0.3282583775732918	T	T	T
0.3366763138337099	0.0007711205574162	0.3311021929984799	T	T	T
0.6701129950572232	0.9966610756039705	0.3371314298698075	T	T	T
0.3291557779842249	0.3385944209101957	0.3315181516062317	T	T	T
0.6659801248003900	0.3295043997067582	0.3313551684832021	T	T	T
0.0007547147174711	0.3352230010860081	0.3275700640193489	T	T	T
0.3310128021243164	0.6659101359684307	0.3275264673734470	T	T	T
0.6715685038409310	0.6713550204948741	0.3281471277934653	T	T	T
-0.0011644216638380	0.6684185140410304	0.3277702338580781	T	T	T
0.6113767397045048	0.0498560759913676	0.4360006763433736	T	T	T
0.4822592054117095	0.8684262584072279	0.4737411617690673	T	T	T
0.7900998787746035	0.1768027798406594	0.4755508575884636	T	T	T
0.5154362765361132	0.1478739714811892	0.4185517658236408	T	T	T
0.3364064002212451	0.3314682246065829	0.4439409655139428	T	T	T
0.5519481319708378	0.7851412380432473	0.4824910959573394	T	T	T

0.2041303809458641	0.2462183859370283	0.4557768462309847	T	T	T
0.4026671857667339	0.2562653939242616	0.4487552787106602	T	T	T
0.7518792148005947	0.2166315936525104	0.5234998533374944	T	T	T
0.3491062067176881	0.7794392727549684	0.4462858227035509	T	T	T
0.4445788726601582	0.9035513847915104	0.5227394815995290	T	T	T
0.8665951632926349	0.1011758569816819	0.4867297252842154	T	T	T
0.8845534727052587	0.3085157054918576	0.4482540138367992	T	T	T

Pd catalyst



IS: -222.766166 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2219003123726241	0.1107680873582597	0.2207401256027382	T	T	T
0.5565077775193966	0.1126665456902280	0.2221595749003805	T	T	T
0.8891832769886964	0.1111379521008753	0.2209984391354915	T	T	T
0.2220730399807803	0.4447012029385237	0.2205863467208468	T	T	T
0.5561502847892988	0.4437144194043872	0.2217045832382473	T	T	T
0.8869492368432482	0.4435262350094063	0.2223069935096080	T	T	T
0.5552178852050611	0.7780141335002073	0.2205064536713153	T	T	T
0.8896962577154052	0.7783654097400383	0.2206329123027009	T	T	T
0.2222438808307463	0.7777447185725713	0.2205666391072767	T	T	T
0.0002736025672327	0.0001182178740753	0.3318498680720005	T	T	T
0.3323045586744473	0.9986356002650622	0.3315640093576931	T	T	T
0.6664162354642305	0.9987908805076245	0.3317788427389653	T	T	T
0.3317591787357736	0.3335409451365103	0.3310228903377267	T	T	T
0.6674076400181732	0.3339529851998639	0.3368042967315198	T	T	T
0.0015320319512998	0.3336959947477786	0.3317398850113057	T	T	T
0.3338208341854457	0.6668868661940716	0.3322618180739021	T	T	T
0.6668220249826619	0.6686910772559084	0.3305919909787380	T	T	T
0.0019095492382528	0.6683820234745866	0.3315804883127471	T	T	T
0.6523355385224739	0.7224578537082577	0.5150457265970142	T	T	T
0.5339250166302568	0.5547529917212314	0.4804625330580719	T	T	T

0.6551216030957985	0.3311118161603360	0.4450541133770965	T	T	T
0.4946043230877607	0.5848432117767656	0.4390885615520108	T	T	T
0.5757589005550091	0.7912995771372917	0.5294963440388061	T	T	T
0.6107895076115212	0.4181981960934403	0.4594426250611893	T	T	T
0.5556456280773691	0.2074098352025701	0.4551044705898975	T	T	T
0.7719949678875756	0.8166458873130318	0.4854955330510481	T	T	T
0.6989267907050616	0.6832017056049636	0.5587581568721434	T	T	T

TS: -221.979506 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000004	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.1111111111111102	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.1111111111111102	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111102	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111102	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.1111111111111102	F	F	F
0.11111111111111089	0.5555555555555571	0.1111111111111102	F	F	F
0.44444444444444501	0.88888888888889002	0.1111111111111102	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888889002	0.1111111111111102	F	F	F
0.11111111111111209	0.88888888888889002	0.1111111111111102	F	F	F
0.2217227012011738	0.1123631237837629	0.2201168085250093	T	T	T
0.5544050225091310	0.1122125150068470	0.2206027020475280	T	T	T
0.8882488503881609	0.1126608634462441	0.2204073319964651	T	T	T
0.2211140901145620	0.4455375159985245	0.2205710903518205	T	T	T
0.5564889042088557	0.4458565150925894	0.2229918439541521	T	T	T
0.8864026812675465	0.4450012207853379	0.2223641709512285	T	T	T
0.5553277927909922	0.7758889734279636	0.2225288223748091	T	T	T
0.8890447922628987	0.7790946243664876	0.2217631733632953	T	T	T
0.2199374113555324	0.7773723551501596	0.2210309564285266	T	T	T
1.0024132006644071	0.0073305506818794	0.3310630247865342	T	T	T
0.3292578327607312	1.0007212034268276	0.3310472715627329	T	T	T
0.6638937882583154	0.0030480094561271	0.3304233151500148	T	T	T
0.3299769937010053	0.3362412169841548	0.3312405500262455	T	T	T
0.6647442884939913	0.3318016381311588	0.3355235876174475	T	T	T
1.0004741842279579	0.3366154686776475	0.3315952771360376	T	T	T
0.3289970276068869	0.6690875137509834	0.3325228603110174	T	T	T
0.6661889279045878	0.6751490301688580	0.3369993004532870	T	T	T
0.9991368170922914	0.6711738074829946	0.3349023769822458	T	T	T
0.6924644735750742	0.6914057017840508	0.4460656066720372	T	T	T
0.5388600637686014	0.5336102268621237	0.4705426411937857	T	T	T
0.6344535547529528	0.2738524829684202	0.4474081319223441	T	T	T
0.4321487542981235	0.5076694400310742	0.4427811048818868	T	T	T
0.6753980489693260	0.8126762511834607	0.4431558591035871	T	T	T
0.5816538469008963	0.3512112345161162	0.4616994336244250	T	T	T

0.5320162317532117	0.1471832492844484	0.4465914532975429	T	T	T
0.8105248115096446	0.7214201947721223	0.4769180741916922	T	T	T
0.8037689751230167	0.6612661253623999	0.3943490590833290	T	T	T

FS: -218.804823 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

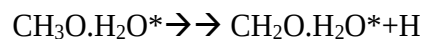
36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2216698671002799	0.1107215226294100	0.2203277558394117	T	T	T
0.5553874862419595	0.1122753964907340	0.2212020420552002	T	T	T
0.8890191967910638	0.1110495593009373	0.2204567916426483	T	T	T
0.2217411596834747	0.4441932905513598	0.2202841881083005	T	T	T
0.5576034742593111	0.4460572661565182	0.2236351146193514	T	T	T
0.8869581642060361	0.4434182483946272	0.2221074400739121	T	T	T
0.5556678935947321	0.7761764105720005	0.2217668906828195	T	T	T
0.8870387176799300	0.7770422734528938	0.2225049855909783	T	T	T
0.2213813872113012	0.7771115355387209	0.2203071303344260	T	T	T
0.0008807731613071	0.0004993755782314	0.3316005977169095	T	T	T
0.3315932262743983	0.9983607632118253	0.3309498978703925	T	T	T
0.6661135513853556	-0.0005975670942792	0.3303477375051287	T	T	T
0.3312237310416479	0.3331409260428012	0.3309072321685937	T	T	T
0.6668619303027762	0.3333519790198136	0.3360326348350857	T	T	T
0.0014879934822366	0.3336076110672861	0.3315550638071681	T	T	T
0.3319235580560455	0.6663510011937415	0.3316674881415292	T	T	T
0.6673769520333352	0.6703970967400054	0.3412480676894100	T	T	T
0.0012795166947856	0.6680923898477771	0.3318106602320124	T	T	T
0.6574625267552724	0.6962587269612351	0.4403708557219066	T	T	T
0.5204985195182678	0.5322806574849365	0.4695607499132143	T	T	T
0.6452373581671361	0.2980959338760816	0.4457448316801525	T	T	T
0.4010261485079264	0.5015207392735668	0.4503580333567868	T	T	T
0.5841076781558733	0.3696416746363516	0.4585266307752362	T	T	T
0.5517958201401374	0.1684029107521569	0.4497772796900301	T	T	T

0.6303275365172356	0.8102971430390632	0.4472927898050902	T	T	T
0.7907435064561972	0.7258825364023477	0.4599780924720466	T	T	T



IS: -218.503001 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2222770509603342	0.1119175153216970	0.2209041912065660	T	T	T
0.5567278201530100	0.1129989176009856	0.2218583357855297	T	T	T
0.8887399042706926	0.1115448367282838	0.2203001252715640	T	T	T
0.2231804480240857	0.4437194875917824	0.2217382894295562	T	T	T
0.5548222940179374	0.4433998081535909	0.2228173610025971	T	T	T
0.8867880726110431	0.4435411443796888	0.2221536032032942	T	T	T
0.5554856366523668	0.7781349183830183	0.2201715850414035	T	T	T
0.8895796832712599	0.7783503606278941	0.2196496397172735	T	T	T
0.2218546716789864	0.7776519634967812	0.2195773467549779	T	T	T
0.9989317009874209	0.9990121221901838	0.3304435582465453	T	T	T
0.3314710463968552	0.9971818330826001	0.3300339761806511	T	T	T
0.6667837389917436	0.9990765468577191	0.3311430725554207	T	T	T
0.3301924048561900	0.3352395009955751	0.3350646253538702	T	T	T
0.6701681198336827	0.3336465797446030	0.3365052997190509	T	T	T
0.0002058009700550	0.3343218630082195	0.3313565983477953	T	T	T
0.3333047493518035	0.6692225144650547	0.3311984031782907	T	T	T
0.6682819467277363	0.6697437414260776	0.3305363948262290	T	T	T
0.0019199765012500	0.6690671888820519	0.3310990282969953	T	T	T
0.6988005071457521	0.2365512629412613	0.4759456585250441	T	T	T
0.6475187753317371	0.3410574021776313	0.4357938190147702	T	T	T
0.3465965669899661	0.3223731286815969	0.4392664429752888	T	T	T
0.6240740030330776	0.0886346436271001	0.4634506932837859	T	T	T

0.2469446528695546	0.2011178364373305	0.4518258585385133	T	T	T
0.4755757515745025	0.3215129511987935	0.4431252399940496	T	T	T
0.6661415144947195	0.2519243885029188	0.5267488596706583	T	T	T
0.8475845403628235	0.2879531508062420	0.4723631038843759	T	T	T

TS: -218.045926 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666650	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000003	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111073	F	F	F
0.4444444444444432	0.2222222222222214	0.11111111111111073	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111073	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111073	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111073	F	F	F
0.11111111111111069	0.5555555555555571	0.11111111111111073	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111073	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111073	F	F	F
0.1121175078655340	0.8892588397134708	0.1098721785789750	F	F	F
0.2212727419907664	0.1118615643367624	0.2204776088735375	T	T	T
0.5552565179042802	0.1108998260389453	0.2206915270263345	T	T	T
0.8878341661711129	0.1111248282506026	0.2213684119998348	T	T	T
0.2225520280743863	0.4429391693641116	0.2222904118282217	T	T	T
0.5544909073234605	0.4441279657843551	0.2222321454948619	T	T	T
0.8873811078770105	0.4430770294369797	0.2213941385271941	T	T	T
0.5565555202443315	0.7812658413014342	0.2225213700143955	T	T	T
0.8881431666132750	0.7771981959935306	0.2198300648974836	T	T	T
0.2209385028896483	0.7758402476736436	0.2192563522315603	T	T	T
0.9979728218902686	0.9970494642881897	0.3307020283941986	T	T	T
0.3274878942315556	0.9946612203274288	0.3282714282489801	T	T	T
0.6655440481786732	0.9992710301351064	0.3365526390348934	T	T	T
0.3303828983521501	0.3338914182941210	0.3356660892381810	T	T	T
0.6661100974073698	0.3350533596838370	0.3329788142713035	T	T	T
0.0008732350762246	0.3326585958351316	0.3336645252438717	T	T	T
0.3306862170348772	0.6668603397927965	0.3318893374348044	T	T	T
0.6662894055513444	0.6672725288721013	0.3317625179198409	T	T	T
0.9996862831890454	0.6673823194030527	0.3305067214802425	T	T	T
0.6946042883937129	0.1425503648946232	0.4437008531566981	T	T	T
0.6553918237277675	0.2758436629932088	0.4345305070221947	T	T	T
0.3496123530262594	0.2960716231231652	0.4435556547828045	T	T	T
0.5787011827247150	0.0004199927048590	0.4497400821118761	T	T	T
0.2416191671165278	0.1760422418104349	0.4518661381392738	T	T	T
0.4587801084041989	0.2765023259722874	0.4456450008615853	T	T	T

0.8091613827597358	0.1757720031122491	0.4775492331010389	T	T	T
0.8243750449518865	0.1522690730614752	0.3925973271960535	T	T	T

FS: -214.943439 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

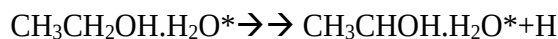
36 1 2 4 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2215895874036033	0.1135960928593692	0.2204019941047210	T	T	T
0.5563793843779588	0.1120736037981817	0.2208707125868120	T	T	T
0.8868937892311455	0.1120976160490713	0.2217457668319574	T	T	T
0.2250999334193860	0.4450904614830978	0.2216826280862572	T	T	T
0.5569169618400387	0.4446724591693790	0.2230977820949882	T	T	T
0.8882558908115652	0.4453809065290595	0.2212225307157918	T	T	T
0.5575148640323332	0.7820487438061179	0.2220118895595834	T	T	T
0.8893354845472807	0.7796782674211260	0.2197793031222925	T	T	T
0.2216326264762185	0.7776619353870599	0.2192887657907911	T	T	T
-0.0014340119600972	0.0026854027726781	0.3307363490976526	T	T	T
0.3298873501994254	-0.0006972451161441	0.3280307525093750	T	T	T
0.6664239328293053	0.0077607203463908	0.3395750464032280	T	T	T
0.3338231677679111	0.3388337963824726	0.3353962951395817	T	T	T
0.6710959925395514	0.3374879285307284	0.3346053757488414	T	T	T
0.0049281981730077	0.3395794954799478	0.3307288187997144	T	T	T
0.3350635222523822	0.6725399579548641	0.3314735341721250	T	T	T
0.6693021417815850	0.6742674395043298	0.3317377657217441	T	T	T
0.0012141500741022	0.6717656417920813	0.3307341532092806	T	T	T
0.6570613336288044	0.1010072567035289	0.4351643017544011	T	T	T
0.6428777026754908	0.2518509257609994	0.4326993273498112	T	T	T
0.3552896329505406	0.3029278836521737	0.4429608349738994	T	T	T
0.5356779946414226	-0.0241988937683623	0.4539012157095286	T	T	T
0.2416012339443248	0.1906233278883295	0.4539647870721290	T	T	T
0.4565380007249369	0.2710683292006056	0.4448078135774012	T	T	T

0.7921345456990228 0.1227015502459761 0.4512584303540497 T T T



IS: -239.490651 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111214	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218908573604911	0.1108224428040010	0.2207707061673900	T	T	T
0.5563569551426991	0.1125493457936423	0.2220651408256780	T	T	T
0.8891841178054904	0.1111702638895681	0.2209714727897331	T	T	T
0.2221326125122756	0.4446414587327452	0.2206566584658808	T	T	T
0.5561071191354485	0.4436305042304771	0.2217764323916082	T	T	T
0.8869235013885183	0.4434849530034464	0.2222851954398273	T	T	T
0.5552531483972569	0.7779405425760965	0.2205047571845477	T	T	T
0.8895188440029397	0.7782341377430392	0.2206769838167879	T	T	T
0.2222007470186855	0.7776590501875807	0.2205916790511130	T	T	T
0.0003462318880784	0.0001913638415229	0.3318757436209087	T	T	T
0.3322450675775314	0.9985880638996947	0.3315385169226879	T	T	T
0.6665009382853821	0.9987394684136178	0.3317246272774756	T	T	T
0.3319116391106333	0.3336819627085384	0.3313240103665750	T	T	T
0.6674372851453984	0.3339360400390527	0.3367198476545732	T	T	T
0.0016274733384830	0.3337582813714134	0.3317689910948696	T	T	T
0.3338051391401638	0.6668359542504846	0.3323186227452108	T	T	T
0.6668010960343969	0.6685689889419809	0.3307048263449377	T	T	T
0.0019184260159021	0.6683673111340709	0.3316155103131321	T	T	T
0.6682095753938418	0.7314163051708660	0.5106034000523311	T	T	T
0.7807073496759549	0.7064116627359824	0.5627614467530602	T	T	T
0.5391355893729877	0.5525419578114670	0.4835077344760575	T	T	T
0.6549355874270741	0.3266324394398120	0.4448462333208102	T	T	T

0.4826390920603703	0.5707433775317208	0.4441922387657644	T	T	T
0.6922106108349320	0.6155372694464357	0.6016082685968733	T	T	T
0.8613478651870511	0.6479228187982802	0.5424821898120253	T	T	T
0.8767246694003913	0.8403313027383367	0.5844166540993362	T	T	T
0.5892768437631266	0.7923103565918574	0.5308655085845019	T	T	T
0.6124138616269266	0.4143598455664624	0.4602258898402809	T	T	T
0.5545754843530954	0.2029400334486914	0.4543788405293569	T	T	T
0.7570347228015366	0.8218232496237797	0.4713769434996480	T	T	T

TS: -238.695633 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2194686832590430	0.1122602440914250	0.2201536725690766	T	T	T
0.5522415066271035	0.1125013060120938	0.2206328653335508	T	T	T
0.8864288500004446	0.1129571072566998	0.2205223576368254	T	T	T
0.2191744901670935	0.4458627690275086	0.2204873379678617	T	T	T
0.5547801963248138	0.4461191914520011	0.2230005521549846	T	T	T
0.8846599220539977	0.4455233868195728	0.2224134749969219	T	T	T
0.5534725022514485	0.7762973061370212	0.2224801247393910	T	T	T
0.8869071670381774	0.7791487237680298	0.2220389154571224	T	T	T
0.2176439088845710	0.7775225507471609	0.2210312146631543	T	T	T
0.9983524563131266	0.0072766478709556	0.3314024518536546	T	T	T
0.3251944006940687	0.0007486522458469	0.3312412286160817	T	T	T
0.6599347556219720	0.0038922107952310	0.3302375596252736	T	T	T
0.3253096870725481	0.3360571917772098	0.3309892961441291	T	T	T
0.6604761560316234	0.3328580726011440	0.3355077086753397	T	T	T
0.9964189480719169	0.3371998728326834	0.3317194992235265	T	T	T
0.3241342439730204	0.6691604435826439	0.3322361900070034	T	T	T
0.6619421117620633	0.6753573672138466	0.3372300898602617	T	T	T
0.9939693990346354	0.6715025697965971	0.3355597487003651	T	T	T
0.6639058505125172	0.6883166093686288	0.4493467161019584	T	T	T
0.8152838149770022	0.7534396837532660	0.4992820521047588	T	T	T
0.5134225749391043	0.5208892482888690	0.4685332465732536	T	T	T
0.6306518484128583	0.2746217995642793	0.4481897545418182	T	T	T
0.4118979253351158	0.4889505616099172	0.4368951605412144	T	T	T
0.7625383659626540	0.7762153220427310	0.5453153193940717	T	T	T

0.8594801044355925	0.6523863631935236	0.5078119263353864	T	T	T
0.9340158608641878	0.8835345217098750	0.4836315487818021	T	T	T
0.6251076950857374	0.7929101008852941	0.4386861233084307	T	T	T
0.5711517116757610	0.3466561976988273	0.4613718909213789	T	T	T
0.5320622593770218	0.1461896002783333	0.4462328181402391	T	T	T
0.7892088064035225	0.6630532157500834	0.3971424710846223	T	T	T

FS: -235.541093 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

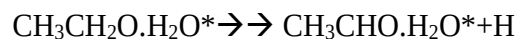
36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1105460710006549	0.8883676401448883	0.1102073966555688	T	T	T
0.2219404196137032	0.1106232442838951	0.2200500284291043	T	T	T
0.5559127539893636	0.1125184834360538	0.2209510571825901	T	T	T
0.8894163649104035	0.1111995360194723	0.2202847652163225	T	T	T
0.2223216799420538	0.4443522812402639	0.2202423222312009	T	T	T
0.5581972815732217	0.4465500684412643	0.2238568458482417	T	T	T
0.8873946289774379	0.4436668056519660	0.2218361972000547	T	T	T
0.5563125036383736	0.7761060744906088	0.2219034575542929	T	T	T
0.8870924990101579	0.7770133152761340	0.2224277587369339	T	T	T
0.2218276073597114	0.7775239780966654	0.2200105119293371	T	T	T
0.0018094463711583	0.0011851514809948	0.3312169802574613	T	T	T
0.3326457714752784	-0.0008525287593602	0.3305666895883800	T	T	T
0.6666939694061693	-0.0002367607702619	0.3301801928046875	T	T	T
0.3320527008030801	0.3336463926306779	0.3309518091626688	T	T	T
0.6680906383150484	0.3341067534429676	0.3356622171181847	T	T	T
0.0024431710186682	0.3340206802054541	0.3312821464857430	T	T	T
0.3330085054490821	0.6666850678545712	0.3314812375288447	T	T	T
0.6693892260311968	0.6715509795373537	0.3430393424176513	T	T	T
0.0023481688179872	0.6683175385346741	0.3313863773974222	T	T	T
0.6545408196849744	0.6987442362128540	0.4432741462231031	T	T	T
0.8327266807437028	0.7596601436104398	0.4783288289750265	T	T	T
0.5163455040908668	0.5290997208918219	0.4687420159582162	T	T	T
0.6429470033597046	0.2934288584316760	0.4458830872971668	T	T	T
0.4013712113676620	0.4941350092491747	0.4447772019898569	T	T	T
0.8131680676404741	0.7720276197755646	0.5308144261592465	T	T	T

0.8827134334599700	0.6621110143511102	0.4722774716023455	T	T	T
0.9383849336262592	0.8946115056405939	0.4600958257649836	T	T	T
0.6088098848584687	0.8009626566547199	0.4440029117659089	T	T	T
0.5825978707749702	0.3656666726603630	0.4585040918994741	T	T	T
0.5470862812209651	0.1639653452950161	0.4475624507237927	T	T	T



IS: -235.242244 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996	0.0000000000000000	0.0000000000000000
-1.4999999999999998	2.5980762113533160	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111285	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111285	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111285	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111285	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111285	F	F	F
0.11111111111110858	0.5555555555555571	0.11111111111111285	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111285	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111285	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789962	F	F	F
0.2225112057547266	0.1120213221282569	0.2209202492276925	T	T	T
0.5571574873777236	0.1134955887789966	0.2221379617431743	T	T	T
0.8887773630086155	0.1115278107621409	0.2203418460017109	T	T	T
0.2236211899395509	0.4439404826984600	0.2216428148199551	T	T	T
0.5550687249186591	0.4433410664371042	0.2227422798864541	T	T	T
0.8873805549232947	0.4436739269376366	0.2218463448342761	T	T	T
0.5559757910086345	0.7785545668978887	0.2202004958919695	T	T	T
0.8897929167226143	0.7785652723618479	0.2195894869925134	T	T	T
0.2222964547972171	0.7780581971337811	0.2195437065355981	T	T	T
0.9991657760127269	0.9990164239814884	0.3304491999222050	T	T	T
0.3314922673203209	0.9971822522645620	0.3302444127650384	T	T	T
0.6667151169178143	0.9981954806130099	0.3315171648460397	T	T	T
0.3304024219578279	0.3349488681333649	0.3351014081697913	T	T	T
0.6699393016603784	0.3330029106701261	0.3365675495898140	T	T	T
0.0001862784404264	0.3343122496195886	0.3313451101598900	T	T	T
0.3331132590738853	0.6684888355877766	0.3310640083516774	T	T	T
0.6683801344350320	0.6694083553318092	0.3304238463638398	T	T	T
0.0022496603618772	0.6690727753761995	0.3307185263111642	T	T	T
0.7500697970451751	0.3047423604256445	0.4802070866127409	T	T	T
0.6582407673366513	0.0986238146913474	0.4910829764074933	T	T	T
0.6566190196937961	0.3581000283902718	0.4352981186615911	T	T	T
0.3459597128626356	0.3219441834848399	0.4402140502419913	T	T	T

0.7345220795785606	0.0661838669171539	0.5271491348734516	T	T	T
0.2517334916465878	0.1970085729372888	0.4516699344230860	T	T	T
0.4762539273633617	0.3292712335340216	0.4446123586938219	T	T	T
0.7559884884236160	0.3748391580906543	0.5264726022499234	T	T	T
0.6552549035319625	0.0280032172990735	0.4450385498925110	T	T	T
0.5158537238474634	0.0409048652169506	0.5080535532004347	T	T	T
0.8935116193497572	0.3596872681392033	0.4637916909149759	T	T	T

TS: -234.789212 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000004	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111301	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111301	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111301	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111301	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111301	F	F	F
0.11111111111110829	0.5555555555555571	0.11111111111111301	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111301	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111301	F	F	F
0.1121175078655338	0.8892588397134708	0.1098721785789978	F	F	F
0.2223816028437523	0.1121795832373782	0.2207804059372897	T	T	T
0.5564329221526825	0.1127263225732029	0.2211542986401666	T	T	T
0.8887836670845142	0.1119275666184353	0.2210577324902055	T	T	T
0.2216709264605792	0.4428437613936515	0.2229339318584415	T	T	T
0.5542081830692379	0.4447660851358591	0.2218863151637095	T	T	T
0.8884363372187141	0.4440149801325588	0.2213635693127105	T	T	T
0.5560502955722953	0.7806104489922467	0.2216617681286573	T	T	T
0.8887374100129373	0.7778641898429329	0.2197800563741233	T	T	T
0.2219933437574142	0.7772553615232090	0.2194950180276712	T	T	T
0.9996040073311065	0.9987054183133491	0.3304846036082160	T	T	T
0.3312323253792658	0.9974858892335997	0.3294862751176653	T	T	T
0.6673192118571518	0.9995752321369582	0.3340448123782007	T	T	T
0.3310729602123184	0.3354635787114883	0.3359200816822912	T	T	T
0.6674871989176012	0.3390970543190580	0.3329497617943736	T	T	T
0.9989010391636645	0.3322747877972920	0.3347846328953696	T	T	T
0.3316989081668421	0.6684677224671333	0.3320274493060500	T	T	T
0.6671808897411586	0.6694842974170374	0.3314704617698116	T	T	T
0.0019789771217978	0.6703491539979870	0.3306557412247994	T	T	T
0.7498482230407335	0.2182774263335786	0.4554631691942485	T	T	T
0.6392090797151010	0.0426305834168074	0.4934661551530776	T	T	T
0.6699399164783664	0.3117991207387528	0.4376003754499994	T	T	T
0.3461789281476181	0.2958138083345481	0.4442468620357383	T	T	T
0.7124010597735019	0.9654925102450778	0.4978766803673370	T	T	T
0.2447996621098384	0.1700839409009079	0.4500185741873068	T	T	T

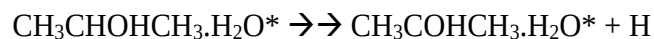
0.4621653743637325	0.2883878784835460	0.4476619757382758	T	T	T
0.8949418907038899	0.3028361675826398	0.4708866561227242	T	T	T
0.5047196667444517	0.9540807230668863	0.4708107956237084	T	T	T
0.6171906219048933	0.0797683607867839	0.5427527453125749	T	T	T
0.8074140759708877	0.1611599832499980	0.3953965681784254	T	T	T


```

FS:          -231.713581 eV
2.8000000000000000
2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 2 2 6      # Pd C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111285 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111285 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111285 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111285 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111285 F F F
0.11111111111110858 0.5555555555555571 0.11111111111111285 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111285 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111285 F F F
0.1121175078655341 0.8892588397134702 0.1098721785789962 F F F
0.2219583268714136 0.1132692965195182 0.2204310382681603 T T T
0.5566682838341206 0.1117320151044609 0.2211985387924032 T T T
0.8868941917837112 0.1116049396781997 0.2217177495745138 T T T
0.2252552990102249 0.4448713542622840 0.2213758385100541 T T T
0.5569942107665508 0.4445153626319792 0.2230548090688097 T T T
0.8883542230784396 0.4451909553263703 0.2210935435029023 T T T
0.5576984225392941 0.7821565266455446 0.2221613486125718 T T T
0.8894562353094591 0.7796159449248876 0.2198065863181558 T T T
0.2216889468839263 0.7776199102883221 0.2192412850898254 T T T
0.9989823675412365 0.0024433598273909 0.3307843864366173 T T T
0.3300211197990102 0.9989201990422941 0.3284552435851440 T T T
0.6665605493732299 0.0070719950068477 0.3403879886441533 T T T
0.3339965338198155 0.3389025318796230 0.3353076956246275 T T T
0.6699740687923542 0.3374980481736535 0.3342343320942928 T T T
0.0047826042317492 0.3391306393295247 0.3302991902890773 T T T
0.3345708592760483 0.6719909149165512 0.3312252220394446 T T T
0.6694554575652749 0.6744123927813738 0.3317563686572738 T T T
0.0011986805439604 0.6711771891415964 0.3307188994635047 T T T
0.6688050703196006 0.1073764910569903 0.4382838756408768 T T T
0.5352059315544353 0.9464314117049559 0.4788832007962950 T T T
0.6392289076920399 0.2476176833919654 0.4323527444739876 T T T
0.3510583094142410 0.3020786394493343 0.4440878483451663 T T T
0.5646679650952209 0.8331613662856099 0.4765945921412744 T T T
0.2356042199456404 0.1892631571237721 0.4530159412154434 T T T

```

0.4499484776416935	0.2677400261947981	0.4461023734746748	T	T	T
0.8160131535699480	0.1481214564392570	0.4436202830294450	T	T	T
0.3924883366016894	0.8954336989109427	0.4633038189623552	T	T	T
0.5483213092396367	0.9917231541588569	0.5300152898620417	T	T	T



IS: -256.224068 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218200381770528	0.1109482773009586	0.2208804986216066	T	T	T
0.5561996382835478	0.1123507564473681	0.2220057357653335	T	T	T
0.8890712418622170	0.1110860719065331	0.2209147447955862	T	T	T
0.2222258167822317	0.4445521240329878	0.2206636965628492	T	T	T
0.5561858072483216	0.4433159156246561	0.2218522704633940	T	T	T
0.8871636683433075	0.4435090818888322	0.2221566304200267	T	T	T
0.5551756782521134	0.7778270926802830	0.2204131551063598	T	T	T
0.8894476659822024	0.7782270529818934	0.2206118290242589	T	T	T
0.2222729378143219	0.7776853421321483	0.2205931597774738	T	T	T
0.0003472459938871	-0.0000499044433112	0.3318981201828619	T	T	T
0.3323554277772459	0.9985482879498355	0.3316240681633001	T	T	T
0.6664730260566262	0.9984098430792010	0.3315942275201404	T	T	T
0.3322595396677309	0.3335919181875254	0.3316171522408152	T	T	T
0.6675376624433437	0.3334376053043016	0.3365891970124292	T	T	T
0.0018542336592112	0.3335362998814424	0.3316332392065079	T	T	T
0.3339031116360626	0.6666935397517431	0.3322673453276158	T	T	T
0.6666454068570141	0.6681433932056442	0.3305525677535073	T	T	T
0.0019862245160532	0.6682066219198799	0.3314629731935425	T	T	T
0.7409605604149696	0.7510689075859522	0.5054123835398371	T	T	T
0.8498619592123243	0.7119166978815199	0.5553175465552214	T	T	T
0.6699200721721582	0.8741572265082934	0.5305161256861968	T	T	T
0.5855228632398315	0.5732675103508352	0.4859216734565721	T	T	T

0.6632896166965705	0.3235164941078563	0.4444084693372036	T	T	T
0.5243960999505112	0.5935660575225711	0.4484715287810441	T	T	T
0.7653887683677911	0.6446347924239110	0.5984167074661998	T	T	T
0.8985096796175077	0.6228446681657951	0.5350652545146869	T	T	T
0.9703577826673306	0.8411793983936635	0.5707889792239922	T	T	T
0.6318885695020381	0.4188809267292661	0.4611363349988210	T	T	T
0.5585600113192961	0.2031252510801365	0.4547591060268468	T	T	T
0.5841882353232157	0.8138852190580282	0.5739184981940703	T	T	T
0.5872927079686190	0.8928099399893330	0.4929909573883507	T	T	T
0.7851001886228048	0.0106392401824881	0.5430713163341183	T	T	T
0.8267419206142800	0.8142339740154728	0.4617173270022564	T	T	T

TS: -255.200371 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2178575516734053	0.1125690570047573	0.2203412917850152	T	T	T
0.5508109474891565	0.1128169579582659	0.2201505377022880	T	T	T
0.8858271929001025	0.1132057185912177	0.2203797448515408	T	T	T
0.2180954275567297	0.4457952569901848	0.2205024758786331	T	T	T
0.5538059480030234	0.4468961514002208	0.2239273021209825	T	T	T
0.8837924246278723	0.4458409477480108	0.2223213977769855	T	T	T
0.5522913206693045	0.7755091668615166	0.2225756991820468	T	T	T
0.8851083956402991	0.7791239752908304	0.2226305361761001	T	T	T
0.2165338437103221	0.7775681885665927	0.2210193340540393	T	T	T
0.9956976685912611	0.0068750697523062	0.3322413573796367	T	T	T
0.3229307954555422	0.0014441810340730	0.3310473829995764	T	T	T
0.6583887797471368	0.0045419900130777	0.3288117913631480	T	T	T
0.3231754181152525	0.3365508026112133	0.3316748349767738	T	T	T
0.6587682570031694	0.3338298745126071	0.3350781121741788	T	T	T
0.9946556479761258	0.3380363774119605	0.3317040291021345	T	T	T
0.3222270069925467	0.6692728674277472	0.3322411711003764	T	T	T
0.6588543054671961	0.6749789745888566	0.3405579474616897	T	T	T
0.9918220240313569	0.6727136846653746	0.3356151080984041	T	T	T
0.6690668305350088	0.6818436373244251	0.4605707952049635	T	T	T
0.8253220724736524	0.7048436213241011	0.5039733657813853	T	T	T
0.6214610194582588	0.8315414859046825	0.4709284137505389	T	T	T
0.5184470996546081	0.5057015659563395	0.4711530168576090	T	T	T
0.6286515473278466	0.2592561915604517	0.4470637186545789	T	T	T
0.4181902022338773	0.4848407039183872	0.4404895778419615	T	T	T

0.7808190219612959	0.6976497654919247	0.5548938198843306	T	T	T
0.8604220491034834	0.5970059828966251	0.4960106573184889	T	T	T
0.9477979986745361	0.8393888730681290	0.4958092066748105	T	T	T
0.5738298231206850	0.3355008731415674	0.4605949982639209	T	T	T
0.5244337667627769	0.1346501293814138	0.4409720528551920	T	T	T
0.5943628900399419	0.8351615526648788	0.5233756508009427	T	T	T
0.4970510415456604	0.8041924769415869	0.4438283807068431	T	T	T
0.7353204104329081	0.9669830826931188	0.4566941948101280	T	T	T
0.8024278113521583	0.6963400773054998	0.3991657257521852	T	T	T

FS: -252.114783 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

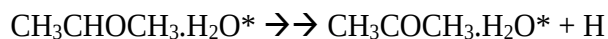
36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218379575823944	0.1113116915970892	0.2202370214206393	T	T	T
0.5553081444981561	0.1122534387598303	0.2204989651778984	T	T	T
0.8894078322600147	0.1112438731402525	0.2201275779865069	T	T	T
0.2219393729897717	0.4442536150239282	0.2202293410087829	T	T	T
0.5585422700001366	0.4473522023758317	0.2244509628114822	T	T	T
0.8872135355497269	0.4436759851485588	0.2217870946407247	T	T	T
0.5560713074188699	0.7751765617348653	0.2221195180782664	T	T	T
0.8861970570164672	0.7767631105771894	0.2230761727501232	T	T	T
0.2215588472952461	0.7770676300279968	0.2202173179725158	T	T	T
0.0013461870293015	0.0012450873172480	0.3315554856334545	T	T	T
0.3314805885993069	0.9988844949799368	0.3303534802764178	T	T	T
0.6664802553984581	0.9996430150864772	0.3292844992918220	T	T	T
0.3317456541880153	0.3339587227029889	0.3311587004506513	T	T	T
0.6671104701985168	0.3340058971482874	0.3352241541801280	T	T	T
0.0019289593061339	0.3343080112569504	0.3312144443587125	T	T	T
0.3323187453026762	0.6664795310273488	0.3317243249791864	T	T	T
0.6682399430130864	0.6730921861918568	0.3468508222374194	T	T	T
0.0011202534861781	0.6681036946790813	0.3316285114508886	T	T	T
0.6602494695207458	0.6912164679751327	0.4492360045556960	T	T	T
0.8409558634867976	0.7258336232275308	0.4776174044852112	T	T	T
0.6107241193680896	0.8348945612049206	0.4691892299327767	T	T	T
0.5203220949827867	0.5135522912638250	0.4699777398084850	T	T	T
0.6350886935499703	0.2741749615010400	0.4448188838217925	T	T	T
0.4049051556223828	0.4855246441218374	0.4478015377760861	T	T	T

0.8303958449878409	0.7208550155017046	0.5312363401871251	T	T	T
0.8775310560892687	0.6232309621224440	0.4619191592514801	T	T	T
0.9519518956469198	0.8626504362927335	0.4633090365033076	T	T	T
0.5802332211541761	0.3514963464035568	0.4578989211128702	T	T	T
0.5323982679743866	0.1476255507967480	0.4428484988204325	T	T	T
0.6058784939022565	0.8381715032969944	0.5228829391319326	T	T	T
0.4751526640133092	0.8027513421733702	0.4502231117362133	T	T	T
0.7147589087993713	0.9724413745490011	0.4521004309428046	T	T	T



IS: -251.929310 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111001	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2223273197448363	0.1109095378103067	0.2206910501979084	T	T	T
0.5567130612992059	0.1108059021308869	0.2213961827672681	T	T	T
0.8887455746965329	0.1101594791278817	0.2204070502329455	T	T	T
0.2233711005168705	0.4425747815338201	0.2213580441426313	T	T	T
0.5553916414509372	0.4418023568734595	0.2230096747499320	T	T	T
0.8863501889585350	0.4421940121108186	0.2223992059375395	T	T	T
0.5555621951674123	0.7763343591677770	0.2203406426750383	T	T	T
0.8893883892825223	0.7769588742354494	0.2198074464753589	T	T	T
0.2216741083988115	0.7761014424491439	0.2196723346550543	T	T	T
0.9999512119590565	0.9967569752427343	0.3305149692131362	T	T	T
0.3310845816565601	0.9943756436058357	0.3295466622099845	T	T	T
0.6680429686130089	0.9964626341804634	0.3316430808927900	T	T	T
0.3325971628060921	0.3336002742247285	0.3348739228682302	T	T	T
0.6718759087386535	0.3301059541413017	0.3365221129710340	T	T	T
0.0031675141304979	0.3333591229206000	0.3310122175056083	T	T	T
0.3340785917508099	0.6669378095445967	0.3312660717472766	T	T	T
0.6689549887892033	0.6668265083369814	0.3310603986828364	T	T	T
0.0018901310108066	0.6667404217840677	0.3314589591043344	T	T	T
0.6605805340154132	0.1592508732935836	0.4683758071475416	T	T	T
0.5056717844675004	0.0518438107595817	0.5169442873189098	T	T	T
0.8508668783872064	0.2525865645178313	0.4993121241958868	T	T	T
0.6294807505471215	0.2900171084666447	0.4353568299071372	T	T	T

0.3494342387859052	0.3220738006327345	0.4400448110961870	T	T	T
0.5280547456357594	0.9502971565879738	0.5428291815980094	T	T	T
0.2394014389231611	0.2091540756699545	0.4533422407136437	T	T	T
0.4619890906886120	0.2987930091443923	0.4437815182827911	T	T	T
0.8621080960851046	0.3529118026680719	0.5359971545108672	T	T	T
0.3724564945951991	0.9773911380813346	0.4918718604763724	T	T	T
0.5000437767023598	0.1455755151834008	0.5530320411151602	T	T	T
0.8777060153950694	0.1508477718329065	0.5229173665064121	T	T	T
0.9571290367329379	0.3260420185476974	0.4620151381713279	T	T	T
0.6552884745381238	0.0557696960714058	0.4316253861763316	T	T	T

TS: -251.562635 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000004	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111087	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111087	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111087	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111087	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111087	F	F	F
0.11111111111110974	0.5555555555555571	0.11111111111111087	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111087	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111087	F	F	F
0.1121175078655338	0.8892588397134708	0.1098721785789764	F	F	F
0.2221775456899065	0.1118458868234107	0.2207366794451491	T	T	T
0.5569464162836610	0.1126056058913115	0.2216174860533678	T	T	T
0.8880163435855720	0.1108881914677226	0.2212919286732622	T	T	T
0.2235724475514841	0.4440065100394915	0.2212656753888434	T	T	T
0.5552396704194402	0.4438652531925123	0.2226067584126988	T	T	T
0.8870777014725595	0.4437322143621495	0.2214906089177240	T	T	T
0.5562226452143012	0.7790230139042603	0.2215474140448615	T	T	T
0.8891778787578499	0.7778244104203446	0.2199768189254824	T	T	T
0.2219207337229474	0.7770575553883692	0.2195725884850903	T	T	T
0.9996721151223940	0.9995569333176196	0.3307169767639180	T	T	T
0.3310602490282819	0.9976168466283730	0.3295239070152938	T	T	T
0.6675402231703197	0.0007816972482604	0.3346507369753369	T	T	T
0.3329491401577803	0.3356778453180040	0.3347185709999639	T	T	T
0.6697177834201629	0.3347462632923594	0.3358241831075369	T	T	T
0.0027548924770676	0.3356029419000378	0.3305868124378534	T	T	T
0.3337198451411104	0.6685958224822398	0.3316737721083399	T	T	T
0.6684143593083256	0.6690929215037825	0.3318564603972425	T	T	T
0.0013747617473138	0.6687649429257621	0.3310940770253745	T	T	T
0.6654603614547054	0.1636690119123624	0.4712781100969933	T	T	T
0.5086289896599853	0.0059844913293934	0.5073548037898679	T	T	T
0.8587728642386901	0.2240350685953710	0.4939003436846673	T	T	T
0.6354466518985126	0.2862543831003720	0.4454481452667997	T	T	T
0.3339948933704153	0.3077786425471286	0.4432721901221047	T	T	T
0.5365139168068846	0.8938200800342098	0.5168929562265202	T	T	T

0.2249748435412914	0.1867717342566600	0.4490664975805905	T	T	T
0.4437442980076736	0.2888304346593855	0.4484263894894318	T	T	T
0.8784672067750892	0.2932399423521194	0.5412908918282058	T	T	T
0.3801264298615874	0.9518646773460885	0.4797018716710776	T	T	T
0.4916224676504959	0.0588774735195045	0.5544018928890353	T	T	T
0.8811698118387019	0.1071551881862718	0.5004457298972143	T	T	T
0.9601381111663381	0.3231403307933206	0.4595280588643089	T	T	T
0.6641165367114465	0.0361363493938396	0.4121348009965093	T	T	T

FS: -248.501623 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111001	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2224964498024621	0.1119061447336110	0.2215210218545871	T	T	T
0.5559068957049809	0.1111470012075209	0.2207233456668300	T	T	T
0.8886518107139145	0.1111842586069479	0.2207347852536530	T	T	T
0.2233310562063751	0.4437331140636106	0.2221286804672186	T	T	T
0.5537568204112804	0.4437752630933928	0.2221637158578905	T	T	T
0.8889203766518968	0.4443205336770634	0.2204774839310657	T	T	T
0.5558571828015931	0.7780956766473447	0.2208763838754879	T	T	T
0.8891635071280394	0.7775544103866006	0.2201549967972762	T	T	T
0.2219454969112007	0.7775277808242050	0.2202157605579934	T	T	T
0.9985918106091016	0.9983947631821459	0.3311226339154204	T	T	T
0.3328204105034748	0.9983493834665240	0.3308924340603338	T	T	T
0.6669523845019527	0.0000379221880680	0.3318696634566233	T	T	T
0.3340803188309582	0.3342654462281385	0.3366265942932767	T	T	T
0.6683812988689322	0.3338460714173349	0.3312537847407754	T	T	T
0.9986501458276946	0.3332622590240976	0.3315662558926329	T	T	T
0.3333007452368232	0.6680216057347824	0.3316036445956843	T	T	T
0.6682458556686247	0.6680683134264724	0.3316828603662118	T	T	T
0.0002304946469560	0.6669396260932934	0.3315814514452037	T	T	T
0.6649702958641948	0.2274216620626243	0.5093472739844856	T	T	T
0.5401673753602719	0.0233273765817553	0.5049163727573381	T	T	T
0.8654357028857086	0.2975261405918953	0.5214012927988986	T	T	T
0.6090924048831313	0.3371284779902473	0.5007165768099467	T	T	T
0.3073055544080887	0.3048841590778794	0.4453579734874887	T	T	T
0.5779271954508861	0.9728492450013271	0.4610437684864924	T	T	T

0.2083398158409231	0.1768380892486940	0.4475376944886268	T	T	T
0.4183053144160148	0.3086847237141584	0.4659872311190967	T	T	T
0.8882365711445140	0.2105370660899404	0.5555443407532198	T	T	T
0.3957571078286445	0.9864033198724232	0.5006612692086078	T	T	T
0.5593081138331905	0.9532229973732030	0.5467595026260395	T	T	T
0.9272242998086014	0.2929700437893041	0.4744158463325045	T	T	T
0.9341955396538559	0.4405326581358249	0.5378899977403833	T	T	T

Ir catalyst



IS: -345.893922 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.3333333333333499	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666714	0.3333333333333499	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333499	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666785	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000071	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.11111111111111214	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777857	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444571	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777928	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444642	0.88888888888889284	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777999	0.88888888888889284	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111356	0.88888888888889284	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223728421494936	0.1109868018937606	0.2205207519919465	T	T	T
0.5561634412630295	0.1123306157039159	0.2216862736487219	T	T	T
0.8885743392214288	0.1110999817781472	0.2207150167902945	T	T	T
0.2224452683640331	0.4450386429235467	0.2203383958249879	T	T	T
0.5560891695376458	0.4435294352109875	0.2218357768203446	T	T	T
0.8869796413195723	0.4433829623859962	0.2219376152745285	T	T	T
0.5549901644247758	0.7773201431041783	0.2202738729522845	T	T	T
0.8887753188060545	0.7775256918645562	0.2205393414625219	T	T	T
0.2222645808240473	0.7772493834380512	0.2201874072213081	T	T	T
0.0003086934907891	0.0003029745127817	0.3297249468358300	T	T	T
0.3307276510329444	0.9979052896082612	0.3296325726057135	T	T	T
0.6666459843767382	0.9974872720562942	0.3296940673007042	T	T	T
0.3295116636892153	0.3314328632689321	0.3294257610160892	T	T	T
0.6678244895704010	0.3346254216719139	0.3331527134354563	T	T	T
0.0022703074471441	0.3329795597002720	0.3295554306685349	T	T	T
0.3333844498789250	0.6670072870662609	0.3300794411915179	T	T	T
0.6679056879147338	0.6699177296636327	0.3294145038702380	T	T	T
0.0020766300056454	0.6691116932526798	0.3294892081311290	T	T	T
0.6330797210150774	0.6884481631885497	0.5300334952515536	T	T	T
0.5211935943088295	0.5228732699148838	0.4904354207184652	T	T	T

0.6670289691608705	0.3280735345445505	0.4438349836159919	T	T	T
0.4750469180848246	0.5571007500952153	0.4505181884583433	T	T	T
0.5444581622658716	0.7413408917483558	0.5505771759185702	T	T	T
0.6113051802497201	0.4059466578620138	0.4624958326142646	T	T	T
0.5785012991633941	0.1967196340606525	0.4545262930479329	T	T	T
0.6914144646217509	0.6456701286016107	0.5708980047522979	T	T	T
0.7482040400850077	0.7991562215786999	0.5008068005654362	T	T	T

TS: -344.982654 eV
 2.7400000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333415	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666734	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000026	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333461	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666764	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000059	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111185	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444511	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777873	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444535	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777906	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111204	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444660	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777778003	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111335	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.2223650205068328	0.1105050792454644	0.2198262667173472	T	T	T
0.5560704370515517	0.1121482313376889	0.2209781239425360	T	T	T
0.8888695981718446	0.1107805804194500	0.2204164220243436	T	T	T
0.2227306441689854	0.4449422610481435	0.2199640496655973	T	T	T
0.5572308476089306	0.4462145443224144	0.2226871929697715	T	T	T
0.8867453373593517	0.4440631535394867	0.2218934346372796	T	T	T
0.5565364783970592	0.7759671026030991	0.2215434541350136	T	T	T
0.8879496668358111	0.7770811036885109	0.2210552922448605	T	T	T
0.2223826503397904	0.7774568366608040	0.2198849121514711	T	T	T
0.0028650518544654	0.0031877348660298	0.3291628641733210	T	T	T
0.3308939709640134	0.9991517959504479	0.3293646368315045	T	T	T
0.6679566032685408	0.0011535799055627	0.3284537462838055	T	T	T
0.3281815749062000	0.3300545722677367	0.3291100755644875	T	T	T
0.6665157727538353	0.3280657847766634	0.3323049808456881	T	T	T
0.0019432617094805	0.3332300192859628	0.3294108522055774	T	T	T
0.3293775830059293	0.6643629974710374	0.3293123053969355	T	T	T
0.6670833777771141	0.6699612496167333	0.3378672540618467	T	T	T
0.0067004323421320	0.6694247222527667	0.3298588614329629	T	T	T
0.6459093968918652	0.6829229103243406	0.4529814832026342	T	T	T
0.5027265349184014	0.5095307255351476	0.4775265576276920	T	T	T
0.6609173190794794	0.3066675232102493	0.4454486628044572	T	T	T
0.3917611558935991	0.4690415066082640	0.4482893975956739	T	T	T
0.6066631781718601	0.7918675841561177	0.4512483742198408	T	T	T
0.5833787670655390	0.3621760950846179	0.4619932496160701	T	T	T

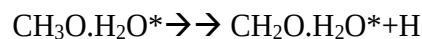
0.5850840280989404	0.1705128337729774	0.4514240291007912	T	T	T
0.7676452959500457	0.7292241701108932	0.4860774087614704	T	T	T
0.7794829811063804	0.6692467836555205	0.4058632881761610	T	T	T

```

FS:          -341.939112 eV
2.740000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533200  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495292
36  1  2  5      # Ir C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2221694017635580 0.1110550037649920 0.2201870067917096 T T T
0.5559127955940397 0.1122213555178480 0.2213156281166150 T T T
0.8884183627299634 0.1107046549954175 0.2204645659424763 T T T
0.2228678213922984 0.4452453919197683 0.2200458772142938 T T T
0.5572447539403441 0.4460040892926204 0.2227915864033003 T T T
0.8861549766359880 0.4438697705555222 0.2218992170263925 T T T
0.5559908340870723 0.7764067299137104 0.2212682805101961 T T T
0.8866608955306727 0.7765184769054290 0.2215048848414267 T T T
0.2221101526227931 0.7774148599922069 0.2201228625200283 T T T
0.0017532745776411 0.0012219050627856 0.3293413955121019 T T T
0.3303019059506991 -0.0008058920039371 0.3294627255638582 T T T
0.6670972710690595 0.0005833811747625 0.3287297477960933 T T T
0.3281799654765016 0.3306774157135179 0.3291871284164221 T T T
0.6677127816602170 0.3314519500037141 0.3328063869170828 T T T
0.0019369676481469 0.3339473850065730 0.3293957370350406 T T T
0.3308510017214106 0.6651301212036648 0.3296231143904217 T T T
0.6674179540255804 0.6723426260991261 0.3371869107669350 T T T
0.0045484078892076 0.6694240733503516 0.3293325073053979 T T T
0.6684165161671092 0.6933159390469175 0.4423589123154637 T T T
0.5279735950246192 0.5255492493557554 0.4752871219092574 T T T
0.6613040205020148 0.3127253984982816 0.4430813386478386 T T T
0.4062204183951805 0.4893238501753285 0.4543508090353461 T T T
0.5940448436229212 0.3821992679146970 0.4593746480839702 T T T
0.5776482120569294 0.1788406943842943 0.4515755205074461 T T T

```

0.6470316581352592	0.8109692875086498	0.4553598694730451	T	T	T
0.8037015201491747	0.7191294123261545	0.4619082842254890	T	T	T



IS: -341.922093 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227698949523436	0.1110221168785044	0.2199257474817734	T	T	T
0.5570889236096193	0.1133573775316264	0.2218214761803683	T	T	T
0.8895103471595127	0.1114552378466594	0.2206437590561548	T	T	T
0.2230417193352611	0.4448292569272037	0.2198437120095320	T	T	T
0.5571475333227150	0.4452467761520869	0.2224419808945134	T	T	T
0.8873565674950669	0.4440423294440055	0.2216076969759291	T	T	T
0.5570525688571797	0.7762605913451661	0.2220332995448224	T	T	T
0.8860585442640089	0.7757478603139257	0.2222866161849951	T	T	T
0.2232747793443768	0.7784505686226486	0.2194035724359129	T	T	T
0.0027072634915053	0.0009579622074116	0.3295254402372159	T	T	T
0.3310084585699305	-0.0002122572259532	0.3293169816904711	T	T	T
0.6686955362041942	0.0011501651332912	0.3291353820229929	T	T	T
0.3276487274330476	0.3300956508685150	0.3289318710683155	T	T	T
0.6652064552110121	0.3271094260267424	0.3326235900175249	T	T	T
0.0026959026880803	0.3352754481221320	0.3295804790856797	T	T	T
0.3304023439859411	0.6638591750354849	0.3293256247910659	T	T	T
0.6678598712644372	0.6733720408565936	0.3344838026387527	T	T	T
0.0092307863670498	0.6706722813398843	0.3291056023112207	T	T	T
0.7460632766525873	0.7955974473622367	0.4803203472326914	T	T	T
0.6710631283861080	0.3513939411144134	0.4396762423210411	T	T	T
0.6574190228551702	0.6403242511866409	0.4360450043270836	T	T	T
0.6831705583760412	0.8860175913302458	0.4752237114274305	T	T	T

0.6718436708502454	0.4843433968775731	0.4454057206376552	T	T	T
0.7233419925458552	0.7397844888731392	0.5313159800546766	T	T	T
0.7939985620133613	0.3712845792392215	0.4530896399015887	T	T	T
0.8984357762927964	0.8813901438858942	0.4705650706761862	T	T	T

TS: -341.158753eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333368	0.3333333333333455	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666730	0.3333333333333455	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000004	0.3333333333333455	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333450	0.66666666666666839	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666744	0.66666666666666839	0.0000000000000000	F	F	F
0.000000000000000010	0.66666666666666839	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111153	0.2222222222222307	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444522	0.2222222222222307	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777811	0.2222222222222307	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444526	0.5555555555555682	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777890	0.5555555555555682	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111158	0.5555555555555682	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444541	0.88888888888889083	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777974	0.88888888888889083	0.11111111111111075	F	F	F
0.1121175078655448	0.8892588397134924	0.1098721785789750	F	F	F
0.2229734276346886	0.1124499130050148	0.2209569970975854	T	T	T
0.5558079734379350	0.1108507262140495	0.2208259798785631	T	T	T
0.8871479088385869	0.1099659531030860	0.2212268598330897	T	T	T
0.2246048246289467	0.4432174023248948	0.2211443190303952	T	T	T
0.5565714629709523	0.4437393320041731	0.2224540240791223	T	T	T
0.8859879538160231	0.4421161842828555	0.2215259483668930	T	T	T
0.5576853862535682	0.7814297899891809	0.2218603023652882	T	T	T
0.8892198389909033	0.7778511035807294	0.2197752069261179	T	T	T
0.2214240108253120	0.7761437164383859	0.2188953422815041	T	T	T
0.0021758475104842	0.9989702082342572	0.3294942920578613	T	T	T
0.3231745972743355	0.9890686719456583	0.3275125625685140	T	T	T
0.6646748787229388	-0.0002934913054766	0.3384989413409956	T	T	T
0.3326931624693773	0.3338015890054725	0.3323096404624065	T	T	T
0.6730714857116413	0.3348404963442417	0.3323846852912045	T	T	T
0.0073184200874678	0.3381942573117866	0.3285093997849048	T	T	T
0.3336997955031750	0.6681297845803773	0.3289979921062567	T	T	T
0.6696188115468937	0.6690383441094977	0.3289255494788322	T	T	T
0.9995857516071223	0.6672515454305591	0.3290585961650693	T	T	T
0.6318651825101690	0.0982048875641435	0.4446045308293188	T	T	T
0.6531652455926596	0.2732579227907182	0.4337044637227140	T	T	T
0.3607369761297252	0.3237784129986455	0.4431978045013519	T	T	T
0.4866514156805855	0.9833586990114175	0.4517994465981107	T	T	T
0.2484889527899477	0.2066922384827905	0.4560053144432484	T	T	T
0.4710345044548713	0.3004177667611468	0.4471097859165259	T	T	T

0.7200730912792435	0.1034650158651234	0.4870319482537842	T	T	T
0.7619074175368217	0.0386725565195122	0.4121607071006114	T	T	T

FS: -337.965936 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

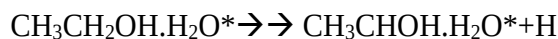
36 1 2 4 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333428	0.000000000000000	F	F	F
0.66666666666666714	0.3333333333333428	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333428	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.66666666666666856	0.000000000000000	F	F	F
0.66666666666666714	0.66666666666666856	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.66666666666666856	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777857	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.55555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444571	0.88888888888889070	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777999	0.88888888888889070	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655483	0.8892588397134915	0.1098721785789749	F	F	F
0.2226486451211348	0.1119123154528013	0.2215400133747507	T	T	T
0.5558900096964265	0.1106568847148883	0.2198150412199759	T	T	T
0.8875459757993739	0.1108253784405222	0.2209252518864905	T	T	T
0.2225213088425455	0.4440415219313879	0.2205793625100181	T	T	T
0.5545456349708031	0.4439351142043205	0.2215652433536118	T	T	T
0.8849560500147107	0.4431546110596262	0.2218022109495208	T	T	T
0.5560227482561234	0.7792466927510684	0.2209092052358999	T	T	T
0.8890691503802464	0.7783185227416064	0.2197971892460106	T	T	T
0.2235296800954206	0.7818432971652821	0.2216660901220374	T	T	T
0.9981615642803192	0.9987335230703991	0.3293309908670398	T	T	T
0.3322472722537039	0.9959494568216629	0.3318553950420695	T	T	T
0.6703467473446246	0.9966347228009605	0.3342327583719527	T	T	T
0.3293964651689622	0.3388861489134710	0.3315888634139189	T	T	T
0.6704496730360443	0.3344043114823595	0.3319162499772577	T	T	T
0.0010917340866006	0.3349946127318495	0.3288342339636086	T	T	T
0.3312855100187901	0.6654148791131017	0.3286297363207211	T	T	T
0.6681567805557287	0.6681777291519914	0.3291168682886352	T	T	T
0.9993153961316870	0.6677915990493055	0.3294418763652658	T	T	T
0.6116873133099465	0.0517708750228851	0.4306732356210587	T	T	T
0.5127574281043640	0.1505761404522814	0.4176880866821593	T	T	T
0.3356220610762271	0.3292766487096004	0.4441401169256205	T	T	T
0.5197660108970090	0.9210331442457166	0.4575684045899854	T	T	T
0.2039632648003994	0.2431610946817106	0.4552979837690144	T	T	T
0.4031702682850742	0.2568196251668596	0.4502487737068717	T	T	T

0.7411704883488869 0.1436718601335031 0.4581895174553303 T T T



IS: -362.596103 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225442775554650	0.1112258787382407	0.2205874413024451	T	T	T
0.5562356889733683	0.1124981817950055	0.2216839897845992	T	T	T
0.8885969795654698	0.1111982472921142	0.2207060927605298	T	T	T
0.2225352186177784	0.4451361673539599	0.2203491676049830	T	T	T
0.5562436164883752	0.4437382516185963	0.2218683114841490	T	T	T
0.8870175741329511	0.4434790898535674	0.2219094719351764	T	T	T
0.5551062565593397	0.7774375999486866	0.2202905916539848	T	T	T
0.8890007088952988	0.7777005147649435	0.2204569637705961	T	T	T
0.2223365216302521	0.7773407425310513	0.2201945989727375	T	T	T
0.0004225922973666	0.0005949431266754	0.3296726582325273	T	T	T
0.3309057797885535	0.9981195101590988	0.3296752298530167	T	T	T
0.6667677446367115	0.9978309669390052	0.3297068151408535	T	T	T
0.3297908291427888	0.3316901898366063	0.3294862176866363	T	T	T
0.6679905494073195	0.3350752286365162	0.3332083399167252	T	T	T
0.0024094909972765	0.3332481266003851	0.3295389179655436	T	T	T
0.3335238812551298	0.6672642371973719	0.3300605292208316	T	T	T
0.6680333858599840	0.6703128104509909	0.3294756656203638	T	T	T
0.0022300618306199	0.6692852999940474	0.3294573321744013	T	T	T
0.6119742905511747	0.6674656119548245	0.5448575410872712	T	T	T
0.8167741020056307	0.8135091359693771	0.5339232679976514	T	T	T
0.6671197212018243	0.3271662110631652	0.4441702313557050	T	T	T
0.5322587654114866	0.5318766542086021	0.4912633636100718	T	T	T

0.5250736590508955	0.7336428521589152	0.5513550177604634	T	T	T
0.6179227331379525	0.4097991135476733	0.4634688519744661	T	T	T
0.5115950946470155	0.5901004290792828	0.4516700029870814	T	T	T
0.8701212022082890	0.9088944355389477	0.5768469969792226	T	T	T
0.9031841755481468	0.7469454444568734	0.5280297094561653	T	T	T
0.8347266660141905	0.8981307993983494	0.4893426251617340	T	T	T
0.5944921102489160	0.5831540390506252	0.5894172089458752	T	T	T
0.5727345136827134	0.1970542432750306	0.4541072994825797	T	T	T

TS: -361.684551 eV
 2.7400000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333415	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666734	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000026	0.3333333333333466	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333461	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666764	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000059	0.6666666666666862	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111185	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444511	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777873	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444535	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777906	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111204	0.5555555555555739	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444660	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777778003	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111335	0.88888888888889319	0.11111111111111075	F	F	F
0.2224127507588805	0.1106187709246952	0.2198730119707338	T	T	T
0.5561018791037274	0.1121614231840194	0.2209506337479072	T	T	T
0.8888597131318008	0.1108430469083986	0.2203693671575197	T	T	T
0.2228303708431947	0.4449784194463280	0.2199556097183054	T	T	T
0.5572411982720726	0.4462020655004335	0.2226348180591212	T	T	T
0.8868186386766068	0.4441636781711489	0.2219060460538251	T	T	T
0.5565276189466750	0.7759305084244835	0.2215368096666378	T	T	T
0.8879710556232261	0.7771381823618818	0.2210725480464793	T	T	T
0.2224208804966259	0.7775144525723862	0.2198947059640660	T	T	T
0.0029212050259400	0.0033914336237959	0.3291475226225481	T	T	T
0.3310046225727940	0.9992681842110236	0.3293487282070960	T	T	T
0.6682183200871281	0.0011467499111176	0.3284402283980848	T	T	T
0.3286395618219646	0.3305475655854577	0.3291872047687734	T	T	T
0.6664275458505894	0.3280197122929875	0.3322438154498631	T	T	T
0.0020963257873348	0.3334229866469891	0.3294052452447273	T	T	T
0.3296392041471168	0.6643004314504432	0.3293141323553308	T	T	T
0.6680069996891606	0.6704819900937340	0.3380082595653915	T	T	T
0.0069630627308400	0.6696273308588597	0.3299162537705955	T	T	T
0.6457950813744406	0.6863113837642156	0.4560126514489383	T	T	T
0.8100944706573843	0.7622229391308827	0.5037303838073961	T	T	T
0.5031404412091909	0.5091590410808352	0.4778409832466716	T	T	T
0.6584557093351782	0.3026501661798617	0.4456572185375010	T	T	T
0.3948382164528752	0.4687178733071740	0.4471397168725154	T	T	T
0.7614669814095586	0.7783579509861036	0.5529248082286093	T	T	T

0.8686074559847341	0.6683898649164111	0.5086741996311441	T	T	T
0.9217694168029124	0.8999732017966450	0.4866049334799884	T	T	T
0.5938491948865157	0.7844911985749703	0.4492942599721755	T	T	T
0.5839669574529713	0.3614435669174593	0.4622056813273877	T	T	T
0.5775504828334580	0.1664650669561310	0.4500896482700860	T	T	T
0.7782299367582854	0.6636547964461839	0.4048223722764146	T	T	T

FS: -358.571502 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

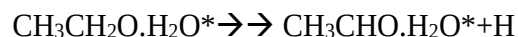
36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221928003491703	0.1110218668490840	0.2201943099283911	T	T	T
0.5560373041758302	0.1124555287981351	0.2212309515511755	T	T	T
0.8884234573506605	0.1108087014007358	0.2204466246903879	T	T	T
0.2230443703200689	0.4453340960063970	0.2200435971442405	T	T	T
0.5574039518224865	0.4463880015852116	0.2229425964304877	T	T	T
0.8862837125728719	0.4438975877511870	0.2218584262161310	T	T	T
0.5560881252645932	0.7763728678581521	0.2212561909948640	T	T	T
0.8866922569402582	0.7766042931341095	0.2214315556475394	T	T	T
0.2221590979583680	0.7775122064414649	0.2202041501050572	T	T	T
0.0019201406614933	0.0017908067519047	0.3291754825864740	T	T	T
0.3310139898865075	0.9994213961451620	0.3293273601470976	T	T	T
0.6666317433142221	0.0004655249973576	0.3286671806473134	T	T	T
0.3283567740135481	0.3310803610811819	0.3291928488999690	T	T	T
0.6677287534505232	0.3317219052317443	0.3327921636929256	T	T	T
0.0025957619820350	0.3343047553089279	0.3293353054870120	T	T	T
0.3309843361724556	0.6652110641545542	0.3295069749274858	T	T	T
0.6697841849813209	0.6736759265322626	0.3387073170110099	T	T	T
0.0038572739673483	0.6693789903350906	0.3292853342382988	T	T	T
0.6628167999428909	0.6980623875502251	0.4451095154359477	T	T	T
0.8445385097564038	0.7621730346317225	0.4825104438218682	T	T	T
0.5234282011010140	0.5222918879553826	0.4746963963691386	T	T	T
0.6596257943525834	0.3097287652304964	0.4431901400030384	T	T	T
0.4051383789895541	0.4809648676198514	0.4501073507413878	T	T	T
0.8192546212708632	0.7637193142076444	0.5362566538258887	T	T	T

0.9041413718417857	0.6704799467679932	0.4737573299228993	T	T	T
0.9492271551890705	0.9050669947227803	0.4669703817060316	T	T	T
0.5947633285468823	0.3816123214414326	0.4593478143502566	T	T	T
0.5725608398365988	0.1760282630170748	0.4508661937825475	T	T	T
0.6140630843305206	0.7996164557169549	0.4518648090385297	T	T	T



IS: -358.598829 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226257781031619	0.1108963437446124	0.2198411438846846	T	T	T
0.5571816744455425	0.1134804089890793	0.2217025195035110	T	T	T
0.8893411486986647	0.1114290450046135	0.2206378087672590	T	T	T
0.2229466549062063	0.4448794845768320	0.2198642636202095	T	T	T
0.5570633696617405	0.4454105580309240	0.2224486175006625	T	T	T
0.8873806040532725	0.4439781064654882	0.2215044160232151	T	T	T
0.5568864575544119	0.7763091759217089	0.2219188885348375	T	T	T
0.8855871252621604	0.7756629376075274	0.2225046372049211	T	T	T
0.2230441125266741	0.7785502298311878	0.2193561523518481	T	T	T
0.0029391094371105	0.0020604813276547	0.3294695670190774	T	T	T
0.3310074146175863	0.9996107776996259	0.3292129616457677	T	T	T
0.6679018482469569	0.0007901217726740	0.3292085113168994	T	T	T
0.3273924696970861	0.3298478143883345	0.3288862383522699	T	T	T
0.6649850029482304	0.3275085374886614	0.3325289075936804	T	T	T
0.0025940959893509	0.3351913692620482	0.3295991619807528	T	T	T
0.3301238205658369	0.6643520659762427	0.3292587269065712	T	T	T
0.6683386259337745	0.6731353923742928	0.3345261976034883	T	T	T
0.0088227430068598	0.6701422298392897	0.3290010929322632	T	T	T
0.6903339494127767	0.7806015978724908	0.4839514629596274	T	T	T
0.8935402610261534	0.8898751062457231	0.5065503573170477	T	T	T
0.6699692561323100	0.3494179183848277	0.4402304725846357	T	T	T

0.6569986117044071	0.6395653921284672	0.4356155847217207	T	T	T
0.6456196078084036	0.8760770357039299	0.4627301554193969	T	T	T
0.6692016234537157	0.4796146995476483	0.4465334999364926	T	T	T
0.9106065567734117	0.9933811031069699	0.5445821349433049	T	T	T
0.9397608665741098	0.7966139070659860	0.5278849707695338	T	T	T
0.9871964668232092	0.9664705415153931	0.4646173395495168	T	T	T
0.5964010773380204	0.7067022761181994	0.5262071936567143	T	T	T
0.7942826603452940	0.3719326315715241	0.4530190159676402	T	T	T

TS: -357.882051 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333402	0.3333333333333511	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666778	0.3333333333333511	0.000000000000000	F	F	F
0.00000000000000021	0.3333333333333511	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333511	0.6666666666667022	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666804	0.6666666666667022	0.000000000000000	F	F	F
0.00000000000000042	0.6666666666667022	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111173	0.2222222222222346	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444564	0.2222222222222346	0.1111111111111075	F	F	F
0.7777777777777860	0.2222222222222346	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444582	0.5555555555555840	0.1111111111111075	F	F	F
0.7777777777777962	0.5555555555555840	0.1111111111111075	F	F	F
0.1111111111111187	0.5555555555555840	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444684	0.8888888888889307	0.1111111111111075	F	F	F
0.77777777777778154	0.8888888888889307	0.1111111111111075	F	F	F
0.1121175078655575	0.8892588397135158	0.1098721785789750	F	F	F
0.2231052023613966	0.1126956910024899	0.2209534463439792	T	T	T
0.5559170495941063	0.1108869597696386	0.2209669638123387	T	T	T
0.8871175046830638	0.1101142441382225	0.2212504299110498	T	T	T
0.2244559951823401	0.4434634240245645	0.2211215015784310	T	T	T
0.5565910015207686	0.4440687022946765	0.2223528427958947	T	T	T
0.8859193235955907	0.4424060057096918	0.2215624031004875	T	T	T
0.5575144187353581	0.7812735478047081	0.2216603725646634	T	T	T
0.8893540283382781	0.7780892297340555	0.2197921726030444	T	T	T
0.2214358385414446	0.7763731965622082	0.2189275698877809	T	T	T
0.0024586474177671	0.9993391510186652	0.3295110277497281	T	T	T
0.3239235580153469	0.9899358822754678	0.3276247971938041	T	T	T
0.6665150424646784	1.0003762709522861	0.3382849722737692	T	T	T
0.3329148343059970	0.3346885604329931	0.3320883820560330	T	T	T
0.6724394560640344	0.3344382643757374	0.3324305134382184	T	T	T
0.0068932489855064	0.3382174492331902	0.3285285636066270	T	T	T
0.3342378653925356	0.6688620784439170	0.3289976817823036	T	T	T
0.6695192257764657	0.6692078199995247	0.3288713148439588	T	T	T
0.0001308761822970	0.6677593492997068	0.3290632275813090	T	T	T
0.6269137383231593	0.1036511321353911	0.4484955751863629	T	T	T
0.7297395605612538	0.1000517212143106	0.5106148580491506	T	T	T
0.6572109549885159	0.2787407971992774	0.4345181640313162	T	T	T
0.3584585324430674	0.3252765132551358	0.4438578503767703	T	T	T
0.4783668552899070	0.9912574085860421	0.4476631656694155	T	T	T
0.2490700714191544	0.2037636939443511	0.4548738768215291	T	T	T

0.4717991425150430	0.3078188431940051	0.4476900982841959	T	T	T
0.8810050391513230	0.2002027703500441	0.5070114328263978	T	T	T
0.7566895188114867	0.0289878465889924	0.4118789451398234	T	T	T
0.6740851630155359	0.1424358298942200	0.5528856242445050	T	T	T
0.7060500332786588	0.9583920974208525	0.5203245892311225	T	T	T

FS: -354.723667 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

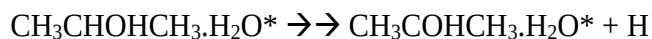
36 2 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231262345184612	0.1121719882945913	0.2214483260201812	T	T	T
0.5557638766289976	0.1109187526088177	0.2206169963817326	T	T	T
0.8908649458956054	0.1152651463503531	0.2224387187149797	T	T	T
0.2223951992898550	0.4441974843417879	0.2204986468489570	T	T	T
0.5548951373948727	0.4439990074879168	0.2211917627907141	T	T	T
0.8902443547947079	0.4465941659186516	0.2208743602288568	T	T	T
0.5513539662197957	0.7756218969961621	0.2224524494273008	T	T	T
0.8884019974388211	0.7782657676082776	0.2195241940698597	T	T	T
0.2198251419471222	0.7764314668744666	0.2207977338268298	T	T	T
0.9991431030270685	0.9952891918170984	0.3290769031408809	T	T	T
0.3362193435265670	0.9983696634202492	0.3289347326928126	T	T	T
0.6664272423941330	0.0011045986864340	0.3297474965866841	T	T	T
0.3362088017897394	0.3299421655062666	0.3314270327210375	T	T	T
0.6675430476863219	0.3310444067530089	0.3289365279387877	T	T	T
0.0010941699305081	0.3264356910357408	0.3320709886813650	T	T	T
0.3395436158225131	0.6664876355103069	0.3320624296099948	T	T	T
0.6712311640031380	0.6663666491433307	0.3293136843917278	T	T	T
0.9972325251315183	0.6715731926229551	0.3356129637146047	T	T	T
0.0452970266870647	0.6081490910231135	0.4329634243340686	T	T	T
0.1509259919268752	0.7678963908021014	0.4811598275284883	T	T	T
0.3329918765236825	0.3410918955962653	0.4445440347421677	T	T	T
0.1469290390143576	0.5124978205187825	0.4176731006630532	T	T	T
0.2618088255521192	0.4101989187250908	0.4501558452014537	T	T	T
0.1723770811939895	0.7133149812582309	0.5284578805199428	T	T	T

0.2889143696875622	0.8733682447693442	0.4615106207022925	T	T	T
0.0697452032010306	0.8380748153056395	0.4912856892206516	T	T	T
0.4642494411082573	0.4317000710931054	0.4547314579759468	T	T	T
0.9081061458629365	0.5026934834413452	0.4532715995972991	T	T	T



IS: -379.356367 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225479428243040	0.1111803904434287	0.2205714921772531	T	T	T
0.5562825853084884	0.1126077416466670	0.2217457491673342	T	T	T
0.8887098751008842	0.1112393356118587	0.2207070626587340	T	T	T
0.2225593599604246	0.4451393492283646	0.2203486073602312	T	T	T
0.5561730288127076	0.4436082945644947	0.2218063003926754	T	T	T
0.8871697962365332	0.4435541079443114	0.2219110857924911	T	T	T
0.5551250417911867	0.7775116714567383	0.2202785674877991	T	T	T
0.8889343806407191	0.7776891767598952	0.2205280245705097	T	T	T
0.2224220443997419	0.7774253738263983	0.2201858047363537	T	T	T
0.0004806721478110	0.0005509221849355	0.3297586594677340	T	T	T
0.3309775730131398	0.9981278815343397	0.3297125448877317	T	T	T
0.6668714755800200	0.9979441832342415	0.3296639771220782	T	T	T
0.3299178510651528	0.3318970101872000	0.3295432953836191	T	T	T
0.6680820483716856	0.3350924470840737	0.3332643280969109	T	T	T
0.0023905439368664	0.3330658092738176	0.3295593961922207	T	T	T
0.3334835369334556	0.6671821629636687	0.3300702331839948	T	T	T
0.6678752905484494	0.6699491562524565	0.3292917249348812	T	T	T
0.0024465790101539	0.6694815545663571	0.3294771743746263	T	T	T
0.6844272647804466	0.7382748988307302	0.5218989345480211	T	T	T
0.7932615161561071	0.7049287307297348	0.5758081529906227	T	T	T
0.5705689845479766	0.8249528779365147	0.5473055384683309	T	T	T
0.5575303395790574	0.5552850317481169	0.4919101779301456	T	T	T

0.6707405233121936	0.3332532875610786	0.4440056717768174	T	T	T
0.4941953609213890	0.5746755700030747	0.4536082511355840	T	T	T
0.6979086816776949	0.6116796954037053	0.6144975479358900	T	T	T
0.8724911205671515	0.6415051547938246	0.5552840518660010	T	T	T
0.8937243993403706	0.8389414436608342	0.5991022761075940	T	T	T
0.6302868082806252	0.4236721185399835	0.4630051101872246	T	T	T
0.5731218164070632	0.2062462337999676	0.4560351028101648	T	T	T
0.4729432348894274	0.7375093707259333	0.5865193608111837	T	T	T
0.4886701388185203	0.8390687308958041	0.5067784799035807	T	T	T
0.6644257835768431	0.9656400779032789	0.5676668094332941	T	T	T
0.7819823684051475	0.8287068407924201	0.4827890509784095	T	T	T

TS: -378.096703 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333513	0.3333333333333665	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666886	0.3333333333333665	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000076	0.3333333333333665	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333602	0.6666666666667265	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666667034	0.6666666666667265	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000163	0.6666666666667265	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111294	0.2222222222222445	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444656	0.2222222222222445	0.1111111111111075	F	F	F
0.7777777777778032	0.2222222222222445	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444742	0.55555555555556037	0.1111111111111075	F	F	F
0.7777777777778181	0.55555555555556037	0.1111111111111075	F	F	F
0.1111111111111298	0.55555555555556037	0.1111111111111075	F	F	F
0.4444444444444960	0.8888888888889859	0.1111111111111075	F	F	F
0.7777777777778399	0.8888888888889859	0.1111111111111075	F	F	F
0.1111111111111602	0.8888888888889859	0.1111111111111075	F	F	F
0.2223259367355682	0.1106557719838299	0.2197192230632312	T	T	T
0.5555233276680078	0.1114422704455637	0.2207064958196145	T	T	T
0.8888842211781632	0.1107671699594392	0.2202392214683359	T	T	T
0.2226522785226620	0.4447078630512487	0.2197965168206833	T	T	T
0.5576140868044173	0.4464775178306378	0.2230649240009315	T	T	T
0.8865537956808738	0.4439199325039707	0.2219672783509186	T	T	T
0.5563832011619553	0.7753825237806286	0.2214742816431146	T	T	T
0.8878483763838843	0.7768252851722482	0.2211064045513614	T	T	T
0.2222539538262255	0.7771169130312936	0.2199278376086526	T	T	T
0.0033636642488092	0.0036285389442915	0.3292035121574625	T	T	T
0.3299589192657033	0.9987837679206604	0.3290182143808606	T	T	T
0.6684308752922268	0.0008532655672517	0.3278776193842383	T	T	T
0.3288117556059733	0.3307075271722533	0.3293240279335861	T	T	T
0.6668499790448064	0.3283955732987245	0.3321569451018375	T	T	T
0.0017681017472299	0.3333854763930637	0.3292734042359038	T	T	T
0.3297323461876877	0.6640800372684219	0.3293517123192405	T	T	T
0.6664264086623304	0.6712533538909935	0.3394551563547507	T	T	T
0.0060459100375747	0.6689619111009414	0.3300620819517705	T	T	T
0.6583307578803248	0.6780814312195710	0.4662030576238037	T	T	T
0.8285154446403888	0.7066648028383440	0.5057920492192959	T	T	T
0.6086594899316232	0.8276537021243870	0.4821343795838899	T	T	T
0.5081523383043370	0.4961086325697273	0.4799704478064141	T	T	T
0.6480505872634625	0.2843302491464885	0.4444950831407709	T	T	T
0.4031124769383246	0.4708192928698084	0.4494360593049254	T	T	T

0.7929467538288866	0.6957806059567453	0.5590193518418324	T	T	T
0.8700010524366937	0.6020981799879875	0.4941473306308443	T	T	T
0.9482516864939720	0.8472121366946086	0.4962191252044718	T	T	T
0.5961406800216321	0.8321648252350782	0.5366740455629756	T	T	T
0.5795904457316856	0.3497953762510561	0.4612130995824927	T	T	T
0.5562788859307909	0.1494366353134118	0.4447639356477456	T	T	T
0.4748700424335867	0.7970274064294243	0.4593983277823436	T	T	T
0.7196647021683819	0.9662877860113077	0.4651950901498572	T	T	T
0.7972367659488451	0.6924175710782570	0.4036330430915811	T	T	T

FS: -375.049251 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

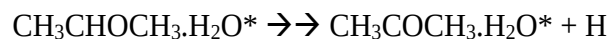
36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218845840867765	0.1108783758142791	0.2200031584630216	T	T	T
0.5554588336575925	0.1114493474444028	0.2210595786363371	T	T	T
0.8885654402558302	0.1107883080286473	0.2202284531647966	T	T	T
0.2227939163687318	0.4448841056486555	0.2198042058315381	T	T	T
0.5577585294841376	0.4466640943979021	0.2232055087129648	T	T	T
0.8858134378916517	0.4436686505147611	0.2218703990873298	T	T	T
0.5560130174270976	0.7759877305138716	0.2210595107308188	T	T	T
0.8858240824959276	0.7758405053986601	0.2216072952816870	T	T	T
0.2219648669622034	0.7770986946688718	0.2202439173197322	T	T	T
0.0016976961407051	0.0005541514647511	0.3292654358941127	T	T	T
0.3295511746100670	-0.0003819152461240	0.3289391424182545	T	T	T
0.6678947707211392	0.0003340162632871	0.3281853331923461	T	T	T
0.3283907861905331	0.3307682555885245	0.3292299298909686	T	T	T
0.6675275375247586	0.3302037862553704	0.3325768183318963	T	T	T
0.0022703823865147	0.3348648274905113	0.3291199896753307	T	T	T
0.3314349880227517	0.6641768631468022	0.3294069690327250	T	T	T
0.6675720003018809	0.6753112104266674	0.3420814117481287	T	T	T
0.0038464672294349	0.6688802475958405	0.3293022538076555	T	T	T
0.6632193572160788	0.6891244448360448	0.4504901444006834	T	T	T
0.8483580925072982	0.7297663257828265	0.4819479710498232	T	T	T
0.6071869828867910	0.8279519354557837	0.4772321158816050	T	T	T
0.5226153246191372	0.5040947265360146	0.4756450032457221	T	T	T
0.6543193784741578	0.2950392476659742	0.4421524571180100	T	T	T
0.4050492724169615	0.4673393441321867	0.4512445546487882	T	T	T

0.8308877311926837	0.7151741904227954	0.5363900798635175	T	T	T
0.8969643016576285	0.6346866204807805	0.4644463369889258	T	T	T
0.9578714922698367	0.8742032230460191	0.4704764777277280	T	T	T
0.5908037061916268	0.3689071666999100	0.4588310492609484	T	T	T
0.5631412161695332	0.1613041458211860	0.4475214987939036	T	T	T
0.6101752590072977	0.8260740944526052	0.5320478954655674	T	T	T
0.4650131305330115	0.7916554527929993	0.4613102199477015	T	T	T
0.7070049287489638	0.9715705448954308	0.4603183396399201	T	T	T



IS: -375.323088 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224017577592663	0.1106659168933235	0.2198062797553219	T	T	T
0.5565592710899377	0.1127871496701690	0.2214713015611708	T	T	T
0.8888445809252234	0.1111785990971393	0.2207142810670011	T	T	T
0.2226572706597937	0.4449395752550305	0.2199393392205629	T	T	T
0.5566256307240086	0.4450859860050652	0.2225678938492620	T	T	T
0.8868395146549214	0.4435907974492733	0.2216255199399436	T	T	T
0.5567228393284123	0.7761631801935830	0.2219104381277302	T	T	T
0.8851411036090110	0.7755993949504011	0.2224983528656796	T	T	T
0.2224576701547047	0.7781183888852059	0.2193516301215323	T	T	T
0.0032599353105298	0.0025006524998720	0.3293676050988583	T	T	T
0.3311949856314639	-0.0004280746695936	0.3294297348712250	T	T	T
0.6667889154966612	0.0005391993904181	0.3293782294086429	T	T	T
0.3260934914468709	0.3287508524105581	0.3288912684899716	T	T	T
0.6669730133412034	0.3299368031093726	0.3325718500708021	T	T	T
0.0026979001642785	0.3350482441148731	0.3294597059392466	T	T	T
0.3298310409234785	0.6649872566422332	0.3292424081975394	T	T	T
0.6689152248756742	0.6732873898643464	0.3344674776842317	T	T	T
0.0075736070266997	0.6693460822367187	0.3289764118100297	T	T	T
0.6871266650748774	0.7859111706801974	0.4831113009441482	T	T	T
0.8849423546470869	0.8741139605199165	0.5115066242837969	T	T	T
0.5338980849003793	0.6976863898449928	0.5357446717013868	T	T	T
0.6640487808534327	0.3476967114203851	0.4408074330277857	T	T	T

0.6564234312774051	0.6427529146923247	0.4352903351195632	T	T	T
0.6601983036538326	0.4749367681283093	0.4470134822285112	T	T	T
0.9095834029567670	-0.0142160887642111	0.5470144948991905	T	T	T
0.9061830623713036	0.7682498239879405	0.5373202363869598	T	T	T
0.9899137589369765	0.9363951360407090	0.4715174172621244	T	T	T
0.5437100663499234	0.5867238121766279	0.5628788853894494	T	T	T
0.5487034845413419	0.8042704356023923	0.5720026923119675	T	T	T
0.3942869825458054	0.6362979087220677	0.5128141956817911	T	T	T
0.5410783780918997	0.2438865757136461	0.4537983638123959	T	T	T
0.6718826079429381	0.8950911961795985	0.4560370491871077	T	T	T

TS: -374.776338 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.3333333333333440	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666723	0.3333333333333440	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000003	0.3333333333333440	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333434	0.66666666666666807	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666727	0.66666666666666807	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000003	0.66666666666666807	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111147	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.44444444444444511	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777799	0.2222222222222294	0.11111111111111075	F	F	F
0.44444444444444513	0.55555555555555659	0.11111111111111075	F	F	F
0.77777777777777877	0.55555555555555659	0.11111111111111075	F	F	F
0.11111111111111151	0.55555555555555659	0.11111111111111075	F	F	F
0.44444444444444515	0.88888888888889029	0.11111111111111075	F	F	F
0.77777777777777939	0.88888888888889029	0.11111111111111075	F	F	F
0.11111111111111227	0.88888888888889029	0.11111111111111075	F	F	F
0.2224946500626795	0.1103627497775030	0.2198238813743350	T	T	T
0.5566985557550774	0.1118814942808461	0.2222732804202737	T	T	T
0.8872054408030018	0.1101776381806870	0.2214103487187896	T	T	T
0.2220959685325643	0.4447573708102145	0.2200031715130950	T	T	T
0.5559045040111310	0.4442199610589082	0.2218510549843305	T	T	T
0.8865574132298144	0.4429262402791097	0.2217404338986267	T	T	T
0.5563318372506725	0.7776872385920208	0.2213574590384570	T	T	T
0.8863178799013953	0.7765604433008949	0.2217610063672797	T	T	T
0.2226811018469033	0.7779724382721045	0.2195892006769061	T	T	T
0.0055610794947523	0.0030740718061892	0.3290733382209199	T	T	T
0.3306692963330700	0.9987418544993171	0.3297315452234185	T	T	T
0.6655046684325918	0.9970237502419391	0.3331062284690396	T	T	T
0.3279082328656966	0.3300820019787312	0.3290431052906336	T	T	T
0.6689651208469670	0.3341865639714290	0.3319837294665347	T	T	T
0.0039474788315123	0.3350428250134124	0.3294632183809010	T	T	T
0.3285228283269480	0.6645634576793292	0.3290018305265462	T	T	T
0.6685914547921867	0.6688175346135410	0.3322530465673619	T	T	T
0.0039763306507808	0.6683349725211841	0.3292285967574650	T	T	T
0.6749757875205494	0.8228246002675913	0.4736152445225842	T	T	T
0.8712597099333481	0.9594242396053858	0.4962644422866496	T	T	T
0.5131767913385069	0.8079676274999948	0.5136412951481155	T	T	T
0.6508475739364913	0.3451926348619833	0.4457504986744196	T	T	T
0.6453538429732351	0.6726125244160425	0.4417149325055983	T	T	T
0.6534957502621120	0.4670297477092198	0.4525648434561843	T	T	T

0.8882062820508173	0.0964887482832852	0.5093718690526423	T	T	T
0.9004836024219988	0.8993734163105016	0.5406878230215646	T	T	T
0.9744016418649242	0.9775065111117560	0.4577816996808121	T	T	T
0.4975062478877196	0.7241916250443375	0.5585278686318503	T	T	T
0.5388732609318716	0.9463879154582133	0.5296561477392686	T	T	T
0.3818882299172182	0.7350727578183812	0.4852050788717946	T	T	T
0.5187109641477077	0.2477904023279620	0.4508244680483815	T	T	T
0.6666119041730055	0.9600510932623632	0.4154557731680979	T	T	T


```

FS:          -371.615299 eV
2.740000000000000
3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 8          # Ir C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2225830681448291 0.1111877103580856 0.2206756553097012 T T T
0.5560101528583226 0.1122648188587196 0.2216379361046773 T T T
0.8886509115486932 0.1110994463915700 0.2206674528512080 T T T
0.2224937994730817 0.4450151800338106 0.2203348183401464 T T T
0.5562611585352304 0.4434864286961741 0.2217773684823956 T T T
0.8871809984764204 0.4435648583370801 0.2218931111096337 T T T
0.5551430517394050 0.7774540721523406 0.2202457261730377 T T T
0.8888570579098233 0.7776345034421807 0.2206249410562787 T T T
0.2222585746991688 0.7772916827230624 0.2201746270537742 T T T
0.0006248432555011 0.0007846946180398 0.3297596238097404 T T T
0.3305451336636869 0.9977791921762729 0.3298180319087845 T T T
0.6671487990291871 0.9979918590265504 0.3296406031424151 T T T
0.3307525010170979 0.3327828210857085 0.3295856297719141 T T T
0.6684742726251924 0.3356546782871062 0.3330923304681005 T T T
0.0019109346605648 0.3326536555520696 0.3295272232532617 T T T
0.3336309558907841 0.6672507272600994 0.3298347907731393 T T T
0.6667678717187738 0.6690810686442172 0.3294076837744955 T T T
0.0024746104042704 0.6694366105643009 0.3295626802378279 T T T
0.6371153551524739 0.6987937593971092 0.5240228976728410 T T T
0.8463804735031564 0.8225225860480304 0.5233034812949077 T T T
0.5205189411720706 0.7857334633545479 0.5425935298310800 T T T
0.6642163672555649 0.3191462012997845 0.4447970674385089 T T T
0.5583077657690193 0.5310349727800029 0.5079339586847094 T T T
0.6334544631766515 0.4112011057411833 0.4673287161001981 T T T

```

0.8846587742796606	0.9427837084982933	0.4899547930634515	T	T	T
0.8958190851570917	0.8812036847141702	0.5732318907715170	T	T	T
0.9164878484998779	0.7463847900708345	0.5065557949104885	T	T	T
0.3834595695360197	0.6789932532877441	0.5617623257493048	T	T	T
0.5924071924435925	0.9028355634990627	0.5775796022742303	T	T	T
0.4960088520824116	0.8419396183085582	0.4961429785963972	T	T	T
0.5546107897538458	0.1945519010896997	0.4518003575902929	T	T	T

Pt catalyst



IS: -252.290694 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000

-0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 1 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.2233510799380369	0.1125178782042130	0.2204993572766617	T	T	T
0.5574805695749446	0.1140779100400393	0.2216335552641083	T	T	T
0.8900892448122524	0.1127630627104794	0.2206310747823992	T	T	T
0.2234456807204774	0.4466371214555786	0.2203277413878142	T	T	T
0.5577454379829887	0.4453267723808297	0.2216455275845697	T	T	T
0.8879322786496828	0.4450901928711326	0.2220072371546510	T	T	T
0.5561330907273649	0.7791123372173678	0.2203324998648305	T	T	T
0.8902899597647274	0.7796101881584138	0.2205501195298050	T	T	T
0.2235111820494289	0.7788898732161647	0.2203365292316494	T	T	T
0.0030387829745153	0.0040925578978602	0.3322204798919158	T	T	T
0.3344663111163130	0.0023802507379410	0.3319017679351633	T	T	T
0.6700106341720167	0.0024598293681135	0.3319685272759829	T	T	T
0.3334625253427319	0.3366290222810054	0.3315245571404468	T	T	T
0.6706800871160017	0.3385844641033581	0.3357701750817264	T	T	T
0.0049761593099276	0.3372038598505916	0.3319515192585202	T	T	T
0.3365777415432956	0.6709404722988018	0.3329131601986992	T	T	T
0.6701554184970329	0.6732084946595722	0.3316516345963881	T	T	T
0.0053421862296777	0.6730987766201308	0.3319200249392937	T	T	T
0.6082363333847050	0.6784342275186740	0.5221168068982083	T	T	T
0.5070416183194927	0.5133653254826107	0.4849282733945085	T	T	T

0.6645997947761344	0.3312336319632414	0.4447985620992149	T	T	T
0.4614137102696008	0.5409114943255356	0.4451246941803355	T	T	T
0.5167437039818483	0.7266337324104791	0.5393506854663517	T	T	T
0.6048603262771316	0.4033642647649492	0.4607211124171343	T	T	T
0.5784598667781794	0.2030204720431506	0.4541120939568409	T	T	T
0.7199902435806409	0.7861768764482826	0.4937100933156381	T	T	T
0.6649424451596745	0.6437005688583710	0.5636819208954507	T	T	T

TS: -251.375873 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777787	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2229493973295128	0.1133624710265100	0.2200602560861928	T	T	T
0.5553637097017897	0.1136654094435023	0.2204047503579981	T	T	T
0.8889777625537081	0.1137359974246399	0.2205503748428770	T	T	T
0.2224564476963984	0.4469215717333835	0.2204216423508367	T	T	T
0.5578218931100416	0.4474539666802707	0.2232804396922077	T	T	T
0.8873356370788805	0.4463351540763266	0.2219022886349208	T	T	T
0.5574126122249439	0.7764141151692191	0.2230484440216371	T	T	T
0.8883700929105199	0.7797912064093122	0.2219235648674222	T	T	T
0.2221857008767281	0.7793449513432327	0.2202175955020430	T	T	T
0.0042065917497742	0.0105990325991146	0.3318144215153723	T	T	T
0.3311046309217682	0.0042027688409699	0.3322542151102024	T	T	T
0.6667065136583957	0.0079231503444913	0.3313415861638385	T	T	T
0.3298597942880841	0.3375942454377476	0.3320692571629724	T	T	T
0.6670766811185816	0.3360164617354420	0.3346894204595728	T	T	T
0.0020506460844236	0.3391440321265391	0.3323239510579818	T	T	T
0.3295891835422829	0.6719509862912897	0.3326043997739467	T	T	T
0.6675220307761545	0.6793590139764110	0.3395839651603488	T	T	T
0.0040626168305695	0.6743812619674768	0.3333373780217970	T	T	T
0.6544111922844300	0.6867582591367065	0.4506369261005352	T	T	T
0.5122091068877397	0.5204913629298595	0.4729874348231606	T	T	T
0.6503881411672322	0.2986328316589324	0.4485751765614043	T	T	T
0.4058971318957757	0.4833713337219215	0.4439932575299348	T	T	T
0.6222035425129296	0.7968531565608962	0.4481710139021051	T	T	T
0.5814232359356956	0.3601749806558749	0.4624060244570742	T	T	T

0.5628830266310618	0.1675086308471623	0.4492679538429764	T	T	T
0.7733106130307578	0.7272346651771660	0.4819643330992236	T	T	T
0.7802620682665897	0.6681052924100818	0.4027077829023005	T	T	T

FS: -248.518937 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

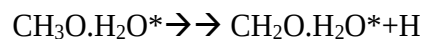
36 1 2 5 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225806355999144	0.1121720154794405	0.2201082006830364	T	T	T
0.5557096269890502	0.1135099945131114	0.2206970496506163	T	T	T
0.8889012253828036	0.1120664707260169	0.2204340813368531	T	T	T
0.2226565354120661	0.4455931291466406	0.2203144113707621	T	T	T
0.5584573672617849	0.4476815360704811	0.2238934662595699	T	T	T
0.8870444687241561	0.4450599669831046	0.2217831554725525	T	T	T
0.5557943708078829	0.7764285428966677	0.2217659128357999	T	T	T
0.8866586373636901	0.7779509823200175	0.2224690896490109	T	T	T
0.2218639915031929	0.7782029946098304	0.2199875760737794	T	T	T
0.0012880453960986	0.0035277055415687	0.3319557973987373	T	T	T
0.3312174868288785	0.0011184907074374	0.3317571770696948	T	T	T
0.6667438840068995	0.0016760672887859	0.3307625990631895	T	T	T
0.3304817542121491	0.3350291363794592	0.3318720166290580	T	T	T
0.6675434865217267	0.3367012785802048	0.3352468965684204	T	T	T
0.0019755691595128	0.3358555155362526	0.3317620716079212	T	T	T
0.3321489733671375	0.6692398834956953	0.3321033359227792	T	T	T
0.6681190422830949	0.6731666132960530	0.3433369696211220	T	T	T
0.0027246884390423	0.6717463955580197	0.3322289807623777	T	T	T
0.6648422200434070	0.6921297670892561	0.4431479690975241	T	T	T
0.5320401145101578	0.5281325639901736	0.4732572010918303	T	T	T
0.6557147526765401	0.3035237183869682	0.4455151106921117	T	T	T
0.4119044663559252	0.4948767526868108	0.4551597902930511	T	T	T
0.5943365561396458	0.3735981395697477	0.4598210571404995	T	T	T
0.5649282484774378	0.1739954826249479	0.4496008804613307	T	T	T

0.6379760753354092	0.8039941667377870	0.4531403325547660	T	T	T
0.7982916345726849	0.7216579273188803	0.4615355111441025	T	T	T



IS: -247.959422 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2219658466789903	0.1111760637896830	0.2198855709916798	T	T	T
0.5565285265111786	0.1145414039364065	0.2216695574501943	T	T	T
0.8885919822201215	0.1117900688202164	0.2205352563508924	T	T	T
0.2221396575360612	0.4453189297474190	0.2199160447302333	T	T	T
0.5568774407769561	0.4456666548019281	0.2225606425562294	T	T	T
0.8876339602563846	0.4445770823679486	0.2212390322016809	T	T	T
0.5565860458449470	0.7767192301078500	0.2222818503900042	T	T	T
0.8866433156834480	0.7776548399514662	0.2220484981100976	T	T	T
0.2233137248125352	0.7790208623948083	0.2195361903730486	T	T	T
0.0017802025397541	0.0040669941601736	0.3318455306323920	T	T	T
0.3295680493400717	-0.0013237017360299	0.3319616212736190	T	T	T
0.6658642782503302	0.0013696650707593	0.3319607629609130	T	T	T
0.3288883940399339	0.3328272562263748	0.3307610379907593	T	T	T
0.6647561822922903	0.3294457097082335	0.3349580598040151	T	T	T
0.0012700469045483	0.3343300384729128	0.3318628160770900	T	T	T
0.3297516896813113	0.6674050572687471	0.3317601938798049	T	T	T
0.6668593553933955	0.6733900100877187	0.3369456945350491	T	T	T
0.0036384779529683	0.6700112309301307	0.3307634488671838	T	T	T
0.7518546244065116	0.7903466094368845	0.4772830432952302	T	T	T
0.6738280715260964	0.3574897153262298	0.4398517452335116	T	T	T
0.6537277628810668	0.6368812405378600	0.4361016767315846	T	T	T
0.7010819898441359	0.8867714593910447	0.4718887341442882	T	T	T

0.6733817189997218	0.4857411510743344	0.4438029131844655	T	T	T
0.7276020469593707	0.7389582450744496	0.5273159472527377	T	T	T
0.7954193753787453	0.3806697928378351	0.4516983872477735	T	T	T
0.9000464302991356	0.8629893671679763	0.4674677925303967	T	T	T

TS: -247.474167 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777787	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111145	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888855	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888855	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655340	0.8892588397134700	0.1098721785789749	F	F	F
0.2213943533663073	0.1128527524039685	0.2204953226396263	T	T	T
0.5561761965329183	0.1132252858414419	0.2216669755292180	T	T	T
0.8864584121496540	0.1115071904076248	0.2216058666825067	T	T	T
0.2237585761883940	0.4448012354801963	0.2210942061851867	T	T	T
0.5541816702931472	0.4448093177352741	0.2222233667416034	T	T	T
0.8863915517536991	0.4451939107849410	0.2211766789075675	T	T	T
0.5557663883099448	0.7807341319314146	0.2215940286699362	T	T	T
0.8884292941568619	0.7787766762157213	0.2199090808858692	T	T	T
0.2210128709109083	0.7777041281013302	0.2192449039247895	T	T	T
0.9976308001776837	0.0011753256824410	0.3317990350818498	T	T	T
0.3284731136993287	0.9987460857581335	0.3300656201145202	T	T	T
0.6652276396663710	0.0017943260903870	0.3369271800093885	T	T	T
0.3309462493428234	0.3372712159378917	0.3348261280290375	T	T	T
0.6688498011946773	0.3383270931163567	0.3347462586388121	T	T	T
0.0010094487605033	0.3380852084709485	0.3311553605249590	T	T	T
0.3311197087250843	0.6705828745888673	0.3320012082329920	T	T	T
0.6674564141028358	0.6721221778511134	0.3321704316706824	T	T	T
0.9998369165193184	0.6714707045685985	0.3317997847471221	T	T	T
0.6888870526876921	0.1802935337479942	0.4671874220107595	T	T	T
0.6368295107148767	0.2876342427058265	0.4448924604444302	T	T	T
0.3319645321304470	0.3078754363023011	0.4458799759024471	T	T	T
0.5991905389301679	0.0720858289995634	0.5013087487806611	T	T	T
0.2238793460754701	0.1869139478144072	0.4506068890628939	T	T	T
0.4399132651785160	0.2894190569963671	0.4514370872304458	T	T	T

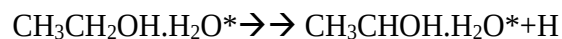
0.8352978521360530	0.2243747028130088	0.4675774885458909	T	T	T
0.6496386548046476	0.0198301498251059	0.4151095667386939	T	T	T

```

FS:          -244.281928 eV
2.8200000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  4          # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1121175078655341  0.8892588397134702  0.1098721785789749  F  F  F
0.2215271275347144  0.1154589542880531  0.2201442179437919  T  T  T
0.5559347372262438  0.1136740780007700  0.2207521864854201  T  T  T
0.8869460283161842  0.1142682965041648  0.2220506031514064  T  T  T
0.2266933299611444  0.4475356555489257  0.2214567949158101  T  T  T
0.5572878244942805  0.4475636584415149  0.2231912912448854  T  T  T
0.8873564557468082  0.4472631702384126  0.2213019299550656  T  T  T
0.5573376015394923  0.7843130333149810  0.2223899834053261  T  T  T
0.8893551284986994  0.7821227563003230  0.2200102578209001  T  T  T
0.2211328048180471  0.7785892228722052  0.2192235466190735  T  T  T
-0.0018415045267146  0.0080002382524529  0.3322885590992355  T  T  T
0.3278496758893538  0.0032321198683708  0.3285790340416944  T  T  T
0.6664383320375428  0.0136254359513607  0.3410938502164303  T  T  T
0.3336452794263969  0.3446049780250948  0.3350113091654982  T  T  T
0.6725879174831856  0.3430453548187278  0.3343502483745131  T  T  T
0.0057692423403834  0.3452140306185194  0.3310570279230733  T  T  T
0.3350884831948073  0.6787463481225779  0.3326776114610205  T  T  T
0.6697810220253728  0.6817140015926534  0.3326701912986667  T  T  T
0.0013813055982331  0.6777028134333537  0.3316069569647401  T  T  T
0.6594487279319683  0.1093774383314431  0.4357980163489232  T  T  T
0.6397082381225248  0.2598014163166131  0.4321165404648959  T  T  T
0.3575766298366921  0.3143779729807941  0.4436611698207967  T  T  T
0.5431727527072598  0.9914157640823474  0.4590733708543104  T  T  T
0.2437136592867208  0.2031518289743055  0.4541778816791373  T  T  T
0.4572520770582327  0.2809383201977216  0.4453952888189190  T  T  T

```

0.7939688845596066 0.1404675691045759 0.4545927421209060 T T T



IS: -269.015946 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 2 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111214	0.8888888888888899	0.11111111111111072	F	F	F
0.2236111292006363	0.1128823021419131	0.2205100234085437	T	T	T
0.5576513607686275	0.1142571187110101	0.2215843772850877	T	T	T
0.8903324075050815	0.1130267695025977	0.2206085994794527	T	T	T
0.2237026498456489	0.4469225958689894	0.2203220088728161	T	T	T
0.5579621026578410	0.4455545508382493	0.2216113024015918	T	T	T
0.8881794123223771	0.4454238689524081	0.2219532237483707	T	T	T
0.5563444528915110	0.7793567423745245	0.2202828254149941	T	T	T
0.8906534975386942	0.7799781377450061	0.2205508250102806	T	T	T
0.2237551471659852	0.7792397571436365	0.2203269455298307	T	T	T
0.0035061921250101	0.0046297299093493	0.3322725781336076	T	T	T
0.3348250876793456	0.0028998395987492	0.3319056091891332	T	T	T
0.6703548055590250	0.0027967820012262	0.3318941757407624	T	T	T
0.3338818856152460	0.3371639859323392	0.3316205432440739	T	T	T
0.6711484156237869	0.3390473106555202	0.3356386491465198	T	T	T
0.0053187746600200	0.3376788275003412	0.3319183684037970	T	T	T
0.3368604814962030	0.6713376212857125	0.3328876739783926	T	T	T
0.6706071432120436	0.6736305058433915	0.3315167339850220	T	T	T
0.0057988211381029	0.6736581352490993	0.3319165953495912	T	T	T
0.6255553147183160	0.6925980491290137	0.5176697408908907	T	T	T
0.7419499003037981	0.6710965651277628	0.5683968574999133	T	T	T
0.5152757352275645	0.5178726235952518	0.4856670737798653	T	T	T
0.6660440474323057	0.3314338996226712	0.4442702056280949	T	T	T

0.4576731857986596	0.5358574636172431	0.4471454435048391	T	T	T
0.6568468684039703	0.5657531741404378	0.6037197284297185	T	T	T
0.8369333343213934	0.6337497263058128	0.5464064381757281	T	T	T
0.8227186079953481	0.8005681899448397	0.5943223050892587	T	T	T
0.5327293383435182	0.7333956603993221	0.5396126647118256	T	T	T
0.6090610974970788	0.4061457078359422	0.4605261044651817	T	T	T
0.5779187241775888	0.2038018657601658	0.4536618644587705	T	T	T
0.7108179881824416	0.7959541400597716	0.4815299062773274	T	T	T

TS: -268.105343 eV
 1.0000000000000000
 8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 2 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444500	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.88888888888888999	0.11111111111111072	F	F	F
0.2235489085014706	0.1130426769687745	0.2201055456581145	T	T	T
0.5559467716259192	0.1132126237732365	0.2203955646598885	T	T	T
0.8895169622382966	0.1133814266290329	0.2206045500383169	T	T	T
0.2228962483269612	0.4466155532627241	0.2204707928717156	T	T	T
0.5582606740977170	0.4471793248561369	0.2230462694137429	T	T	T
0.8877610477947329	0.4458242080761039	0.2219739555111175	T	T	T
0.5581566404724327	0.7763182134811544	0.2231323045272404	T	T	T
0.8891748252971752	0.7794327314169109	0.2219535499156606	T	T	T
0.2228247987162675	0.7789400513429783	0.2202734035086209	T	T	T
0.0049698794268309	0.0095090944085641	0.3318987733602015	T	T	T
0.3321553476722485	0.0036076850793449	0.3322815387093172	T	T	T
0.6678507496393564	0.0071913671269570	0.3315283942558978	T	T	T
0.3311742302577727	0.3371863116335803	0.3319829349778942	T	T	T
0.6682609790152441	0.3354610239211127	0.3345878106615103	T	T	T
0.0029936358755833	0.3384456351066873	0.3325754400857548	T	T	T
0.3310300714089252	0.6711129468416033	0.3327400290827427	T	T	T
0.6692347854870420	0.6783625462698026	0.3396608484569654	T	T	T
0.0053422438034261	0.6735745742710151	0.3333638096974028	T	T	T
0.6498815130535149	0.6876356143710112	0.4548849641182926	T	T	T
0.8070240618016626	0.7473872178158629	0.5013609382361963	T	T	T
0.5029503189837072	0.5207062539780836	0.4730700777903749	T	T	T
0.6371027064536676	0.2891141213462944	0.4504259762756107	T	T	T
0.4010860908091232	0.4895892068149976	0.4423461136181714	T	T	T
0.7633709068201355	0.7718923287428723	0.5486011521884819	T	T	T

0.8472779860236699	0.6434242670162291	0.5074444707909507	T	T	T
0.9251522435268953	0.8746348656242304	0.4845938868941317	T	T	T
0.6128910393375193	0.7927507123284983	0.4462101847986446	T	T	T
0.5680828984259989	0.3513095322140458	0.4626968772847775	T	T	T
0.5462076102249469	0.1591683905973014	0.4469496680843221	T	T	T
0.7730695911407395	0.6578353957278011	0.4025825746664893	T	T	T

FS: -265.226057 eV
 1.0000000000000000
 8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

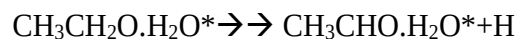
36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1108547298458652	0.8887962635904091	0.1103451313179605	T	T	T
0.2237805534272978	0.1122025161267336	0.2198509813208109	T	T	T
0.5569520633991997	0.1135587529050376	0.2205747969761635	T	T	T
0.8901473387325723	0.1122136647789130	0.2203665004643796	T	T	T
0.2239312910563484	0.4458357986314294	0.2202726819437733	T	T	T
0.5600125901078984	0.4481486312155178	0.2239552411610549	T	T	T
0.8881618791171210	0.4449105637712354	0.2217825657571987	T	T	T
0.5573623283497892	0.7766378931813807	0.2217905805378605	T	T	T
0.8879381231713375	0.7780350812069866	0.2224291343392597	T	T	T
0.2230324423473071	0.7784890713361722	0.2196786798107174	T	T	T
0.0042714495257943	0.0042456092796124	0.3317339499848334	T	T	T
0.3340869678950116	0.0017317419858858	0.3314294127087648	T	T	T
0.6696048392131239	0.0021365697961165	0.3307259952562570	T	T	T
0.3335390256072664	0.3359392808870568	0.3317250212980164	T	T	T
0.6705986208238278	0.3375910806919273	0.3351599219483445	T	T	T
0.0047964465677660	0.3364059126033146	0.3318042933388827	T	T	T
0.3353972706416830	0.6700022937190105	0.3318795153192587	T	T	T
0.6719674743526632	0.6742631623004017	0.3447858025975247	T	T	T
0.0054521398115195	0.6719730656799898	0.3319181505737179	T	T	T
0.6579224847595129	0.6924083138560925	0.4458055692940527	T	T	T
0.8344556006953966	0.7515235135905093	0.4811403083749008	T	T	T
0.5219339327321575	0.5219374656201451	0.4713498443539939	T	T	T
0.6525634711583115	0.2990139049106554	0.4458490424511120	T	T	T
0.4076828910314956	0.4846514382549811	0.4473622191680722	T	T	T
0.8118355132450353	0.7574662320625677	0.5333177199687205	T	T	T

0.8860359371659325	0.6568094488256137	0.4735662120435758	T	T	T
0.9389117528824140	0.8876836148420021	0.4647928074534725	T	T	T
0.6115615658935459	0.7925706248271551	0.4498865453857777	T	T	T
0.5905893702242651	0.3688756016346954	0.4594882118279756	T	T	T
0.5602530731504275	0.1694408153937251	0.4481261572903323	T	T	T



IS: -264.669565 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2230139623287002	0.1111068734736875	0.2200037277960689	T	T	T
0.5578038956451863	0.1138504857888947	0.2213044827478967	T	T	T
0.8903148248814006	0.1118885201071151	0.2206610358532757	T	T	T
0.2236202796626401	0.4457380892410967	0.2198088528239950	T	T	T
0.5583703236035120	0.4459908869819600	0.2223210803877009	T	T	T
0.8881501287627458	0.4440900549675391	0.2216025951884504	T	T	T
0.5582406039999910	0.7776034337849751	0.2219724884945364	T	T	T
0.8873101827944936	0.7774908542256611	0.2226622182289546	T	T	T
0.2238543652701210	0.7789224191946218	0.2195374593044832	T	T	T
0.0065012442767696	0.0054878881797649	0.3323534101333223	T	T	T
0.3349342852700161	0.0009228526197163	0.3320064684163739	T	T	T
0.6703825411414002	0.0030174975495214	0.3320933109013851	T	T	T
0.3328083677576643	0.3339704027830663	0.3304468397873634	T	T	T
0.6716460114354561	0.3333948151624639	0.3348345142045162	T	T	T
0.0057649442920393	0.3358970166951849	0.3318041584256051	T	T	T
0.3342853697346300	0.6693304102771762	0.3313227323512109	T	T	T
0.6721530190169958	0.6749054964815357	0.3374566992519874	T	T	T
0.0080734220976453	0.6716348255577174	0.3311372242369828	T	T	T
0.6912918909045729	0.7700706428083208	0.4823491018230257	T	T	T
0.8935691382012223	0.8737554688059532	0.4978450151162122	T	T	T
0.6661360722542398	0.3506997953976025	0.4404801501436566	T	T	T
0.6396533513194882	0.6276127745899203	0.4359874540780666	T	T	T

0.6450079395128228	0.8638472020045285	0.4651638562022100	T	T	T
0.6566346412930955	0.4723358572099841	0.4450666675621591	T	T	T
0.9221683332721611	0.9767567340781582	0.5353233541384554	T	T	T
0.9409340295378286	0.7815783851814118	0.5149467416651845	T	T	T
0.9734508698665181	0.9456285124489909	0.4544317261627739	T	T	T
0.6112733818877913	0.7019312408357763	0.5261258285357613	T	T	T
0.5476682304597986	0.2476710006553944	0.4526881110487153	T	T	T

TS: -264.243345 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2244237564857841	0.1094219277104926	0.2197701086443971	T	T	T
0.5592877566052792	0.1110107870831882	0.2234929698068342	T	T	T
0.8884363166229008	0.1086505527721897	0.2215982601096158	T	T	T
0.2230172292414849	0.4430052856153708	0.2198111692617317	T	T	T
0.5576460527322809	0.4429944979669784	0.2214861788824578	T	T	T
0.8881377273823148	0.4416799014848394	0.2216570755554059	T	T	T
0.5575619990697049	0.7770157361533592	0.2213324955555436	T	T	T
0.8885496052147772	0.7751785830390361	0.2212466008137994	T	T	T
0.2242707788215981	0.7772190740558429	0.2197911936578052	T	T	T
0.0073528497631017	0.9994279243098276	0.3310114864561413	T	T	T
0.3337074717019632	0.9951081596091313	0.3326925096929827	T	T	T
0.6693650074997777	0.9943456704175873	0.3374907743604965	T	T	T
0.3323221979396465	0.3285366056559056	0.3312749780560509	T	T	T
0.6693443147973213	0.3287358692671987	0.3356967471834480	T	T	T
0.0041746394236171	0.3303472159363636	0.3319408519109288	T	T	T
0.3317837893654669	0.6613656694289176	0.3310879696725735	T	T	T
0.6697739095813731	0.6640410359337139	0.3338351670026967	T	T	T
0.0054532266303724	0.6651045130708724	0.3313422192439788	T	T	T
0.6833252916516059	0.8273880818891186	0.4690368229752266	F	F	F
0.8649081863132153	0.9608684414780981	0.4979296000723821	T	T	T
0.6563088320204287	0.3552207299929648	0.4479805010314237	T	T	T
0.6588673495467319	0.6788169336869956	0.4422359567877479	T	T	T
0.6664328404828481	0.4773737248617422	0.4522317264463638	T	T	T
0.8749768062349972	0.0930158269428958	0.5078214364654912	T	T	T

0.8793337062279605	0.9035286751268998	0.5439252756654156	T	T	T
0.9766102956892198	0.9804301457871034	0.4657206319097327	T	T	T
0.5608529075024222	0.8217097047407194	0.4906828469730513	T	T	T
0.5267494612949761	0.2674094325705738	0.4543211471743120	T	T	T
0.6739846698072256	0.9497883216983283	0.4154066382904489	F	F	F

FS: -261.067497 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

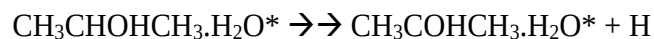
36 2 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2232466330119758	0.1132207694123813	0.2206736379293392	T	T	T
0.5569885654368263	0.1143619484418542	0.2215155529565654	T	T	T
0.8899370595258297	0.1132523831395502	0.2206313275400337	T	T	T
0.2232241517682145	0.4468579179983466	0.2202687028797097	T	T	T
0.5574827843198807	0.4457189290821525	0.2216242900011519	T	T	T
0.8876230964009965	0.4456256329636909	0.2219079509581838	T	T	T
0.5560954948196024	0.7796482179158176	0.2201879342775154	T	T	T
0.8901703366293261	0.7802632287732008	0.2206423663064416	T	T	T
0.2231389215130240	0.7795021700875983	0.2202731919535298	T	T	T
0.0024239881026856	0.0052186760788968	0.3324718919491558	T	T	T
0.3337594075223475	0.0034741780098730	0.3321041766739767	T	T	T
0.6693178570293793	0.0035067735802930	0.3317657515078992	T	T	T
0.3334642846077157	0.3378840530239047	0.3318103386676670	T	T	T
0.6703786097455882	0.3400243919422470	0.3356417891099594	T	T	T
0.0042935402694516	0.3382243843598469	0.3318852252656829	T	T	T
0.3357087760912719	0.6719637887908422	0.3321916472784873	T	T	T
0.6689739314312823	0.6735263585439020	0.3316118710440273	T	T	T
0.0045246691739239	0.6738234684610521	0.3320326541364060	T	T	T
0.6889333378076540	0.7239504947955870	0.5208232150637560	T	T	T
0.8888682772623041	0.8327290436506988	0.5097389287711886	T	T	T
0.6565278249558540	0.3196979336774082	0.4464587829342867	T	T	T
0.5904797532320606	0.5617405667642753	0.5073664057991848	T	T	T
0.6383213515205167	0.4179055227898313	0.4664943775238048	T	T	T
0.9574359452730586	0.9125878125237590	0.5531832439718374	T	T	T

0.9465908086208221	0.7479875928116747	0.4946775710060797	T	T	T
0.9137171815668863	0.9332529999756475	0.4711671738559158	T	T	T
0.6244455882727264	0.7982467413261297	0.5426231753995153	T	T	T
0.5402344739350864	0.2061338238662824	0.4514317714163283	T	T	T



IS: -285.759984 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 3 2 10 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2241662382673191	0.1124489846543755	0.2205065138381817	T	T	T
0.5582020874478527	0.1138518773035094	0.2215577617020762	T	T	T
0.8908375321672017	0.1125224534656158	0.2205709019102667	T	T	T
0.2242022701109724	0.4463514062927606	0.2203074382517433	T	T	T
0.5584632968007240	0.4450710073864774	0.2216990773040698	T	T	T
0.8885652281734961	0.4448517647685374	0.2219896003624399	T	T	T
0.5567479606480968	0.7788010304535284	0.2202498082629024	T	T	T
0.8910751476268339	0.7794463209083926	0.2205038656169720	T	T	T
0.2242199133327172	0.7787059849789247	0.2203199755341365	T	T	T
0.0046225039514117	0.0036081716848597	0.3321993387099936	T	T	T
0.3358539523950210	0.0018186024175952	0.3318608661533134	T	T	T
0.6712569697703927	0.0016597984963730	0.3317865505920566	T	T	T
0.3351051009060980	0.3362863354823863	0.3317131002546195	T	T	T
0.6720603797760099	0.3377282033321929	0.3357854730596238	T	T	T
0.0062721715133917	0.3365111574594457	0.3318421097013646	T	T	T
0.3377524619397198	0.6701390102141919	0.3328527882781617	T	T	T
0.6715380347813846	0.6726322092623155	0.3315365451297428	T	T	T
0.0066278498160739	0.6724400685748145	0.3318766784008378	T	T	T
0.6504679441581595	0.7014033831952275	0.5145638560525031	T	T	T
0.7582615869279201	0.6740378461831497	0.5675268964058380	T	T	T
0.5405218020168743	0.7874150273928069	0.5382074977992861	T	T	T
0.5267986290813264	0.5206293258768098	0.4875318646469242	T	T	T

0.6667639780664685	0.3265279317229633	0.4444094952205239	T	T	T
0.4656417397432653	0.5358571612615817	0.4495049167891993	T	T	T
0.6664408525508535	0.5853543442079764	0.6056756782900782	T	T	T
0.8358067065212795	0.6119808655215341	0.5484767230446528	T	T	T
0.8553107720147090	0.8060478280984841	0.5891666567838081	T	T	T
0.6123990379918539	0.4030992579390498	0.4614716258096023	T	T	T
0.5771347846218245	0.1991164545639492	0.4534325021094793	T	T	T
0.4463169972262210	0.7046894820970432	0.5768372293668805	T	T	T
0.4604910177434850	0.7994513926108737	0.4986305866448740	T	T	T
0.6324733453944722	0.9250277463837011	0.5571371550377917	T	T	T
0.7436612770734172	0.7859654899008617	0.4756083254801000	T	T	T

TS: -284.597112 eV
 1.0000000000000000
 8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 3 2 10 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2239926720497820	0.1151350635648214	0.2202785100192628	T	T	T
0.5558530180114190	0.1147461156900818	0.2199561468142122	T	T	T
0.8903843600332877	0.1152647022334108	0.2202329193630490	T	T	T
0.2236853357210933	0.4480292227335241	0.2205408413793393	T	T	T
0.5588925696312188	0.4489662612019814	0.2235285384966943	T	T	T
0.8885510965711916	0.4479213663254527	0.2217168109731134	T	T	T
0.5581406676694911	0.7772804776579818	0.2228911109966134	T	T	T
0.8893117210827626	0.7813226419460761	0.2221024819131330	T	T	T
0.2229500834486231	0.7804537953209305	0.2203820222837791	T	T	T
0.0060554051001773	0.0133998175991934	0.3321142928322658	T	T	T
0.3330012076282003	0.0073039400216786	0.3321760773703488	T	T	T
0.6693614539183983	0.0110424617034752	0.3299438768775786	T	T	T
0.3329847713316738	0.3416485775754694	0.3329974353507339	T	T	T
0.6692510675036587	0.3402329574586176	0.3341762317737889	T	T	T
0.0042768984434929	0.3425399788731696	0.3322796451013446	T	T	T
0.3319301193981588	0.6747460418081772	0.3326934285321528	T	T	T
0.6694836215408984	0.6826040928945289	0.3410868190691332	T	T	T
0.0052116193026279	0.6774454086419226	0.3335841866867497	T	T	T
0.6586443176720636	0.6802956202391641	0.4665892546353305	T	T	T
0.8245031052785947	0.7103220008454727	0.5043722308666574	T	T	T
0.6083974696849097	0.8256940280012302	0.4772748573623318	T	T	T
0.5161688747343049	0.5043477500460156	0.4761878350574946	T	T	T
0.6419782806002416	0.2730316041630800	0.4495963245046966	T	T	T
0.4145803887545298	0.4798432109973803	0.4461466533122120	T	T	T

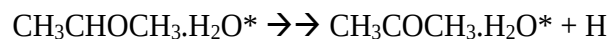
0.7922629618946999	0.7063038789950298	0.5561753431881087	T	T	T
0.8614141835943983	0.6054326148068228	0.4947311162807821	T	T	T
0.9414440895616423	0.8449464013324359	0.4932838947839215	T	T	T
0.5806294062176605	0.3418192811231222	0.4633066026467958	T	T	T
0.5430043076864521	0.1478992414435609	0.4415443731587274	T	T	T
0.5899144978385493	0.8327635923461258	0.5298342501628639	T	T	T
0.4806306462397316	0.7934081788754739	0.4526887497469900	T	T	T
0.7172790604367947	0.9597988026127311	0.4609147846518695	T	T	T
0.7915260337011674	0.6880377815480117	0.4021874137562307	T	T	T

```

FS:          -281.760109 eV
1.0000000000000000
 8.4600000381469727  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-4.2300004959106445  7.3265748023986816  0.0000000000000000
-0.0000009058180126 -0.0000015689229258  20.7227001190185547
36 3 2 9          # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.1111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.1111111111111072 F F F
0.2225360566194121 0.1124299881180544 0.2200736916113104 T T T
0.5555142117702926 0.1132687992091179 0.2202355596459195 T T T
0.8892498544131678 0.1122774357987426 0.2201282642628154 T T T
0.2229117879759191 0.4454554363955574 0.2202937192927098 T T T
0.5591235378133914 0.4482062558490417 0.2245695588504416 T T T
0.8871490660046478 0.4452111069087678 0.2216486683821586 T T T
0.5561529527275191 0.7753563569774771 0.2219631421374993 T T T
0.8860280476522698 0.7777862603538199 0.2229800683638522 T T T
0.2219010248241658 0.7780381424172232 0.2199077581038243 T T T
0.0013834972162854 0.0040149418571074 0.3320574838786278 T T T
0.3308422432225748 0.0014695309783237 0.3313245976276136 T T T
0.6672649909659852 0.0022228790081152 0.3296332431206662 T T T
0.3309563004351009 0.3361159082713929 0.3321992959266485 T T T
0.6669371513485365 0.3379565571157928 0.3349186848380100 T T T
0.0021632739326238 0.3366821086604325 0.3315652733636740 T T T
0.3325129711171250 0.6696891542446185 0.3318905132006201 T T T
0.6684425934007487 0.6759646088799434 0.3484016663183866 T T T
0.0020364712413868 0.6719719761671555 0.3320591826499606 T T T
0.6602054431866200 0.6857616003108474 0.4513531588458173 T T T
0.8407950817036701 0.7247866484311167 0.4804610406623597 T T T
0.6052509059465176 0.8226115209484470 0.4741242324984779 T T T
0.5248762673650170 0.5070000750133227 0.4728661970339788 T T T
0.6476674700397516 0.2841843459252553 0.4448091861788759 T T T
0.4100424877457592 0.4735177762967512 0.4499864294236008 T T T

```

0.8266557135712270	0.7150189509346619	0.5335014801844830	T	T	T
0.8832268181163969	0.6281870348775526	0.4640942008652467	T	T	T
0.9481195956290187	0.8632877807323392	0.4677317432937647	T	T	T
0.5898086382247859	0.3577274469193921	0.4593352468244843	T	T	T
0.5500228359712244	0.1563006011229617	0.4444213192745927	T	T	T
0.6032484122089138	0.8214792167727318	0.5274068477588908	T	T	T
0.4686337945370006	0.7871333099825371	0.4566444068578990	T	T	T
0.7041674702947062	0.9612101686361098	0.4576883361295620	T	T	T



IS: -281.375524 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2237861717622513	0.1128615111062343	0.2199882068827674	T	T	T
0.5582264157985123	0.1155286248181735	0.2214090642625682	T	T	T
0.8907745064285276	0.1137709879439406	0.2207148643770357	T	T	T
0.2239750122958065	0.4473883992327379	0.2197896853372221	T	T	T
0.5588047803573782	0.4476616918769421	0.2221940828336810	T	T	T
0.8885715650545019	0.4459987991484364	0.2217377880668341	T	T	T
0.5585575044191848	0.7795918845509737	0.2218187424270549	T	T	T
0.8877753543994475	0.7793958670319505	0.2227857333976779	T	T	T
0.2242226236484615	0.7806566375195216	0.2195888419043041	T	T	T
0.0080113568075964	0.0092173738531733	0.3323402864119278	T	T	T
0.3364290898101995	0.0048831356379109	0.3322628899491511	T	T	T
0.6716539032989383	0.0068665051581691	0.3323771790773312	T	T	T
0.3338295183877854	0.3374491658936135	0.3304411563438457	T	T	T
0.6729770581987372	0.3379980483537929	0.3350314463527084	T	T	T
0.0067561093983071	0.3393990111240123	0.3319105579755298	T	T	T
0.3352171101173702	0.6727543267184833	0.3312412181658712	T	T	T
0.6741370868935876	0.6786961248167853	0.3368269461647309	T	T	T
0.0096196556030536	0.6755347417634461	0.3313347095236788	T	T	T
0.6799428583823228	0.7828219398148593	0.4796047454786650	T	T	T
0.8748633768576138	0.8679937181561502	0.5045150091613220	T	T	T
0.5370995819116440	0.7051910963131556	0.5331887578039338	T	T	T
0.6650039336279081	0.3571051707403640	0.4412926288359193	T	T	T

0.6389163684472021	0.6368774785699417	0.4350085490950665	T	T	T
0.6559107196672985	0.4772403728736043	0.4456764605911157	T	T	T
0.9063261310580987	0.9829282102422405	0.5369448041175280	T	T	T
0.8949235229756295	0.7669203366829469	0.5311576751890310	T	T	T
0.9721747390020905	0.9198329548856685	0.4639540652080665	T	T	T
0.5474658794997147	0.5989186657823453	0.5602759842962400	T	T	T
0.5582976062700585	0.8136675742421116	0.5672744874819503	T	T	T
0.3990621592626084	0.6456689136453627	0.5129755717012321	T	T	T
0.5455973390979159	0.2548106774352516	0.4530609390887030	T	T	T
0.6640961295667969	0.8878729900735022	0.4529350817197064	T	T	T

TS: -281.048319 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2244721637331537	0.1107278634660673	0.2197349811115643	T	T	T
0.5594191375179349	0.1126135382006481	0.2233960177411234	T	T	T
0.8886254850904294	0.1101783888162231	0.2215811379807278	T	T	T
0.2230797359147019	0.4442262140830522	0.2196778429761750	T	T	T
0.5581224742587594	0.4449711795431455	0.2217622399728114	T	T	T
0.8882686943524334	0.4432181985018246	0.2217488205696796	T	T	T
0.5578188674815365	0.7783758581989417	0.2212557921434666	T	T	T
0.8883580335628807	0.7764522199548196	0.2215134521050288	T	T	T
0.2243317590524470	0.7786527392345306	0.2197267643575600	T	T	T
0.0082362586272566	0.0026127895715504	0.3310717088046644	T	T	T
0.3345259584111915	0.9982551062853346	0.3326240627502202	T	T	T
0.6694570533884772	0.9979295903305356	0.3371169265988883	T	T	T
0.3329497947257352	0.3315377434286688	0.3310987241617696	T	T	T
0.6704341307863686	0.3326434716436637	0.3358251377178902	T	T	T
0.0047686798109225	0.3332741248245839	0.3319516325138423	T	T	T
0.3316725732196133	0.6639931779573729	0.3308187131113698	T	T	T
0.6711078433805042	0.6686723026618822	0.3344973821029953	T	T	T
0.0061785450895755	0.6681056852772329	0.3315126648534914	T	T	T
0.6765689754835122	0.8313020813869372	0.4689538794895185	T	T	T
0.8666302823236691	0.9632837564048629	0.4932871492880011	T	T	T
0.5173290852971917	0.8149974342720583	0.5078420896490243	T	T	T
0.6533668815351348	0.3592831770844995	0.4487020016624115	T	T	T
0.6502373807552786	0.6812888159289017	0.4407928788822346	T	T	T
0.6610738912682095	0.4806391642656038	0.4521996721397343	T	T	T

0.8841376460611343	0.0980469362954253	0.5040441825939084	T	T	T
0.8886159699105391	0.9062182886691090	0.5380655247774584	T	T	T
0.9695306232329202	0.9777309010690587	0.4576295854323931	T	T	T
0.5074022772627629	0.7403113408760191	0.5526945040240463	T	T	T
0.5374198288199565	0.9493606878731882	0.5210978777870707	T	T	T
0.3892935962338200	0.7375684659783275	0.4809514039265181	T	T	T
0.5235361509375878	0.2703596306370173	0.4537273144385807	T	T	T
0.6696374188952063	0.9481459255295945	0.4155852370284521	T	T	T

FS: -278.039190 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2237233535270654	0.1120289866675800	0.2206485853495069	T	T	T
0.5576660391141453	0.1133815586760666	0.2215395777983831	T	T	T
0.8904989354363068	0.1121314692095869	0.2206708954887880	T	T	T
0.2235266338361788	0.4457210129383678	0.2202624588035587	T	T	T
0.5579707285703775	0.4448069234307466	0.2214415105847564	T	T	T
0.8881099343406289	0.4444139720484478	0.2220670815365847	T	T	T
0.5565940878989585	0.7786333373618894	0.2201618662875151	T	T	T
0.8907691011269224	0.7791456982367380	0.2206300463467438	T	T	T
0.2235499632789565	0.7783801851088029	0.2202598376427517	T	T	T
0.0039692064098396	0.0029254371140199	0.3325329069668502	T	T	T
0.3351459111949461	0.0011281274127479	0.3320574486979442	T	T	T
0.6706955619313222	0.0012826432371637	0.3317967591622935	T	T	T
0.3349383649169959	0.3357631544705479	0.3315862234994337	T	T	T
0.6721074983056917	0.3380094674916517	0.3356527478865570	T	T	T
0.0055968069898643	0.3357950707978671	0.3320618424863668	T	T	T
0.3371728278341103	0.6696406657742694	0.3321154405168148	T	T	T
0.6706101113055433	0.6715397671456621	0.3314904325656812	T	T	T
0.0059352032913011	0.6716604887054038	0.3321097613931099	T	T	T
0.6345733094115091	0.6970343503943346	0.5186213224820394	T	T	T
0.8387122050305816	0.8096567145868010	0.5157980809285826	T	T	T
0.5317817860619386	0.7890448287833461	0.5411466159206774	T	T	T
0.6512620293850447	0.3155935296116223	0.4461973117839590	T	T	T
0.5510461510611556	0.5346524813067957	0.5022354502763631	T	T	T
0.6227367417112151	0.4084765153156369	0.4655561544499995	T	T	T

0.8753497816559294	0.8897527884585567	0.4705434213211528	T	T	T
0.8936698182096470	0.9079393485033839	0.5557311467341787	T	T	T
0.9012584706021027	0.7233949527128197	0.5146365976685884	T	T	T
0.5521412465329035	0.8134622120811820	0.5934958370739545	T	T	T
0.5871088043532523	0.9236844812825294	0.5182122392472073	T	T	T
0.3859227123359500	0.7040362795247311	0.5308708127517994	T	T	T
0.5372009149593064	0.1987238989220605	0.4490083651679169	T	T	T

OH dissociation

Co catalyst



IS: -285.285414 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310

36 1 2 6 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2234193447311949	0.1143179873140174	0.2247939046338801	T	T	T
0.5550757906312593	0.1107233341915876	0.2228272131470143	T	T	T
0.8888011298322123	0.1110962830085460	0.2231238544994817	T	T	T
0.2234529860338234	0.4427533805116012	0.2247516245129026	T	T	T
0.5520380232714621	0.4430025139576398	0.2245216468312412	T	T	T
0.8890685506653752	0.4449262692993985	0.2228693689480501	T	T	T
0.5554896407959615	0.7779373648345066	0.2229735092588254	T	T	T
0.8888918327486762	0.7778039204076513	0.2231475543495743	T	T	T
0.2212309893514107	0.7777115537877293	0.2229238418925799	T	T	T
0.9971461308261782	0.9977459201054589	0.3294022052993308	T	T	T
0.3331175028340972	0.9971967810443737	0.3289678942454280	T	T	T
0.6662398307160481	0.9998429117670887	0.3296142220519405	T	T	T
0.3332468082713342	0.3331086535275334	0.3373828817843669	T	T	T
0.6688371123733139	0.3327371851483588	0.3284014793080114	T	T	T
0.9970898441806544	0.3337420203227645	0.3292702378915677	T	T	T
0.3326884317920804	0.6691819297522520	0.3288930018156348	T	T	T
0.6682513920451196	0.6686681474092063	0.3290957961196682	T	T	T
0.9991764332530703	0.6657328693015471	0.3299271946786209	T	T	T

0.6799596887318869	0.1988756014059268	0.5389320850923032	T	T	T
0.6857792609966901	0.3751909748573938	0.5043502113238063	T	T	T
0.3331803929013067	0.3315411102978933	0.4535573490957040	T	T	T
0.7776271021250174	0.4155094381989500	0.4612028264912911	T	T	T
0.5683503623492921	0.1527346353808477	0.5837953035660816	T	T	T
0.3262286613267942	0.4524431720298710	0.4696227855879386	T	T	T
0.4665750288342232	0.3473436459819448	0.4740912095092268	T	T	T
0.8325673476258715	0.2404331914113972	0.5612222465598822	T	T	T
0.6301147467922972	0.0694633195129654	0.5002856604313243	T	T	T

TS: -284.603391 eV

1.0000000000000000

7.4700000000000015 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.7350000000000008 6.4692097662697670 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903333

36 1 2 6 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888856	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222218	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225047412221987	0.1118002652048710	0.2227246380141860	T	T	T
0.5562795328754861	0.1140006661369500	0.2235066358462287	T	T	T
0.8888806674379083	0.1114570029738574	0.2224688170493104	T	T	T
0.2220572392977258	0.4446756948589335	0.2229074451089269	T	T	T
0.5584382134295384	0.4454788257631260	0.2262508544966620	T	T	T
0.8856683373030714	0.4430537668456912	0.2240596249661636	T	T	T
0.5558760574683019	0.7761041025788898	0.2239149842700832	T	T	T
0.8864121761768839	0.7770510629472133	0.2237655551280501	T	T	T
0.2215707764177403	0.7780220554272974	0.2221459356569585	T	T	T
0.0027407983844401	0.0031453084199367	0.3287333557337349	T	T	T
0.3299135029200942	0.9968330203894734	0.3279794880910753	T	T	T
0.6663984255055387	-0.0004162717433976	0.3275998069795756	T	T	T
0.3287167891553590	0.3338326688661484	0.3296361679724638	T	T	T
0.6671588122808334	0.3279806341046295	0.3354310421392699	T	T	T
0.0015975096361669	0.3331477689444718	0.3288961307580519	T	T	T
0.3295055920435467	0.6647159851085119	0.3295473168642843	T	T	T
0.6699769448895223	0.6727969317372026	0.3350103629345155	T	T	T
0.0032744875343647	0.6690149549378299	0.3283067270755574	T	T	T
0.6406663146291955	0.7895588482297246	0.4981184075376700	T	T	T
0.6724575700424400	0.3288343494892495	0.4503928859728063	T	T	T
0.6072133959510173	0.6273310733799220	0.4492355166090156	T	T	T
0.5758063446618831	0.8817460572461743	0.4748932186410483	T	T	T
0.6455149139804016	0.4493899356701469	0.4608570574455992	T	T	T
0.5644632635481636	0.7244443932067577	0.5507877012624707	T	T	T

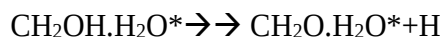
0.5524403639435868	0.2028546566746800	0.4681486115208095	T	T	T
0.8073623199641007	0.8935807509660552	0.5068230798902692	T	T	T
0.4474201553985799	0.5707356085916947	0.3973094338926200	T	T	T

```

FS:          -281.65873 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 1 2 5      # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2255553871472584 0.1133467603199307 0.2255991899440375 T T T
0.5546820948159666 0.1113123226374773 0.2253279968284934 T T T
0.8897888034507648 0.1111356375742277 0.2220940570992878 T T T
0.2226082928475180 0.4437436245236542 0.2226998281521095 T T T
0.5532500527593625 0.4410592326705219 0.2256797233996735 T T T
0.8854548405869238 0.4434896445651412 0.2233222306030223 T T T
0.5551215412226582 0.7765108291663123 0.2223276355056768 T T T
0.8890453675891827 0.7772563020608253 0.2226255659491813 T T T
0.2228890167583831 0.7805955158047506 0.2236335293285007 T T T
0.9989732014930497 0.9967392563882360 0.3281731045961588 T T T
0.3329721187399736 0.9979315789876390 0.3362569546802811 T T T
0.6714543791218139 0.9953196710664759 0.3279188026313917 T T T
0.3265420580870259 0.3401863465869349 0.3338162474759613 T T T
0.6684490875586564 0.3320271569904663 0.3362644112074316 T T T
0.9970589790136217 0.3326094337040434 0.3273854085933909 T T T
0.3329031797938826 0.6686361779212310 0.3279090792283790 T T T
0.6702889988616039 0.6675808134184411 0.3283285510673606 T T T
-0.0003373125040976 0.6664634848188908 0.3290416942461308 T T T
0.5892547301663273 0.0760936349769279 0.4813429119430632 T T T
0.5112731203382783 0.1543215523064063 0.4256356000043882 T T T
0.3307702611170873 0.3560649641430222 0.4502891468235757 T T T
0.1892483453086485 0.2705286353556917 0.4676141180626691 T T T
0.4018137737495376 0.2682539763169724 0.4530987109619931 T T T
0.6490412780754158 0.9794209394955591 0.4577872086150454 T T T

```

0.4641389153814758	0.9793147364085749	0.5196578777932257	T	T	T
0.7155351710128682	0.2058575152119810	0.5111180620343443	T	T	T



IS: -280.925185eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225453122191078	0.1121720060319664	0.2221019507083923	T	T	T
0.5579566016955193	0.1105751914441753	0.2240515270553356	T	T	T
0.8863234036532515	0.1091783356425540	0.2237307742723703	T	T	T
0.2238945232510389	0.4465443435955855	0.2232259794907886	T	T	T
0.5560560806605740	0.4450489125880028	0.2226044727525240	T	T	T
0.8905900478764248	0.4478583927577436	0.2232719768984885	T	T	T
0.5555406820829993	0.7798262925409476	0.2254851716207619	T	T	T
0.8906931303864581	0.7769969010011918	0.2229909821598473	T	T	T
0.2205035545701352	0.7760951774417242	0.2245390545153818	T	T	T
0.0037904907642582	0.0002287289551041	0.3282135808766047	T	T	T
0.3334948580218991	0.0044467886478702	0.3277339622166678	T	T	T
0.6696895429382763	0.0024742478480141	0.3356962635641875	T	T	T
0.3336885230666078	0.3323102459019628	0.3284903800473706	T	T	T
0.6677830008334287	0.3365377179422415	0.3287896161307597	T	T	T
0.9998993220068202	0.3308333325019818	0.3273488056902791	T	T	T
0.3322719565925131	0.6648286676210207	0.3321120027091961	T	T	T
0.6703134349945848	0.6648639799524226	0.3285922278178233	T	T	T
0.0027992405193894	0.6662404140058987	0.3378473823881975	T	T	T
0.0776899846033701	0.6718350011067848	0.4424460374497005	T	T	T
0.6605430243341323	0.9882173173422596	0.4554974622088718	T	T	T
0.2662932633192857	0.6546173429362888	0.4527156936522126	T	T	T

0.9509394528778073	0.5459683912770211	0.4731899803565176	T	T	T
0.5234150581807447	0.8648384442219482	0.4654380589630733	T	T	T
0.1175188280338775	0.8202003624901497	0.4678855226196971	T	T	T
0.7632333867351717	0.9483881306834858	0.4676309803394126	T	T	T
0.2255721316891362	0.5077874021433171	0.4557153547759036	T	T	T

TS: -280.384576 eV
 2.490000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 5 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222186	0.1111111111111122	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555468	0.1111111111111122	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888598	0.1111111111111122	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222099	0.4444444444444273	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555437	0.4444444444444273	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888601	0.4444444444444273	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555567	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888853	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333351	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666639	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.00000000000000143	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224578314875165	0.1131596477559253	0.2224368201807420	T	T	T
0.5583645642115139	0.1111909969726437	0.2236313065859014	T	T	T
0.8860737777035991	0.1095415371709385	0.2238205027419564	T	T	T
0.2238073140459082	0.4468765682010714	0.2229216107138109	T	T	T
0.5559031005345507	0.4454235811435954	0.2226074108153086	T	T	T
0.8908680960457163	0.4483063718457939	0.2234557956484468	T	T	T
0.5556634540580232	0.7804646686287847	0.2248282984740312	T	T	T
0.8904604186859952	0.7779000731591021	0.2226992453768373	T	T	T
0.2207066091906494	0.7776140911187455	0.2237955468889938	T	T	T
0.0032035977033217	-0.0011238712758714	0.3284095322905283	T	T	T
0.3334963759074654	0.0059316423334504	0.3272556101664034	T	T	T
0.6688446512739682	0.0019470753797007	0.3353701193660686	T	T	T
0.3317561913599266	0.3332029932546244	0.3302007855148955	T	T	T
0.6673172578115887	0.3369349288427620	0.3283544572701286	T	T	T
-0.0003962901419882	0.3288181302267590	0.3280581680558104	T	T	T
0.3315933479677662	0.6665861067979816	0.3309309412673418	T	T	T
0.6707674913679101	0.6652315853017681	0.3281420631286679	T	T	T
0.0036243427837698	0.6658351751356164	0.3372651837930561	T	T	T
0.0916677245324751	0.6514316554409252	0.4404048184476209	T	T	T
0.6355349018763410	0.9760376835474215	0.4516254550309605	T	T	T
0.2695268951191095	0.6301235229144505	0.4438207196078568	T	T	T
0.9577084172472190	0.5200145203472596	0.4666127952363964	T	T	T
0.5015986712825330	0.8416703438032691	0.4582046268282692	T	T	T
0.1266797554279327	0.7987079266460181	0.4661850757052675	T	T	T

0.7448941723375724	0.9585432372927430	0.4734713423077155	T	T	T
0.2407819630794737	0.4700353765829216	0.3986381858129102	T	T	T

FS: -277.553444 eV

2.490000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

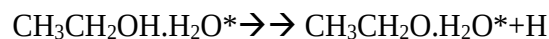
36 1 2 4 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2222428486691921	0.1129961743276284	0.2232887950528966	T	T	T
0.5552193398523556	0.1108653626997586	0.2224173867862182	T	T	T
0.8890380479967176	0.1131975011945192	0.2231133091156765	T	T	T
0.2230712304290123	0.4427917711792629	0.2265930766425968	T	T	T
0.5532211629718808	0.4438030508337664	0.2234429766131414	T	T	T
0.8909613467272265	0.4457256362227648	0.2241747760977907	T	T	T
0.5522722697491834	0.7765645176263120	0.2234439586997929	T	T	T
0.8880571780999736	0.7775035358661491	0.2214196987491508	T	T	T
0.2200217946748684	0.7747923688929697	0.2240284321380171	T	T	T
0.9976151865011363	0.9983484150037286	0.3276350103438248	T	T	T
0.3346522427562488	0.9975648221073686	0.3274126795617192	T	T	T
0.6664346902988885	0.9995107168671085	0.3287447643293263	T	T	T
0.3407945397829084	0.3264041518590852	0.3347619958556112	T	T	T
0.6683518307244689	0.3307819600201852	0.3277457331943274	T	T	T
0.9992752537549464	0.3322401880976115	0.3341645954749581	T	T	T
0.3320421175097081	0.6667272478044994	0.3343573688225027	T	T	T
0.6680248360188270	0.6692584265322843	0.3278912014211861	T	T	T
0.9944496923660887	0.6718843917657531	0.3329126856381558	T	T	T
0.0343307349917572	0.6227932774742142	0.4370999562320356	T	T	T
0.3530615856450576	0.3400917867698082	0.4526150790797937	T	T	T
0.1430045743566220	0.5182291324951260	0.4223798875397006	T	T	T
0.2674290284809526	0.4079447695474250	0.4598455690372565	T	T	T
0.2727234401592369	0.2000152572262457	0.4718017130127873	T	T	T
0.8864633981333154	0.5239555760271702	0.4650298154273023	T	T	T

0.1303129718414528 0.7686332589763677 0.4666263907617526 T T T



IS: -301.982096 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2219903285953584	0.1109890232198733	0.2228335807291043	T	T	T
0.5571301690853885	0.1142788609080611	0.2246546344199747	T	T	T
0.8888693868633083	0.1111646513581134	0.2229781832506939	T	T	T
0.2220391304007618	0.4445027249472440	0.2231522633314524	T	T	T
0.5570442931788413	0.4426474062363123	0.2246495005091524	T	T	T
0.8856884193889168	0.4427260163805327	0.2247569115099531	T	T	T
0.5550076468011169	0.7774393209456389	0.2228883925572036	T	T	T
0.8890174122728379	0.7776938320150314	0.2229045023748814	T	T	T
0.2220466801333127	0.7772694612847898	0.2229208683474987	T	T	T
0.9999196727074450	0.9998406107800054	0.3294442424639624	T	T	T
0.3306656177351365	0.9970416248165721	0.3287988341523200	T	T	T
0.6659726314289517	0.9963030999467273	0.3289246141231557	T	T	T
0.3309653148062341	0.3331057092962078	0.3290161713113367	T	T	T
0.6666829567780176	0.3333109329429698	0.3372767157282904	T	T	T
0.0021187482471367	0.3328548909975965	0.3292830036516065	T	T	T
0.3338811517535121	0.6670665239536907	0.3298093664157684	T	T	T
0.6666540969125917	0.6694482787477296	0.3287733745467928	T	T	T
0.0024464955453083	0.6693125383937119	0.3290427910557998	T	T	T
0.6088139164574362	0.7060441443728004	0.5621214382151779	T	T	T
0.8375988174312439	0.8529026716245187	0.5493139371575373	T	T	T
0.6685641702203182	0.3258475636747319	0.4535440711750932	T	T	T
0.5134516982626898	0.5500968945981284	0.5056705128509325	T	T	T

0.5231908968390477	0.7902911003213612	0.5664000188479820	T	T	T
0.6116697788572218	0.4112969889784027	0.4761067875999876	T	T	T
0.4938940830329983	0.6120909056341344	0.4608100569245900	T	T	T
0.9026539807160212	0.9645724361860600	0.5945010985522620	T	T	T
0.9224051674137294	0.7680995266475625	0.5461116868645597	T	T	T
0.8640084543204488	0.9401280173717983	0.4981691217420345	T	T	T
0.5830673598262822	0.6187611965638341	0.6130925738754007	T	T	T
0.5742028255615038	0.1823887194786685	0.4671502731340927	T	T	T

TS: -301.324968 eV
 1.0000000000000000
 7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -3.7350000000000003 6.4692097662697572 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903404

36 2 2 8 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222143	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555569	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222050	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333360	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.9999999999999929	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2229359363516831	0.1117826644591898	0.2227322997970083	T	T	T
0.5567668824903113	0.1139275664095166	0.2234852814457708	T	T	T
0.8892838588175801	0.1113434804960308	0.2224835333196412	T	T	T
0.2225161034175757	0.4446517386878734	0.2229105416822521	T	T	T
0.5589762062501915	0.4455076042459956	0.2262621543207516	T	T	T
0.8861287613179820	0.4430341696650489	0.2240319351298258	T	T	T
0.5563380907181457	0.7759113968056509	0.2239515559925060	T	T	T
0.8869890730781644	0.7770659579384931	0.2237783514503934	T	T	T
0.2222324412523814	0.7780738093039031	0.2221375207949804	T	T	T
0.0030123468226123	0.0028884537342810	0.3288475175558923	T	T	T
0.3303321837519905	0.9967956858468928	0.3279034817093546	T	T	T
0.6667631196898107	0.9994586946436677	0.3276491623904431	T	T	T
0.3292301967905336	0.3339320447569132	0.3296214878931509	T	T	T
0.6674795771228687	0.3277395177787279	0.3354335288296433	T	T	T
0.0019803843792135	0.3331407234172344	0.3288638372906726	T	T	T
0.3302697743726873	0.6647614839650836	0.3295877535326046	T	T	T
0.6707786443777151	0.6725704347389837	0.3351625940187343	T	T	T
0.0039219562379342	0.6688507163117842	0.3282660420890536	T	T	T
0.6448098001919650	0.7893167945177938	0.4997539251565850	T	T	T
0.8652812452033140	0.8957766457521510	0.5280824476342936	T	T	T
0.6700363530550817	0.3266168351994854	0.4505333341946393	T	T	T
0.6078216900917315	0.6273288796640141	0.4495565308331317	T	T	T
0.6140922235430903	0.9023484778469743	0.4713965300278231	T	T	T
0.6430474599361672	0.4473898131836627	0.4608856723733646	T	T	T

0.8910633506849394	0.0198500915163225	0.5664405534291308	T	T	T
0.8980797686841832	0.7858947680261517	0.5566246599386844	T	T	T
0.9757763307832925	0.9650751723697177	0.4826096498818485	T	T	T
0.5491010069074177	0.2003037641107972	0.4675750674792488	T	T	T
0.5331941219301688	0.7223137083769189	0.5451680550173291	T	T	T
0.4485098154661001	0.5732731536588027	0.3970685217731129	T	T	T

FS: -298.410449 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

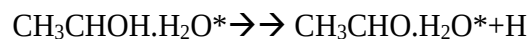
36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2258742710184049	0.1133357615927982	0.2256689732977647	T	T	T
0.5551607719583431	0.1115226996119938	0.2253813924856969	T	T	T
0.8899412137249632	0.1111536117584958	0.2221730807924041	T	T	T
0.2229675397709549	0.4437450408296644	0.2227458153552134	T	T	T
0.5536495457531478	0.4411413780397132	0.2256649603917533	T	T	T
0.8858540200011776	0.4436210397626604	0.2232874091662123	T	T	T
0.5554384660617412	0.7766237689584751	0.2223604143837949	T	T	T
0.8894178721204293	0.7774360413627959	0.2225965539971556	T	T	T
0.2233045957316834	0.7808010700977481	0.2236651322088632	T	T	T
0.9995359684354748	0.9968639163112563	0.3281708985663655	T	T	T
0.3335568636521525	0.9983322701235224	0.3364252894989290	T	T	T
0.6714842585632734	0.9950432899896933	0.3281140279383385	T	T	T
0.3269491375259414	0.3401211142516126	0.3339285842150566	T	T	T
0.6688643757548555	0.3324565031668881	0.3361203736594995	T	T	T
0.9975426942696599	0.3327996052044053	0.3273305334075369	T	T	T
0.3330104709943007	0.6685572040750651	0.3279068850177750	T	T	T
0.6705793336295041	0.6677041772282246	0.3282820552494641	T	T	T
0.0000211914346207	0.6666631586230679	0.3289441507663395	T	T	T
0.5946510417443811	0.0759510571452261	0.4802969632168522	T	T	T
0.7596158147310815	0.2488508561205379	0.5261122114405736	T	T	T
0.5133025368749996	0.1552865694386188	0.4256107518917909	T	T	T
0.3308490248457572	0.3553902924612663	0.4506175045978169	T	T	T
0.1892768940890411	0.2686704077541446	0.4677331982023317	T	T	T
0.4026854428662565	0.2684428523829456	0.4533657812617796	T	T	T

0.6977322100591552	0.3360550844569284	0.5544375530410774	T	T	T
0.8191989845153843	0.1856416046727564	0.5677058122321783	T	T	T
0.8886665375994858	0.3577414482047902	0.4912773564927970	T	T	T
0.6590726959651384	0.9868417315769155	0.4531564514191201	T	T	T
0.4644586594038609	0.9647734898989102	0.5143235709049092	T	T	T



IS: -297.533152 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225200313101227	0.1123787095158838	0.2220462656558883	T	T	T
0.5579758208109610	0.1109271915993340	0.2237479613536033	T	T	T
0.8864882546575835	0.1095328484387882	0.2235800096568793	T	T	T
0.2242992721715955	0.4474243093690625	0.2231134843172893	T	T	T
0.5561008899742648	0.4455201692312319	0.2225507652316399	T	T	T
0.8907078807910799	0.4487201706880006	0.2235242024061515	T	T	T
0.5554855057936354	0.7802629526952398	0.2254234232468208	T	T	T
0.8907863651132902	0.7773267011867726	0.2231570345465343	T	T	T
0.2201553943288535	0.7762949381669888	0.2247546324172928	T	T	T
0.0036490875405959	0.0000512127649667	0.3281888216947300	T	T	T
0.3329861023651196	0.0046614433688952	0.3275907633334798	T	T	T
0.6695768432776468	0.0034498615923233	0.3350924763833155	T	T	T
0.3336446321970601	0.3324526703214802	0.3282847850687822	T	T	T
0.6669470944422393	0.3367905175744183	0.3285650797332120	T	T	T
-0.0001904745253131	0.3312717755993034	0.3269961355607881	T	T	T
0.3321121840963626	0.6654669301098765	0.3322747058424212	T	T	T
0.6700032240924392	0.6651263923572862	0.3286774227560980	T	T	T
0.0019667968727246	0.6660606601224249	0.3395639188631711	T	T	T
0.0618427525862536	0.6426975184082863	0.4451726939942752	T	T	T
0.0658835779353849	0.8011130822967156	0.4980635053450076	T	T	T
0.6589736580447015	0.0012909511243851	0.4552400441011624	T	T	T
0.2697332676794076	0.6562794891755293	0.4507034083019065	T	T	T

0.9494038881865858	0.4864872429453824	0.4643854113866471	T	T	T
0.5214830358167912	0.8782062335473724	0.4649311025204571	T	T	T
0.1080026542922558	0.7776017500629308	0.5536588593804290	T	T	T
0.1740798798954785	0.9607345881600295	0.4809718313210175	T	T	T
0.9101264849296157	0.7818213944211668	0.5007019531882837	T	T	T
0.7614792730655258	0.9625831687231157	0.4689398898057377	T	T	T
0.2484949323367569	0.5169619569417985	0.4583512882222066	T	T	T

```

TS:          -297.014038 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292
36 2 2 7      # Co C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111142 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555500 0.11111111111111142 0.0000000000000000 F F F
0.88888888888888571 0.11111111111111142 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222071 0.44444444444444284 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555429 0.44444444444444284 0.0000000000000000 F F F
0.88888888888888569 0.44444444444444284 0.0000000000000000 F F F
0.5555555555555568 0.7777777777777782 0.0000000000000000 F F F
0.8888888888888853 0.7777777777777782 0.0000000000000000 F F F
0.2222222222222213 0.7777777777777782 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333355 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666640 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333355 0.3333333333333355 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666640 0.3333333333333355 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333355 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333355 0.6666666666666640 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666640 0.6666666666666640 0.11111111111111143 F F F
0.00000000000000142 0.6666666666666640 0.11111111111111143 F F F
0.2222060789751919 0.1129365250731127 0.2224215063746303 T T T
0.5580403906596129 0.1109398175627161 0.2235068049893071 T T T
0.8858619751478556 0.1092798050047107 0.2236621427224402 T T T
0.2236350922145799 0.4469313649538236 0.2228351345375855 T T T
0.5555224820659674 0.4451569544043480 0.2225489774160026 T T T
0.8905344757575455 0.4481997132295846 0.2234196421710400 T T T
0.5554153800124996 0.7803778298514814 0.2247438189385667 T T T
0.8902231113957405 0.7774394941978364 0.2228681027145604 T T T
0.2201355569397871 0.7774872689162152 0.2238995378547667 T T T
0.0026712128658454 0.9982772985622806 0.3282601074969337 T T T
0.3328938109138347 0.0057409994354891 0.3272792252597582 T T T
0.6683678607488763 0.0019132665822307 0.3349979839199169 T T T
0.3315184335605800 0.3332620654881047 0.3301483815805207 T T T
0.6666075127736142 0.3365960739565241 0.3281758625876606 T T T
0.9991450951072689 0.3284285642855490 0.3276821097317541 T T T
0.3312490441549909 0.6667516335257720 0.3307777475895005 T T T
0.6703028669981755 0.6648209465602632 0.3280439101343462 T T T
0.0037413362579111 0.6658291081482144 0.3384080985815943 T T T
0.0808066751997011 0.6362899738928675 0.4432957741029786 T T T
0.0953807751033987 0.8009472079434572 0.4952970920145234 T T T
0.6365416297507269 0.9790931799400961 0.4519012860260966 T T T
0.2677120298601205 0.6306407076576079 0.4437072043916571 T T T
0.9510437702242922 0.4824384609310214 0.4582491849531965 T T T
0.5015443612942161 0.8464231240518736 0.4585227442460270 T T T

```

0.1337518863122605	0.7720460821828480	0.5507599431818737	T	T	T
0.2134517119966235	0.9578401844829707	0.4787039578619038	T	T	T
0.9456811006657422	0.7952627798296689	0.4980231120805838	T	T	T
0.7445820762483037	0.9578748416097197	0.4728066334869487	T	T	T
0.2420971613488754	0.4722153817071422	0.3986532504947583	T	T	T

FS: -294.275628 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

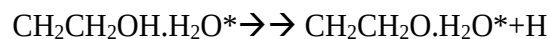
36 2 2 6 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225221354134998	0.1133934135965983	0.2233015843642566	T	T	T
0.5554063993093107	0.1109941064911612	0.2223679533084783	T	T	T
0.8890002916145415	0.1133841104741624	0.2229265769440470	T	T	T
0.2233560017884210	0.4432968477336831	0.2264979889996812	T	T	T
0.5533309046947458	0.4439221574987789	0.2233148681213536	T	T	T
0.8914259849582442	0.4463209496177344	0.2243825103474600	T	T	T
0.5522986424915448	0.7767576114963086	0.2234535671748199	T	T	T
0.8884444924718358	0.7775395439406859	0.2216597974817816	T	T	T
0.2200272163656510	0.7751235134004242	0.2241315123627677	T	T	T
-0.0023209070611575	-0.0011196776320965	0.3274530367779837	T	T	T
0.3350154367166945	0.9985281814829424	0.3274281306252481	T	T	T
0.6664736930699789	-0.0005108860890386	0.3286139338016682	T	T	T
0.3410718210052834	0.3275935404104517	0.3346652321035542	T	T	T
0.6683004792128493	0.3311145960157449	0.3275030166289892	T	T	T
-0.0007862542912440	0.3318181811973328	0.3338132200358562	T	T	T
0.3321388580509112	0.6670139191052741	0.3342903188099626	T	T	T
0.6679764434049055	0.6694633737895255	0.3277624823410511	T	T	T
-0.0044892590744482	0.6736710451254950	0.3339942995739158	T	T	T
0.0278554893862784	0.6212678169736472	0.4394973568070962	T	T	T
0.1429217840955171	0.8014345013880263	0.4911754035540618	T	T	T
0.3521822425683456	0.3433868504538928	0.4524371853620962	T	T	T
0.1368259509642425	0.5185467371624564	0.4222151970804011	T	T	T
0.2644538712703136	0.4087564413392343	0.4594997146028953	T	T	T
0.1678561139183929	0.7470464753618741	0.5443381944951168	T	T	T

0.2962165646126017	0.9146870428429160	0.4692681927482436	T	T	T
0.0507817689631798	0.8767366629989275	0.5011128244890884	T	T	T
0.2747570807334252	0.2032285844520652	0.4719324286328717	T	T	T
0.8723073862383852	0.5108349104705502	0.4602532623367670	T	T	T



IS: -297.53460967 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2190141544408291	0.1085944007346037	0.2233408232055905	T	T	T
0.5546565155383534	0.1102791582310894	0.2220076429184282	T	T	T
0.8898263949884939	0.1078317534335334	0.2232965201167818	T	T	T
0.2222476861907136	0.4434615001671119	0.2222297846146519	T	T	T
0.5569372508224353	0.4464373171753965	0.2236919331277931	T	T	T
0.8902293663748391	0.4461948470038982	0.2241477504848330	T	T	T
0.5568592553727515	0.7759936904642196	0.2233164402296192	T	T	T
0.8906911430016254	0.7777503466293912	0.2273494721509448	T	T	T
0.2196467095839462	0.7762315526981867	0.2237343584235250	T	T	T
-0.0005587770727048	0.0069143516485978	0.3371130056370142	T	T	T
0.3331533987529718	0.0008198228781875	0.3282483280969632	T	T	T
0.6631657768494482	0.0016446556461158	0.3274290905883280	T	T	T
0.3333268480468172	0.3327906684131910	0.3283313287769378	T	T	T
0.6631770401661469	0.3290420060690997	0.3282368422836219	T	T	T
-0.0007920035623441	0.3295416102318397	0.3280701565943960	T	T	T
0.3328909227104284	0.6648233393649129	0.3274728893336908	T	T	T
0.6637463130113010	0.6664006170829754	0.3338790798226543	T	T	T
0.0029709969194246	0.6633510187603339	0.3353472264436677	T	T	T
0.7715640774118390	0.9200964695937656	0.4828336265872014	T	T	T
0.9793908015895223	0.0485609031726416	0.4467837866277924	T	T	T
0.9953423322328921	0.6271965236653944	0.4570171057234009	T	T	T
0.6799983805532938	0.7033321786561637	0.4587462658885164	T	T	T

0.6634351491799227	0.9743698499763176	0.4676861476400057	T	T	T
0.8662146685422997	0.6312133898133339	0.4669041032352593	T	T	T
0.0330451749599355	0.2120627603845117	0.4599448254095446	T	T	T
0.0950680385331500	0.0151199470424256	0.4704865909972890	T	T	T
0.7824939185735797	0.9183493019244801	0.5430330536042339	T	T	T
0.9566160410007879	0.4815944229911423	0.4601467084822351	T	T	T
0.5371075238780149	0.6230856604276159	0.4757172464612305	T	T	T

TS: -296.953340 eV
 2.4900000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222213	0.1111111111111141	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555498	0.1111111111111141	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888703	0.1111111111111141	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222140	0.4444444444444351	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555500	0.4444444444444351	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888703	0.4444444444444351	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555567	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888853	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333352	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666639	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000075	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.2202223871026915	0.1103391557542425	0.2231028271787328	T	T	T
0.5570986949603957	0.1136013437935317	0.2235798703609573	T	T	T
0.8907907695174453	0.1099859922734844	0.2231484635267464	T	T	T
0.2229417049468962	0.4449270330654373	0.2226356453583972	T	T	T
0.5583582300821162	0.4440294741674083	0.2251218061521237	T	T	T
0.8863262156868349	0.4429931316241444	0.2240927107375613	T	T	T
0.5559989486476745	0.7760959952958079	0.2234481361063325	T	T	T
0.8891287699979391	0.7804311137352541	0.2246060871581858	T	T	T
0.2224123528126218	0.7779825546588521	0.2219240296212122	T	T	T
0.0018613603017856	0.0026460663113428	0.3370062323309351	T	T	T
0.3307573520773924	0.9964311342718315	0.3275678513286439	T	T	T
0.6665211576096082	0.9988176113749245	0.3277128224110031	T	T	T
0.3296446675582869	0.3330769785926336	0.3286638739469789	T	T	T
0.6665908795634046	0.3277582802943432	0.3354800412559173	T	T	T
0.0025462347713408	0.3337188643728228	0.3283864209468477	T	T	T
0.3313358158196298	0.6651696913639270	0.3295585848359635	T	T	T
0.6673799788917392	0.6673480114180883	0.3323461609745015	T	T	T
0.0038529373155276	0.6683248256261363	0.3281068223597905	T	T	T
0.7580800482232433	0.8637357353955621	0.4764786600562135	T	T	T
0.9777620814969072	0.9818549998535411	0.4475209449511869	T	T	T
0.6745760117178459	0.3398471164813135	0.4503000882341228	T	T	T
0.6405158532850013	0.6591031206496784	0.4475784351239204	T	T	T
0.6754143829957344	0.9493204600335939	0.4637811347136906	T	T	T
0.6635021691915362	0.4703802679944422	0.4596053143702564	T	T	T

0.0553967539618589	0.1412703573438209	0.4687610974209535	T	T	T
0.0662357448333981	0.9087154784787077	0.4664619979941060	T	T	T
0.7569544357243390	0.8483567078778882	0.5367205789532384	T	T	T
0.5532406935768492	0.2227634856982164	0.4718877497350977	T	T	T
0.4782739970956157	0.6251701339519627	0.3984082982301824	T	T	T

FS: -294.161275 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

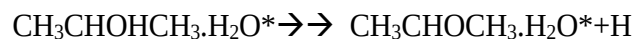
36 2 2 6 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225570628620203	0.1109691410571316	0.2229366138195762	T	T	T
0.5534545966027923	0.1110891913389166	0.2236401863283529	T	T	T
0.8878678807120299	0.1104633680955943	0.2218868783305660	T	T	T
0.2225976239704018	0.4450805071391166	0.2224820210496007	T	T	T
0.5573405775274886	0.4450743443706772	0.2258958362967095	T	T	T
0.8851267691677055	0.4439486146957541	0.2238841056455058	T	T	T
0.5560086512026704	0.7757300215023432	0.2233859058989486	T	T	T
0.8878494452035114	0.7775063317233403	0.2246654101792614	T	T	T
0.2200875741518150	0.7768770695474351	0.2236817495794144	T	T	T
0.0077244144219606	0.0115579479034486	0.3301169553524114	T	T	T
0.3283893173474969	0.9968763305026683	0.3311628524803847	T	T	T
0.6671767875894578	0.9986089086609287	0.3271865695361192	T	T	T
0.3313631875574807	0.3350797158627949	0.3299349712030027	T	T	T
0.6636317568423808	0.3233088338401154	0.3339362898359226	T	T	T
0.0019943453742382	0.3355798384149681	0.3269828019708092	T	T	T
0.3345672932646052	0.6667094010520901	0.3281288096033357	T	T	T
0.6668801416516340	0.6698974931689918	0.3352078579910594	T	T	T
0.9990553923233473	0.6619357134360119	0.3322179398810142	T	T	T
0.9822867089648190	0.8915476181631080	0.4668889751214020	T	T	T
0.1776048174644799	0.0527472400182286	0.4274170486406511	T	T	T
0.6904565904433088	0.3299997938148221	0.4507220302207517	T	T	T
0.8626910499150076	0.7108175582482813	0.4215907728873046	T	T	T
0.8850795497054919	0.9580189718705442	0.4821095260094103	T	T	T
0.7589636396130447	0.4875723046666263	0.4531592449976970	T	T	T

0.2382998535130381	0.2056485001727365	0.4537577659322274	T	T	T
0.2981941536467693	0.0054226894139614	0.4356421590347582	T	T	T
0.0214991297209561	0.8365992339600807	0.5172412978985306	T	T	T
0.5555634311031827	0.2726127377687632	0.4741285925459633	T	T	T



IS: -318.752454 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224524890462407	0.1105805460645720	0.2228711134176894	T	T	T
0.5575972354921389	0.1139555189661540	0.2245981570687462	T	T	T
0.8894494471320162	0.1109432733228961	0.2229992532374403	T	T	T
0.2226076699044358	0.4442006225813537	0.2230807281567701	T	T	T
0.5575663382525690	0.4422246457963668	0.2245902418360496	T	T	T
0.8862790942701095	0.4425035155736280	0.2246808386335235	T	T	T
0.5555647081200821	0.7771472168708993	0.2228229232189636	T	T	T
0.8894301507513180	0.7774607866497197	0.2229011592652212	T	T	T
0.2227456645708515	0.7772371159384304	0.2229093726241469	T	T	T
0.0004135657313546	0.9996317425692095	0.3295585249202208	T	T	T
0.3315276889981761	0.9973163435068637	0.3289834138686379	T	T	T
0.6667007750446090	0.9963577914623897	0.3288113392033962	T	T	T
0.3315651766051471	0.3328269954442288	0.3290016552419972	T	T	T
0.6678012778600747	0.3331159306466260	0.3372225035137787	T	T	T
0.0032237100115460	0.3329387945041035	0.3292716742917874	T	T	T
0.3343924056711644	0.6666568579255989	0.3296626799753507	T	T	T
0.6668890711623736	0.6688743586308687	0.3287018618105929	T	T	T
0.0033942754744359	0.6695650268735017	0.3289534728915416	T	T	T
0.6748503190779871	0.7730226758122440	0.5386242765774670	T	T	T
0.8023075458257789	0.7398727158544527	0.5959121674294888	T	T	T
0.5465786027334818	0.8616646471694578	0.5698153776242609	T	T	T
0.5380545573259503	0.5720085504515614	0.5054339900355892	T	T	T

0.6816145922422332	0.3390945605339446	0.4526490695240802	T	T	T
0.4727530827344912	0.5929586522841755	0.4617134044875530	T	T	T
0.7020226254672158	0.6336264748893865	0.6386661646952297	T	T	T
0.8920821133044838	0.6754915311550577	0.5713273094049026	T	T	T
0.9108310938779862	0.8876161035246019	0.6218653467372410	T	T	T
0.6287469993956638	0.4285779384295020	0.4749269328851725	T	T	T
0.5951525370572062	0.1994117074100899	0.4715255589360281	T	T	T
0.4440847744193336	0.7620697569637094	0.6134635612721381	T	T	T
0.4491138748541514	0.8732663926277671	0.5270286609996908	T	T	T
0.6476488113458392	0.0165924700834044	0.5926081376743887	T	T	T
0.7778685420321992	0.8763139051624180	0.4952825416562626	T	T	T

TS: -318.046455 eV
 1.0000000000000000
 7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -3.7350000000000003 6.4692097662697572 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903404

36 3 2 10 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222143	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444428	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555569	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222068	0.7777777777777785	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333360	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.9999999999999929	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2227138043107886	0.1115625407498092	0.2226844401890648	T	T	T
0.5566153340999194	0.1135157198370403	0.2234825176793679	T	T	T
0.8890073583878801	0.1110213703352255	0.2224652226466373	T	T	T
0.2222784560413575	0.4443723327909460	0.2228838750951653	T	T	T
0.5586758994648613	0.4451655475500489	0.2261731407539991	T	T	T
0.8858038980120951	0.4425916748563543	0.2239719174267212	T	T	T
0.5561654685360615	0.7756425216076055	0.2240080431554274	T	T	T
0.8866905501007540	0.7766726590512617	0.2237694791192408	T	T	T
0.2219430468835644	0.7777080654916698	0.2220969056050173	T	T	T
0.0030383365310197	0.0027856396703762	0.3287410286186515	T	T	T
0.3302753621786085	0.9965350137530157	0.3278054606899830	T	T	T
0.6667294759118194	0.9991413252113751	0.3277739406064961	T	T	T
0.3291107008667513	0.3336754445831063	0.3295675129751152	T	T	T
0.6673126986210254	0.3275916728141759	0.3353119815556614	T	T	T
0.0018019670516930	0.3328990492509235	0.3287425490308731	T	T	T
0.3301286694354242	0.6644772388444992	0.3296464839645418	T	T	T
0.6706144412912480	0.6721053963765001	0.3351852282249991	T	T	T
0.0036756037824327	0.6684398788157498	0.3281930204554703	T	T	T
0.6524898364379556	0.7953444829767888	0.4992699599142693	T	T	T
0.8717033667036167	0.8848245847714037	0.5284832796142779	T	T	T
0.4894279927418423	0.7184367456233999	0.5593565510622357	T	T	T
0.6702368566633574	0.3267540495504681	0.4503980523014713	T	T	T
0.6097734389079688	0.6290455675469799	0.4495738231879434	T	T	T
0.6438587883379903	0.9172341853587767	0.4671941093823172	T	T	T

0.6442789204182626	0.4481783379922643	0.4607215502295450	T	T	T
0.9117384529466446	0.0178530780609597	0.5642740358785979	T	T	T
0.8873383019463501	0.7679950795592304	0.5600001913246558	T	T	T
0.9833701909386001	0.9372688823847901	0.4830700206889545	T	T	T
0.5483883381341720	0.2008258864802533	0.4671510096420630	T	T	T
0.4925350047625846	0.5953151333336507	0.5912960348724384	T	T	T
0.5183865238276738	0.8448686562771024	0.5970434267068158	T	T	T
0.3341223120030971	0.6567148854274816	0.5359775744390771	T	T	T
0.4492307493821592	0.5752854882310402	0.3970338055784713	T	T	T

FS: -315.146596 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

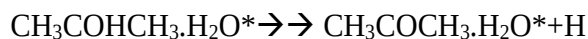
36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222285	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.88888888888888928	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2255440181667177	0.1129024469560492	0.2256781820026296	T	T	T
0.5549911655339981	0.1111644365410001	0.2253896665177697	T	T	T
0.8898314147268005	0.1110035060175481	0.2223435563344195	T	T	T
0.2225904344309226	0.4432060356227705	0.2226898275973736	T	T	T
0.5531228394786254	0.4405655350242571	0.2255341849871811	T	T	T
0.8856478233461603	0.4431248630278121	0.2234961177517293	T	T	T
0.5555672302168446	0.7766258388877475	0.2221522328256694	T	T	T
0.8893575875552950	0.7772311818840707	0.2225138714279394	T	T	T
0.2228626965625079	0.7807131715136428	0.2233084180783444	T	T	T
0.9993358038438047	0.9959424740043074	0.3282270953182894	T	T	T
0.3343883536715245	0.9979454807590397	0.3362344743468121	T	T	T
0.6713757048043590	0.9944340507310839	0.3283140066349111	T	T	T
0.3269138686463936	0.3394151558995041	0.3340820622518291	T	T	T
0.6688164637171380	0.3332374615582880	0.3360603845966177	T	T	T
0.9985041714648273	0.3333873835966180	0.3276965648294280	T	T	T
0.3334294709270345	0.6686655721433237	0.3272171029710056	T	T	T
0.6699916777059710	0.6670491090539196	0.3279870907523155	T	T	T
0.0003800873331572	0.6667306596580865	0.3288010551570554	T	T	T
0.6007864077567732	0.0721284772423485	0.4787062179817155	T	T	T
0.4264815719247752	0.9054528601375145	0.5240572621605104	T	T	T
0.7639718821647974	0.2478783030633163	0.5244954433998567	T	T	T
0.5158464973751056	0.1534237861908304	0.4254432671880813	T	T	T
0.3139317102590218	0.3350810729381594	0.4509000159333938	T	T	T
0.4873912160082147	0.8363321970881230	0.5627322235611576	T	T	T

0.4003425590446849	0.4771299354826904	0.4676336710051648	T	T	T
0.4017244382221821	0.2644410362740249	0.4538414172100937	T	T	T
0.6941886509738784	0.3210275975226016	0.5570999535313574	T	T	T
0.3114992785875257	0.7833721965727249	0.4884075808771479	T	T	T
0.3475948350443206	0.9708334983788097	0.5557410509890940	T	T	T
0.8379595394931205	0.1898307246307771	0.5621410639229251	T	T	T
0.8841910265681584	0.3656571067498496	0.4891500961181858	T	T	T
0.6781791309799451	0.9996134038055624	0.4479787597139788	T	T	T



IS: -314.110173 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2223308883234978	0.1114587427355076	0.2219127422665039	T	T	T
0.5578514100558962	0.1101483633718772	0.2240091146259928	T	T	T
0.8859938915007959	0.1088512807888478	0.2234579797561764	T	T	T
0.2235878549278496	0.4462988074617797	0.2230303135409315	T	T	T
0.5558500474722408	0.4446111017662204	0.2223797333284239	T	T	T
0.8908071355514124	0.4484147587480223	0.2236526987873759	T	T	T
0.5548588285554246	0.7792510925072875	0.2253206582257334	T	T	T
0.8906295274966922	0.7762476985310371	0.2232779838015446	T	T	T
0.2195554575030414	0.7753648327965621	0.2251960631359466	T	T	T
0.0032151632135538	0.9998417207263728	0.3277538932739930	T	T	T
0.3341281424350058	0.0044648387023258	0.3278328772029226	T	T	T
0.6693471959645549	0.0010267308124909	0.3353453704459852	T	T	T
0.3339223872330379	0.3320598259482352	0.3277747764055192	T	T	T
0.6682835920642276	0.3365305099903324	0.3285892015456966	T	T	T
0.9994128268431623	0.3306468424065798	0.3270232260683272	T	T	T
0.3309493958416638	0.6631597676567011	0.3322557259867907	T	T	T
0.6699661371933914	0.6638607642747303	0.3283289157110332	T	T	T
0.0032345765254647	0.6687878252004893	0.3413393841715333	T	T	T
0.0801024390750271	0.6794922135231971	0.4492941758499427	T	T	T
0.1606653373236639	0.8873077528152464	0.4871615790226329	T	T	T
0.9106811979173770	0.5088692873962799	0.4950562997191099	T	T	T
0.6617112351153267	0.9720204810209196	0.4561165629579236	T	T	T

0.2644529445509676	0.6475524462813524	0.4511689881061116	T	T	T
0.9641629169193493	0.5165635374974755	0.5520394950605763	T	T	T
0.5223844759480514	0.8501963304942421	0.4647218897797387	T	T	T
0.2061116032553869	0.8789465569056887	0.5440834015135820	T	T	T
0.2952311712981768	0.0143360086503250	0.4592165353066306	T	T	T
0.0404771807031068	0.9309412767340532	0.4886939354962223	T	T	T
0.7590199817330472	0.9216669004679190	0.4622337813266668	T	T	T
0.8596829023882364	0.3534703682776694	0.4733208209993194	T	T	T
0.7738585884592126	0.5275602989322223	0.4960865701688135	T	T	T
0.2149555214824304	0.4986297863591602	0.4541474565182213	T	T	T

TS: -313.569919 eV

1.0000000000000000

7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.7350000000000003 6.4692097662697670 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903297

36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222121	0.1111111111111127	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555415	0.1111111111111127	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888560	0.1111111111111127	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222110	0.4444444444444296	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555375	0.4444444444444296	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888495	0.4444444444444296	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555567	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888853	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777782	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333351	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666635	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.00000000000000074	0.3333333333333355	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333355	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666639	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.00000000000000123	0.6666666666666640	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224384499196845	0.1126925238320151	0.2222828962152852	T	T	T
0.5581247803885205	0.1107364830325779	0.2237832872249133	T	T	T
0.8858993628823223	0.1095456951613279	0.2235330130127581	T	T	T
0.2232031739485874	0.44466714021545523	0.2228525776842468	T	T	T
0.5556108025679979	0.4447719525703761	0.2224437409396331	T	T	T
0.8909546618614286	0.4485619849725769	0.2236023516926603	T	T	T
0.5551254365004816	0.7800401546699892	0.2245976851029793	T	T	T
0.8905013930628123	0.7771465683032169	0.2229013577650222	T	T	T
0.2198722579672897	0.7772445479621040	0.2241944715594340	T	T	T
0.0025517680167634	0.9987146078188303	0.3277289340975847	T	T	T
0.3339559490706970	0.0060633812505726	0.3275235334973321	T	T	T
0.6690219268718480	0.0004735079089104	0.3349583349664272	T	T	T
0.3314936929796450	0.3334279264100957	0.3295897332215874	T	T	T
0.6679096561872699	0.3370215285001678	0.3282186000097037	T	T	T
-0.0005664137158997	0.3288871066402393	0.3281562511308463	T	T	T
0.3306290097760143	0.6659545414677244	0.3307860040300907	T	T	T
0.6702081298903341	0.6643712327040412	0.3276809894033971	T	T	T
0.0043327398041225	0.6684108073919554	0.3395263267061132	T	T	T
0.0938372688517249	0.6674709228766352	0.4470632549125744	T	T	T
0.1683678835640446	0.8753640356933069	0.4844467994135583	T	T	T
0.9161030641171548	0.4942307397219016	0.4894207705741477	T	T	T
0.6434343718234390	0.9591272100988864	0.4518400482801745	T	T	T
0.2647632821893208	0.6320688500083145	0.4438144590647580	T	T	T
0.9670323307614995	0.4933964848980123	0.5461828220639994	T	T	T

0.5033456644301274	0.8305570378634192	0.4572518862213477	T	T	T
0.2195613564042036	0.8695650127846445	0.5407100399715530	T	T	T
0.2995799572770740	0.0052479213927558	0.4560630112665813	T	T	T
0.0439691777750005	0.9128676021103220	0.4878789799729943	T	T	T
0.7457203536231589	0.9224571814932863	0.4676321790758358	T	T	T
0.8657658356815916	0.3412122460387986	0.4657032149532972	T	T	T
0.7814793507470881	0.5164355478996013	0.4911716567743760	T	T	T
0.2222757054850438	0.4693195961619983	0.3980275699718709	T	T	T

FS: -310.994503 eV

2.490000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

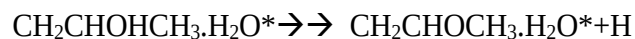
36 3 2 8 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2228734664941564	0.1107058334343150	0.2229283352485103	T	T	T
0.5578426196021922	0.1138474893865613	0.2246006993642455	T	T	T
0.8898029930539063	0.1108520131750267	0.2229051215430488	T	T	T
0.2230293627031618	0.4440374547989620	0.2231460562145086	T	T	T
0.5577981847815358	0.4422217044656891	0.2246032933137195	T	T	T
0.8866838055457144	0.4424978754835568	0.2246631164238005	T	T	T
0.5559323069396552	0.7768983174681979	0.2228061981429442	T	T	T
0.8896954168679220	0.7772009987062336	0.2229923432596214	T	T	T
0.2232262252721322	0.7769325110841789	0.2230388985302174	T	T	T
0.0007943961355575	0.9992299766009135	0.3295473528598598	T	T	T
0.3316502043871475	0.9968315858256842	0.3289906856330057	T	T	T
0.6671067454629827	0.9963652790636394	0.3286396934717645	T	T	T
0.3320966608565329	0.3322442690404633	0.3292457295296691	T	T	T
0.6685293708580510	0.3338390908360319	0.3372091341930356	T	T	T
0.0030431301358066	0.3323122423835417	0.3291909476343786	T	T	T
0.3347492734394619	0.6667716955890045	0.3296628434711785	T	T	T
0.6678763098518045	0.6686535975553046	0.3287313706854413	T	T	T
0.0035747313590701	0.6692384903441230	0.3290623815176308	T	T	T
0.6095506187460031	0.7056256921742206	0.5442427989560369	T	T	T
0.8394536526190285	0.8425989340859482	0.5408040368344609	T	T	T
0.4805728914087694	0.8009881730265730	0.5647104766034198	T	T	T
0.6748806148383627	0.3199528277763922	0.4541406298202847	T	T	T
0.5225114028109347	0.5199870365813841	0.5280360277668317	T	T	T
0.6223127995209921	0.4015231192123502	0.4818161847861293	T	T	T

0.8772150244893708	0.9604139251919743	0.4979298118953120	T	T	T
0.8981428645359389	0.9271086226892008	0.5925645315626257	T	T	T
0.9166989805169462	0.7546768412649977	0.5278869749290647	T	T	T
0.3454081109563334	0.6913288868153173	0.5965198547560332	T	T	T
0.5682218777714568	0.9481512492737126	0.5938347313184618	T	T	T
0.4216456077364127	0.8284039294719027	0.5129403468986844	T	T	T
0.5760401778463808	0.1745191764208243	0.4636586601903704	T	T	T



IS: -314.247073 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2191686903954747	0.1092594795923098	0.2231338488958046	T	T	T
0.5569138618925644	0.1136849209155926	0.2236019185758664	T	T	T
0.8911455526606391	0.1097166811648632	0.2233745448986550	T	T	T
0.2223412641619743	0.4441982334597000	0.2222890012869853	T	T	T
0.5585282487508242	0.4449674677632311	0.2253952789680996	T	T	T
0.8865222521269668	0.4429631322472404	0.2243238128037007	T	T	T
0.5562637673106375	0.7763375117326536	0.2232891227847746	T	T	T
0.8884895867482653	0.7804110494711362	0.2254046002788457	T	T	T
0.2218690331057081	0.7775379992080238	0.2220583976644596	T	T	T
0.0029672238454778	0.0008315689681699	0.3387791258671992	T	T	T
0.3315256302861089	0.9965872051504142	0.3277549685500616	T	T	T
0.6665543143251309	0.9990307110968462	0.3274960569598623	T	T	T
0.3299298849642663	0.3320614417080892	0.3278582717663112	T	T	T
0.6667609976286666	0.3294288605918783	0.3353401221610633	T	T	T
0.0030916658709620	0.3334505023733169	0.3287132239538618	T	T	T
0.3304152497316246	0.6665024547426416	0.3277848898934362	T	T	T
0.6649492273643187	0.6682515358564008	0.3332554975254554	T	T	T
0.0026946580796460	0.6674776021147905	0.3286361533679170	T	T	T
0.7948744040868366	0.8904371766247137	0.4879614841912736	T	T	T
0.0017516960722286	0.9778417718168209	0.4498391428968375	T	T	T
0.8027250790557665	0.8662198507179241	0.5704364825180132	T	T	T
0.6610716741097922	0.3249825368413166	0.4559597109566780	T	T	T

0.6526429856781526	0.6828356970289730	0.4566855591942339	T	T	T
0.7258751627288359	0.9874057916252054	0.4752627208500579	T	T	T
0.6607604774126969	0.4559046583339608	0.4664596739621872	T	T	T
0.0991335876053128	0.1381985099332773	0.4689050327266030	T	T	T
0.0786226733036841	0.8913482417067520	0.4672139575328554	T	T	T
0.5209668660260123	0.2131386095197765	0.4662885307007737	T	T	T
0.8695625504233091	0.7682551402265453	0.5836244916442567	T	T	T
0.8993111103906136	0.0181337637363066	0.5958972310804566	T	T	T
0.6479453911744643	0.7970401474083264	0.5951246811933520	T	T	T
0.5101587930971930	0.6569627310833526	0.4584716985490359	T	T	T

TS: -313.661748 eV

1.0000000000000000

7.4700000000000015 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.7350000000000008 6.4692097662697670 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903333

36 3 2 9 # Co C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888856	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222216	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2199902963674910	0.1104699215422102	0.2230141516284241	T	T	T
0.5565802468812495	0.1134490761273749	0.2236411928810356	T	T	T
0.8902202021920125	0.1097650441685454	0.2232169838901263	T	T	T
0.2225302126192088	0.4448541619897710	0.2226199347889180	T	T	T
0.5579695152230347	0.4440753519893536	0.2251400963825753	T	T	T
0.8857827117448915	0.4428356524469041	0.2240767718120216	T	T	T
0.5556073210655006	0.7761566025767721	0.2234489007940441	T	T	T
0.8886494458310996	0.7802638242197857	0.2244520185403128	T	T	T
0.2218563638841748	0.7780056123274254	0.2218632787372500	T	T	T
0.0013672292526682	0.0022807131220549	0.3366111784452899	T	T	T
0.3300226903006542	0.9962793649044422	0.3275256879837443	T	T	T
0.6659304851226455	0.9990478508504160	0.3278995273181172	T	T	T
0.3292268553473177	0.3332469777187639	0.3287060936673487	T	T	T
0.6660504503241053	0.3280543066181827	0.3354075258164891	T	T	T
0.0018998745589195	0.3335900583940714	0.3283532042032900	T	T	T
0.3304771242560706	0.6648039117516797	0.3293836499742105	T	T	T
0.6673594861372369	0.6676420221268140	0.3322142077314694	T	T	T
0.0034415337752433	0.6681864665620306	0.3280616515503307	T	T	T
0.7510493486028608	0.8671216961168277	0.4755344282144111	T	T	T
0.9721447304564359	0.9824516861464321	0.4467175947142930	T	T	T
0.7396890668418820	0.8557394789954785	0.5589790664754868	T	T	T
0.6724301643925911	0.3395053824282825	0.4506416044171000	T	T	T
0.6390683953360944	0.6606957625906767	0.4467884771963124	T	T	T
0.6690835880934900	0.9494460564146070	0.4564354531540913	T	T	T

0.6621769540736571	0.4700331666538529	0.4598360295756633	T	T	T
0.0521502378603239	0.1420001823546323	0.4677786155946255	T	T	T
0.0568873016598876	0.9062162926554493	0.4667263575284976	T	T	T
0.5488083093512770	0.2226079626374509	0.4711510921644741	T	T	T
0.8184654483113776	0.7751326635806138	0.5798630136000856	T	T	T
0.8151726232919403	0.0117430074913038	0.5826770041615668	T	T	T
0.5780930533734168	0.7719697666974333	0.5774339018691059	T	T	T
0.4745652292532294	0.6188309982652334	0.3981938232102648	T	T	T

FS: -310.886875 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Co C O H

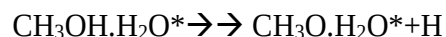
Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2227777956259574	0.1116052389814543	0.2232548648494276	T	T	T
0.5544194374024077	0.1123550787538262	0.2234939359182710	T	T	T
0.8888615889173683	0.1110684985139131	0.2222561959381693	T	T	T
0.2230251038287840	0.4456320502656806	0.2226460936151291	T	T	T
0.5570081027883914	0.4454041167765650	0.2259145137329551	T	T	T
0.8859444814495416	0.4448078582581360	0.2238254408049385	T	T	T
0.5564593727455217	0.7765214023821945	0.2233135897082798	T	T	T
0.8881968870739889	0.7776291582496777	0.2243267993016308	T	T	T
0.2208935317276429	0.7778890248287457	0.2236423554326088	T	T	T
0.0059751996613421	0.0093117537538833	0.3308471512576010	T	T	T
0.3314896347605705	0.9989132511891299	0.3310670859153566	T	T	T
0.6667992471149428	-0.0001332722182085	0.3270301113437158	T	T	T
0.3301407295628371	0.3343958883433111	0.3307287270364098	T	T	T
0.6658503386615118	0.3266845338706128	0.3337792419276336	T	T	T
0.0018742061717296	0.3359428963071826	0.3270719392852664	T	T	T
0.3349117421561098	0.6672561367510326	0.3280282098111473	T	T	T
0.6655780119179686	0.6703832113377330	0.3342905784371986	T	T	T
0.0021396440750566	0.6639516198436592	0.3319383484744240	T	T	T
0.9926857920928583	0.9085026391495963	0.4668408739049736	T	T	T
0.1894850096286964	0.0667597452799658	0.4262781153597723	T	T	T
0.0378661358663539	0.8330396259769616	0.5381736235547235	T	T	T
0.6963484845348790	0.3424302278096747	0.4512041011880344	T	T	T
0.8729336357413319	0.7298619001784095	0.4194100966743168	T	T	T
0.7644932785720313	0.4987307973727978	0.4527468599013373	T	T	T

0.2530857157822995	0.2207588328666863	0.4522624540542842	T	T	T
0.3069349819439470	0.0153473899114974	0.4353525198242452	T	T	T
0.1312183084820010	0.7593528877341130	0.5277181161924767	T	T	T
0.1232039561536340	0.9631816497002154	0.5758893508792439	T	T	T
0.8938696171977781	0.7205988332760008	0.5654725016688692	T	T	T
0.5608525633494678	0.2869101877396110	0.4740742827871060	T	T	T
0.8960184006507330	0.9786340893287877	0.4779961127572299	T	T	T

Ni catalyst



IS: -230.851963 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 6 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225835597606386	0.1112997510831657	0.2214658696623176	T	T	T
0.5570959301555684	0.1138845699422508	0.2233959982397838	T	T	T
0.8889406559349962	0.1114010534367785	0.2216325424763641	T	T	T
0.2223608205026967	0.4448326977135905	0.2213643777015219	T	T	T
0.5569608225431708	0.4432208825677498	0.2231623044935754	T	T	T
0.8862146424346948	0.4431639788861624	0.2236271139143055	T	T	T
0.5553937147669975	0.7778417096569610	0.2211451242498417	T	T	T
0.8891536943569850	0.7777495845294837	0.2213803188525986	T	T	T
0.2223977537445461	0.7777111863742104	0.2211380853236975	T	T	T
0.0004274593449325	0.0001856153780900	0.3314370356758056	T	T	T
0.3314680220739575	0.9981468904099217	0.3306372918877484	T	T	T
0.6670890020988889	0.9980010818125404	0.3308797172024590	T	T	T
0.3313474986013947	0.3329775369878372	0.3306326784214927	T	T	T
0.6676264733408840	0.3342512143010020	0.3413008635045582	T	T	T
0.0023030490191634	0.3331261174038776	0.3309925664913710	T	T	T
0.3340990887784735	0.6672283819558020	0.3313818377056783	T	T	T
0.6673863900534998	0.6694838500828902	0.3302241633752924	T	T	T
0.0027275032012525	0.6695950005331407	0.3307681541595758	T	T	T
0.7097616014112830	0.7880521580268250	0.5394299363637607	T	T	T
0.6657401589935509	0.3326706880614980	0.4541165780647383	T	T	T

0.5611724954507422	0.6007057398328269	0.5030809392640593	T	T	T
0.8253306441079430	0.8978366596042749	0.5007178511147886	T	T	T
0.6284553298082085	0.4367253891500126	0.4743194201031254	T	T	T
0.6313248671966920	0.8608715814302125	0.5668414571150120	T	T	T
0.5548745958631589	0.1962232725225719	0.4687981035752177	T	T	T
0.7868517206996587	0.7438350264300240	0.5806765649786397	T	T	T
0.5101138110067694	0.6364481591788526	0.4587000615470851	T	T	T

TS: -230.10525 eV
 2.4900000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 6 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333351	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666635	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333355	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666635	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333355	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666639	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000168	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.11111111111111064	0.2222222222222127	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444267	0.2222222222222127	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777622	0.2222222222222127	0.11111111111111071	F	F	F
0.444444444444424	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777771	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111141	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444254	0.8888888888888509	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777530	0.8888888888888509	0.11111111111111071	F	F	F
0.11111111111111056	0.8888888888888509	0.11111111111111071	F	F	F
0.2233204767911184	0.1119036896255588	0.2210314835339356	T	T	T
0.5566633662386361	0.11133229912567551	0.2222352118864659	T	T	T
0.8895355087268982	0.1114616814014609	0.2211105456463340	T	T	T
0.2230045981771475	0.4451324075021701	0.2209358467504713	T	T	T
0.5579996941094052	0.4451066981519133	0.2244782076773622	T	T	T
0.8868006777373005	0.4434370267564673	0.2230454261785185	T	T	T
0.5564909416264288	0.7769315005017462	0.2222203363593691	T	T	T
0.8870512697699424	0.7768979419758548	0.2231176940335578	T	T	T
0.2223949080038442	0.7779785772508890	0.2205493346203639	T	T	T
0.0042279423043194	0.0032546454886499	0.3306219654026671	T	T	T
0.3321568936985301	0.9983313254356322	0.3297584218017103	T	T	T
0.6681579920490034	0.0008989971844676	0.3292655828344450	T	T	T
0.3298988242069244	0.3342334525089909	0.3313863814202589	T	T	T
0.6689253762287932	0.3290185181354923	0.3389680814718785	T	T	T
0.0022352605965754	0.3330726590998419	0.3306723122556082	T	T	T
0.3313372632457465	0.6642228075213680	0.3317644456967930	T	T	T
0.6727027014110278	0.6733107056279817	0.3381674045611167	T	T	T
0.0051033827363726	0.6697311593784597	0.3302524834893521	T	T	T
0.6418337676604868	0.7912585384502606	0.4974788740619452	T	T	T
0.6666379160962831	0.3268597814019407	0.4511357013333045	T	T	T
0.6017983304834653	0.6264183428377903	0.4487103047084289	T	T	T
0.5910442441750766	0.8934935928723087	0.4728060563631347	T	T	T
0.6388321191378007	0.4471010891717417	0.4609280413846679	T	T	T
0.5575136916998826	0.7282384740911405	0.5490587691178453	T	T	T

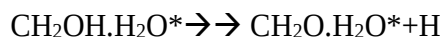
0.5438713325071278	0.2001707703785327	0.4669222686761184	T	T	T
0.8086908218410753	0.8844402678397218	0.5085045114330071	T	T	T
0.4382097173309376	0.5699846712475823	0.3970709738101114	T	T	T

```

FS:          -226.950616 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  5          # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2238306762886006  0.1142799502722386  0.2228942886301822  T  T  T
0.5559691966384974  0.1125392707804852  0.2219449091958899  T  T  T
0.8895597470750320  0.1106825158929859  0.2205620418511149  T  T  T
0.2233017426903678  0.4445835663187670  0.2214376172055273  T  T  T
0.5558286223157010  0.4442643095405374  0.2236895688718311  T  T  T
0.8873444567599017  0.4439687457901711  0.2222095628496195  T  T  T
0.5554894264883576  0.7765777644788417  0.2214248668639807  T  T  T
0.8857118270301355  0.7760242199011269  0.2230288411457942  T  T  T
0.2238563050838869  0.7759545251431688  0.2223451549176855  T  T  T
0.0004743913448399  0.9995785550805278  0.3312368784088072  T  T  T
0.3319937683814714  0.9984650212409020  0.3301959963118637  T  T  T
0.6698112892496405  0.0024260433389049  0.3287217189732038  T  T  T
0.3263126132924372  0.3248269059465019  0.3354267958938620  T  T  T
0.6719300356527192  0.3312994526558627  0.3359235992408142  T  T  T
0.9978431661624411  0.3300979134601806  0.3290241211325657  T  T  T
0.3306786221420875  0.6695433803841175  0.3335354978352429  T  T  T
0.6750352413254478  0.6737058065433649  0.3357034647884851  T  T  T
0.0021809159634305  0.6689149137878522  0.3305163940406811  T  T  T
0.4116395420113261  0.5952537347238035  0.4850410821737709  T  T  T
0.6555195528208007  0.3193917997503107  0.4550615564220748  T  T  T
0.4422913556956475  0.5583551535984566  0.4099581741817130  T  T  T
0.5553154300673151  0.3677631706414713  0.4579306773621308  T  T  T
0.5730303289590292  0.1689479259116981  0.4606641311396344  T  T  T
0.4761092696783729  0.7619946055810878  0.4938100719325622  T  T  T

```

0.4912263452396669	0.5414753225113267	0.5222323864211750	T	T	T
0.2455321664133207	0.5132693988474055	0.4975801121096083	T	T	T



IS: -226.572904 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 5 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444358	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777715	0.2222222222222143	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.44444444444444287	0.88888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.77777777777777573	0.88888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111072	0.88888888888888573	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221225239738763	0.1111988322402645	0.2206451359465657	T	T	T
0.5575361751362200	0.1101481751852690	0.2228274993030381	T	T	T
0.8858398524200540	0.1088384829957792	0.2230271159478011	T	T	T
0.2223466826562194	0.4442057722984127	0.2207219531360208	T	T	T
0.5558616266829091	0.4442044992563759	0.2210660719642243	T	T	T
0.8904949414701837	0.4469663973078501	0.2226300685605911	T	T	T
0.5573495837296994	0.7797574723514176	0.2226846242849348	T	T	T
0.8906729156568214	0.7764074126521029	0.2226979868708636	T	T	T
0.2204977212626868	0.7769035237802471	0.2219439751160558	T	T	T
0.0018824018319244	0.9999054579632251	0.3304547084893665	T	T	T
0.3326147414953952	0.0030620811010300	0.3291885003461342	T	T	T
0.6664125391999599	0.9999383850174902	0.3400098289510839	T	T	T
0.3338712156027271	0.3336337938787881	0.3307011500837926	T	T	T
0.6678815179638384	0.3361240345398069	0.3303750714408028	T	T	T
0.0012335334865944	0.3324969329206406	0.3298587321518568	T	T	T
0.3323805136937092	0.6641257625183297	0.3294819475754031	T	T	T
0.6692209822002755	0.6650788081234273	0.3302605400765656	T	T	T
0.0064626133550414	0.6684393978213843	0.3436074537150974	T	T	T
0.0531587571418376	0.6747556552904018	0.4488681800660299	T	T	T
0.6291864271244492	0.9742886765897679	0.4541009709748297	T	T	T
0.2276850896536516	0.6560528778778618	0.4722206481363364	T	T	T

0.9093016842139798	0.5452137858169206	0.4706895203532088	T	T	T
0.4849129578965548	0.8596761760084199	0.4638580950170167	T	T	T
0.0796704821362575	0.8224645237358511	0.4710025280769395	T	T	T
0.7210516832382305	0.9265238504754126	0.4722240813252812	T	T	T
0.2082762151232647	0.5235994942455173	0.4535129988127687	T	T	T

TS: -226.034411 eV
2.4900000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292
36 1 2 5 #Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333351 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666635 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333355 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666635 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000002 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333355 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666639 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.00000000000000103 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111133 0.2222222222222124 0.11111111111111071 F F F
0.4444444444444329 0.2222222222222124 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777682 0.2222222222222124 0.11111111111111071 F F F
0.4444444444444424 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777771 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.1111111111111141 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.44444444444444318 0.8888888888888568 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777601 0.8888888888888568 0.11111111111111071 F F F
0.11111111111111054 0.8888888888888568 0.11111111111111071 F F F
0.2223582044578588 0.1121582584906445 0.2205970233570528 T T T
0.5578865601625320 0.1104082494421436 0.2226187452387361 T T T
0.8861628609954655 0.1087911321327781 0.2222807322062147 T T T
0.2228388933570410 0.4453691012639024 0.2208736857121124 T T T
0.5552431417605517 0.4442549855976922 0.2214015328270642 T T T
0.8905683205167142 0.4467861199977354 0.2224353302492009 T T T
0.5551254579687213 0.7785970213860589 0.2235980640829361 T T T
0.8906505097218074 0.7769500831261517 0.2221282718377082 T T T
0.2215406683228880 0.7778311797967566 0.2220395767703208 T T T
0.0021257620941380 0.9985688992700057 0.3302109082328563 T T T
0.3341581809690443 0.0077986483691268 0.3288450722158248 T T T
0.6697965537470596 0.0027350355812160 0.3388375509923682 T T T
0.3323277086516983 0.3355175670907352 0.3329204028121018 T T T
0.6669538897518238 0.3362747186027762 0.3303856663158943 T T T
0.0003568472886827 0.3292401368342127 0.3298308882646745 T T T
0.3331637153685575 0.6683848950654442 0.3331611907024298 T T T
0.6722497386607045 0.6659098756720438 0.3299299383991436 T T T
0.0054350405123980 0.6673215888580437 0.3411482598831235 T T T
0.0876365679243377 0.6446218525446393 0.4416907076281094 T T T
0.6362146394021074 0.9711429648495153 0.4526322814691651 T T T
0.2625896723600414 0.6209352293340114 0.4444025136005073 T T T
0.9496847054751125 0.5104630129480071 0.4648107134623795 T T T
0.5019325294943869 0.8378928783883390 0.4584305735208341 T T T
0.1223896633544356 0.7912203668021033 0.4678757277064391 T T T

0.7445448054037278	0.9467880834919609	0.4713618527505933	T	T	T
0.2330839648822057	0.4627817861707442	0.3989540966204678	T	T	T

FS: -223.066305 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

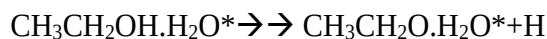
36 1 2 4 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228084125332195	0.1122713040045009	0.2220762645064155	T	T	T
0.5558715660980547	0.1106758571661489	0.2207370287390151	T	T	T
0.8900891559224505	0.1146200802068945	0.2230006031403917	T	T	T
0.2227838405884723	0.4431660272012392	0.2235712182147041	T	T	T
0.5543427549818855	0.4437627756112884	0.2222514864102607	T	T	T
0.8904451339815472	0.4457777402862251	0.2219811664893536	T	T	T
0.5511742157227091	0.7757337962963141	0.2231419555011144	T	T	T
0.8887137124187554	0.7774577065759968	0.2207046905422208	T	T	T
0.2203674533743054	0.7757749862489220	0.2217435629740962	T	T	T
0.9983822904448332	0.9967466284540888	0.3297969895067468	T	T	T
0.3361159984093748	-0.0025864275163616	0.3288089834348343	T	T	T
0.6672087053584483	0.9988073157576204	0.3309331065126903	T	T	T
0.3418656402536275	0.3259919572031754	0.3368548483270817	T	T	T
0.6690939888750682	0.3298547697385513	0.3290852328718488	T	T	T
0.0007286931543577	0.3293943407137301	0.3359063186696878	T	T	T
0.3356014668338854	0.6650402522254185	0.3359728505417190	T	T	T
0.6699811844748437	0.6687184727076508	0.3299760509353287	T	T	T
0.9955864031240041	0.6719444435725231	0.3363000047113143	T	T	T
0.0398718119440648	0.6221986611257952	0.4370812952877963	T	T	T
0.3472545548973308	0.3278333432393312	0.4521280916230790	T	T	T
0.1460001106228286	0.5168236984090819	0.4217953616870804	T	T	T
0.2652165238017867	0.3990572870237798	0.4595594633338264	T	T	T
0.2585006868458337	0.1846864613199519	0.4674249088530507	T	T	T
0.8905413524415620	0.5244220588270478	0.4642173568930931	T	T	T

0.1373355063846878 0.7689722317039922 0.4658298478702450 T T T



IS: -247.55000 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224595436527332	0.1116000606878847	0.2214165427876678	T	T	T
0.5570460491347684	0.1142921609318503	0.2236377611523386	T	T	T
0.8888692342997702	0.1117560277331916	0.2215643187311842	T	T	T
0.2220444083408030	0.4450541771565282	0.2212725857121700	T	T	T
0.5567662510889201	0.4435590865637292	0.2232443316472813	T	T	T
0.8858910404954879	0.4433761666758841	0.2236843947359439	T	T	T
0.5554236207181601	0.7782929964032762	0.2212364724874190	T	T	T
0.8890703767268723	0.7783168937631681	0.2214078868551561	T	T	T
0.2225079633918866	0.7780363549674501	0.2210026078616774	T	T	T
-0.0000302330390203	0.0001893620474519	0.3316065221539477	T	T	T
0.3309855765539062	-0.0012852528873393	0.3305811141389587	T	T	T
0.6672186402372842	-0.0011327020959158	0.3309701247465220	T	T	T
0.3307218709308016	0.3331261178702309	0.3306117399807069	T	T	T
0.6670270026792188	0.3344736405609068	0.3419333663952823	T	T	T
0.0018107862504912	0.3333313038610842	0.3310581619107563	T	T	T
0.3332359696446893	0.6671936384778798	0.3311182333450786	T	T	T
0.6673084602205578	0.6696415338967922	0.3303180766741375	T	T	T
0.0023933806977592	0.6700022813781420	0.3306131762130604	T	T	T
0.6788364831242903	0.7877873572387403	0.5406814991964576	T	T	T
0.7126926224050750	0.7863237348228542	0.6221964992922018	T	T	T
0.6595545773703417	0.3337864946678321	0.4555126982968258	T	T	T
0.8065988811594427	0.7210209437499743	0.5027078605423244	T	T	T

0.7214142278122249	0.9437349631112422	0.5215588403877419	T	T	T
0.7090913926051018	0.4770521167551937	0.4764968960284160	T	T	T
0.8459132903082622	0.7901830650025786	0.4544988887361692	T	T	T
0.6107750313762025	0.8282260568110827	0.6517303054845965	T	T	T
0.6776225237239188	0.6323161933998770	0.6408417851048211	T	T	T
0.8733490068069166	0.8974788242542442	0.6369351478347842	T	T	T
0.5153914705514493	0.6836716038475334	0.5262160822067783	T	T	T
0.5140168565915080	0.2490076332301171	0.4687124819406993	T	T	T

TS: -246.83185 eV
 1.0000000000000000
 7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -3.7350000000000003 6.4692097662697572 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903404

36 2 2 8 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2237197833908725	0.1118293520541135	0.2210541717397061	T	T	T
0.5571961611882803	0.1132094917964185	0.2221510589252562	T	T	T
0.8899476834502685	0.1112875046873162	0.2211001821635480	T	T	T
0.2234231550784727	0.4450821159181783	0.2209619228624728	T	T	T
0.5586368730011538	0.4451329721278204	0.2243736256300035	T	T	T
0.8873204337292692	0.4434582135798822	0.2230463794684556	T	T	T
0.5570788207192019	0.7767812318919763	0.2222358842033985	T	T	T
0.8876905382499339	0.7768142062476543	0.2230445388141327	T	T	T
0.2230836665688894	0.7780040158283473	0.2205216479281347	T	T	T
0.0050874357061332	0.0032329614778798	0.3306839581148641	T	T	T
0.3329197130299116	0.9981542489585243	0.3296888071044592	T	T	T
0.6688010644519200	0.0006806079374901	0.3292297699115544	T	T	T
0.3310019873402150	0.3344673929041301	0.3313117830839091	T	T	T
0.6698582262709930	0.3286701787603479	0.3387236064893528	T	T	T
0.0031766379118031	0.3330067704219585	0.3306611631472611	T	T	T
0.3326322602178549	0.6642827764755925	0.3318239544938794	T	T	T
0.6739592917526367	0.6728487528481184	0.3381101357771789	T	T	T
0.0062430246698050	0.6694820276099775	0.3301836038070244	T	T	T
0.6476063825430858	0.7914949350820122	0.4985199702601517	T	T	T
0.8685575628420383	0.8930555305615759	0.5261434978542788	T	T	T
0.6643103034893880	0.3232362849052717	0.4509573762992212	T	T	T
0.6046465806637734	0.6266258063134059	0.4486684956227851	T	T	T
0.6202241137419009	0.9064765379032887	0.4700644968211118	T	T	T
0.6384086194663864	0.4448384182453720	0.4606373494218712	T	T	T

0.8982741791578611	0.0178901048650130	0.5646987337204611	T	T	T
0.8986884878951220	0.7807032070863675	0.5541908626344272	T	T	T
0.9780035878663350	0.9604499389892063	0.4802449656320764	T	T	T
0.5365814554195097	0.7269515413604811	0.5441721940214174	T	T	T
0.5385774318755109	0.1970573633529609	0.4652109236459123	T	T	T
0.4409145235125952	0.5719598459984444	0.3968731924847405	T	T	T

FS: -243.738521 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

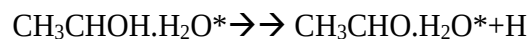
36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2251206476561048	0.1125970910666411	0.2238180215732527	T	T	T
0.5555463927724785	0.1114343933059672	0.2224506365524312	T	T	T
0.8905614101938447	0.1118493443081435	0.2204553408735299	T	T	T
0.2228440467599523	0.4439321161080541	0.2211397008289643	T	T	T
0.5540279535100974	0.4415522936024922	0.2239453107794755	T	T	T
0.8853581391510665	0.4437233006812356	0.2231212710224577	T	T	T
0.5554161938033867	0.7766684817056947	0.2202148729563224	T	T	T
0.8897810465122207	0.7781360803438068	0.2203945339979710	T	T	T
0.2231629187140956	0.7821266635617498	0.2228203635367331	T	T	T
-0.0005733077485227	0.9964943137354347	0.3298889688441717	T	T	T
0.3379313465499481	0.9981819656488177	0.3386668564589563	T	T	T
0.6729642094340613	0.9939618448409568	0.3285059254356310	T	T	T
0.3258378033774758	0.3406661529490005	0.3364042195451870	T	T	T
0.6699027029103353	0.3303205857922774	0.3383359484440022	T	T	T
-0.0007327293806019	0.3344322335357742	0.3292652117715084	T	T	T
0.3336215628628373	0.6689249793581964	0.3287227626365954	T	T	T
0.6701966785284138	0.6677878336511452	0.3297359133093163	T	T	T
0.0004610483558903	0.6676666231568607	0.3310363672304967	T	T	T
0.5949892569180568	0.0837600514267881	0.4805199061822215	T	T	T
0.4262143907159653	0.9286793975766524	0.5301755860807700	T	T	T
0.5111622723093447	0.1609357430442846	0.4258342346976148	T	T	T
0.3124862315100302	0.3432462428728501	0.4498943568532913	T	T	T
0.4929631496331726	0.8732207868656436	0.5719172182878760	T	T	T
0.3998813568716555	0.4869454598349728	0.4648415452094722	T	T	T

0.4004088826696783	0.2720674157960617	0.4531586389937401	T	T	T
0.3108833136031722	0.7957058265013194	0.4984217536950105	T	T	T
0.3461067413329462	-0.0017655426302334	0.5585161497341778	T	T	T
0.7126616630237416	0.2175231658188188	0.5115672082405918	T	T	T
0.6765815804987009	0.0121617484023027	0.4529805281377317	T	T	T



IS: -243.19326 eV

2.4900000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1104986591139287	0.8886667824038629	0.1093905277633733	T	T	T
0.2219964406677098	0.1108826478086878	0.2203264687642430	T	T	T
0.5560276891216510	0.1130033866273896	0.2221838513628207	T	T	T
0.8888080216612613	0.1110939106673831	0.2208520781999273	T	T	T
0.2224111772870466	0.4444543153203398	0.2206304949939845	T	T	T
0.5589953568813288	0.4466402781120851	0.2251828228226867	T	T	T
0.8857018056694201	0.4428317515783823	0.2232256101479764	T	T	T
0.5563798800028259	0.7759733204659598	0.2219872352804197	T	T	T
0.8866923027827539	0.7765028397441550	0.2224939932497887	T	T	T
0.2211387865775170	0.7774575523788034	0.2202159922827900	T	T	T
0.0016045639434415	0.0012731530998484	0.3302586729693088	T	T	T
0.3296367721882529	-0.0030727971032908	0.3290698369669275	T	T	T
0.6665698644099972	-0.0013852961649435	0.3287846593695925	T	T	T
0.3304930898756454	0.3325843177516671	0.3296625024338978	T	T	T
0.6663063915227333	0.3307630686984747	0.3397516082343505	T	T	T
0.0025589085802516	0.3333461439475156	0.3305631547593534	T	T	T
0.3307702968457629	0.6655589097986754	0.3297103162647410	T	T	T
0.6687006914219157	0.6742661840164778	0.3450142886248207	T	T	T
0.0007557578256659	0.6676031470394586	0.3303841622221617	T	T	T
0.6629618210407918	0.7230966674444509	0.4513066104775365	T	T	T
0.8601997860011354	0.7896220912012972	0.4936173561397513	T	T	T
0.5017405637392240	0.5365792955645492	0.4844887877032392	T	T	T
0.6462114756832484	0.2886025311253121	0.4527531198267646	T	T	T

0.3736545763850558	0.4956271866668464	0.4566151135730957	T	T	T
0.8324498212180587	0.8007570522842482	0.5523012576349622	T	T	T
0.9181486129674264	0.6811568441729057	0.4875269022898412	T	T	T
0.9810358010951629	0.9424214399879054	0.4745969917866911	T	T	T
0.6170031383929923	0.8422451802555998	0.4545183807086742	T	T	T
0.5769930377728955	0.3673070676002475	0.4706700394802216	T	T	T
0.5470092122793947	0.1419086070781274	0.4600573146863906	T	T	T

TS: -242.550000 eV
 2.4900000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970378064	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1099991940585126	0.8874442981840533	0.1090075755536775	T	T	T
0.2216743915288092	0.1069132793702701	0.2200152914079381	T	T	T
0.5562182045590661	0.1105455552897664	0.2219337581930888	T	T	T
0.8894244542444321	0.1088415078866713	0.2206022855106110	T	T	T
0.2230411577322043	0.4415328961926378	0.2204261125867311	T	T	T
0.5585830709454983	0.4424659788480589	0.2251034940910545	T	T	T
0.8874129834764845	0.4410115991297069	0.2226079892735440	T	T	T
0.5565527315821799	0.7725236929001826	0.2216434991725309	T	T	T
0.8871519579734495	0.7741543745932553	0.2222364359270793	T	T	T
0.2226683364130746	0.7752423695793415	0.2204374142769780	T	T	T
0.0009916654064036	0.9955974153596014	0.3301951234810493	T	T	T
0.3310440982737212	0.9938916994947418	0.3291103849669781	T	T	T
0.6667136147228341	0.9918002437081689	0.3278211130576472	T	T	T
0.3303276181732427	0.3274387454916809	0.3313291609577391	T	T	T
0.6709993578653251	0.3241976618045181	0.3379286106614071	T	T	T
0.0047657341466843	0.3290107604708822	0.3300896046390889	T	T	T
0.3312974615900512	0.6603345817334182	0.3298972724506986	T	T	T
0.6692687093722861	0.6663560575243563	0.3434756610833132	T	T	T
0.0016209625567747	0.6643412063979085	0.3299410426580203	T	T	T
0.6462382571103213	0.6986031635185105	0.4575473917913750	T	T	T
0.8518725643924629	0.8147033902831032	0.4954994789151711	T	T	T
0.5231990906779516	0.5028336842182479	0.4763383284108927	T	T	T
0.6970541588371105	0.2944244283446291	0.4489506689078351	T	T	T
0.8255743009194882	0.8202211834021104	0.5546672983654312	T	T	T
0.9445158759027178	0.7389940785309699	0.4883217130452899	T	T	T

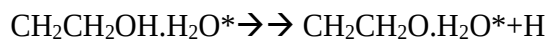
0.9403232187799208	0.9739897287454558	0.4748421358781645	T	T	T
0.5636745356124385	0.7859241823902532	0.4488576919412798	T	T	T
0.6266132091633960	0.3736515932557851	0.4686969818283189	T	T	T
0.6064968116054443	0.1488530215101189	0.4610478757769336	T	T	T
0.3815484950059221	0.4176157278936896	0.4110803065157321	T	T	T

```

FS:          -239.61000 eV
2.4900000000000000
 3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  2  2  6          # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111119389534  0.2222222238779068  0.1111111119389534  F  F  F
0.4444444477558136  0.2222222238779068  0.1111111119389534  F  F  F
0.7777777910232544  0.2222222238779068  0.1111111119389534  F  F  F
0.4444444179534912  0.5555555224418640  0.1111111119389534  F  F  F
0.7777777910232544  0.5555555224418640  0.1111111119389534  F  F  F
0.1111110970377922  0.5555555224418640  0.1111111119389534  F  F  F
0.4444444477558136  0.8888888955116272  0.1111111119389534  F  F  F
0.7777777910232544  0.8888888955116272  0.1111111119389534  F  F  F
0.1111228113174037  0.8888965791857949  0.1097697679553724  T  T  T
0.2225507291403648  0.1106422731777119  0.2211000578972209  T  T  T
0.5568692871724452  0.1129955675529766  0.2231432128371623  T  T  T
0.8889968942192003  0.1108196001709940  0.2214127054323257  T  T  T
0.2223658517751524  0.4440704552491539  0.2213274585289026  T  T  T
0.5570311159705564  0.4427694578002665  0.2233376343550659  T  T  T
0.8862339078802361  0.4426074383387790  0.2236408097442291  T  T  T
0.5553899675360531  0.7770969082400220  0.2210760668246340  T  T  T
0.8893419026498670  0.7773173538930608  0.2211100891062618  T  T  T
0.2221271290643435  0.7770714716210702  0.2208634397395061  T  T  T
0.0006519122619765  -0.0005088362442212  0.3310177370989533  T  T  T
0.3312542333306210  -0.0026591785787563  0.3302755609889280  T  T  T
0.6674110460119609  -0.0027463685588484  0.3303601616621756  T  T  T
0.3315448372103482  0.3322245691434038  0.3306756836114974  T  T  T
0.6677262556712402  0.3338654511866582  0.3410986069591289  T  T  T
0.0023138862971425  0.3323027769689834  0.3308907992539488  T  T  T
0.3338750350028475  0.6665371846283148  0.3310925875671921  T  T  T
0.6676452135887501  0.6684785886568724  0.3303476750131322  T  T  T
0.0022592852407720  0.6687346973236344  0.3306734226271741  T  T  T
0.6517570566158073  0.7158160306711461  0.5505106688531392  T  T  T
0.8785712101920110  0.8333444417502751  0.5378940249552475  T  T  T
0.5353351555637110  0.5358483281672500  0.5317351779797619  T  T  T
0.6565382652824008  0.3070751690617763  0.4551264344300633  T  T  T
0.9589227075493061  0.9310039063282272  0.5853624139475232  T  T  T
0.9397729140274098  0.7315213359362989  0.5237444330800681  T  T  T

```

0.9080189121668788	0.9394152513912808	0.4913056081294888	T	T	T
0.5835706947850512	0.8008756104340884	0.5780968292527960	T	T	T
0.6118598175962408	0.3962846555264113	0.4817332566848042	T	T	T
0.5456201470980545	0.1643566141439976	0.4619149199440931	T	T	T



IS: -243.122728 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2194237055178053	0.1095822105493337	0.2221593787000322	T	T	T
0.5562156715751967	0.1134592252776905	0.2222726153745415	T	T	T
0.8903811738550358	0.1100429317740347	0.2223836121609837	T	T	T
0.2219686284013959	0.4442407543285652	0.2204976788620190	T	T	T
0.5573259815693684	0.4447204540790722	0.2237218299854835	T	T	T
0.8861359283413031	0.4429947683727984	0.2229897709706910	T	T	T
0.5558256210492520	0.7770122610584078	0.2213235757941531	T	T	T
0.8885700211437511	0.7794534714829600	0.2233508779572977	T	T	T
0.2216652517645519	0.7776846299648169	0.2201787313042847	T	T	T
0.0015325315756620	0.0011422148296810	0.3428926467198656	T	T	T
0.3316487438950038	0.9977778245436372	0.3295094888696755	T	T	T
0.6659519731478503	0.9996862150811234	0.3289271859070642	T	T	T
0.3301409352157380	0.3325434281127509	0.3293685342849764	T	T	T
0.6672229594492487	0.3309356381769712	0.3389880787968659	T	T	T
0.0022661123353286	0.3338012255474593	0.3302554523947431	T	T	T
0.3306488320285076	0.6662401484228618	0.3296893170544504	T	T	T
0.6660284740773573	0.6684502506804670	0.3340667144106220	T	T	T
0.0028055894076981	0.6681824191276544	0.3298682368887492	T	T	T
0.7903239418576544	0.8980001553947859	0.4870966262961372	T	T	T
0.9987585990647607	0.9879187779272465	0.4505802918982006	T	T	T
0.6560977262204767	0.3297998459931769	0.4552723488858060	T	T	T
0.6481975912916140	0.6881800045394953	0.4602470795770736	T	T	T

0.7195732516266785	0.9941364971252356	0.4767190984923978	T	T	T
0.6560458007735599	0.4607247428234708	0.4661940759831009	T	T	T
0.0938972587372558	0.1493083863039873	0.4690004091853971	T	T	T
0.0775436631688150	0.9029627560892779	0.4671099284849564	T	T	T
0.8024804255917769	0.8839384449096243	0.5467600981040395	T	T	T
0.5152523976652024	0.2181307959665647	0.4648540650028351	T	T	T
0.5094215641290957	0.6701365409497121	0.4534824671364680	T	T	T

TS: -242.53580 eV
1.0000000000000000
7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-3.7350000000000003 6.4692097662697670 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903297
36 2 2 7 # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333351 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666635 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333355 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666635 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000002 0.3333333333333355 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333355 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666639 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.00000000000000083 0.6666666666666640 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111118 0.2222222222222165 0.11111111111111071 F F F
0.4444444444444359 0.2222222222222165 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777699 0.2222222222222165 0.11111111111111071 F F F
0.4444444444444424 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777771 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.1111111111111141 0.5555555555555564 0.11111111111111071 F F F
0.44444444444444331 0.8888888888888862 0.11111111111111071 F F F
0.7777777777777659 0.8888888888888862 0.11111111111111071 F F F
0.1111111111111103 0.8888888888888862 0.11111111111111071 F F F
0.2203256648005578 0.1099964579842833 0.2219621368256813 T T T
0.5565007960308314 0.1130533020281146 0.2222898669614128 T T T
0.8900667656132620 0.1096762030757718 0.2220981156742617 T T T
0.2221553054296276 0.44444442951757737 0.2206901909859807 T T T
0.5574362589600008 0.4442953698631715 0.2238149863950727 T T T
0.8861515920627575 0.4428070608884860 0.2228946391649055 T T T
0.5557074718631019 0.7763085688864951 0.2216243817183891 T T T
0.8882895026930122 0.7787652693204324 0.2234263840520605 T T T
0.2217711865157030 0.7772228607445141 0.2201903411140488 T T T
0.0021162975487585 0.0015022987644900 0.3413003694138374 T T T
0.3309080983787597 0.9963227628494483 0.3292633227529579 T T T
0.6666703357043483 0.9998824699956947 0.3291108690506505 T T T
0.3287316847851094 0.3302839638218736 0.3297811068509833 T T T
0.6665600226406070 0.3276885867202010 0.3392221598011221 T T T
0.0020348313001048 0.3328073985931591 0.3300805901293419 T T T
0.3321439157610483 0.6644063072439540 0.3318408267820296 T T T
0.6675494091242923 0.6669083576324023 0.3357188224547445 T T T
0.0039371975458249 0.6676557323611318 0.3295539066164578 T T T
0.7599615189012894 0.8674280775611475 0.4775583410903791 T T T
0.9796299931649564 0.9822632014530310 0.4487444378372546 T T T
0.6674937360719178 0.3400359571783512 0.4511757125326871 T T T
0.6379158089418984 0.6640347162696664 0.4481016118834738 T T T
0.6809681125107845 0.9568309397986611 0.4661365541687305 T T T
0.6579388520078674 0.4715622594109789 0.4597082923771790 T T T

0.0605669602811567	0.1421902380440684	0.4693854888431051	T	T	T
0.0658626837836416	0.9052487468873079	0.4658597253254090	T	T	T
0.7605632687131674	0.8501240872702289	0.5377070913399973	T	T	T
0.5396937533642984	0.2235507845521067	0.4695784634582412	T	T	T
0.4754298289304122	0.6409763394043122	0.3979544921647545	T	T	T

FS: -239.427372 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

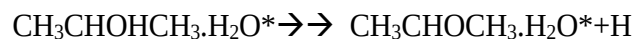
36 2 2 6 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227592023833073	0.1117284379974347	0.2205810109104894	T	T	T
0.5554489807223841	0.1108669060403971	0.2214793083156650	T	T	T
0.8894339882722253	0.1110273612147292	0.2212699220173430	T	T	T
0.2225101254749225	0.4449106827423572	0.2200815562047747	T	T	T
0.5587163133562429	0.4448775529459951	0.2233669309964699	T	T	T
0.8870147368996483	0.4449923553648095	0.2236059320598080	T	T	T
0.5569614507498661	0.7746410445748100	0.2226245750999989	T	T	T
0.8903257260152307	0.7802177758189743	0.2235441082640433	T	T	T
0.2177978865786082	0.7744994834363552	0.2226524693938796	T	T	T
0.0136057288977739	0.0200631713576959	0.3359823263300075	T	T	T
0.3304626194358166	0.9970460462401007	0.3290182681534006	T	T	T
0.6668561965819615	0.9968176505747529	0.3288698918519440	T	T	T
0.3353775948533603	0.3391848339218031	0.3287503125686566	T	T	T
0.6597566645490134	0.3167366875466133	0.3363767507088150	T	T	T
0.0034899681268284	0.3377341664508244	0.3292380521719568	T	T	T
0.3331283229541970	0.6675593952875761	0.3305033264713597	T	T	T
0.6688582849486705	0.6706107519885751	0.3364607351900237	T	T	T
0.9990179572913923	0.6696333686403234	0.3377309976212022	T	T	T
0.9024287245320811	0.8495861687103183	0.4735140264313208	T	T	T
0.0835021883811256	0.0406681080800385	0.4413778129806569	T	T	T
0.6622084222861216	0.3000686367750477	0.4493214065267517	T	T	T
0.8283440126643760	0.6741011054695218	0.4244210054797189	T	T	T
0.7733140892643126	0.8767779358558323	0.4849985166416840	T	T	T
0.7284755891558378	0.4599931933340097	0.4525896454169812	T	T	T

0.1018955025847507	0.1835080649861917	0.4656837436140956	T	T	T
0.2272061570958484	0.0355225661169030	0.4509466383399757	T	T	T
0.9453045088967253	0.8029742020741698	0.5250555911281723	T	T	T
0.5214374711443575	0.2386989672213572	0.4681508159850443	T	T	T



IS: -264.2700 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226274740885124	0.1109250218231037	0.2214150844856628	T	T	T
0.5570986051079522	0.1135755829788144	0.2233568513188527	T	T	T
0.8890598531342793	0.1111139395655455	0.2215380780085407	T	T	T
0.2223978819973548	0.4444191570624541	0.2213343451430821	T	T	T
0.5571781676328138	0.4428910200037935	0.2233670326330038	T	T	T
0.8863731558905330	0.4428891733584694	0.2236078789254808	T	T	T
0.5554089935941893	0.7772957025139384	0.2210830036257363	T	T	T
0.8889938616683193	0.7773321031206638	0.2214878776133542	T	T	T
0.2224627110327108	0.7774686818449975	0.2212463177880405	T	T	T
0.0003774327067241	-0.0001682850326858	0.3312845757233865	T	T	T
0.3318624526730000	-0.0019156096637338	0.3307028385820497	T	T	T
0.6670679599707680	-0.0025612105949637	0.3305605102463518	T	T	T
0.3314444986279748	0.3326404875304102	0.3305408536150893	T	T	T
0.6676614770302300	0.3337763077901112	0.3415214409300677	T	T	T
0.0025041113076140	0.3326988243723064	0.3309845418279306	T	T	T
0.3339459521108413	0.6665715624168979	0.3313613724475931	T	T	T
0.6671652176118471	0.6689168367857691	0.3306380984272505	T	T	T
0.0026668937828426	0.6692273322934466	0.3308384899223724	T	T	T
0.5529623932490821	0.6607357612669773	0.5641506885674900	T	T	T
0.7732393381190821	0.8271580905740837	0.5458824996258921	T	T	T
0.4078281152700779	0.7456438614877644	0.5764423058269849	T	T	T
0.6739978842859192	0.3300790874970077	0.4542847453166940	T	T	T

0.4681783764696727	0.5009930685797580	0.5079021578709066	T	T	T
0.5950978807431978	0.3947781255009842	0.4769176966942577	T	T	T
0.4372057166678863	0.5559849508146820	0.4635265852834810	T	T	T
0.8393178748425153	0.9405250157576945	0.5905245686425826	T	T	T
0.8724166965499975	0.7592403717173097	0.5373957461588477	T	T	T
0.7772382949754133	0.9097894916597494	0.4955172427636043	T	T	T
0.5542915965124753	0.5762872160839191	0.6132543402114767	T	T	T
0.6021212545970562	0.1848798868984441	0.4686542921807323	T	T	T
0.2518685364099371	0.6214088300970856	0.5906676483738695	T	T	T
0.4650510451912743	0.8599095296640977	0.6209035689223643	T	T	T
0.3962186952281640	0.8217842800068250	0.5264969016405038	T	T	T

```

TS:          -263.55000 eV
2.490000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36  3  2  10      # Ni C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2220827480919458  0.1110968642265384  0.2207305128025212  T  T  T
0.5554130327936341  0.1121989044156431  0.2219857672874388  T  T  T
0.8882099700390474  0.1106616099399278  0.2209730139976609  T  T  T
0.2215967775928841  0.4443307488833019  0.2208325529830822  T  T  T
0.5566424296558677  0.4440844797726964  0.2240340867730305  T  T  T
0.8854194030610846  0.4426081537193940  0.2230013194788736  T  T  T
0.5552180161678941  0.7760844062432123  0.2220952956121982  T  T  T
0.8858883914805447  0.7760142317396352  0.2227125916499378  T  T  T
0.2209612771087547  0.7770524594177918  0.2203036408779920  T  T  T
0.0022232732916119  0.0016036933017100  0.3301760297684826  T  T  T
0.3294329641374040  0.9960940415555849  0.3292203424552256  T  T  T
0.6663611737255021  0.9992457125674273  0.3292071132161551  T  T  T
0.3271453861885195  0.3325127175389141  0.3307717149539362  T  T  T
0.6654161913457707  0.3259150908708956  0.3383918065616874  T  T  T
-0.0001246197495624  0.3315348024676180  0.3305689866204845  T  T  T
0.3291426492751187  0.6630591371835761  0.3316231298716824  T  T  T
0.6703706698216877  0.6701455411597955  0.3371191790876304  T  T  T
0.0027020794344238  0.6676452272337180  0.3300146303038213  T  T  T
0.6765753129891491  0.7968555409198361  0.4968796209085585  T  T  T
0.8910536285786076  0.8492265057646577  0.5228813111771983  T  T  T
0.5199977440803709  0.7405362438005402  0.5583226352926856  T  T  T
0.6502075457193677  0.3146101827978050  0.4505094362030733  T  T  T
0.6038318547216786  0.6253249323565974  0.4467206974918477  T  T  T
0.6895720797844425  0.9308782971155881  0.4660734165393459  T  T  T

```


0.6267214948540862	0.4387720673659963	0.4589211352420234	T	T	T
0.9558265424951379	0.9818092231167812	0.5604091669838757	T	T	T
0.8849740261223022	0.7163735687389010	0.5511930346499180	T	T	T
0.9958402187053956	0.8883351215142857	0.4756560887154619	T	T	T
0.5216825655145453	0.1897046705075572	0.4635757233565112	T	T	T
0.4990031486742192	0.6028690002070022	0.5876847877921850	T	T	T
0.5724677221400618	0.8680733995641338	0.5977517383569021	T	T	T
0.3694002530552112	0.7067657671474579	0.5363355980638260	T	T	T
0.4374313808174982	0.5803531370106837	0.3963990899735235	T	T	T

FS: -260.474738 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

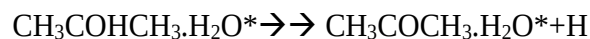
36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1121175078655341	0.8892588397134702	0.1098721785789749	F	F	F
0.2251463848228962	0.1126659169129016	0.2236974575206678	T	T	T
0.5554492222014158	0.1113031774563095	0.2224528807750691	T	T	T
0.8901104372173351	0.1114451112986342	0.2203486337180237	T	T	T
0.2228843260804976	0.4437647681146338	0.2211874411493426	T	T	T
0.5540656709141502	0.4415753293102119	0.2240538695401331	T	T	T
0.8851756281558789	0.4437529340364531	0.2230463454311452	T	T	T
0.5551012352307467	0.7763961117933358	0.2203911742160280	T	T	T
0.8896113125792571	0.7779134969066550	0.2204020947227578	T	T	T
0.2231319887600342	0.7817500572156793	0.2228591251896730	T	T	T
-0.0002553288555841	0.9970242478479892	0.3296985375154310	T	T	T
0.3372578309592709	0.9979643619648060	0.3381737719435277	T	T	T
0.6732249797035837	0.9940303816007712	0.3286910711736044	T	T	T
0.3270001983866137	0.3412986972712633	0.3365741370902200	T	T	T
0.6695702117428161	0.3292171267054622	0.3387091802688806	T	T	T
-0.0010731970958552	0.3336448499199958	0.3288886604290289	T	T	T
0.3326189203587120	0.6679635754327108	0.3291117205451001	T	T	T
0.6708262637132351	0.6677525002854269	0.3298358224279023	T	T	T
-0.0000864917780209	0.6670798529942565	0.3310345987493412	T	T	T
0.5888728224822587	0.0709736660734870	0.4800902316471721	T	T	T
0.4113420151084069	0.9119674557127132	0.5263739609761356	T	T	T
0.7562539969265762	0.2468924272574433	0.5246818035575798	T	T	T
0.5089254829494141	0.1554174939153881	0.4258655252480107	T	T	T
0.3244361178592494	0.3526671244644384	0.4500912751238462	T	T	T
0.4675911549658274	0.8395443878074094	0.5654525924255379	T	T	T

0.1808125660713162	0.2638892137180476	0.4648882701903495	T	T	T
0.3966684557079115	0.2658846103012476	0.4534857523831087	T	T	T
0.6922219922994732	0.3295120288354463	0.5548727395641909	T	T	T
0.2934151135964926	0.7900275680466866	0.4915941804045670	T	T	T
0.3390677414600397	0.9851684242625524	0.5575617106194806	T	T	T
0.8230795692871815	0.1867997871165811	0.5646518784866132	T	T	T
0.8799095201188173	0.3583995492255725	0.4886948690472763	T	T	T
0.6591232698935544	0.9911124858435882	0.4499641790734206	T	T	T



IS: -259.603795 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222008410152610	0.1116739979225106	0.2207208112295831	T	T	T
0.5557915071885924	0.1126765641121887	0.2218432775431924	T	T	T
0.8889308738702200	0.1113376849633120	0.2207242388416814	T	T	T
0.2224519702034150	0.4446366540972737	0.2206894644718466	T	T	T
0.5593866742391980	0.4475657819682032	0.2259131661105116	T	T	T
0.8855447631573433	0.4430095815674229	0.2230973089811309	T	T	T
0.5565271950552546	0.7754638476179153	0.2225295505047672	T	T	T
0.8856242846201855	0.7762491543224910	0.2233680734278992	T	T	T
0.2211749268465617	0.7769044569352237	0.2206910749679710	T	T	T
0.0007853480175295	0.0014719534319761	0.3307453839495952	T	T	T
0.3286903643852628	0.9968400434177154	0.3286801359767651	T	T	T
0.6671534967621122	0.9980530499035334	0.3283225605049134	T	T	T
0.3302713776193097	0.3333760990812348	0.3300691317237847	T	T	T
0.6654777367150138	0.3300479734681130	0.3387802422937282	T	T	T
0.0029557494391175	0.3342171837629190	0.3303294990441296	T	T	T
0.3318048294419270	0.6657291621614713	0.3304373121047014	T	T	T
0.6682983514113472	0.6764279127060202	0.3513763326071647	T	T	T
0.9998928959640183	0.6676830042188515	0.3306693398823087	T	T	T
0.6683904468415177	0.7051067090416775	0.4610919162571845	T	T	T
0.8670129750398550	0.7341307800874874	0.4952175285732319	T	T	T
0.6263509082866714	0.8719535425471773	0.4890989785465549	T	T	T
0.5001024458151425	0.5081856223040890	0.4881278028011557	T	T	T

0.6431048092625630	0.2787162974230990	0.4491174195372236	T	T	T
0.3750174344956431	0.4792411544874735	0.4604842802572227	T	T	T
0.8475060190791845	0.7172153418897329	0.5552259501300640	T	T	T
0.9114318727225980	0.6230262672943395	0.4756026639361245	T	T	T
0.9938465153946181	0.8906338684837106	0.4831809244912022	T	T	T
0.5692307894914844	0.3528572195863714	0.4687359281170183	T	T	T
0.5528156875030051	0.1309698162784856	0.4575472089091487	T	T	T
0.6218281681696285	0.8676225216018256	0.5495175652845601	T	T	T
0.4756722204625915	0.8459945091224061	0.4693242139945721	T	T	T
0.7503747300863519	0.0250007153591869	0.4718283335648143	T	T	T

TS: -258.972214 eV
 1.0000000000000000
 7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -3.7350000000000003 6.4692097662697572 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903404

36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333360	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777789	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.8888888888888856	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888856	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111140	0.8888888888888856	0.11111111111111072	F	F	F
0.2234549895384400	0.1121048471596782	0.2205950835199688	T	T	T
0.5566538847004291	0.1132229030573231	0.2215156784262699	T	T	T
0.8898515925091428	0.1117533076319193	0.2207165421873075	T	T	T
0.2236474616813379	0.4452016246688046	0.2207648289578172	T	T	T
0.5595522352727723	0.4478167646487176	0.2255116776612891	T	T	T
0.8863987776096214	0.4435844564915247	0.2229354421267306	T	T	T
0.5570684500462846	0.7760864999337136	0.2228469596811985	T	T	T
0.8873968726400825	0.7770001137515277	0.2230197720270509	T	T	T
0.2227774640727964	0.7772500209957882	0.2207652082381667	T	T	T
0.0042139425847452	0.0034156164064158	0.3303358721658355	T	T	T
0.3312721180109177	0.9978672111097030	0.3282952884487612	T	T	T
0.6688184492542805	0.0009609134356947	0.3284843846382495	T	T	T
0.3318989359204578	0.3367575720751804	0.3311225593307763	T	T	T
0.6687506672936929	0.3302093636164100	0.3377867230843969	T	T	T
0.0038150840410358	0.3350236996624978	0.3300882851309519	T	T	T
0.3336528137061002	0.6642342149498424	0.3322603540289503	T	T	T
0.6789898795603366	0.6839549686473718	0.3490102363732513	T	T	T
0.0032457445315469	0.6689970364599264	0.3305712418427434	T	T	T
0.6899153748540862	0.7303632753081729	0.4620648289509102	T	T	T
0.8816347624645720	0.7434911744018028	0.4959564067565629	T	T	T
0.6559979610041003	0.9039722967489482	0.4868933308079406	T	T	T
0.5130389724102195	0.5416569655795960	0.4683238906647177	T	T	T
0.6401093361842156	0.2918905542478455	0.4485018521855300	T	T	T
0.8560283589651503	0.7176860604641679	0.5555095808937278	T	T	T

0.9184582074690781	0.6286420560918281	0.4744439164620665	T	T	T
0.0149416938265351	0.8985661047984093	0.4873723092406819	T	T	T
0.6407620997424677	0.8957083552332261	0.5471629590839975	T	T	T
0.5092480230889315	0.8808538371756922	0.4641670290504684	T	T	T
0.7847170406761536	0.0567994427073223	0.4722220794966777	T	T	T
0.5733265995096315	0.3803913445030721	0.4622078123893550	T	T	T
0.5406588573684915	0.1479344653498244	0.4595587985970359	T	T	T
0.4058140826810849	0.5208534430974745	0.4050019526776084	T	T	T

FS: -256.593318 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

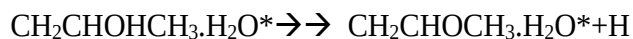
36 3 2 8 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220471046745655	0.1113297661028698	0.2213793664609255	T	T	T
0.5565588900144451	0.1135407912526706	0.2231984334427873	T	T	T
0.8886951206781809	0.1112814828966544	0.2215630163321232	T	T	T
0.2220166033313099	0.4446904218408743	0.2214311252677649	T	T	T
0.5565349499766890	0.4431735264853439	0.2233954603658443	T	T	T
0.8857104138365309	0.4429883565011790	0.2237768410111003	T	T	T
0.5550035758824392	0.7776294572198519	0.2212694317399670	T	T	T
0.8885742300081880	0.7775610661609071	0.2215081620029674	T	T	T
0.2217990809205452	0.7772640653849711	0.2211094506999413	T	T	T
0.0000145795676458	0.0001831073764616	0.3314714713288854	T	T	T
0.3304847229326104	0.9979129671230678	0.3302713324168068	T	T	T
0.6668933395533634	0.9984258364709125	0.3306123505908453	T	T	T
0.3307880809285868	0.3328141017383476	0.3308150186311754	T	T	T
0.6669729158218156	0.3346520438608044	0.3414868445151968	T	T	T
0.0014957315443139	0.3329673635668794	0.3310346244345939	T	T	T
0.3331828989262284	0.6672219039728338	0.3312977954171925	T	T	T
0.6669523489775669	0.6691958421465096	0.3306639877031060	T	T	T
0.0017063005036335	0.6691761172787910	0.3309147042981745	T	T	T
0.6767485929170226	0.7419412235310779	0.5534398254750814	T	T	T
0.9049131902489986	0.8546791681682926	0.5390931181526281	T	T	T
0.5885737930986168	0.8566693559028018	0.5929743587433757	T	T	T
0.6470864884208096	0.3090420959812800	0.4557298500915040	T	T	T
0.5624784472409724	0.5621777231582288	0.5325530079474383	T	T	T
0.6233809317702310	0.4145257588460803	0.4819387614356366	T	T	T

0.9322916550693954	0.9463496355184939	0.4885404127469037	T	T	T
0.9919456117055407	0.9640464698191793	0.5830334161655913	T	T	T
0.9617104465424952	0.7468896039530681	0.5295785293392973	T	T	T
0.6377459842186406	0.8767898763561220	0.6505996592221929	T	T	T
0.6512727090134721	0.0129539957922576	0.5701243458418849	T	T	T
0.4195393409333145	0.7714373482834996	0.5903509145508495	T	T	T
0.5179129465132134	0.1774464435253843	0.4608083773352569	T	T	T



IS: -259.836561 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2193101013646295	0.1097168939142591	0.2220962270598524	T	T	T
0.5560012341400438	0.1136279677120806	0.2222038515513336	T	T	T
0.8901617120562805	0.1101606748234141	0.2223774913466004	T	T	T
0.2218610226158672	0.4443430215692484	0.2204429707531813	T	T	T
0.5573628246341935	0.4452106215593342	0.2238951090389242	T	T	T
0.8861613645295358	0.4431826135236217	0.2229590827460081	T	T	T
0.5558516580657653	0.7771338700780996	0.2214213896538226	T	T	T
0.8882542437692892	0.7794557720484397	0.2235806569716133	T	T	T
0.2216115907405801	0.7778512407094549	0.2201454162621977	T	T	T
0.0013023464238010	0.0012294249766880	0.3427533351455064	T	T	T
0.3313530174287601	0.9978536002351726	0.3295357084558346	T	T	T
0.6655418382497844	0.0002539289602154	0.3288733088748765	T	T	T
0.3297608264804434	0.3323734526572767	0.3293567339613310	T	T	T
0.6672608286676104	0.3314387025335500	0.3387868849933984	T	T	T
0.0022580360939567	0.3339622639229681	0.3302701312321514	T	T	T
0.3301412707937958	0.6661288950001368	0.3295632868874670	T	T	T
0.6657933805088972	0.6689030348649854	0.3349098842391804	T	T	T
0.0028151967184111	0.6683618716715898	0.3298873402150316	T	T	T
0.7849689822104995	0.9010959913367574	0.4865495414977160	T	T	T
0.9945520465209287	0.9883885752361202	0.4503606527955452	T	T	T
0.7922230897746005	0.8902014227424846	0.5696028265544310	T	T	T
0.6559594677745066	0.3292945150456640	0.4557930686699694	T	T	T

0.6480509038610738	0.6892033954089077	0.4583116745905846	T	T	T
0.7134569622202181	0.9934121918528838	0.4702975873817654	T	T	T
0.6580678756134024	0.4614166973111077	0.4662706775773894	T	T	T
0.0914623946104422	0.1495527826895820	0.4686573901627374	T	T	T
0.0701325310487333	0.9009687475943841	0.4679769090447923	T	T	T
0.5131113733957817	0.2196915215300447	0.4637762031913859	T	T	T
0.8608382075406212	0.7964165715555463	0.5864575673950950	T	T	T
0.8866144407193252	0.0462627324104044	0.5923117792100953	T	T	T
0.6368284159136290	0.8227415837891285	0.5935675371022068	T	T	T
0.5055973091713244	0.6635092006938386	0.4552801886144491	T	T	T

TS: -259.246092 eV

1.0000000000000000

7.4700000000000006 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.7350000000000003 6.4692097662697670 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 18.2976883785903297

36 3 2 9 # Ni C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333351	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666635	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333355	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666635	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333355	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333355	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666639	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000075	0.6666666666666640	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111141	0.2222222222222140	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444353	0.2222222222222140	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777704	0.2222222222222140	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444424	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777777	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111141	0.5555555555555564	0.11111111111111071	F	F	F
0.44444444444444350	0.88888888888888631	0.11111111111111071	F	F	F
0.77777777777777635	0.88888888888888631	0.11111111111111071	F	F	F
0.11111111111111071	0.88888888888888631	0.11111111111111071	F	F	F
0.2201725846051237	0.1099905148578196	0.2220213925668755	T	T	T
0.5562877627599744	0.1129423854161834	0.2223482973981348	T	T	T
0.8898006268640475	0.1095601942497406	0.2221138172308447	T	T	T
0.2220388308752395	0.4443693615266109	0.2206324285909833	T	T	T
0.5572537432379253	0.4441994713186588	0.2238041121376508	T	T	T
0.8861085457626903	0.4428185729855789	0.2228984644468210	T	T	T
0.5556336617092008	0.7763346009201431	0.2215954989663109	T	T	T
0.8881436595332283	0.7787021255969848	0.2233831006650857	T	T	T
0.2217241736653799	0.7774269456147612	0.2201724503517691	T	T	T
0.0015240712087706	0.0011154710994114	0.3413107623965985	T	T	T
0.3307696062613777	0.9965705215699582	0.3293689925983321	T	T	T
0.6662446031798025	1.0000234354875883	0.3292292059303507	T	T	T
0.3285443788525604	0.3305724551099324	0.3298757099644833	T	T	T
0.6665572318998173	0.3279912121728878	0.3391425736878829	T	T	T
0.0017474878685559	0.3328005758095055	0.3300265948638038	T	T	T
0.3313991135787093	0.6639690403356177	0.3317045688001358	T	T	T
0.6679281202817973	0.6671727187988978	0.3356208342152744	T	T	T
0.0039613809300251	0.6678150610933359	0.3295695026536172	T	T	T
0.7519086792326145	0.8693733081340723	0.4768672403670530	T	T	T
0.9731818505933777	0.9824355523474025	0.4484329486863801	T	T	T
0.7418922713784813	0.8540662510652408	0.5602973573572593	T	T	T
0.6673329750505050	0.3398898336272020	0.4514762334263754	T	T	T
0.6360731553549157	0.6640978916598916	0.4472057772620572	T	T	T
0.6731557561707776	0.9553229491233617	0.4589755433339760	T	T	T

0.6577768049445151	0.4710513527138744	0.4598654885152821	T	T	T
0.0554911783383824	0.1427427382198808	0.4686860547222925	T	T	T
0.0564304545610499	0.9033798761749687	0.4669694926487665	T	T	T
0.5384798563364133	0.2234623045069555	0.4692698760639942	T	T	T
0.8189406074761152	0.7705946477393594	0.5800355885458401	T	T	T
0.8191528688879403	0.0089701728018963	0.5849167141379368	T	T	T
0.5803341923023704	0.7712819174293757	0.5787997907511711	T	T	T
0.4706359916257934	0.6323716120210314	0.3977241108454198	T	T	T

FS: -256.145152 eV

2.4900000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 8 # Ni C O H

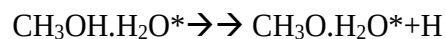
Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223909544547907	0.1114410726818477	0.2206325826702725	T	T	T
0.5555877394337121	0.1110423314502911	0.2213480123751026	T	T	T
0.8893045256007553	0.1110882585507325	0.2212306503157857	T	T	T
0.2223186926042251	0.4447713307428893	0.2201166289346068	T	T	T
0.5585281524246279	0.4447831565505208	0.2233621660176136	T	T	T
0.8871998772021755	0.4454217312620956	0.2238389203401210	T	T	T
0.5567273702757997	0.7745215682701765	0.2226168392674147	T	T	T
0.8901863523628450	0.7801227191825872	0.2236697604955928	T	T	T
0.2175069960779775	0.7743739534291098	0.2226617204280932	T	T	T
0.0123160062757492	0.0193824435627918	0.3363564855772752	T	T	T
0.3306072740393804	0.9969137552317009	0.3286444829567699	T	T	T
0.6665269262433100	0.9965678881869743	0.3287904578767514	T	T	T
0.3347865807550604	0.3381719200301435	0.3287510899099010	T	T	T
0.6598009593480357	0.3167991091262106	0.3362661519901899	T	T	T
0.0034419413429533	0.3376790430196642	0.3293805928451377	T	T	T
0.3326751326364349	0.6672527686181630	0.3305145256736194	T	T	T
0.6681592078374107	0.6695376612604869	0.3364581924617761	T	T	T
0.9994768803897475	0.6710660811453240	0.3386009649986400	T	T	T
0.8895870715317751	0.8492645268969510	0.4749336567624244	T	T	T
0.0670375313723330	0.0440254813772780	0.4424463949621621	T	T	T
0.9418748175445815	0.7917500543075073	0.5487251913140481	T	T	T
0.6627778304567751	0.2997334602053180	0.4491393332348106	T	T	T
0.8261937673916081	0.6749993435351266	0.4249284259914533	T	T	T
0.7546740292782281	0.8708856137022647	0.4810498136682940	T	T	T

0.7273208520745882	0.4594489352211558	0.4525556255098869	T	T	T
0.0762994539624885	0.1842213097584031	0.4656108187936405	T	T	T
0.2141288060496008	0.0475752840864364	0.4543242870009642	T	T	T
0.5211611500650724	0.2366654857670907	0.4672470570941665	T	T	T
0.0715241606001083	0.7623308601020867	0.5431919953277969	T	T	T
0.9860787346307386	0.9186002666970499	0.5879134136120042	T	T	T
0.8086025902290013	0.6528546392018860	0.5715743753672341	T	T	T

Ru catalyst



IS: -356.571949 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495310

36 1 2 6 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224043963742968	0.1116275959407335	0.2190026559110626	T	T	T
0.5550772804549403	0.1108731536671766	0.2182709396052941	T	T	T
0.8893299509803121	0.1112133223080541	0.2184861524517489	T	T	T
0.2224869558231035	0.4440902371658586	0.2190076844195085	T	T	T
0.5548577345532638	0.4442015849660795	0.2189392985887475	T	T	T
0.8888196188584848	0.4441313710009926	0.2190909841228193	T	T	T
0.5552501880713401	0.7772581242888965	0.2185226409311636	T	T	T
0.8886502543458822	0.7780616755316321	0.2190837447074716	T	T	T
0.2226520645227177	0.7779183775339502	0.2188753947878067	T	T	T
0.9974338394683151	0.9976820467774310	0.3246677055666208	T	T	T
0.3334940669385148	0.9972286279305914	0.3244842389585433	T	T	T
0.6664475427254428	-0.0001242552584734	0.3252418279182943	T	T	T
0.3339487296318732	0.3329646838693883	0.3284808529982813	T	T	T
0.6692340995311689	0.3330362271556610	0.3242918143533324	T	T	T
0.9974395021596848	0.3334062651002127	0.3247974505071785	T	T	T
0.3332511428464459	0.6690324165225268	0.3246368028780992	T	T	T
0.6688764210070056	0.6692201426836879	0.3246625630542559	T	T	T
0.9996424054764884	0.6661653388954564	0.3250689638179072	T	T	T
0.6584285260448988	0.2308996654740473	0.5247450961790081	T	T	T
0.6577219446840740	0.3889592423506996	0.4914371414562261	T	T	T

0.3321736632863240	0.3319046870788464	0.4410543405937246	T	T	T
0.7497007972457835	0.4333054490523871	0.4537131988351583	T	T	T
0.5496042106427566	0.1825539699754800	0.5642474237381749	T	T	T
0.3186393912619149	0.4407051411675714	0.4543019357521545	T	T	T
0.4582883913906707	0.3541462388839363	0.4604993050658142	T	T	T
0.7980874682923863	0.2771935056406120	0.5479030787606330	T	T	T
0.6235372931092240	0.1133336516650089	0.4893237509356311	T	T	T

TS: -356.036361 eV

1.00000000000000000000

8.10000000000000014 .0000000000000000 .0000000000000000

-4.05000000000000007 7.0148057706539646 .0000000000000000

.00000000000000000 .0000000000000000 19.8408669165437317

36 1 2 6 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222215	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555572	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888858	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222208	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666644	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.2229229062467746	.1113270827719887	.2185444915173251	T	T	T
.5558976225135356	.1108289504679148	.2190645286119532	T	T	T
.8891466379931507	.1114125714571952	.2182321102849182	T	T	T
.2236217969447391	.4447783800117939	.2191472035856389	T	T	T
.5564049848143632	.4444825297413692	.2190571798620822	T	T	T
.8891698639889193	.4445273107004237	.2187016533021092	T	T	T
.5563906357056971	.7779218998051911	.2194425446730445	T	T	T
.8887570463112384	.7774484009765159	.2189003363517966	T	T	T
.2216995083726138	.7781585713832039	.2182125163040265	T	T	T
.0022403947355825	.0026268018174747	.3245771648887200	T	T	T
.3311481487458288	.9962922734235015	.3242193593641533	T	T	T
.6680681603057644	.0011230598245343	.3242274308141037	T	T	T
.3282225804776147	.3314193680591617	.3249069763532130	T	T	T
.6677489692747897	.3309367270887884	.3274354539996399	T	T	T
.0018548993293394	.3330940021370940	.3246065328100400	T	T	T
.3323093911125068	.6640879612196958	.3263410723699505	T	T	T
.6705990056153481	.6714766619809036	.3269343850155464	T	T	T
.0058300081936159	.6688804016711271	.3242147897929487	T	T	T
.6742017239139650	.7831643763228867	.4822275580266239	T	T	T
.6637630260661248	.3430235533658037	.4389918326366634	T	T	T
.6099741308724911	.6255394809958846	.4368832461199245	T	T	T
.6325888135129331	.8854263049868752	.4631779198071884	T	T	T
.6395077819365687	.4549763720710164	.4470844646754113	T	T	T
.6089399472844889	.7305025396840528	.5320181025605790	T	T	T

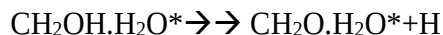
.5495968202666847	.2265797227609893	.4534031725357328	T	T	T
.8305465672351189	.8576439005984138	.4863643634727817	T	T	T
.4557050966518803	.5886948964510376	.3964827407740977	T	T	T

```

FS:          -352.981117 eV
2.700000000000000
 3.0000000000000004  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000002  2.5980762113533200  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495310
36  1  2  5      # Ru C O H
Selective dynamics
Direct
0.2222222222222214 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.11111111111111143 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.4444444444444429 0.00000000000000000 F F F
0.5555555555555571 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.8888888888888857 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.2222222222222214 0.7777777777777786 0.00000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.11111111111111143 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.11111111111111143 F F F
0.2230692399676649 0.1113579056853304 0.2191544396422686 T T T
0.5553869437067624 0.1113117396136612 0.2182018130458877 T T T
0.8894864543978679 0.1117847594222045 0.2183302924583727 T T T
0.2218860479242139 0.4448532266425438 0.2185687749332443 T T T
0.5554210921749416 0.4436490935789582 0.2190559675296803 T T T
0.8879002252521407 0.4448374998801681 0.2196122980503373 T T T
0.5549951565213959 0.7772923599572081 0.2183347889283593 T T T
0.8891064667253655 0.7773186438358464 0.2186628112366380 T T T
0.2218797748700268 0.7785288152432652 0.2197375903460887 T T T
0.9978076022441773 0.9974245511950430 0.3243357475598263 T T T
0.3387455495563818 0.0009703514081318 0.3277490609985230 T T T
0.6717971005331415 0.9954849066587604 0.3236983272170016 T T T
0.3286305695176353 0.3382278942909258 0.3258102349477600 T T T
0.6656000919500157 0.3275009960684325 0.3277295622309051 T T T
0.9977990583188722 0.3330299237318582 0.3236988355114847 T T T
0.3332279559758102 0.6685515967286358 0.3237418015224545 T T T
0.6697991550535177 0.6690287769081160 0.3243356843128273 T T T
0.9997042386481407 0.6670431276102832 0.3249023617931127 T T T
0.5704212623970447 0.0886549478051591 0.4694830309897883 T T T
0.5000976524213218 0.1623115762304290 0.4181828337116756 T T T
0.3356654207218028 0.3463566310280413 0.4371201675129333 T T T
0.4501114700012017 0.9815506812141979 0.4994609289430608 T T T
0.2035010351298314 0.2681972406985650 0.4518069973166582 T T T
0.4014853630539859 0.2640497014789150 0.4407377960979227 T T T

```

0.6706271886946134	0.2065435128438762	0.5019576992054480	T	T	T
0.6461713368751454	0.0193700905532279	0.4473645663128532	T	T	T



IS: -352.557987 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.8408669165437317

36 1 2 5 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2214432836224514	0.1091908876398543	0.2188177785887391	T	T	T
0.5557513217320279	0.1106804117999725	0.2193373927970887	T	T	T
0.8889287844073951	0.1106594482742948	0.2197050378959202	T	T	T
0.2217077524293241	0.4445926785607873	0.2188150051856020	T	T	T
0.5575290603314063	0.4455975744296282	0.2186203461590900	T	T	T
0.8894680555369011	0.4452651227312478	0.2182935033275388	T	T	T
0.5556618516384673	0.7772378650980315	0.2200313236104349	T	T	T
0.8877580203330004	0.7767035708227148	0.2176003479744066	T	T	T
0.2212925414731094	0.7771161738233890	0.2183060433571794	T	T	T
0.0025762431836557	0.9999377053677515	0.3241894392181574	T	T	T
0.3350840662126911	0.0069208584956724	0.3236547148616774	T	T	T
0.6677195510949242	0.0002479948406269	0.3270701726850490	T	T	T
0.3339348351465365	0.3318156010237805	0.3246220973500332	T	T	T
0.6668991318960835	0.3346617726593548	0.3248233071675084	T	T	T
0.9996154197851137	0.3280785392982709	0.3237398692223024	T	T	T
0.3329606901925165	0.6638200633518345	0.3254265151696160	T	T	T
0.6695747631601163	0.6625438446753322	0.3246218001000654	T	T	T
0.0042197675908198	0.6657619654618988	0.3313695622147746	T	T	T
0.0913663950696399	0.6742702922948273	0.4332653255715340	T	T	T
0.6467347207070919	0.9754608258989358	0.4424196459157413	T	T	T
0.2711684290958087	0.6641621628192153	0.4379357297416178	T	T	T

0.9818254372283755	0.5555623760896243	0.4628961797966796	T	T	T
0.5181412280184479	0.8644651723762417	0.4507749298429310	T	T	T
0.1281828845834221	0.8104883071664075	0.4571846202281042	T	T	T
0.7375210825263242	0.9321424129341902	0.4521842085465643	T	T	T
0.2370899829412444	0.5310462570975253	0.4461229514781083	T	T	T

TS: -351.980377 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 .0000000000000000 .0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 .0000000000000000

.0000000000000000 .0000000000000000 19.8408669165437317

36 1 2 5 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222215	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555572	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888858	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222212	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666644	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.2213761071984963	.1096729690652920	.2190695898269324	T	T	T
.5562811234235074	.1111369363121102	.2191002356586008	T	T	T
.8889934848871580	.1107062249531892	.2197468347655883	T	T	T
.2216293618898251	.4442301398864043	.2185733239597059	T	T	T
.5572778995068836	.4452869514762994	.2188903014709573	T	T	T
.8895653935252319	.4456744223688665	.2188257158697124	T	T	T
.5562912854604442	.7775801672530145	.2193872321926503	T	T	T
.8880520882369166	.7767559865896632	.2174298892328591	T	T	T
.2208671913185462	.7775004026280494	.2180919782185114	T	T	T
.0020742139147316	.9974022264814504	.3243558955140099	T	T	T
.3344382722298941	.0076166524945975	.3236177604279024	T	T	T
.6668343994919536	.9986423714536113	.3271316932763411	T	T	T
.3326691706531222	.3321765955906341	.3265274252199611	T	T	T
.6661032451926672	.3341548871890635	.3251286420628304	T	T	T
.9982417686632580	.3264747192139382	.3246844930565592	T	T	T
.3333964732447530	.6660180029278141	.3239149873759932	T	T	T
.6714954528039845	.6625716700077167	.3243117927721944	T	T	T
.0049511130314726	.6645869997628149	.3318371223841438	T	T	T
.1058295518080273	.6529954196897910	.4317730469610770	T	T	T
.6232425937285697	.9582984330848561	.4401135983441078	T	T	T
.2743118052631929	.6364517482320670	.4314923334745123	T	T	T
.9900927238137005	.5319635097679448	.4588134251261746	T	T	T
.4979278871259166	.8365135550167625	.4454138240920846	T	T	T
.1412784259412914	.7885444547362391	.4563409216932467	T	T	T

.7218483340519307	.9333540698169964	.4571670329467204	T	T	T
.2381841805783844	.4752984584162180	.3956642149274915	T	T	T

FS: -349.166733 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

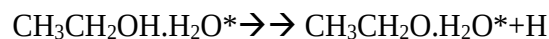
36 1 2 4 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.11111111111111143	0.00000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.00000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.00000000000000000	F	F	F
0.00000000000000000	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.00000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.00000000000000000	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.00000000000000000	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.2226938864184795	0.1110603126225971	0.2196584865554256	T	T	T
0.5560212457443813	0.1105235130435054	0.2179754214998282	T	T	T
0.8890487268629048	0.1115443478381268	0.2178531620147331	T	T	T
0.2219625279283939	0.4448430246907308	0.2191630179755683	T	T	T
0.5554473993985999	0.4439899165252409	0.2198146473144511	T	T	T
0.8879332536272001	0.4440473726571873	0.2194577449912729	T	T	T
0.5550847566177571	0.7774155131229219	0.2177328880494695	T	T	T
0.8885502295337390	0.7782495607744789	0.2184991082384580	T	T	T
0.2227140684426557	0.7789108811871098	0.2193035950755475	T	T	T
0.9964192723394950	0.9970991201798040	0.3244801068338579	T	T	T
0.3346639485196296	0.0020066142910641	0.3266036540069260	T	T	T
0.6698110422722247	0.9966000863128178	0.3289525229802133	T	T	T
0.3291331310931059	0.3375935888131982	0.3262839051679346	T	T	T
0.6648261653923347	0.3326871791839175	0.3265908560457194	T	T	T
0.0004744324005376	0.3363824733552906	0.3237210133575776	T	T	T
0.3309108519712242	0.6666786979436046	0.3237052524396636	T	T	T
0.6691419317856950	0.6702478017494076	0.3244842068920505	T	T	T
-0.0009051380302469	0.6677013455204824	0.3246778203744495	T	T	T
0.6129577582448440	0.0574842845722067	0.4283123521638623	T	T	T
0.5130007944563492	0.1563723316925545	0.4140849707014967	T	T	T
0.3275472927648184	0.3281996030626727	0.4396551353955973	T	T	T
0.5209586599592403	0.9255061362850422	0.4563198906651784	T	T	T
0.4070672630781123	0.4602913940294845	0.4542435039013979	T	T	T
0.4045002209861291	0.2627865511026819	0.4465426153788970	T	T	T

0.7456630097971456 0.1500341125205535 0.4558381891919320 T T T



IS: -373.267605 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2227567895108597	0.1114597557573784	0.2184733642306765	T	T	T
0.5560006713325097	0.1119300100347139	0.2190101819526004	T	T	T
0.8888452148010779	0.1116185576952964	0.2184513885021246	T	T	T
0.2220477215174843	0.4440963564863314	0.2190747866669563	T	T	T
0.5559027882986033	0.4443188443602049	0.2190160626870958	T	T	T
0.8884502173038635	0.4443495288084990	0.2189984558368050	T	T	T
0.5559421904716524	0.7781173698818559	0.2190379645773410	T	T	T
0.8891386459486695	0.7776556503285600	0.2182824593787534	T	T	T
0.2220809442591564	0.7783151367889160	0.2188603489045590	T	T	T
0.0001788853193677	0.0003945267576855	0.3251258611272438	T	T	T
0.3312775497978201	0.9979099926568019	0.3246601281690703	T	T	T
0.6666825122647531	0.9977187446237346	0.3246935048478098	T	T	T
0.3308906996518168	0.3332996560347808	0.3246522645206237	T	T	T
0.6675469331135581	0.3347340336710657	0.3285811232999668	T	T	T
0.0024972843798880	0.3334031929923530	0.3246473891746297	T	T	T
0.3338381448604056	0.6670494243685854	0.3250438636321429	T	T	T
0.6670179588081144	0.6699948481154832	0.3244798184743614	T	T	T
0.0029441266042346	0.6698689320508727	0.3244833379286676	T	T	T
0.6124611004037255	0.6825668327832148	0.5448271893957997	T	T	T
0.8213651220260102	0.8282385596766210	0.5342963507908998	T	T	T
0.6724880064692647	0.3346640420948119	0.4415466819411307	T	T	T
0.5330810313556824	0.5417100405621593	0.4913859379705385	T	T	T

0.5255125943544307	0.7517619758238439	0.5492222914329291	T	T	T
0.6229357297401903	0.4168288570367696	0.4620776833363858	T	T	T
0.5060134083046638	0.5965189672426973	0.4512521484303972	T	T	T
0.8746861251520459	0.9285189439888826	0.5768992297340658	T	T	T
0.9077012395074380	0.7586300011295691	0.5306821652905092	T	T	T
0.8425715216146310	0.9106576868533196	0.4878759842421039	T	T	T
0.5915951571340252	0.5999169309535294	0.5910992255880426	T	T	T
0.5823333061657457	0.2028946928562403	0.4540361682740308	T	T	T

TS: -372.750475 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.8408669165437317

36 2 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222215	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222201	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2230751804728981	0.1115110550871956	0.2184134813588948	T	T	T
0.5559259924817354	0.1110208305856565	0.2190788078221177	T	T	T
0.8892042192549946	0.1114855977941345	0.2182294351282580	T	T	T
0.2237144484226083	0.4448706070665974	0.2191368805218211	T	T	T
0.5564842268268148	0.4446423179540988	0.2190862359468274	T	T	T
0.8891154550335487	0.4446362644333031	0.2187063686344109	T	T	T
0.5565449543836712	0.7780626330200804	0.2193800881410000	T	T	T
0.8887539170300338	0.7774874699778721	0.2189120526401439	T	T	T
0.2217723218633762	0.7783416385549582	0.2182165878295127	T	T	T
0.0024978598860120	0.0031246828797921	0.3246009762531887	T	T	T
0.3311395841503979	0.9967558317448389	0.3240712955569856	T	T	T
0.6681158799368320	0.0013769833169850	0.3242353092760305	T	T	T
0.3282743553413359	0.3321468244987357	0.3250338023566079	T	T	T
0.6677169473114036	0.3311226044858269	0.3275020271974634	T	T	T
0.0017456789116609	0.3333451287042865	0.3245765908546406	T	T	T
0.3319556052758317	0.6642742395725854	0.3261154170119089	T	T	T
0.6708194662593929	0.6720091328162043	0.3269962330944426	T	T	T
0.0059028060178918	0.6688526074109232	0.3241803390746870	T	T	T
0.6592187959693794	0.7780266918934924	0.4840476386603077	T	T	T
0.8631322220451708	0.8610450050070007	0.5079758160101194	T	T	T
0.6617083869901650	0.3421263984875268	0.4391967095089336	T	T	T
0.6079828077908143	0.6247140308751763	0.4369621590142110	T	T	T
0.6390476928446923	0.8890360763383288	0.4590075050979530	T	T	T
0.6377454827178648	0.4543651546519802	0.4472055349460955	T	T	T

0.8978852230480243	0.9763217830056017	0.5443844122814040	T	T	T
0.8858348648035733	0.7522465129189926	0.5324066853244196	T	T	T
0.9631972441839585	0.9211768916089703	0.4653098250120669	T	T	T
0.5582016661910256	0.7208509541543866	0.5265797220538260	T	T	T
0.5459844246206946	0.2257857325643199	0.4526914380894042	T	T	T
0.4523694441305903	0.5804615116454802	0.3956713616683115	T	T	T

FS: -369.741174 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

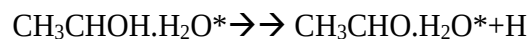
36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.2230568175208193	0.1114232893884250	0.2191774293838572	T	T	T
0.5554196554299266	0.1114312388661065	0.2182161872290092	T	T	T
0.8894659915860467	0.1118286583400186	0.2183721440835594	T	T	T
0.2218808106546863	0.4449612023251496	0.2186200220875976	T	T	T
0.5554601698582193	0.4438169376037348	0.2190714849139541	T	T	T
0.8880435610412410	0.4450102727646308	0.2195197950425724	T	T	T
0.5550255081029266	0.7773731295820688	0.2183632613074562	T	T	T
0.8890841084571630	0.7773778243379020	0.2185931628237033	T	T	T
0.2219105424675115	0.7785977427817911	0.2196853953919964	T	T	T
0.9978462760875019	0.9974489042313904	0.3243336647407710	T	T	T
0.3386349469039418	0.0012724683882342	0.3277397572247589	T	T	T
0.6717899355965888	0.9956987687544319	0.3238700569324742	T	T	T
0.3285415321145920	0.3383237521077672	0.3258964947617667	T	T	T
0.6654859755444777	0.3279628341637505	0.3276756394858482	T	T	T
0.9980037243948203	0.3332609558014116	0.3236781584856367	T	T	T
0.3330372294740309	0.6684687881239454	0.3237439568275252	T	T	T
0.6697315196647461	0.6690687888726142	0.3242957526022753	T	T	T
0.9997869394086778	0.6672366962173772	0.3248821747077451	T	T	T
0.5765133467020890	0.0877703272576784	0.4674918382088215	T	T	T
0.7225019801072886	0.2446594242135454	0.5120481010747616	T	T	T
0.5015994128091238	0.1628724982846945	0.4178281426077184	T	T	T
0.3331507023281726	0.3442711209848909	0.4376110876284457	T	T	T
0.2002889547220109	0.2636211211360562	0.4512191074800853	T	T	T
0.4002277184974485	0.2637319141657024	0.4413473998165460	T	T	T

0.6596498160402485	0.3179486502848122	0.5393790210786960	T	T	T
0.7778014081231447	0.1840925275047957	0.5493790157787092	T	T	T
0.8422270955636230	0.3504957364239122	0.4815229457144071	T	T	T
0.6419855635832431	0.0123080127866601	0.4414491110410760	T	T	T
0.4550154385303204	0.9787455947294826	0.4967283412932982	T	T	T



IS: -369.169659 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2214432570213973	0.1094392440129349	0.2188430197668071	T	T	T
0.5558563585807574	0.1108936944955334	0.2192529294205971	T	T	T
0.8888094289015716	0.1108264525701189	0.2196866057731227	T	T	T
0.2217076453828786	0.4447803400411626	0.2187195965734134	T	T	T
0.5575992074431574	0.4457832644685756	0.2185372509216654	T	T	T
0.8895480428208515	0.4458198003386838	0.2183096825225247	T	T	T
0.5556920546263393	0.7773308401112219	0.2199803862494675	T	T	T
0.8879769070421581	0.7767322565204676	0.2175966321615853	T	T	T
0.2211393458066479	0.7773090041175403	0.2183634623519802	T	T	T
0.0021778291420912	-0.0000550135765370	0.3240677551219953	T	T	T
0.3350724097888664	0.0072445543993565	0.3236419365156510	T	T	T
0.6676156210650109	0.0005683142595632	0.3268639653752946	T	T	T
0.3339516094891650	0.3322010204330092	0.3244600705679209	T	T	T
0.6669405162414803	0.3349071115401255	0.3247465702219796	T	T	T
0.9992672354699869	0.3280561931972252	0.3235693026789697	T	T	T
0.3327166879455429	0.6639521226317069	0.3252740386174721	T	T	T
0.6695580379880547	0.6625244444164470	0.3246420916723342	T	T	T
0.0050456623187159	0.6671642979270263	0.3324328823667320	T	T	T
0.0858921975500520	0.6632152026782112	0.4357151550833366	T	T	T
0.1137231350344331	0.8233080871083645	0.4822098074745165	T	T	T
0.6456876514977397	0.9774563826699837	0.4424547984195403	T	T	T
0.2725554340629808	0.6617104927482569	0.4368211277964764	T	T	T

0.9796117979020078	0.5247480257484668	0.4567628736784419	T	T	T
0.5171812326904190	0.8657666964067330	0.4503640446875860	T	T	T
0.1551036902647782	0.8034322664187312	0.5332824968048230	T	T	T
0.2224195235240777	0.9640813019130171	0.4632624747851478	T	T	T
-0.0207697230914386	0.8248261745156202	0.4859669660102694	T	T	T
0.7367630108391109	0.9343946367047672	0.4519867345086576	T	T	T
0.2452614048049247	0.5307696617258090	0.4453127701668150	T	T	T

TS: -368.607261 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.8408669165437317

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222215	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2213857220334562	0.1098745837313239	0.2191030601320524	T	T	T
0.5562576077349077	0.1111970645320089	0.2191347627367237	T	T	T
0.8887097504060293	0.1106399457899287	0.2197057160642467	T	T	T
0.2216609622867621	0.4442825829640258	0.2185548295927048	T	T	T
0.5572453504865957	0.4452375514260195	0.2188115904417392	T	T	T
0.8893756610595365	0.4459218132911651	0.2186954988745268	T	T	T
0.5561930302620151	0.7775577509433523	0.2193933943860054	T	T	T
0.8882783446242180	0.7766837194659185	0.2174469709393327	T	T	T
0.2206124038440505	0.7774215776960351	0.2181607601949217	T	T	T
0.0016419197198277	0.9975051399917905	0.3242205933629043	T	T	T
0.3342862512961813	0.0075753807353264	0.3237621012579268	T	T	T
0.6667652461096920	0.9986181127977914	0.3270277006951347	T	T	T
0.3326405897707949	0.3326210361542412	0.3264673440682327	T	T	T
0.6663057597423694	0.3342104651189058	0.3250963244689807	T	T	T
0.9978229757101577	0.3262280351694724	0.3245037417272235	T	T	T
0.3330555986597717	0.6659253333414472	0.3238974155014815	T	T	T
0.6714127645111689	0.6623469854634270	0.3243268582011550	T	T	T
0.0056008746880615	0.6658404060070080	0.3325158551909642	T	T	T
0.1020211550504127	0.6479351524506557	0.4340020582940783	T	T	T
0.1341485415182254	0.8089726503672418	0.4809543071160639	T	T	T
0.6251903594630901	0.9574700767030192	0.4402193697439482	T	T	T
0.2736956193680534	0.6357608870630914	0.4313080923585633	T	T	T
0.9857867728458098	0.5106359173163181	0.4528191417050801	T	T	T
0.4991040757310858	0.8367192136059517	0.4454640521368718	T	T	T

0.1767396604644457	0.7858131788093183	0.5313810830071504	T	T	T
0.2456565494818312	0.9492200039083099	0.4624911152525933	T	T	T
0.0022078955346675	0.8148316802286860	0.4861803367707377	T	T	T
0.7229720383720546	0.9291156705407095	0.4556284031839268	T	T	T
0.2384907217820132	0.4752130023662161	0.3954847939479056	T	T	T

FS: -365.811324 eV
 2.700000000000000
 3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

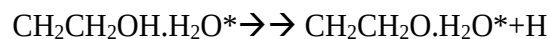
36 2 2 6 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.11111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.11111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.11111111111111143	F	F	F
0.2215750132135761	0.1105495002498553	0.2190709345940467	T	T	T
0.5558802087852005	0.1112013244936381	0.2187583937022565	T	T	T
0.8891741185872528	0.1113108196143582	0.2192664671370297	T	T	T
0.2222039002346539	0.4445801767053624	0.2184161443118164	T	T	T
0.5565587765256319	0.4454179023849625	0.2190064403747464	T	T	T
0.8894385373448039	0.4450672141160890	0.2188601437613712	T	T	T
0.5550426595743524	0.7772448811936145	0.2194741756686954	T	T	T
0.8880621394359104	0.7788141665526769	0.2173742579531272	T	T	T
0.2220936243947781	0.7776386565084954	0.2186339658702914	T	T	T
0.9985161341226108	0.9968608865271241	0.3241833873032654	T	T	T
0.3364941270219164	0.0005163438441783	0.3241925446975804	T	T	T
0.6670596925952623	0.0000294171820598	0.3244577288790219	T	T	T
0.3380383744749100	0.3298642329372204	0.3273297047589604	T	T	T
0.6658558749915123	0.3297235217336999	0.3241204333224331	T	T	T
0.0027200056546830	0.3350395058011456	0.3262085238772372	T	T	T
0.3314564691820522	0.6638340998665438	0.3264021271685634	T	T	T
0.6700762422483967	0.6683629687313587	0.3242914220191921	T	T	T
0.9990752938495034	0.6689006314488440	0.3280660316456028	T	T	T
0.0449059794220746	0.6098326647674377	0.4301726197778288	T	T	T
0.1528800392281626	0.7745473051100343	0.4782446074724346	T	T	T
0.3326506550923035	0.3408900406353018	0.4405990497114619	T	T	T
0.1466857750601474	0.5125044824252610	0.4150759856613670	T	T	T
0.2548407537226617	0.4059339863676109	0.4466700543238181	T	T	T
0.1808045953817421	0.7241181843044538	0.5263415638239938	T	T	T

0.2915539346864160	0.8824002879653272	0.4571209602832857	T	T	T
0.0675396308618308	0.8425126032195609	0.4891180709511194	T	T	T
0.2528044525929007	0.2087358697945358	0.4550210477334312	T	T	T
0.9042475655429647	0.5060148471697211	0.4509199509292550	T	T	T



IS: -369.171550 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2222481885318094	0.1116891152873729	0.2177814544314762	T	T	T
0.5554311177696122	0.1109896781329367	0.2198915416601245	T	T	T
0.8893653085514258	0.1111214581465743	0.2179427570237505	T	T	T
0.2219748185220865	0.4428237720313665	0.2183783986703143	T	T	T
0.5553893505021072	0.4439778749976053	0.2197514787693740	T	T	T
0.8889180041528497	0.4445931207305432	0.2193566453382266	T	T	T
0.5564628497593072	0.7782536655969656	0.2189477812555918	T	T	T
0.8892206818019357	0.7790991567043863	0.2191594248729724	T	T	T
0.2214346937155880	0.7784158226124236	0.2185864162921315	T	T	T
-0.0008729257565917	-0.0017552185674711	0.3305008671474259	T	T	T
0.3329228144824503	0.9980417924112688	0.3239398725261798	T	T	T
0.6640576455685716	-0.0004314198931820	0.3238624177514088	T	T	T
0.3289291384329484	0.3325367697665550	0.3242000585634451	T	T	T
0.6669322608428382	0.3316603450441077	0.3268156341020693	T	T	T
0.0026853082667910	0.3340296224715633	0.3244185653845370	T	T	T
0.3307184658045943	0.6658662790865969	0.3243460024839280	T	T	T
0.6641524111833910	0.6668162975935921	0.3258952729982705	T	T	T
0.0043688399059506	0.6654189029900145	0.3240144153886835	T	T	T
0.7854210858208320	0.8686752076645491	0.4710538245984251	T	T	T
0.9799743832300345	0.9588450576254751	0.4394844206230961	T	T	T
0.6647210774631707	0.3383014347330877	0.4423649849459653	T	T	T
0.6609229943673054	0.6760750759681159	0.4425345852537005	T	T	T

0.7156144115818359	0.9533708701878801	0.4610617296396982	T	T	T
0.6657892720886484	0.4592687886153520	0.4523743570223635	T	T	T
0.0627253886502757	0.1058835137095381	0.4585597259264577	T	T	T
0.0551362794149257	0.8833095728510181	0.4550838345050072	T	T	T
0.7881971996270738	0.8476546739248982	0.5259347062809849	T	T	T
0.5346118561885608	0.2349687764201842	0.4511159017927431	T	T	T
0.5270469947102977	0.6463900024717308	0.4440570051781741	T	T	T

TS: -368.684157 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.8408669165437317

36 2 2 7 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222215	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444430	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222201	0.7777777777777789	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333358	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000001	0.6666666666666645	0.1111111111111143	F	F	F
0.2224405121972327	0.1110091915329161	0.2177945854161101	T	T	T
0.5553804099182372	0.1103700180777527	0.2200800934966755	T	T	T
0.8897400816239945	0.1112027009640910	0.2182698870488290	T	T	T
0.2223709838020581	0.4432253145165725	0.2187738619589130	T	T	T
0.5557201875285305	0.4436365072274754	0.2191407526298675	T	T	T
0.8894478843722579	0.4443064454255352	0.2192728691802621	T	T	T
0.5558041775627992	0.7778479547430117	0.2189854551480558	T	T	T
0.8893681120595225	0.7789520148153171	0.2190422923459618	T	T	T
0.2216879937141583	0.7788559962084479	0.2180225073687731	T	T	T
0.9979039634295264	0.9976523313135642	0.3299988355698936	T	T	T
0.3321451924172311	0.9964837361289393	0.3239803184082120	T	T	T
0.6648960547555659	0.0010491677128792	0.3244893241335933	T	T	T
0.3274605139588070	0.3300253511891788	0.3239835539984565	T	T	T
0.6667690726934004	0.3322311183419202	0.3269497733330936	T	T	T
0.0022120558337763	0.3343641997853812	0.3245324656483513	T	T	T
0.3317430344892359	0.6634314879171320	0.3268599611765934	T	T	T
0.6666393513543052	0.6673294839393035	0.3246441423597611	T	T	T
0.0061846949077856	0.6658155118809953	0.3240207482156600	T	T	T
0.7523897317150290	0.8530375290483042	0.4618707855609709	T	T	T
0.9569390952161980	0.9521977130401758	0.4379374814898191	T	T	T
0.6636268941981356	0.3559068531276478	0.4395361201009142	T	T	T
0.6391220894452634	0.6647404447987987	0.4342863292539191	T	T	T
0.6836004417819017	0.9380797237500023	0.4474368619755476	T	T	T
0.6538910577766402	0.4750726583493469	0.4469245462774065	T	T	T

0.0346293610344479	0.0968705487084848	0.4594475621112655	T	T	T
0.0287035118719881	0.8744911821270130	0.4550010941186643	T	T	T
0.7415944837381603	0.8374149750074282	0.5173812380849083	T	T	T
0.5437887060529716	0.2473556428255086	0.4548599331286035	T	T	T
0.4847794700274463	0.6431231198535426	0.3979482891706652	T	T	T

FS: -365.642603 eV

2.7000000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

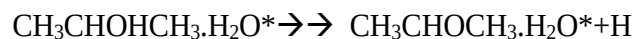
36 2 2 6 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.4444444444444429	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2225893783504085	0.1119620619826912	0.2179735299418525	T	T	T
0.5557553156250306	0.1109053707995410	0.2198089124011269	T	T	T
0.8889409666689632	0.1112303905439066	0.2178915173770323	T	T	T
0.2218668655642930	0.4429942391753995	0.2184247213265685	T	T	T
0.5562090802628650	0.4446171080776664	0.2193811171600816	T	T	T
0.8887799005434920	0.4441725915220051	0.2194599968971548	T	T	T
0.5567432638258222	0.7781870085714686	0.2188032961933624	T	T	T
0.8884783011146534	0.7787049836469012	0.2191602837494975	T	T	T
0.2219629138235637	0.7783305127659349	0.2194223519100852	T	T	T
0.0010617580719493	-0.0004142835490288	0.3293025079288799	T	T	T
0.3338449308909185	0.9987010641882300	0.3235973039695641	T	T	T
0.6654056166417550	0.0001864684406384	0.3241547131414904	T	T	T
0.3283572887050977	0.3314683205010485	0.3239607172584051	T	T	T
0.6667104575151608	0.3309793173236714	0.3271127469394448	T	T	T
0.0034200567100777	0.3337602728426783	0.3242614159268130	T	T	T
0.3313743132071006	0.6665932120555197	0.3238216448429491	T	T	T
0.6648817844585454	0.6679571493153965	0.3267834233841664	T	T	T
0.0052060612990209	0.6664502566735163	0.3241441189087603	T	T	T
0.7808614871168159	0.8380938386876416	0.4631629788521814	T	T	T
0.9835424250744395	0.9533280410421338	0.4371071492352540	T	T	T
0.6766403594758543	0.3584294954992337	0.4368586402996797	T	T	T
0.6734397512339383	0.6595713614633359	0.4296570044764497	T	T	T
0.7054637194127038	0.9202281626209589	0.4567521303292455	T	T	T
0.6763547771332555	0.4891236320353235	0.4430956208962598	T	T	T

0.0555336000243799	0.0963263619565086	0.4600172732342980	T	T	T
0.0650545718142411	0.8825431602058753	0.4509065756656938	T	T	T
0.7788929954708319	0.8071650685377734	0.5176837372808614	T	T	T
0.5592564889562237	0.2548891627942571	0.4557841096317362	T	T	T



IS: -390.037614 eV

2.70000000000000018

3.0000000000000004	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533160	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.2222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2226538575563017	.1112390708917335	.2184119413956364	T	T	T
.5558766239003589	.1116733581690628	.2189747057217125	T	T	T
.8887688062601723	.1114505154428583	.2184519405839002	T	T	T
.2219818517431858	.4439373284973228	.2190769855318647	T	T	T
.5557776669226564	.4440224839329073	.2189703308583390	T	T	T
.8883887562429243	.4441527525802058	.2189975540716483	T	T	T
.5558306069932387	.7779736543999007	.2190463891912706	T	T	T
.8889843177846347	.7774571974840498	.2183697570227632	T	T	T
.2219926288177355	.7781370614464239	.2188654695862551	T	T	T
-.0000227868122128	-.0000549804079836	.3252111988335699	T	T	T
.3310787964340065	.9976938065910782	.3246558553477855	T	T	T
.6665864156528292	.9973965117395012	.3246250486051236	T	T	T
.3307010038281337	.3329045301247530	.3246183341809770	T	T	T
.6674670843106079	.3342537245455642	.3284960241941918	T	T	T
.0026143954482416	.3332017202408079	.3246696455966598	T	T	T
.3335797290902842	.6666590159111384	.3250173499145536	T	T	T
.6667105567253782	.6692610788956471	.3243943369761779	T	T	T
.0029246376939167	.6696380545998287	.3245015374587577	T	T	T
.6869657550686170	.7468637621561754	.5220101117011889	T	T	T
.7987757389036687	.7121698890213278	.5759807270513061	T	T	T
.5695203930559033	.8313102957355381	.5491468018808292	T	T	T
.5602042891622894	.5625971841021877	.4905107586985781	T	T	T

.6748942680995319	.3358254906508188	.4410131072861450	T	T	T
.4950199791815609	.5830871449097599	.4519890653796725	T	T	T
.7026595039481330	.6144166339495027	.6147590705927557	T	T	T
.8811481101856101	.6510332166189656	.5542613351371323	T	T	T
.8989286499017092	.8474266581338953	.6004858213626411	T	T	T
.6342615485035947	.4261622923315976	.4610969406786755	T	T	T
.5801210714849967	.2069552506794601	.4549088477138017	T	T	T
.4709151539171206	.7395833071687828	.5885673511479501	T	T	T
.4854201682484560	.8463893368476794	.5085360994490359	T	T	T
.6633883005432928	.9732401586549979	.5707388960862276	T	T	T
.7855594478724546	.8417812010523720	.4827485045888479	T	T	T

TS: -389.468023 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 .0000000000000000 .0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539539 .0000000000000000

.0000000000000000 .0000000000000000 19.8408669165437423

36 3 2 10 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222218	.1111111111111150	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555577	.1111111111111150	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888861	.1111111111111150	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222225	.4444444444444450	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555575	.4444444444444450	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888866	.4444444444444450	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888852	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222199	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666644	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.2231314563009342	.1114388981916301	.2184676235122905	T	T	T
.5560250918771694	.1109288521972550	.2191299420708271	T	T	T
.8892637780471144	.1114085011697591	.2182416045890113	T	T	T
.2237531320190797	.4448007384357416	.2191364233399667	T	T	T
.5565490329434181	.4446154168440183	.2190709142856888	T	T	T
.8891995327974740	.4445527205723233	.2187117397840749	T	T	T
.5565913998263303	.7779593139372062	.2194108579274748	T	T	T
.8887847844766041	.7774272443391670	.2189275662218967	T	T	T
.2218590622108810	.7782738523770277	.2181927452197650	T	T	T
.0027341169961967	.0030303289461226	.3245645173877410	T	T	T
.3312675345781714	.9965640848656039	.3240884869656800	T	T	T
.6682477146854922	.0012156790854805	.3243553676752032	T	T	T
.3283806632203908	.3318835996900407	.3249723838834181	T	T	T
.6678886928929572	.3311054351704867	.3275096998688669	T	T	T
.0018763140003025	.3332216892939854	.3245518966799207	T	T	T
.3319517436687567	.6640458518154730	.3261892210166527	T	T	T
.6709662755878733	.6717831147404264	.3270530059550434	T	T	T
.0060919877546613	.6687330542385300	.3241920196959352	T	T	T
.6611261792863247	.7820630154783165	.4838466343175279	T	T	T
.8625494533939713	.8529616628859614	.5093332226510480	T	T	T
.5126414313999825	.7148726288401165	.5397506319173456	T	T	T
.6614996624290925	.3425239040679720	.4392798624901685	T	T	T
.6094686736089121	.6268668604851644	.4368595207940145	T	T	T
.6583874132515853	.8986373738855867	.4551453649993634	T	T	T

.6381391008135584	.4550874334758433	.4472957645104409	T	T	T
.9064058012183254	.9749280283864101	.5434342819695891	T	T	T
.8715583219501641	.7399501939289214	.5369348951173235	T	T	T
.9640954244515076	.8994269938293720	.4669946289895036	T	T	T
.5452133927572412	.2264094706199399	.4525481579596332	T	T	T
.5090024191868070	.5961196951479206	.5678975322201579	T	T	T
.5469664955179807	.8315423616321392	.5754549741862470	T	T	T
.3701577274930413	.6667817851738317	.5188547591153445	T	T	T
.4529262785413677	.5834862336405029	.3955274200145289	T	T	T

FS: -386.478028 eV

2.700000000000000

3.0000000000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000002 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

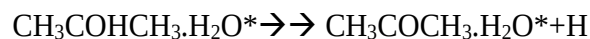
36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

0.2222222222222214	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.1111111111111143	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222285	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.88888888888888928	0.44444444444444571	0.0000000000000000	F	F	F
0.5555555555555571	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.8888888888888857	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.2222222222222214	0.7777777777777786	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.1111111111111143	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.1111111111111143	F	F	F
0.2229296831796486	0.1111559737738653	0.2190895349229176	T	T	T
0.5553175314536473	0.1112360970183664	0.2182095379527151	T	T	T
0.8893636952660031	0.1115832905866593	0.2183700526325378	T	T	T
0.2218490306066920	0.4447617876490783	0.2186369851935580	T	T	T
0.5553081295315517	0.4436090669900696	0.2191593410322220	T	T	T
0.8881687199117375	0.4447718357558166	0.2196315774125950	T	T	T
0.5549144590966970	0.7771287616427122	0.2183818881507021	T	T	T
0.8892819378750014	0.7775066599248308	0.2185445908335280	T	T	T
0.2217868357657714	0.7786208389966479	0.2194938485900526	T	T	T
-0.0022268002866766	0.9968098421207512	0.3242914953097893	T	T	T
0.3388983930690331	0.0011979389581819	0.3277248309985423	T	T	T
0.6710586782660732	0.9948273889776246	0.3239697625255714	T	T	T
0.3284630355765213	0.3378992032313612	0.3259761446580371	T	T	T
0.6655368493137279	0.3280419409977929	0.3277125788636769	T	T	T
-0.0014654900182424	0.3336391629771310	0.3236562774626888	T	T	T
0.3334036115966744	0.6684326567040000	0.3236509255588581	T	T	T
0.6692401935458765	0.6685752687896075	0.3243038108827641	T	T	T
-0.0004029972595731	0.6669117869329042	0.3248210936346922	T	T	T
0.5823652840831616	0.0886188599495087	0.4672150233289872	T	T	T
0.4204787480822453	0.9375166519704327	0.5092197700981650	T	T	T
0.7347631650755281	0.2513003502224787	0.5086082021732784	T	T	T
0.5052762388939920	0.1642932137755324	0.4178362139362669	T	T	T
0.3237291440195202	0.3334221813783803	0.4378011308919803	T	T	T
0.4757276464507263	0.8746428678287184	0.5455986520814763	T	T	T

0.4047394900391584	0.4663908459733599	0.4511975787479064	T	T	T
0.4041239350501472	0.2664143403277945	0.4416289378658174	T	T	T
0.6722862280181258	0.3219294940169127	0.5379042671002630	T	T	T
0.3149305695075248	0.8236457893367521	0.4766970731907368	T	T	T
0.3485713140074119	0.0003080625007558	0.5375442393677908	T	T	T
0.8008984775826984	0.1973090214289298	0.5440680769093763	T	T	T
0.8466346366051765	0.3571944755348394	0.4755962905336266	T	T	T
0.6513443457598935	0.0191552332177292	0.4388146587259392	T	T	T



IS: -385.778848 eV

2.70000000000000018

3.0000000000000004	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533200	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495301

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.2222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2213285119435293	.1097106969758590	.2188409504203572	T	T	T
.5557265985074825	.1108763060606995	.2194679772591246	T	T	T
.8886516600886945	.1107132050214316	.2197113012964239	T	T	T
.2217818109203442	.4447756152845690	.2188735321039562	T	T	T
.5574993919298453	.4456846926580637	.2184714878987594	T	T	T
.8894217116728648	.4458641275635610	.2181555744209110	T	T	T
.5555322361917282	.7773615653395822	.2199536411669245	T	T	T
.8882278090440658	.7766270084419921	.2177016751732213	T	T	T
.2205660368891447	.7770113550900478	.2185504358603451	T	T	T
.0013242615718504	.0002902219333295	.3238509490905704	T	T	T
.3353800612388740	.0074746037789446	.3238442619598965	T	T	T
.6678035750583114	.0004312050762636	.3268148955866968	T	T	T
.3342227800074448	.3327087786030525	.3242186492769940	T	T	T
.6673781279575323	.3357471841536968	.3246129339275574	T	T	T
-.0004578316241241	.3287315307725930	.3236002972953955	T	T	T
.3325103348476618	.6636886361517058	.3253968144608349	T	T	T
.6697558903913317	.6626696450718471	.3246136950163154	T	T	T
.0051452655396534	.6674588481030772	.3333261724472387	T	T	T
.0940522663446649	.6794199345469139	.4382797050124881	T	T	T
.1619993976576607	.8701838639985027	.4728352968633521	T	T	T
.9488928746655716	.5180695326731510	.4821446773846241	T	T	T
.6483760144354539	.9702393576764933	.4426624489248466	T	T	T

.2730674849095211	.6614733024213096	.4370867481523711	T	T	T
.0038467329646480	.5300096070912953	.5340708953203460	T	T	T
.5197618329440444	.8582693264302055	.4503190105749096	T	T	T
.2102552441963156	.8677119355781637	.5248067175357841	T	T	T
.2815446818511042	.9903983025867907	.4459670054734389	T	T	T
.0460056748815772	.9030108764888772	.4748720856985436	T	T	T
.7381336852911256	.9234437308567950	.4485742395195822	T	T	T
.9092834417394043	.3765477245582413	.4618526548354739	T	T	T
.8170596503030697	.5250058671442265	.4846334436849758	T	T	T
.2352969345770687	.5269446396556372	.4444622514702233	T	T	T

TS: -385.190877 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 .0000000000000000 .0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 .0000000000000000

.0000000000000000 .0000000000000000 19.8408669165437317

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.2222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222215	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555572	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888858	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222212	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333358	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666644	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.3333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333358	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.6666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.2211706538487748	.1101880176005665	.2191409928617501	T	T	T
.5562066611448923	.1111238012824296	.2193842991899960	T	T	T
.8887008294474492	.1106727922484315	.2196970077918295	T	T	T
.2216902478390815	.4443016888109936	.2187842033439147	T	T	T
.5571506490715655	.4451269266348905	.2187352990156563	T	T	T
.8893320441279721	.4459591626229677	.2184836796318498	T	T	T
.5560292927587496	.7777092694647386	.2193352134394465	T	T	T
.8884287547884880	.7766909193753027	.2175216542196456	T	T	T
.2200693584687627	.7770587778075235	.2181793890361680	T	T	T
.0007987834319984	.9978923669791306	.3239788151608471	T	T	T
.3345364129592569	.0073522646358457	.3240244138478690	T	T	T
.6674436020727970	.9986703431485449	.3269735292183170	T	T	T
.3332674038211334	.3327904108745756	.3257688683876814	T	T	T
.6669188880439894	.3351967425843603	.3248031353305685	T	T	T
.9985688097373034	.3275005052458248	.3249780022873219	T	T	T
.3328076259572181	.6656897461824498	.3239880916005761	T	T	T
.6711044326694826	.6624716638267764	.3242159234879645	T	T	T
.0053991392820633	.6663217607821403	.3328140929638160	T	T	T
.1087745905434651	.6665787273945426	.4362150258182991	T	T	T
.1804029086246673	.8594716712416031	.4700524321482923	T	T	T
.9560295862323249	.5082897269075228	.4793679414705543	T	T	T
.6285417653791286	.9514857106534973	.4404646904667932	T	T	T
.2716169364779907	.6374965857181026	.4313803944498274	T	T	T
.0129326091621240	.5139606717816193	.5305147116565532	T	T	T

.5011546371418862	.8316927774720611	.4451231337874827	T	T	T
.2378050565701543	.8593919086402583	.5206458629115563	T	T	T
.2970977473423592	.9796670432896338	.4417773022646120	T	T	T
.0652906245574462	.8926861977418432	.4754598491431486	T	T	T
.7245446440213711	.9174920457619747	.4529518650323701	T	T	T
.9100938394256883	.3662144518892298	.4582725936090000	T	T	T
.8295066928649748	.5241630331654514	.4835905996496669	T	T	T
.2233112032608513	.4738197961940576	.3946191519960147	T	T	T

FS: -382.431521 eV

2.70000000000000018

3.0000000000000004	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533160	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495336

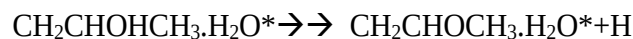
36 3 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222214	.444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222214	.777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2216461642230801	.1105119185166558	.2190994640601577	T	T	T
.5556968328390811	.1111044984819815	.2188523724307227	T	T	T
.8891736244366841	.1114587965475106	.2192216623000233	T	T	T
.2221241035162246	.4445255065256933	.2184729639837691	T	T	T
.5564191165142003	.4452533998510084	.2191324871752483	T	T	T
.8895055618768539	.4452841588285120	.2187817757454011	T	T	T
.5552613358391439	.7775773559237241	.2193855491163843	T	T	T
.8882414875579909	.7786194440929012	.2176388044602726	T	T	T
.2214708213017097	.7773270774197009	.2187074413171732	T	T	T
.9983838360041115	.9974176262117542	.3242413346542846	T	T	T
.3363621086396328	.0005039622806763	.3242185630505782	T	T	T
.6672062511550225	.9995889357808866	.3243035703836929	T	T	T
.3378359660154518	.3300673398031622	.3273088595822100	T	T	T
.6661812664444516	.3300183534482782	.3243207229192679	T	T	T
.0032961780596444	.3350330343356106	.3260152672984691	T	T	T
.3312339317294609	.6636448548420560	.3260829016692859	T	T	T
.6696203667193478	.6690167467292732	.3242178646486317	T	T	T
.9981929501428307	.6689064371332126	.3285679751622120	T	T	T
.0459739929477283	.6157021898079077	.4325550747554703	T	T	T
.1745379601249339	.7926718703603394	.4737875531534137	T	T	T
.8662772598489653	.4846001091450228	.4719820260707902	T	T	T
.3320967474941743	.3444674444466962	.4405255709890959	T	T	T
.1467109263137209	.5173287517199228	.4150416136070532	T	T	T
.9039789487841455	.4467761383211994	.5209787654894292	T	T	T

.2549041986318304	.4107133181149799	.4458764606999182	T	T	T
.2137299011505165	.7517844362238194	.5218474822169284	T	T	T
.3084191241503175	.8892310987827875	.4470415177287321	T	T	T
.0994752315467025	.8705642396601965	.4857211165696628	T	T	T
.2505605195528124	.2125857702014872	.4549761617091398	T	T	T
.7750608409110596	.3495926022490118	.4448493880870403	T	T	T
.7817121402258151	.5537492756930468	.4817475397472903	T	T	T



IS: -385.892429 eV

2.70000000000000018

3.0000000000000004	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000002	2.5980762113533160	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.2222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.5555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.8888888888888857	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.2222222222222214	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2223583398626812	.1117481446558027	.2177270410053223	T	T	T
.5554721126041163	.1110146163768453	.2199426738506575	T	T	T
.8894334460710276	.1110691633938220	.2180434335614378	T	T	T
.2220244061967336	.4428799912330589	.2183835517137133	T	T	T
.5554362223646148	.4440735319060132	.2197647544369608	T	T	T
.8889047487353096	.4445489429657783	.2193313738251408	T	T	T
.5564711081705890	.7783101872800361	.2189054880045931	T	T	T
.8892413475463343	.7791131447187586	.2191416630946561	T	T	T
.2214730880988672	.7784694074256583	.2186080396816699	T	T	T
-.0009043479812697	-.0017556834986055	.3305277655037007	T	T	T
.3325790701204113	.9979986062679231	.3240056816866600	T	T	T
.6639531067351279	-.0001493603459981	.3239247984293836	T	T	T
.3288160823898003	.3324716373767247	.3242096692268492	T	T	T
.6670358749545497	.3318689337800282	.3267547730944089	T	T	T
.0028674369452948	.3344197362642327	.3244343071936422	T	T	T
.3305164984924476	.6658368713030088	.3242902269680970	T	T	T
.6642256307385155	.6669091441347379	.3259125719917939	T	T	T
.0045003860027181	.6655842898338585	.3240233427655733	T	T	T
.7778888147892180	.8733975079217311	.4701046793534002	T	T	T
.9743481566612640	.9609874714397367	.4394491673410549	T	T	T
.7712223080972480	.8577485557552208	.5466090179986973	T	T	T
.6648248517937307	.3385479674086814	.4424971342145735	T	T	T

.6601435827318299	.6775540106873896	.4418417150120770	T	T	T
.7073531481136890	.9535589424044009	.4533336825061626	T	T	T
.6679200589159613	.4605481650688789	.4522162175720246	T	T	T
.0587685655482341	.1079149068514955	.4583800285102354	T	T	T
.0457282255551404	.8826496859897925	.4563655218669616	T	T	T
.5335376208044430	.2367916996157157	.4506916884239854	T	T	T
.8383191644610148	.7764873229402066	.5641484571933177	T	T	T
.8487211279194194	.0010654708563082	.5687932367835928	T	T	T
.6239426728817862	.7884658721415413	.5655492779607011	T	T	T
.5244062045350107	.6416322947774067	.4437933456628967	T	T	T

TS: -385.402880 eV

1.0000000000000000

8.1000000000000014 .0000000000000000 .0000000000000000

-4.0500000000000007 7.0148057706539646 .0000000000000000

.0000000000000000 .0000000000000000 19.8408669165437352

36 3 2 9 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222215	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555572	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888858	.4444444444444430	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222215	.7777777777777789	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666644	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.333333333333358	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333358	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000001	.666666666666645	.1111111111111143	F	F	F
.2224571469640446	.1109773836514356	.2177480328223791	T	T	T
.5553987819975701	.1104390374435563	.2201890253945816	T	T	T
.8897304949624487	.1111639925592142	.2183360922675175	T	T	T
.2224187329917736	.4432727341587516	.2187765475206009	T	T	T
.5557677470607836	.4437043092414624	.2192027298806802	T	T	T
.8894126792125192	.4442292467660658	.2192638422942716	T	T	T
.5558035405722882	.7779071717385341	.2189707753253906	T	T	T
.8894060108565677	.7789721426041772	.2189798593651488	T	T	T
.2217490400702024	.7789208272744057	.2180071352719573	T	T	T
.9977325486292083	.9975257570339056	.3299274451237157	T	T	T
.3318083629361268	.9963623152040190	.3240150094329781	T	T	T
.6648561318925218	.0012507577515380	.3246584804125131	T	T	T
.3274081390131461	.3301144436678157	.3240148199715711	T	T	T
.6668509629849394	.3324912339142329	.3270294650498253	T	T	T
.0022228645355672	.3345714102701888	.3245391379834169	T	T	T
.3314492107230454	.6631358240612100	.3268473207690936	T	T	T
.6667984052618797	.6674662817935464	.3246014773229032	T	T	T
.0061861378379750	.6658743396059273	.3240115485781450	T	T	T
.7483131884302033	.8560453620337776	.4616716607803458	T	T	T
.9536678607006176	.9530314489896146	.4376441760738429	T	T	T
.7260828980770668	.8426009127229357	.5382272199777539	T	T	T
.6632402126682939	.3563442088727676	.4399414377527749	T	T	T
.6389162089238294	.6663388199490170	.4338558488312960	T	T	T
.6806110817627889	.9387365945751137	.4420709909481821	T	T	T

.6539338733730231	.4756193901960853	.4471445994342273	T	T	T
.0334413739925433	.0977584277428421	.4589306944091988	T	T	T
.0222726628263888	.8727882899492110	.4553891475809145	T	T	T
.5423599821898775	.2481441129322431	.4547242558071955	T	T	T
.7916057742543916	.7635723033225035	.5594759425536822	T	T	T
.7966490542487475	.9859151160772091	.5605571972955685	T	T	T
.5748025208715773	.7694468966923150	.5524992967951429	T	T	T
.4825004331307985	.6396763141188119	.3980671085481648	T	T	T

FS: -382.359478 eV
 2.70000000000000018
 3.0000000000000004 .0000000000000000 .0000000000000000
 -1.5000000000000002 2.5980762113533160 .0000000000000000
 .0000000000000000 .0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Ru C O H

Selective dynamics

Direct

.222222222222214	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.1111111111111143	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222214	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.4444444444444429	.0000000000000000	F	F	F
.555555555555571	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.888888888888857	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.222222222222214	.7777777777777786	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.0000000000000000	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.333333333333357	.1111111111111143	F	F	F
.333333333333357	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.666666666666643	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.0000000000000000	.666666666666643	.1111111111111143	F	F	F
.2226831912476450	.1120998281037213	.2177597442808973	T	T	T
.5557242555182668	.1111643487395486	.2200815123995858	T	T	T
.8888709504516307	.1110654824854051	.2181890177595306	T	T	T
.2216131865461199	.4430312799009162	.2184083969603298	T	T	T
.5559766443526780	.4447582469219860	.2193664101598930	T	T	T
.8884568880511701	.4440458467159814	.2194012029550777	T	T	T
.5565149403760925	.7782318125459516	.2186756768755751	T	T	T
.8884171020983828	.7786380853375944	.2189545296479821	T	T	T
.2218737210675299	.7786115288948326	.2193896397291097	T	T	T
.0000820797320991	.0001076074174242	.3292314811569487	T	T	T
.3321776916377248	.9986283601949464	.3237042538944278	T	T	T
.6643279308339399	.0006811321386398	.3245810730806996	T	T	T
.3276505970085125	.3313802138985374	.3238417247740699	T	T	T
.6662602909487022	.3321878176637763	.3272492298976995	T	T	T
.0027732113069374	.3348688024278594	.3242744007131521	T	T	T
.3303571791867169	.6666752520099466	.3237676547911248	T	T	T
.6646698874533937	.6682791438708650	.3263814138269763	T	T	T
.0050473869451897	.6670690017329240	.3241240102245396	T	T	T
.7625828934495950	.8487597442977207	.4604679465127791	T	T	T
.9687417070479920	.9647177752072629	.4371925034915338	T	T	T
.7403795943353311	.8224508897710439	.5368433713062976	T	T	T
.6729026742059174	.3610319225861313	.4377924459517325	T	T	T
.6681512155744357	.6656457948792857	.4289536419594271	T	T	T
.6727447195475015	.4895050276162848	.4441151702825218	T	T	T

.0366678948294570	.1091602357595688	.4588373378573282	T	T	T
.0490319472546143	.8956349440178403	.4544948609560915	T	T	T
.8137090951795090	.7479009769593213	.5552514906070627	T	T	T
.8028537102203381	.9615021245018150	.5621589309098095	T	T	T
.5890437359343116	.7388687954516421	.5507554646104860	T	T	T
.5529044373113660	.2579193056948708	.4553666958272075	T	T	T
.6857185219484132	.9255292332205581	.4439236949935560	T	T	T

Rh catalyst



IS: -290.927470 eV

1.0000000000000000

8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0800000000000001 7.0667672948810303 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107005

36 1 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1115397388653211	0.8896251016316147	0.1100060818602826	T	T	T
0.2231386469096917	0.1127828932213638	0.2204734164933252	T	T	T
0.5553324401921426	0.1107387675132860	0.2191576162480366	T	T	T
0.8893123294944589	0.1113775966126822	0.2193594117543672	T	T	T
0.2234612178674892	0.4432984617984844	0.2209558161250302	T	T	T
0.5538601023669192	0.4436749521436647	0.2205698352209050	T	T	T
0.8891098894282745	0.4445736829197140	0.2192737743258154	T	T	T
0.5555707702952489	0.7775897523999722	0.2193973463365220	T	T	T
0.8893449416448614	0.7776517624037318	0.2188928446137446	T	T	T
0.2220169880315288	0.7778900317104598	0.2190260767920692	T	T	T
0.9972599911243739	0.9974438528138885	0.3284188063146670	T	T	T
0.3334637266025758	0.9975646333401578	0.3283803351690647	T	T	T
0.6669284824027860	0.0000984585237101	0.3291216665435038	T	T	T
0.3335433778647705	0.3334974301848199	0.3343990343251132	T	T	T
0.6692195695227579	0.3328582985776792	0.3280203114291351	T	T	T
0.9971202195374717	0.3328369085418412	0.3287848414410969	T	T	T
0.3339934311141629	0.6697812654323970	0.3284724563597143	T	T	T
0.6694798635362821	0.6699208468825038	0.3283942190535910	T	T	T
0.0000146740630551	0.6665704300298789	0.3287462858105695	T	T	T
0.6434043579452331	0.1883287364725505	0.5184653450398550	T	T	T
0.6476364444104928	0.3533998314961113	0.4905287819313936	T	T	T

0.3298987831937886	0.3271849373465591	0.4448221658831204	T	T	T
0.7354520839450119	0.3987010875993489	0.4520499006250039	T	T	T
0.5362119671218357	0.1356186916904902	0.5580765106371165	T	T	T
0.2241561854731646	0.2016200972618847	0.4552907922162692	T	T	T
0.4490758466166612	0.3320006284592444	0.4626323787126649	T	T	T
0.7814389224371778	0.2262462170621490	0.5403793121292071	T	T	T
0.6051290222799860	0.0773963614402221	0.4803704202724811	T	T	T

TS: -290.354027 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226028115385470	0.1105821640296478	0.2191573183058897	T	T	T
0.5569082764292885	0.1126689219402354	0.2203001425829149	T	T	T
0.8886894580357483	0.1103436312145809	0.2194078151098966	T	T	T
0.2226344423660992	0.4449911619939043	0.2193381522996801	T	T	T
0.5565992707002626	0.4447328400409815	0.2208617103810378	T	T	T
0.8864826299943870	0.4428268357522763	0.2204650287842091	T	T	T
0.5549098536768912	0.7765868612320310	0.2203738103208858	T	T	T
0.8864178454371782	0.7756352856003338	0.2209358969452494	T	T	T
0.2213776934514703	0.7779821613631667	0.2182618212329633	T	T	T
0.0028986650561533	0.0007946316773424	0.3283590846284963	T	T	T
0.3323298797207253	0.9959933310107710	0.3278584765551015	T	T	T
0.6677657972110638	0.0016679675477852	0.3285076306503472	T	T	T
0.3261709520375607	0.3266769052803430	0.3281819437324903	T	T	T
0.6669071014472878	0.3305578975585505	0.3332090876410647	T	T	T
0.0015955196690204	0.3322935403307215	0.3286411904451046	T	T	T
0.3325825189986413	0.6614513095251667	0.3320307388470312	T	T	T
0.6730527783133179	0.6721605236575017	0.3328250620299293	T	T	T
0.0071634969896215	0.6677900902391583	0.3280938146937582	T	T	T
0.6795933745360979	0.7921659469612736	0.4827277633251433	T	T	T
0.6571304390795406	0.3468242889885390	0.4431760145375925	T	T	T
0.6037785380669819	0.6320241730522379	0.4391285250655469	T	T	T
0.6567613541162750	0.9043160448504808	0.4614455181544356	T	T	T
0.6332610931208829	0.4582788204405686	0.4491610995926979	T	T	T
0.6073154380316331	0.7483686208017141	0.5314692042637181	T	T	T

0.5411157199190977	0.2328739609644175	0.4567117106924245	T	T	T
0.8326923769937096	0.8506090986461063	0.4894754195577828	T	T	T
0.4503313013066316	0.6165575550798628	0.3975068584451937	T	T	T

```

FS:          -287.126289 eV
2.7200000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  5      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2223182621538595  0.1110597376097152  0.2188703508054796  T  T  T
0.5567050695702817  0.1127342355668016  0.2204655750474663  T  T  T
0.8885813974849391  0.1109500552127869  0.2190605873175888  T  T  T
0.2222071994921475  0.4442064702259134  0.2188385826746976  T  T  T
0.5569184765280349  0.4448007574855596  0.2213338050989876  T  T  T
0.8862418618585399  0.4430505007351430  0.2204330910995055  T  T  T
0.5566247569061977  0.7762513247273437  0.2205780162587390  T  T  T
0.8851729895522665  0.7754983922581085  0.2207153346603687  T  T  T
0.2217449159810716  0.7773919973826294  0.2187060387284734  T  T  T
0.0023217978926151  0.0020956989060630  0.3284629210561519  T  T  T
0.3303731531349423  0.9978873745035833  0.3279216291067411  T  T  T
0.6669503748503079  0.0009703896804394  0.3281814206239578  T  T  T
0.3269161483357564  0.3293933562652123  0.3280079908542514  T  T  T
0.6666884477542744  0.3304295930584444  0.3334203252671168  T  T  T
0.0020959093902806  0.3334590999487488  0.3283412267166144  T  T  T
0.3300202058140028  0.6658199701250272  0.3279142000876711  T  T  T
0.6677408194518142  0.6725468072026294  0.3345105953763226  T  T  T
0.0053536543760455  0.6693951259728663  0.3281124805581031  T  T  T
0.7173355971761768  0.7943878205840749  0.4805777261711466  T  T  T
0.6668211151749237  0.3511635522986885  0.4411849987468935  T  T  T
0.6420611371377966  0.6381105293030372  0.4360383447956419  T  T  T
0.6581064061564121  0.8871157007168257  0.4695592497257571  T  T  T
0.6571756124478738  0.4778417564689882  0.4464066559169632  T  T  T
0.6777144771141986  0.7404815954924352  0.5321130967102963  T  T  T

```

0.5481316143048542	0.2444718006519475	0.4569612239183230	T	T	T
0.8731153340145675	0.8801461384402302	0.4771650312823242	T	T	T



IS: -286.987516 eV

2.720000000000000020

3.0000000000000000 .0000000000000000 .0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 .0000000000000000
 .0000000000000000 .0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 5 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2221938475377701	.1109122166623760	.2182631071373854	T	T	T
.5573616834250114	.1101536251532474	.2205448224201704	T	T	T
.8864473646517809	.1090173095853195	.2201907288659656	T	T	T
.2222779424837750	.4452425257604699	.2194529267435581	T	T	T
.5562457087716208	.4443907533880123	.2189376693298688	T	T	T
.8905185173802456	.4468358796980562	.2204274179028385	T	T	T
.5546985666288903	.7768674488373792	.2217785512071368	T	T	T
.8901791764205014	.7761270917244546	.2202980784607377	T	T	T
.2210630644899865	.7772759771867728	.2196937524976327	T	T	T
.0024262257492849	.9996225380622336	.3283532411955131	T	T	T
.3330413241609905	.0060532231890314	.3273330352672970	T	T	T
.6678022617527097	.0005103666958989	.3323170196170089	T	T	T
.3338919746879129	.3319103474291734	.3281196859292299	T	T	T
.6666004242451919	.3353744943359572	.3287727835187144	T	T	T
-.0002095651653498	.3284132718601252	.3278251999136742	T	T	T
.3321413910910138	.6648530952652082	.3305355344080173	T	T	T
.6701272727452797	.6626116823726311	.3285622216744508	T	T	T
.0058892988104826	.6660569518554442	.3395194298578908	T	T	T
.0848863162207316	.6722072452552121	.4379009008190112	T	T	T
.6447011589557510	.9670681409379730	.4466336184777555	T	T	T
.2565368181169757	.6557378035796420	.4433967546891702	T	T	T

.9701786144274690	.5551981413413540	.4658249360874535	T	T	T
.5151456690043207	.8589911012224233	.4528687283368552	T	T	T
.1237439100773245	.8097800069219440	.4601186749606663	T	T	T
.7291458924630355	.9156086504595720	.4533582090379391	T	T	T
.2174703708479033	.5205459812697530	.4458108301488051	T	T	T

TS: -286.388745 eV

2.72000000000000020

3.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	
-1.5000000000000000	2.5980762113533200	.0000000000000000	
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495292	

36 1 2 5 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2224058233217547	.1111797542609275	.2182270728979492	T	T	T
.5577213902401372	.1100961615443021	.2204898349119940	T	T	T
.8857864722148449	.1072260508492954	.2200587302422486	T	T	T
.2210594096882339	.4442383741376489	.2195692892875852	T	T	T
.5561507712136318	.4442432180776941	.2193211144507504	T	T	T
.8916840062696453	.4465013386659709	.2209095377802671	T	T	T
.5536636507006175	.7763395258065251	.2218705671608398	T	T	T
.8898124075593028	.7767768074343990	.2199343411730093	T	T	T
.2211677284013912	.7772989472534487	.2193964139416475	T	T	T
.0025333898327794	.9990877600716258	.3280874000168300	T	T	T
.3335408837117393	.0065366825008368	.3271654946656810	T	T	T
.6675440200949732	.9997061862359723	.3325437101677250	T	T	T
.3340884528513119	.3307589959959460	.3286793754939901	T	T	T
.6673847883653011	.3348300232171962	.3289115017997220	T	T	T
.0006897171127659	.3292089142480357	.3316258794784920	T	T	T
.3328223566047306	.6655046830702288	.3299248529884812	T	T	T
.6717271094468864	.6626637572344171	.3280839801242176	T	T	T
.0053291968572672	.6685703530548760	.3387949704307635	T	T	T
.1019784115890331	.6701288848608253	.4361222719400730	T	T	T
.6194558697934845	.9478339244071196	.4447137258447595	T	T	T
.2484233938027994	.6262940535884822	.4343969678563315	T	T	T
.9759714683707740	.5591178335627572	.4619276820055040	T	T	T
.4942613858955701	.8290733596017082	.4477600565108874	T	T	T
.1541615780700100	.8115376216639996	.4578497839981791	T	T	T

.7135901459621016	.9144985940760655	.4590268144370708	T	T	T
.1642669276063901	.4538767042748089	.3982408535927268	T	T	T

FS: -283.376071 eV

2.72000000000000020

3.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495336

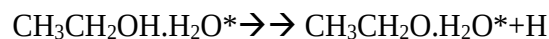
36 1 2 4 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2226806936500687	.1119669173176142	.2199961465097268	T	T	T
.5557789769722556	.1105691964512028	.2192201360456525	T	T	T
.8897357329989436	.1141990384684168	.2218463341268344	T	T	T
.2223549234016171	.4437823867313365	.2196239932574815	T	T	T
.5541741872439443	.4435077566630328	.2200867821308823	T	T	T
.8897103157153770	.4460870498774415	.2196611277827318	T	T	T
.5519382643928407	.7764065984517234	.2218732880634466	T	T	T
.8879925213833608	.7777917226772445	.2189276579016752	T	T	T
.2202842466839934	.7766591207721056	.2195533015552403	T	T	T
.9984893523613791	.9942447833905932	.3281666688599940	T	T	T
.3365314456896197	.0001606288510925	.3279453641821770	T	T	T
.6670206907932033	.9991836938382093	.3290476447692902	T	T	T
.3392241271618753	.3289254672745129	.3318419185321348	T	T	T
.6656586081475452	.3291123960098233	.3279020192723572	T	T	T
.0032857903475565	.3321858695088845	.3316377208947779	T	T	T
.3332382748119990	.6628104800126909	.3318487432781596	T	T	T
.6721109543627638	.6680907787140050	.3281384160516263	T	T	T
.9983190116020821	.6683912541273788	.3347976213048472	T	T	T
.0501763110902605	.6104444894120696	.4312783588641749	T	T	T
.3325571686756931	.3353093834232445	.4442619440346401	T	T	T
.1485434135976147	.5141508490384674	.4184284457021036	T	T	T
.2583852618453417	.4019275751658846	.4498915031574791	T	T	T
.2480588252091046	.2036282650956710	.4569418573573896	T	T	T
.9140717287183506	.5193056260275559	.4563288002848161	T	T	T

.1393654047795015 .7448833248666141 .4575970721043618 T T T



IS: -307.657319 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226776307640728	0.1113287945541208	0.2194338823986063	T	T	T
0.5565110409494723	0.1130786043219437	0.2207377933529810	T	T	T
0.8887084311823225	0.1114249789025623	0.2194653709884343	T	T	T
0.2222370961963436	0.4445199818611817	0.2193713655916698	T	T	T
0.5564506555649200	0.4435647729487284	0.2207552676468917	T	T	T
0.8867282403019336	0.4433216935056827	0.2208725208566676	T	T	T
0.5555447844356669	0.7777739988636094	0.2191911934502027	T	T	T
0.8891397520912819	0.7776231694710455	0.2191745994528065	T	T	T
0.2222428534293315	0.7777762428642437	0.2191102372612112	T	T	T
0.0002126180030262	0.0002605412776959	0.3289514375310864	T	T	T
0.3308884597536943	0.9977746420434526	0.3286647389290573	T	T	T
0.6667041232303653	0.9974398449210220	0.3288195310088282	T	T	T
0.3301290328003059	0.3321970798766845	0.3285304731233765	T	T	T
0.6684873506389815	0.3355164550982652	0.3345011222317986	T	T	T
0.0025414315109458	0.3331285453803557	0.3286611511352559	T	T	T
0.3340812886726323	0.6674221900411423	0.3288795755201542	T	T	T
0.6675370114210577	0.6707007265410601	0.3284072746532614	T	T	T
0.0031468763870796	0.6699196078464473	0.3284262883166587	T	T	T
0.6159246022603354	0.6946845101741347	0.5381462746014015	T	T	T
0.8244083903506048	0.8337038549713012	0.5267741371618185	T	T	T
0.6658957773627671	0.3300890934690558	0.4450198571506824	T	T	T
0.5339268814663064	0.5479152967048848	0.4875986077121883	T	T	T

0.5332418469830996	0.7676456288899002	0.5400150277506726	T	T	T
0.6194671025549116	0.4163985345822491	0.4630495762708298	T	T	T
0.5101201835225366	0.5986114415922965	0.4460247998775882	T	T	T
0.8797882459779161	0.9380043077810918	0.5676042906954536	T	T	T
0.9066099911392104	0.7605972521097202	0.5253901504404942	T	T	T
0.8472856322636056	0.9106720908774193	0.4793424919562630	T	T	T
0.5935440524205039	0.6187062807487690	0.5856705793755920	T	T	T
0.5677390333346163	0.2007498889349071	0.4555352770164584	T	T	T

TS: -307.076192 eV
2.7200000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292
36 2 2 8 # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666651 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666644 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333356 0.6666666666666642 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666642 0.0000000000000000 F F F
-0.0000000000000000 0.6666666666666642 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444433 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111137 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111130 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2226494578532693 0.1107890265431281 0.2191411362468454 T T T
0.5569798695927924 0.1128857392481883 0.2202274346131745 T T T
0.8887065649062931 0.1102295407849680 0.2193908182952879 T T T
0.2226794204028980 0.4451278887657094 0.2193338064766916 T T T
0.5567319600548067 0.4449920498627942 0.2209189154164906 T T T
0.8865861273836381 0.4427969268439625 0.2203820349938672 T T T
0.5551974258637171 0.7767616675454960 0.2204127529525098 T T T
0.8866855840556207 0.7756872635963804 0.2208727157884147 T T T
0.2215956435134177 0.7781594353925402 0.2182253344654425 T T T
0.0034330578241548 0.0013008433957972 0.3284440047603985 T T T
0.3325548220621333 0.9962511817839095 0.3277551722089966 T T T
0.6676127087834647 0.0020107014243393 0.3285276202161360 T T T
0.3265839414912450 0.3271106159676541 0.3282183418449803 T T T
0.6672262563737822 0.3310359838904643 0.3331793909853221 T T T
0.0014866094210890 0.3322946895585700 0.3286246532875742 T T T
0.3326781650842765 0.6613590120888425 0.3318840493274625 T T T
0.6733120859968276 0.6727126355035974 0.3331275049201789 T T T
0.0073858451974871 0.6677302768829199 0.3279239886161819 T T T
0.6689877270840079 0.7903903395112999 0.4844071648745296 T T T
0.8748658598126648 0.8711317859641006 0.5035958606371281 T T T
0.6577332013528203 0.3473322399023140 0.4432491847801933 T T T
0.6036614070575193 0.6324161681184148 0.4396034799085302 T T T
0.6477897211417747 0.9005620562082717 0.4600936692805129 T T T
0.6330867456446899 0.4582054895371415 0.4494462889591258 T T T

0.9184591916021818	0.9897211002828348	0.5386550080595131	T	T	T
0.8993201892904248	0.7638167371255556	0.5273580980223023	T	T	T
0.9662556809172330	0.9249272205655712	0.4588631659426783	T	T	T
0.5769708471545811	0.7404787303076220	0.5290194117879383	T	T	T
0.5423213515762058	0.2327123844721975	0.4567091426725937	T	T	T
0.4491364909209123	0.6131034232496831	0.3969627909974665	T	T	T

FS: -303.841120 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

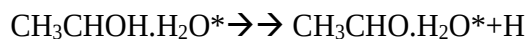
36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221193190595115	0.1111893259933606	0.2188911759666023	T	T	T
0.5567169225721776	0.1129567713662932	0.2204072419391127	T	T	T
0.8883947808010354	0.1108589926651240	0.2191175396687529	T	T	T
0.2220215164324784	0.4443099250961623	0.2188372502388798	T	T	T
0.5567434339618472	0.4450601930928326	0.2213274980696788	T	T	T
0.8861839616358164	0.4431504598969807	0.2204008678151239	T	T	T
0.5564568814004555	0.7763533321736209	0.2204810102335408	T	T	T
0.8848822877753276	0.7754861442801041	0.2208964381694728	T	T	T
0.2215895774240854	0.7775194101565821	0.2186611021972635	T	T	T
0.0027168889465583	0.0026002585905841	0.3286268809894882	T	T	T
0.3305974928882516	0.9980516227681167	0.3278333610765869	T	T	T
0.6663792658383708	0.0010237518829376	0.3283242245764790	T	T	T
0.3270090945366503	0.3298824798734875	0.3279946836641459	T	T	T
0.6665946574400642	0.3306143689479516	0.3334800180812994	T	T	T
0.0019063683494945	0.3335252055942560	0.3283246255315145	T	T	T
0.3296556077211048	0.6657617272098374	0.3278504382605350	T	T	T
0.6680210222735018	0.6727572489871760	0.3344943940629128	T	T	T
0.0053983067350324	0.6692477789681180	0.3280571480122729	T	T	T
0.6823839479061394	0.7855552201607876	0.4825036512511565	T	T	T
0.8897663276479837	0.8923748505080107	0.5023820517341114	T	T	T
0.6648792901070415	0.3500435457315972	0.4417952920007003	T	T	T
0.6379039076130965	0.6372054661032488	0.4358061504667220	T	T	T
0.6404819944862098	0.8842691420007128	0.4608144241690308	T	T	T
0.6535097441514691	0.4743418495865568	0.4472525888751497	T	T	T

0.9158002173017329	0.0026428282366633	0.5393608950924565	T	T	T
0.9339085285571839	0.7965685166582032	0.5238798586754078	T	T	T
0.9795265003789417	0.9623218033149565	0.4582179233384898	T	T	T
0.5922818629287859	0.7201048170956318	0.5269528383069070	T	T	T
0.5456442127849157	0.2424320167905755	0.4567279784238055	T	T	T



IS: -303.627333 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222703745043202	0.1111239284941713	0.2182222864618582	T	T	T
0.5573580286349828	0.1103032181129111	0.2205434551880555	T	T	T
0.8865002565573845	0.1091641333260128	0.2200412125656626	T	T	T
0.2222823568465478	0.4455072391133311	0.2193384570235203	T	T	T
0.5564599470380001	0.4445377564725994	0.2189378390326727	T	T	T
0.8906796451592144	0.4472996934449832	0.2205041323623867	T	T	T
0.5547906964893299	0.7770697804278407	0.2217398017674691	T	T	T
0.8903603591218582	0.7760201649509458	0.2203980124895859	T	T	T
0.2209095249629290	0.7772514483308136	0.2197580383944320	T	T	T
0.0019508004772250	0.9999577979630228	0.3281216983330977	T	T	T
0.3333642628707630	0.0064000337835809	0.3273701109618083	T	T	T
0.6681328134211048	0.0012727801944747	0.3321079907357396	T	T	T
0.3343251148458289	0.3329924187335168	0.3279449107456161	T	T	T
0.6671222801600322	0.3359646743942403	0.3288666458910066	T	T	T
0.9999862630540459	0.3289588458329710	0.3278122969616682	T	T	T
0.3323746616155138	0.6649965116425245	0.3304099364519093	T	T	T
0.6707555269214529	0.6627060786044816	0.3286134613470359	T	T	T
0.0083600210831426	0.6687237688841582	0.3414241622608499	T	T	T
0.0861101987076987	0.6716525637690334	0.4409864432454393	T	T	T
0.1326626369531432	0.8455600229061753	0.4817618111656562	T	T	T
0.6453137244360728	0.9630467028182212	0.4466911366965933	T	T	T
0.2563529685671002	0.6500225867188035	0.4433300589324660	T	T	T

0.9690839098025344	0.5424782231107845	0.4630023478355801	T	T	T
0.5161505464205334	0.8539016612813604	0.4524232149674569	T	T	T
0.1693006218130822	0.8299620670624339	0.5336491392775690	T	T	T
0.2519556631687581	0.9746695476363029	0.4603412211665912	T	T	T
0.0100794770846016	0.8667764422531131	0.4829553242568321	T	T	T
0.7298601622461415	0.9108524520728470	0.4512276458601708	T	T	T
0.2146931102889677	0.5138894857024283	0.4422752981381396	T	T	T

TS: -303.062129 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225919761812729	0.1111805278925247	0.2182513964362140	T	T	T
0.5577628415536235	0.1100273058702410	0.2205001646845629	T	T	T
0.8860395618717051	0.1071566678763108	0.2198591396175167	T	T	T
0.2211793836413215	0.4443972786791857	0.2194583722667337	T	T	T
0.5564677116044463	0.4442172515024976	0.2192804412270781	T	T	T
0.8917396765259045	0.4465322963973974	0.2207806536582115	T	T	T
0.5538580559583089	0.7763417479233128	0.2218933306708303	T	T	T
0.8901413660221638	0.7764170314500756	0.2200792929905131	T	T	T
0.2210540536725434	0.7770612686494378	0.2194726445657353	T	T	T
0.0024408607470856	0.9990903674639433	0.3278976135998177	T	T	T
0.3339936327291765	0.0065840020132462	0.3273382882008732	T	T	T
0.6686628719153579	1.0002929507304743	0.3323037010567036	T	T	T
0.3347914828575826	0.3317966782513222	0.3284498963441048	T	T	T
0.6681617490703075	0.3352260292142384	0.3288751413560050	T	T	T
1.0009417337156692	0.3292711783860896	0.3312788663039302	T	T	T
0.3334940092524483	0.6658474320219084	0.3299513251037014	T	T	T
0.6724488730287335	0.6624193393955773	0.3281822259898158	T	T	T
0.0074739956750525	0.6702939949725804	0.3403352243166445	T	T	T
0.1012179856030822	0.6672226595005797	0.4390967211174795	T	T	T
0.1613907516425796	0.8436450233771821	0.4801045005982471	T	T	T
0.6250412921656170	0.9463212263940658	0.4449910584981472	T	T	T
0.2483633775757258	0.6245177690421693	0.4345624659747370	T	T	T
0.9716042381312080	0.5431179059445090	0.4581843153319837	T	T	T
0.4994139698731898	0.8283264432588738	0.4478793525771183	T	T	T

0.2049955341789249	0.8250578658001811	0.5305517055783699	T	T	T
0.2821603590235824	0.9695702443291252	0.4574638979955875	T	T	T
0.0445069812119035	0.8727948609933234	0.4853637511655734	T	T	T
0.7187239428251569	0.9096572525098805	0.4564803500542545	T	T	T
0.1629766135958888	0.4529418823719010	0.3976442058813593	T	T	T

FS: -300.106338 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

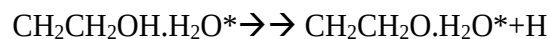
36 2 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2229344968818924	0.1120530789441873	0.2199963574387472	T	T	T
0.5559662844036973	0.1106238324605182	0.2192009457743472	T	T	T
0.8898800351275573	0.1141177044939774	0.2217631590136065	T	T	T
0.2226308541007074	0.4439297773596046	0.2196420259134567	T	T	T
0.5545156508939774	0.4436423710060002	0.2200437692504739	T	T	T
0.8899976230673764	0.4460928223094267	0.2196977619920585	T	T	T
0.5522685512646504	0.7765082197533237	0.2217389359398483	T	T	T
0.8884767242536339	0.7776145430578872	0.2190962519967212	T	T	T
0.2203539297412659	0.7765240737108499	0.2195219217513960	T	T	T
0.9983249256083616	0.9941384292954463	0.3280946904698546	T	T	T
0.3369861894675495	0.0001957794319493	0.3279517020547810	T	T	T
0.6676935652881699	-0.0006472990972461	0.3289261405516025	T	T	T
0.3396943695355650	0.3294749218704959	0.3317651034658482	T	T	T
0.6659546046231619	0.3294333194050414	0.3278664348764599	T	T	T
0.0034880642777987	0.3319805171695800	0.3313392972961136	T	T	T
0.3336888392429602	0.6631211233183973	0.3318188813712708	T	T	T
0.6725278522462635	0.6679192739823528	0.3281757333690288	T	T	T
-0.0003828590151925	0.6693395336143020	0.3355160898980775	T	T	T
0.0468077609046984	0.6082502084889653	0.4331469296862111	T	T	T
0.1536411234275096	0.7757517871046314	0.4791433719261523	T	T	T
0.3323604916639949	0.3361122951370039	0.4443511866142946	T	T	T
0.1454961163744090	0.5128188609018338	0.4184527668856222	T	T	T
0.2573328731936108	0.4020346000684661	0.4495995364122174	T	T	T
0.1818944755495654	0.7289077279331558	0.5274701701093356	T	T	T

0.2908303716652742	0.8810367720750886	0.4574137511670907	T	T	T
0.0683207859344449	0.8430492604016112	0.4888848052654746	T	T	T
0.2483426351704157	0.2042912766061274	0.4570122417155095	T	T	T
0.9039577920198156	0.5070456045144482	0.4519320121909004	T	T	T



IS: -303.564302 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2197053352338004	0.1098715291931267	0.2202082068796520	T	T	T
0.5562915347339743	0.1129411443060773	0.2202074720652006	T	T	T
0.8901427420106174	0.1095852466306386	0.2204073435307201	T	T	T
0.2217552092902225	0.4439224749493784	0.2187456568068691	T	T	T
0.5559475350437608	0.4444368405446973	0.2212805316789336	T	T	T
0.8868794426617169	0.4432243636424094	0.2205659447766592	T	T	T
0.5563154810638330	0.7773541072987759	0.2192893377619823	T	T	T
0.8891121499182956	0.7792205114800317	0.2209395558570232	T	T	T
0.2217129623209008	0.7779276015522918	0.2181244650269506	T	T	T
0.9991993272980426	0.9984677629046136	0.3391018213816847	T	T	T
0.3314691252273942	0.9973903963620439	0.3282025191073536	T	T	T
0.6638004525386544	-0.0001391015163251	0.3278196778783042	T	T	T
0.3282345108789234	0.3319205560209487	0.3281714583195524	T	T	T
0.6676353443997776	0.3322449962779642	0.3319632151032926	T	T	T
0.0032589340347353	0.3340953665583328	0.3286213990647615	T	T	T
0.3310242745423165	0.6660031590518217	0.3278909612557050	T	T	T
0.6652873073048231	0.6686218076664843	0.3304703800505169	T	T	T
0.0059906422971262	0.6677902304507116	0.3278528810788073	T	T	T
0.7839030220896179	0.8792453098848143	0.4734478367311318	T	T	T
0.9793966329634817	0.9685275493678245	0.4438530696382356	T	T	T
0.6602913520714777	0.3432446021116016	0.4461496033973251	T	T	T
0.6614069066861580	0.6863410241081876	0.4468040212970149	T	T	T

0.7153432210957243	0.9629414371417464	0.4616731842939782	T	T	T
0.6668149616157319	0.4666175993024162	0.4540124840452182	T	T	T
0.0611036688793872	0.1140295957577185	0.4632454303368567	T	T	T
0.0518935474704933	0.8910815029049377	0.4588065146746974	T	T	T
0.7860305658286132	0.8634089124717477	0.5282824321055113	T	T	T
0.5279323227810566	0.2466216020455543	0.4534617213436163	T	T	T
0.5295118739731921	0.6591993475745637	0.4466718748676082	T	T	T

TS: -303.003182 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2197585354910913	0.1090371045630993	0.2201956061128174	T	T	T
0.5565906003862484	0.1122584214245283	0.2206302318758156	T	T	T
0.8895686873896482	0.1083121406203149	0.2204657370475731	T	T	T
0.2219896807328758	0.4438547996854327	0.2190663278899321	T	T	T
0.5554685903556991	0.4434137137694493	0.2208079451741931	T	T	T
0.8863007656613088	0.4423260868866258	0.2205332908297682	T	T	T
0.5547221177457980	0.7761079837166166	0.2195439229100997	T	T	T
0.8883837393671006	0.7780251902282942	0.2212626411158923	T	T	T
0.2213264776692645	0.7776824057011825	0.2181299638328875	T	T	T
0.9969132437592600	0.9956396801753288	0.3384859729772729	T	T	T
0.3305861127301564	0.9952097779070070	0.3279025453571872	T	T	T
0.6642259203922732	1.0005797051114886	0.3285718043402112	T	T	T
0.3248493101870218	0.3260338307073073	0.3279088317166892	T	T	T
0.6652224720383908	0.3299807792461974	0.3324116670592667	T	T	T
0.0019326522213562	0.3324156115668875	0.3285031677767607	T	T	T
0.3320605740047152	0.6615850916027285	0.3320371178892749	T	T	T
0.6675004833133529	0.6663649798256079	0.3297537182243602	T	T	T
0.0070245324208402	0.6653130586742436	0.3278598360590382	T	T	T
0.7455147612816876	0.8521547040525732	0.4640757032630599	T	T	T
0.9501676684751493	0.9472514512357302	0.4420807921897443	T	T	T
0.6596620147368294	0.3585300162733279	0.4435970515133063	T	T	T
0.6291562959442473	0.6664440214283545	0.4364618978041032	T	T	T
0.6822137167451544	0.9409700127769378	0.4498747941457374	T	T	T
0.6474259732327436	0.4756463106024061	0.4487388042054800	T	T	T

0.0297113690334184	0.0892063669071945	0.4645496581782381	T	T	T
0.0161462260727424	0.8636384656728158	0.4571582099179836	T	T	T
0.7338022983285929	0.8359742590349714	0.5192168536436287	T	T	T
0.5391424900815553	0.2513597448248116	0.4578794777672097	T	T	T
0.4753273539973625	0.6546427112290981	0.3983308022437383	T	T	T

FS: -299.817838 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

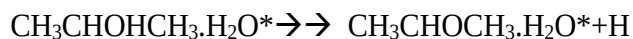
36 2 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2208240124087937	0.1102046019955068	0.2197086431243559	T	T	T
0.5570743871627034	0.1128157268286956	0.2208816334991688	T	T	T
0.8900327786843978	0.1096324111260819	0.2199868936640152	T	T	T
0.2220898050808491	0.4437367996193071	0.2184838248687710	T	T	T
0.5565680330040849	0.4442311838853199	0.2213621186013478	T	T	T
0.8867269521200944	0.4431768599325167	0.2205054080508439	T	T	T
0.5572349537408898	0.7763330739386071	0.2199770114859514	T	T	T
0.8872691397792621	0.7780610530856720	0.2214416262473945	T	T	T
0.2216992407612386	0.7775424345359235	0.2184439860203749	T	T	T
0.0013714473165102	0.0011441951212613	0.3369625970946167	T	T	T
0.3310354717137299	0.9974963725200967	0.3277763171094923	T	T	T
0.6653973609988009	0.0002896645428899	0.3283879539407151	T	T	T
0.3275983515856349	0.3308908327352592	0.3279386997202423	T	T	T
0.6667252099254187	0.3312499384810821	0.3330816090292394	T	T	T
0.0028369276812623	0.3341460829897130	0.3281090160325565	T	T	T
0.3308864596602330	0.6658198850575601	0.3272687165485102	T	T	T
0.6653648854342554	0.6700776530442861	0.3324881626621189	T	T	T
0.0068337697032564	0.6679964682617984	0.3281106483455821	T	T	T
0.7751574763281140	0.8495888331020029	0.4645900871091797	T	T	T
0.9783141293695928	0.9693841493624437	0.4413821339929771	T	T	T
0.6761104744766987	0.3620476761231870	0.4422135868075202	T	T	T
0.6766689847643517	0.6683967074592692	0.4341439197351001	T	T	T
0.6962130354111061	0.9259757290967991	0.4545345778519447	T	T	T
0.6807789859552069	0.4920291634928340	0.4473335124538727	T	T	T

0.0429202691225740	0.1129473995862147	0.4625938747491593	T	T	T
0.0631658607469550	0.9040598304173392	0.4556902033642680	T	T	T
0.7701343296732226	0.8268071923578814	0.5194969769981502	T	T	T
0.5541543669569106	0.2645354137324397	0.4594962906341591	T	T	T



IS: -324.418112 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224987119492948	0.1110115659242016	0.2193581356732572	T	T	T
0.5564281192231346	0.1128705794822261	0.2207454561233952	T	T	T
0.8887119983828083	0.1113313208168608	0.2194697258384480	T	T	T
0.2222732344503604	0.4445142156972189	0.2193628006500397	T	T	T
0.5563046928802641	0.4432053957883621	0.2207046946523077	T	T	T
0.8867947564547943	0.4432707793817054	0.2208807310228093	T	T	T
0.5555039962028072	0.7776661464140118	0.2191404934224076	T	T	T
0.8889418204939072	0.7775107423569982	0.2192632039681603	T	T	T
0.2221482188854034	0.7776869771448034	0.2191125487333658	T	T	T
0.0001070465468544	0.0000542767823123	0.3290775800284255	T	T	T
0.3307837226740423	0.9975743348443418	0.3286804088484819	T	T	T
0.6665999589668866	0.9970863006524970	0.3287132903731390	T	T	T
0.3300509147222317	0.3321135252863872	0.3285244646094003	T	T	T
0.6681219393077130	0.3345911809689958	0.3344148155729822	T	T	T
0.0027071879240280	0.3329512169590738	0.3287112161789640	T	T	T
0.3337032799763137	0.6668920136107142	0.3288617487815211	T	T	T
0.6673098545776786	0.6697971373815597	0.3282064980026304	T	T	T
0.0030369678532246	0.6699049489193154	0.3284529272985454	T	T	T
0.6828355865875013	0.7431367579724438	0.5170509328011670	T	T	T
0.8005604585918767	0.7118887196283197	0.5687767097557431	T	T	T
0.5734851007879124	0.8330945372932477	0.5455591226560190	T	T	T
0.5502097377886215	0.5575647600503766	0.4889153442011565	T	T	T

0.6703030825446777	0.3329210663356231	0.4444467305256294	T	T	T
0.4873477280349016	0.5757962007403136	0.4496510627144894	T	T	T
0.7101243920094387	0.6187449615541076	0.6090337515805502	T	T	T
0.8778260391592362	0.6477951348551040	0.5461070303556576	T	T	T
0.9044367225362655	0.8475967262327109	0.5911326553816413	T	T	T
0.6253971659672418	0.4209773572355059	0.4624867986901402	T	T	T
0.5748558141868518	0.2044460004653934	0.4571001300030792	T	T	T
0.4812919937518492	0.7474972123258071	0.5868100115204452	T	T	T
0.4847099207050122	0.8455947649459200	0.5067290448769157	T	T	T
0.6718700994591864	0.9757247304007551	0.5645802964609368	T	T	T
0.7751856132917203	0.8320598205780307	0.4759457921437387	T	T	T

```

TS:          -323.797039 eV
2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 10      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666651 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666644 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333359 0.6666666666666646 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666647 0.6666666666666646 0.000000000000000 F F F
-0.0000000000000002 0.6666666666666646 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444433 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444430 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.1111111111111137 0.5555555555555572 0.11111111111111076 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.1111111111111130 0.8888888888888857 0.11111111111111076 F F F
0.2226310521030290 0.1105263184430555 0.2191259524458542 T T T
0.5569304197533967 0.1124220890810592 0.2202541713002869 T T T
0.8886409426153656 0.1101127857775952 0.2193896496184155 T T T
0.2226108329861948 0.4448713842782887 0.2193262990617049 T T T
0.5566724912682981 0.4447205186185559 0.2208809845758930 T T T
0.8864299814855223 0.4426779364544274 0.2204146761953736 T T T
0.5551576111063159 0.7764499077926771 0.2204869246092521 T T T
0.8865045650625631 0.7754966793268596 0.2209093252757190 T T T
0.2214188435147019 0.7779056829112371 0.2182018269818783 T T T
0.0032336290321857 0.0008970087251534 0.3283122125209226 T T T
0.3322876593956180 0.9957562585706843 0.3277719277631957 T T T
0.6677259552770873 0.0013035904904941 0.3286985459113564 T T T
0.3264116353550977 0.3265737288379841 0.3281341622513524 T T T
0.6670067294504638 0.3301509646740128 0.3331364681254875 T T T
0.0015116308040829 0.3320197743318498 0.3286063053579974 T T T
0.3327030800896860 0.6612212642872202 0.3319787856586152 T T T
0.6733876955100436 0.6718011836594732 0.3330716008881419 T T T
0.0073280992350520 0.6672968316509932 0.3280075419530937 T T T
0.6757785187982159 0.7885366009082023 0.4850187367008378 T T T
0.8748671012733379 0.8425178594199711 0.5071872806269694 T T T
0.5369443798545587 0.7351770109476109 0.5429979805410339 T T T
0.6537413487621919 0.3428361230441792 0.4431091342835938 T T T
0.6044895921840212 0.6307154449685941 0.4391035968411882 T T T!!
0.6814763708534277 0.9092928126051697 0.4572274622556428 T T T

```


0.6303574830503820	0.4547929670782147	0.4490506059291870	T	T	T
0.9324600446876453	0.9657066243600313	0.5407449102674221	T	T	T
0.8749546251630810	0.7247003692283507	0.5339113148230056	T	T	T
0.9694805179172552	0.8791873594204993	0.4635447234699042	T	T	T
0.5362801482791670	0.2285963358432932	0.4553417313799584	T	T	T
0.5252745547728098	0.6128387503808105	0.5703285950549256	T	T	T
0.5855332105618647	0.8538495055043726	0.5782768142450330	T	T	T
0.3957762051288773	0.6987851669529842	0.5247576027674186	T	T	T
0.4492636059351859	0.6160975501893816	0.3970650200425598	T	T	T!!

FS: -320.558047 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

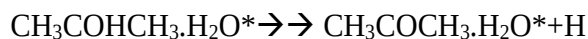
36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2222422799307621	0.1110988990473727	0.2188097978185000	T	T	T
0.5568572134158021	0.1127803762163210	0.2205265070815011	T	T	T
0.8883931866709583	0.1107770843070064	0.2191248440118204	T	T	T
0.2220670183807036	0.4442569416557083	0.2188352557077643	T	T	T
0.5567082577321156	0.4448498409080085	0.2212515959797372	T	T	T
0.8861613993466844	0.4430222602832297	0.2204521717025539	T	T	T
0.5564910080446890	0.7762366760498480	0.2205477908877341	T	T	T
0.8848783259059938	0.7753675475860866	0.2208554379934093	T	T	T
0.2216306199322572	0.7774026079421537	0.2187054913206110	T	T	T
0.0030991878969905	0.0024068546496991	0.3284008432064299	T	T	T
0.3305188723244996	0.9979435723714393	0.3278925039500962	T	T	T
0.6667290206858855	0.0007663194169525	0.3286108359316497	T	T	T
0.3270191318402704	0.3295687537516699	0.3279863266719561	T	T	T
0.6666065428915930	0.3306730034612394	0.3335601496962765	T	T	T
0.0020101880777297	0.3333311377886550	0.3283266139733072	T	T	T
0.3295738007114021	0.6655958346205815	0.3278829391442609	T	T	T
0.6682441846316355	0.6724424727002818	0.3342510050310143	T	T	T
0.0054412581633616	0.6690537923341791	0.3281244556887349	T	T	T
0.6886703591500126	0.7938046672700416	0.4811803309242375	T	T	T
0.8901961567809936	0.8718460026797690	0.5067127344068597	T	T	T
0.5419933169304939	0.7245501132510443	0.5371689586960976	T	T	T
0.6629479000165155	0.3501734356234855	0.4420653373127506	T	T	T
0.6387642736792758	0.6406203723327071	0.4354077014261159	T	T	T
0.6810843735287295	0.9077508378285934	0.4530734207849185	T	T	T

0.6528813731882060	0.4744222851960802	0.4474083353390926	T	T	T
0.9304114181442250	0.9922399993772599	0.5405742032479247	T	T	T
0.9036952270826005	0.7619449758476128	0.5339072732592312	T	T	T
0.9906854867148256	0.9206601200038566	0.4644892196653636	T	T	T
0.5423389119639490	0.2433816017495835	0.4564214963570550	T	T	T
0.5436427237138286	0.6097484811805294	0.5654781235756046	T	T	T
0.5726968948269769	0.8402379626602176	0.5722442721547831	T	T	T
0.3995244305059957	0.6713582612924990	0.5165400168793273	T	T	T



IS: -320.277549 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223583193233471	0.1111310422927232	0.2182294257544569	T	T	T
0.5573551570376154	0.1103009892698568	0.2205228959381985	T	T	T
0.8867146996345292	0.1093997318205732	0.2199619079157090	T	T	T
0.2226357194899391	0.4457476326146182	0.2192693551004897	T	T	T
0.5565420995307062	0.4445912057499974	0.2188321341299147	T	T	T
0.8908436126524786	0.4476514658310740	0.2204197978606707	T	T	T
0.5549895384036910	0.7771990067143685	0.2217030310059964	T	T	T
0.8905886499868545	0.7759634646225241	0.2204780657525138	T	T	T
0.2208017989431375	0.7771178601597402	0.2199066540568912	T	T	T
0.0015815873689510	0.0000598212210689	0.3280374207936720	T	T	T
0.3336947798969217	0.0065721283686414	0.3274087922122908	T	T	T
0.6687853951552514	0.0017556121925417	0.3318608767294886	T	T	T
0.3347738088134822	0.3334624752905968	0.3277702099930011	T	T	T
0.6673676718432277	0.3366477999723178	0.3285720762629964	T	T	T
0.0005748877695824	0.3296768988742188	0.3277142245890590	T	T	T
0.3324385681613654	0.6650260129644446	0.3305919038658804	T	T	T
0.6713203895351106	0.6630576702300836	0.3286788259213930	T	T	T
0.0088263890094122	0.6688233084567050	0.3427263973773770	T	T	T
0.0902286765510600	0.6784781567706325	0.4434478236183100	T	T	T
0.1583821942502689	0.8696778106129887	0.4761802983535158	T	T	T
0.9374751531170935	0.5183361687064929	0.4845151567929611	T	T	T
0.6496606547093725	0.9632220102351610	0.4470223035751126	T	T	T

0.2613432706252951	0.6553189181297500	0.4430870952553281	T	T	T
0.9859747544358232	0.5251506447618168	0.5366584422590198	T	T	T
0.5192740589216562	0.8560130058873161	0.4527460862515402	T	T	T
0.2033006181524308	0.8678582054076189	0.5282397485275717	T	T	T
0.2792636125096262	0.9854114601853318	0.4493015891606517	T	T	T
0.0446359927208353	0.9042960150952674	0.4768203701008477	T	T	T
0.7307393787360251	0.9063432750172103	0.4488436576007341	T	T	T
0.8966225651598306	0.3782585600768898	0.4635718655986814	T	T	T
0.8093657489594400	0.5303297671801566	0.4853852311108504	T	T	T
0.2183621762433933	0.5191821232021088	0.4454865077119519	T	T	T

TS: -319.672178 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226976432959538	0.1110854960528405	0.2182942784345690	T	T	T
0.5576167240213065	0.1098463647858287	0.2206436988091546	T	T	T
0.8861041954173591	0.1071754333103734	0.2197357706236927	T	T	T
0.2212872253622357	0.4444676965362456	0.2194163318494984	T	T	T
0.5564249517408630	0.4441222411493865	0.2191139189653927	T	T	T
0.8917916869587384	0.4466962403397557	0.2207123789597366	T	T	T
0.5539638210783656	0.7763209267072426	0.2217354836877570	T	T	T
0.8902991201686475	0.7762261485883823	0.2201333486821134	T	T	T
0.2208537823842678	0.7768585205091350	0.2195809846795514	T	T	T
0.0019853287950175	0.9988484991230069	0.3278405838403844	T	T	T
0.3339646805709224	0.0062338770489156	0.3275861690271598	T	T	T
0.6694435606470186	1.0003367556801550	0.3320697464293454	T	T	T
0.3349980898192396	0.3320465613488772	0.3282266013882273	T	T	T
0.6679568921974369	0.3357841288172768	0.3285903019524444	T	T	T
1.0015196936366366	0.3299789452353715	0.3312943701033519	T	T	T
0.3334828621634455	0.6662489411146725	0.3299609450139742	T	T	T
0.6729964400254432	0.6626005170584182	0.3281623407701562	T	T	T
0.0071851923535835	0.6695311719322802	0.3419837263237158	T	T	T
0.1045957961124647	0.6721577396727908	0.4420814011864793	T	T	T
0.1869213090097542	0.8671830945467188	0.4735582622454118	T	T	T
0.9417290360105022	0.5212052692140230	0.4830549778443949	T	T	T
0.6301236941898463	0.9420127288669464	0.4450857166698278	T	T	T
0.2507027880070407	0.6269020946700070	0.4348662243611942	T	T	T
0.9927626919313661	0.5190072158962539	0.5341153712094866	T	T	T

0.5024148012429038	0.8262839491660541	0.4476297812280253	T	T	T
0.2451046864290969	0.8665635104696097	0.5234708896275342	T	T	T
0.3047478280115240	0.9787378908822237	0.4438157778349770	T	T	T
0.0790736155513031	0.9088592298382888	0.4793940466290595	T	T	T
0.7205372455044976	0.8985252268188453	0.4530103831148728	T	T	T
0.8862340134102504	0.3795088920755447	0.4612439560548780	T	T	T
0.8250967270362662	0.5512406782082566	0.4868261042731936	T	T	T
0.1649621751207981	0.4557694951264084	0.3968867134221229	T	T	T

FS: -316.672500 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

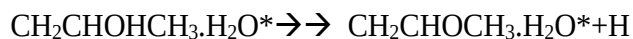
36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2229391386273245	0.1122223014903024	0.2199598467185258	T	T	T
0.5558157425869599	0.1108837722212861	0.2193062781082243	T	T	T
0.8898312957443228	0.1143228342572847	0.2215840991200790	T	T	T
0.2225470670384946	0.4440573363444917	0.2195387880269696	T	T	T
0.5545016225747893	0.4436471953391939	0.2200729647151986	T	T	T
0.8902925695729065	0.4466096834208417	0.2196322403108568	T	T	T
0.5523603129676783	0.7767862605632792	0.2216162474264097	T	T	T
0.8888162409701645	0.7775740204781203	0.2192598649420323	T	T	T
0.2201409343320537	0.7765309562957357	0.2195426236597686	T	T	T
-0.0014794234038266	0.9947949631096822	0.3281229491942260	T	T	T
0.3365693081860472	0.0005212073127336	0.3279048146148672	T	T	T
0.6677728607187184	-0.0006246985265116	0.3287311833804956	T	T	T
0.3393428741770281	0.3302945966357227	0.3315984376331839	T	T	T
0.6665814622803506	0.3300367304918057	0.3279570084210822	T	T	T
0.0037244575028439	0.3326726805563548	0.3312354775512219	T	T	T
0.3338642875475257	0.6636434847796799	0.3313789277705002	T	T	T
0.6726193798478398	0.6689045152220252	0.3280720805900445	T	T	T
-0.0014876060282370	0.6695276114884287	0.3366764179825621	T	T	T
0.0497167372500121	0.6140276277716921	0.4358345972620949	T	T	T
0.1762193472185122	0.7934158387851226	0.4750969873316885	T	T	T
0.8678007825235974	0.4851247145090944	0.4733268701401233	T	T	T
0.3318224269550780	0.3393213856875890	0.4443521508935780	T	T	T
0.1476481424839367	0.5184358612017763	0.4183554280539888	T	T	T
0.9018409428731251	0.4469683949946773	0.5224344601847978	T	T	T

0.2570383719609510	0.4059709942556071	0.4489222372082696	T	T	T
0.2167346430307692	0.7564562666439875	0.5231626777162506	T	T	T
0.3076725138473345	0.8879856993737467	0.4476483115116325	T	T	T
0.1000621359958901	0.8695051325364216	0.4861140387286768	T	T	T
0.2464962791741259	0.2075305199671798	0.4566946033953106	T	T	T
0.7789527556337322	0.3521946352773637	0.4456942323148937	T	T	T
0.7847123952721099	0.5551368276006071	0.4818608523433499	T	T	T



IS: -320.286968 eV

2.7200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2194713100467502	0.1097778172627070	0.2201759963302556	T	T	T
0.5561013837040970	0.1128731457052457	0.2202412642803205	T	T	T
0.8899248492954728	0.1094761134455932	0.2204310621886082	T	T	T
0.2216100879709226	0.4438131867695173	0.2186952368256625	T	T	T
0.5558382109887977	0.4444734346618514	0.2212956571662248	T	T	T
0.8867248394819623	0.4432116301806222	0.2205724872455842	T	T	T
0.5561507487437489	0.7772966186070921	0.2192627397071788	T	T	T
0.8888216353250896	0.7791402959744623	0.2209805301153708	T	T	T
0.2215087344397016	0.7779153004579930	0.2181090326583075	T	T	T
0.9984850004323111	0.9978397409835140	0.3392751868827065	T	T	T
0.3309300738341734	0.9973629684637092	0.3282368191611435	T	T	T
0.6634207972368071	-0.0001270059901178	0.3278738805726420	T	T	T
0.3277430540793795	0.3314949597136194	0.3281823181319721	T	T	T
0.6675412838741595	0.3321679706854473	0.3319209089219891	T	T	T
0.0031210891989252	0.3341236315568986	0.3286162072221065	T	T	T
0.3304852116919442	0.6656087412579790	0.3277921862313830	T	T	T
0.6649680290886213	0.6683787277899604	0.3305880352033351	T	T	T
0.0058866655320812	0.6677328702351099	0.3279035350049397	T	T	T
0.7754607250901090	0.8823989927116520	0.4727518926133119	T	T	T
0.9725796367734115	0.9682889162509436	0.4438928087728417	T	T	T
0.7679961989176692	0.8712158912185031	0.5488760736880985	T	T	T
0.6586613890310401	0.3426090631807224	0.4464278807376624	T	T	T

0.6588030035905019	0.6869209368713455	0.4459383484655696	T	T	T
0.7070446724266711	0.9621297808593750	0.4547233037294044	T	T	T
0.6663289645367121	0.4665304632805117	0.4540024012504066	T	T	T
0.0569701689845916	0.1135591426437108	0.4631931606828455	T	T	T
0.0402863297945227	0.8869634743670459	0.4599943966610927	T	T	T
0.5252949806527444	0.2470903171574589	0.4525720724550262	T	T	T
0.8348008180438862	0.7918438023936248	0.5674528887242035	T	T	T
0.8439701052627345	0.0145795665447546	0.5700729084458828	T	T	T
0.6214089967210416	0.8025470736282377	0.5673081172390042	T	T	T
0.5252047698958637	0.6546137433606708	0.4461271998800858	T	T	T

TS: -319.726795 eV

1.0000000000000000

8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.0800000000000001 7.0667672948810196 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107325

36 3 2 9 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000002	0.6666666666666646	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111137	0.5555555555555572	0.11111111111111076	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.1111111111111130	0.8888888888888857	0.11111111111111076	F	F	F
0.2203905505172967	0.1097414865511056	0.2201463674573047	T	T	T
0.5570357873427975	0.1129032367081046	0.2207330181544398	T	T	T
0.8899432244623434	0.1089032781663249	0.2204584079063125	T	T	T
0.2224033083482933	0.4444110815791122	0.2190493397459822	T	T	T
0.5560358632553424	0.4443667538519678	0.2208906285433446	T	T	T
0.8867199394518255	0.4428501674983315	0.2205341397549638	T	T	T
0.5550066683909637	0.7767383009901442	0.2195523959509156	T	T	T
0.8889020062818226	0.7786347718837521	0.2211294761658874	T	T	T
0.2217939011025343	0.7782200162705750	0.2181742213563658	T	T	T
0.9981662403032796	0.9971034166275957	0.3381070722593639	T	T	T
0.3313299714455055	0.9964452826806859	0.3279029498485263	T	T	T
0.6650498058010851	0.0021269243358581	0.3287479810224402	T	T	T
0.3257430362746531	0.3272433768553232	0.3278732467335085	T	T	T
0.6659093232135814	0.3316612389383237	0.3325053311573117	T	T	T
0.0028078202167082	0.3338906814128061	0.3284454483294930	T	T	T
0.3330395474460400	0.6627031106228711	0.3320935951610591	T	T	T
0.6689476063818649	0.6684699290089918	0.3298354715069659	T	T	T
0.0077019230030321	0.6663565191224754	0.3278197460008279	T	T	T
0.7474633569720783	0.8610078176450168	0.4643345076886781	T	T	T
0.9523692572203957	0.9539200192279618	0.4416943430156536	T	T	T
0.7255459496022643	0.8444821890008379	0.5404060515095521	T	T	T
0.6593342550286276	0.3621129797818264	0.4439419490944826	T	T	T
0.6335889516402684	0.6741194780009455	0.4362229985676587	T	T	T
0.6858209234491669	0.9484163980393070	0.4457026526722461	T	T	T

0.6499438592044975	0.4807499670367923	0.4488105369149978	T	T	T
0.0337827988681259	0.0968612640567569	0.4632556893920308	T	T	T
0.0166614975336953	0.8693242861591517	0.4576851920919808	T	T	T
0.5368590814136552	0.2567565936309763	0.4576486249062758	T	T	T
0.7861291801612255	0.7607174221921095	0.5604267735126939	T	T	T
0.7994872633292830	0.9853359954379838	0.5636384786357390	T	T	T
0.5754152918173268	0.7752569001052122	0.5544763555108523	T	T	T
0.4784827317581806	0.6602744453191626	0.3985229673867938	T	T	T

FS: -316.536011 eV

2.720000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2207994878740850	0.1103317820583084	0.2195101435804429	T	T	T
0.5572774520655742	0.1127339401772155	0.2216418401860329	T	T	T
0.8892150895876973	0.1096441017368818	0.2202205596974819	T	T	T
0.2214433385913706	0.4439782366287256	0.2183801246603678	T	T	T
0.5559830751901473	0.4444049652416557	0.2211249648815605	T	T	T
0.8861554603177264	0.4433287497201422	0.2205563779372954	T	T	T
0.5565886632745575	0.7768944431863325	0.2196590877545883	T	T	T
0.8868234947798175	0.7784174836733120	0.2212664755045087	T	T	T
0.2213290828570736	0.7779412553259373	0.2184177951014133	T	T	T
0.0007844359260191	0.0021039390700294	0.3364220602336071	T	T	T
0.3293931013385334	0.9977235969038024	0.3280343068817843	T	T	T
0.6639970497510275	0.9997335849550079	0.3302503542603115	T	T	T
0.3267929722913767	0.3307618555463868	0.3276503874536285	T	T	T
0.6656304416595428	0.3333108604541235	0.3331828304524250	T	T	T
0.0027368077881764	0.3358899554577507	0.3279793460530517	T	T	T
0.3289571826995284	0.6657634604402690	0.3270484507267562	T	T	T
0.6648522187610837	0.6691157972794415	0.3314703275579445	T	T	T
0.0056483204778362	0.6686426796568686	0.3281347089432610	T	T	T
0.7503768908889488	0.8678153292584205	0.4577825162891597	T	T	T
0.9590281644786378	0.9819320768636436	0.4401739064821198	T	T	T
0.7094657753904129	0.8652505756399475	0.5326630309703544	T	T	T
0.6677222566708846	0.3674796074367068	0.4436204732670814	T	T	T
0.6646176457606093	0.6809303199697143	0.4332739596073182	T	T	T
0.6723502119593039	0.4947167223009339	0.4486726320560263	T	T	T

0.0238104996627132	0.1269445517668046	0.4600002142856291	T	T	T
0.0344133077024507	0.9115295472303447	0.4597355349693000	T	T	T
0.7794644255089062	0.8011810962347133	0.5605613838101295	T	T	T
0.7629621036233959	0.0098592815715573	0.5512734757519693	T	T	T
0.5564911847745405	0.7823263551782733	0.5419417740140026	T	T	T
0.5421980654834763	0.2705407122560040	0.4584373292305298	T	T	T
0.6760161143374512	0.9402696968213730	0.4322704675414650	T	T	T

Pd catalyst



IS: -222.742794 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1113886620299998	0.8895300529879731	0.1107783965838010	T	T	T
0.2228017257773142	0.1125470733292369	0.2218897618554338	T	T	T
0.5555101968605218	0.1107684640709301	0.2206508123081919	T	T	T
0.8886675278483509	0.1113681260070361	0.2208853577946087	T	T	T
0.2231563333716720	0.4437871251920936	0.2221597970351125	T	T	T
0.5537746580030677	0.4441224495623353	0.2220609151350751	T	T	T
0.8892433805723210	0.4447573703997644	0.2204869923751454	T	T	T
0.5557099644743111	0.7783355264305256	0.2209240716247203	T	T	T
0.8889731676755600	0.7777710502194640	0.2204586810821115	T	T	T
0.2221170594055830	0.7778106946075587	0.2204797291253149	T	T	T
0.9986751377707853	0.9987833001293041	0.3314663838236592	T	T	T
0.3330398500495890	0.9988962919560502	0.3313850717349346	T	T	T
0.6666925831034416	0.0005066600510276	0.3318917521325069	T	T	T
0.3333311108242935	0.3341089201244161	0.3366869650270476	T	T	T
0.6688268319635783	0.3342680244140145	0.3307874701905332	T	T	T
0.9985492917299323	0.3337667479875457	0.3317079087807736	T	T	T
0.3332814890600588	0.6684452170461208	0.3315743524365270	T	T	T
0.6682792709150717	0.6682478666841001	0.3316486900649077	T	T	T
0.9999125841717498	0.6669449221949957	0.3320014503189205	T	T	T
0.6464989811467583	0.2167036451460202	0.5143135472471481	T	T	T
0.6413392249616419	0.3710216741552047	0.4858625389977793	T	T	T

0.3207148885194980	0.3228539203032942	0.4449006427935492	T	T	T
0.7157976332394700	0.4078638004833006	0.4456210764908311	T	T	T
0.5559777655731076	0.1745534969357007	0.5568648303010090	T	T	T
0.2249530747395667	0.1962563094640939	0.4533689858502784	T	T	T
0.4405080512826298	0.3360958566239748	0.4617797870230451	T	T	T
0.7867451689298376	0.2573293462705484	0.5301266203222842	T	T	T
0.5974947585235639	0.1010990550210166	0.4799162037631823	T	T	T

TS: -221.904649 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 1 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333354	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444329	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777770	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777780	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.2252039682574292	0.1115055439706756	0.2203307057114962	T	T	T
0.5596524345434349	0.1132764144112942	0.2213008235099131	T	T	T
0.8928190349406073	0.1121603356502876	0.2207979119445062	T	T	T
0.2253862331200500	0.4458929735895942	0.2207338530945115	T	T	T
0.5591098084198222	0.4449925008486937	0.2217189967556381	T	T	T
0.8904363426370913	0.4442515881365596	0.2221697357460510	T	T	T
0.5582219477386983	0.7784383676855383	0.2214297598020114	T	T	T
0.8902942261689386	0.7778535014669884	0.2225778414134639	T	T	T
0.2252029089141586	0.7781708345814686	0.2205289367827818	T	T	T
0.0117740042821043	0.0050909185257059	0.3319096710773411	T	T	T
0.3404206052242763	0.0003995099119129	0.3312560514696032	T	T	T
0.6745321586052726	0.0029486229124160	0.3314024036174437	T	T	T
0.3382758167369123	0.3355060625449617	0.3311641294504496	T	T	T
0.6757682931548639	0.3335478828428804	0.3351144182876650	T	T	T
0.0083785048824052	0.3350186701547918	0.3317752909273520	T	T	T
0.3406322226149255	0.6665542374236061	0.3346037950958569	T	T	T
0.6829298433162173	0.6751099342587648	0.3340712198009290	T	T	T
0.0131667456596438	0.6710900712398390	0.3319033309883783	T	T	T
0.6667997124001522	0.7749247672639452	0.4786107410458710	T	T	T
0.6559091492946206	0.3466835598744039	0.4421959134842190	T	T	T
0.6021810415291518	0.6211654958806619	0.4357955966444551	T	T	T
0.6364999359152923	0.8791037963090852	0.4587253791901779	T	T	T
0.6326250192292423	0.4556307741595009	0.4462135536345534	T	T	T
0.5966111747684041	0.7272263737782985	0.5258262083496559	T	T	T

0.5410605946896503	0.2365833351145650	0.4539538085636232	T	T	T
0.8163847566468121	0.8395583826339029	0.4856169269763521	T	T	T
0.4462644830358526	0.5913691984509392	0.3889033527489417	T	T	T

FS: -218.518425 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

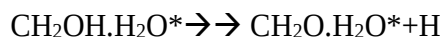
36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218783177415971	0.1108548234324988	0.2201330820630609	T	T	T
0.5562655109914173	0.1126915272015071	0.2215879363873444	T	T	T
0.8890123165824256	0.1111894464773289	0.2204483888126491	T	T	T
0.2218816688704467	0.4447025172474604	0.2200285446852072	T	T	T
0.5568738185346401	0.4451871760620900	0.2226010756642909	T	T	T
0.8874746144420250	0.4436739892571743	0.2215802281379800	T	T	T
0.5566975115964433	0.7772138762078674	0.2220498302620594	T	T	T
0.8870845895040237	0.7773007793742034	0.2221976422505280	T	T	T
0.2224987635904855	0.7780150551191946	0.2198467739896718	T	T	T
0.0020552407316338	0.002383352999234	0.3312747467215280	T	T	T
0.3323435318704135	0.9991654446771993	0.3312402067947338	T	T	T
0.6664597951271247	0.0008317651735250	0.3314247119368462	T	T	T
0.3311936750543082	0.3326111672894002	0.3303463504659266	T	T	T
0.6669137414168207	0.3314764172929864	0.3351931671467154	T	T	T
0.0020953145577766	0.3343151725545153	0.3308912621872791	T	T	T
0.3321976483367504	0.6677083578527487	0.3312404370081004	T	T	T
0.6676353052570955	0.6717328131254096	0.3365242931270382	T	T	T
0.0040964581306211	0.6693586252010296	0.3305337345945899	T	T	T
0.7407951060803396	0.7867261944483300	0.4782739787957252	T	T	T
0.6663701651200752	0.3551919951840246	0.4394052353406595	T	T	T
0.6441536527995456	0.6348329618117010	0.4356776037862160	T	T	T
0.6982509619987408	0.8899310419477147	0.4705111960923902	T	T	T
0.6583213333907850	0.4807397349538181	0.4432717283909006	T	T	T
0.7057549108162314	0.7352889923899204	0.5286319627108036	T	T	T

0.5499145239529577	0.2530654054060124	0.4546316612326816	T	T	T
0.8912979513889541	0.8536324316328556	0.4720905397208721	T	T	T



IS: -218.804823 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2216698671002799	0.1107215226294100	0.2203277558394117	T	T	T
0.5553874862419595	0.1122753964907340	0.2212020420552002	T	T	T
0.8890191967910638	0.1110495593009373	0.2204567916426483	T	T	T
0.2217411596834747	0.4441932905513598	0.2202841881083005	T	T	T
0.5576034742593111	0.4460572661565182	0.2236351146193514	T	T	T
0.8869581642060361	0.4434182483946272	0.2221074400739121	T	T	T
0.5556678935947321	0.7761764105720005	0.2217668906828195	T	T	T
0.8870387176799300	0.7770422734528938	0.2225049855909783	T	T	T
0.2213813872113012	0.7771115355387209	0.2203071303344260	T	T	T
0.0008807731613071	0.0004993755782314	0.3316005977169095	T	T	T
0.3315932262743983	0.9983607632118253	0.3309498978703925	T	T	T
0.6661135513853556	-0.0005975670942792	0.3303477375051287	T	T	T
0.3312237310416479	0.3331409260428012	0.3309072321685937	T	T	T
0.6668619303027762	0.3333519790198136	0.3360326348350857	T	T	T
0.0014879934822366	0.3336076110672861	0.3315550638071681	T	T	T
0.3319235580560455	0.6663510011937415	0.3316674881415292	T	T	T
0.6673769520333352	0.6703970967400054	0.3412480676894100	T	T	T
0.0012795166947856	0.6680923898477771	0.3318106602320124	T	T	T
0.6574625267552724	0.6962587269612351	0.4403708557219066	T	T	T
0.5204985195182678	0.5322806574849365	0.4695607499132143	T	T	T
0.6452373581671361	0.2980959338760816	0.4457448316801525	T	T	T

0.4010261485079264	0.5015207392735668	0.4503580333567868	T	T	T
0.5841076781558733	0.3696416746363516	0.4585266307752362	T	T	T
0.5517958201401374	0.1684029107521569	0.4497772796900301	T	T	T
0.6303275365172356	0.8102971430390632	0.4472927898050902	T	T	T
0.7907435064561972	0.7258825364023477	0.4599780924720466	T	T	T

TS: -218.061857 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000004	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111081	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.11111111111111081	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111081	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111081	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111081	F	F	F
0.11111111111110912	0.5555555555555571	0.11111111111111081	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111081	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111081	F	F	F
0.11111111111110901	0.8888888888888857	0.11111111111111081	F	F	F
0.2241687599961549	0.1128927180786093	0.2205874095914373	T	T	T
0.5571484356435998	0.1134297375459897	0.2209803277430674	T	T	T
0.8906135890087680	0.1119724032882033	0.2204781238201032	T	T	T
0.2236646657830914	0.4457015057270842	0.2211136249209822	T	T	T
0.5582409944370630	0.4470808611705585	0.2228547570426109	T	T	T
0.8877521832974484	0.4443467002029681	0.2223768826472663	T	T	T
0.5563319952425526	0.7771527399664776	0.2218679492540325	T	T	T
0.8907963334444897	0.7792653989824156	0.2215705338012519	T	T	T
0.2237434342586879	0.7778118030772643	0.2206548997751369	T	T	T
0.0057413546295717	0.0038904794047454	0.3314183467555678	T	T	T
0.3353646271827054	0.0003686428772051	0.3307764494159991	T	T	T
0.6689560990206858	0.0024697380275278	0.3303984388248529	T	T	T
0.3342759647125961	0.3384881448381494	0.3328930431169831	T	T	T
0.6711730877347074	0.3345790857699361	0.3355820869397199	T	T	T
0.0029965720460653	0.3349666397588673	0.3318319104786265	T	T	T
0.3340949306022647	0.6654819340437146	0.3347207839183344	T	T	T
0.6787827891082432	0.6776465945142284	0.3377296266826685	T	T	T
0.0062808212611508	0.6712022491313081	0.3319606496722662	T	T	T
0.6505914098810569	0.6960876372293872	0.4400720005915188	T	T	T
0.4973956911725397	0.5379013747090348	0.4516106052481054	T	T	T
0.6326543558574040	0.3142568071808838	0.4436800079646295	T	T	T
0.5647147143563360	0.3843259211059257	0.4513939554336029	T	T	T
0.5444910800404693	0.1849397695090576	0.4519321105128209	T	T	T
0.6401986356498663	0.8220760861608469	0.4410539860819745	T	T	T

0.3816561864568506	0.5142097634374253	0.3951473684252022	T	T	T
0.7772415931642374	0.7091065589310748	0.4610328332589483	T	T	T

FS: -214.874395 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

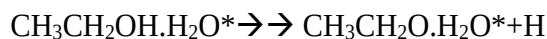
36 1 2 4 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666714	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666785	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000071	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111214	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777857	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777928	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111214	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444571	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777999	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111285	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.2223852773407743	0.1143759993373279	0.2228200432807335	T	T	T
0.5545047582798093	0.1101966336097379	0.2207398821677560	T	T	T
0.8881579824840088	0.1095594334912584	0.2202697541619771	T	T	T
0.2221175644375394	0.4430144120833518	0.2211248770694204	T	T	T
0.5563287201413876	0.4431096563090019	0.2226477734008714	T	T	T
0.8873382737188977	0.4430810314585555	0.2213428543179345	T	T	T
0.5553520739468112	0.7756215980500020	0.2208638477730457	T	T	T
0.8858045031939611	0.7763049769960549	0.2222290439694366	T	T	T
0.2203918027698286	0.7773276053549641	0.2195790916837842	T	T	T
0.9961626535341208	0.9966856150595569	0.3323119072643192	T	T	T
0.3291326155549768	0.9960770568920014	0.3306919546878598	T	T	T
0.6650854833835704	0.9966562421455608	0.3302059611763469	T	T	T
0.3321870554030634	0.3321170281026546	0.3366450723583026	T	T	T
0.6700733972082470	0.3297748768859732	0.3339548193995264	T	T	T
0.0006508800743991	0.3319521124565994	0.3306201216035325	T	T	T
0.3288339837380752	0.6687112470905232	0.3298628854551394	T	T	T
0.6603710945250959	0.6650953914033757	0.3385682333426567	T	T	T
0.9987635703221349	0.6666901161926204	0.3315827266548305	T	T	T
0.5434738449929709	0.5949639427560238	0.4334669207833581	T	T	T
0.4193119243836703	0.4161709494840261	0.4345158541703996	T	T	T
0.6468658761265320	0.2955093595183728	0.4424282925061954	T	T	T
0.5407906456144579	0.3218645526043560	0.4464401886837351	T	T	T
0.5962819680048459	0.1643427721483005	0.4502358593611526	T	T	T
0.4884658507989640	0.6890137028403585	0.4406660983947206	T	T	T

0.6749730314128904 0.6349966162267523 0.4584392102024819 T T T



IS: -239.459942 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2219361886196573	0.1107441466097519	0.2209039502936488	T	T	T
0.5565670501991363	0.1128304219982594	0.2222747173681037	T	T	T
0.8892421504998003	0.1108619652773311	0.2210808941640554	T	T	T
0.2221002133956963	0.4444378573849208	0.2205740142856705	T	T	T
0.5560617484251293	0.4433119603346291	0.2217293574906998	T	T	T
0.8871900188180242	0.4433244915537791	0.2221953912062377	T	T	T
0.5554268090718190	0.7782732489848473	0.2203086146755390	T	T	T
0.8893769885730429	0.7781871736083220	0.2207256473402503	T	T	T
0.2224457711763447	0.7778473828342465	0.2204051319728666	T	T	T
0.0001219684787121	0.9997512525948350	0.3322511693670832	T	T	T
0.3321805818419353	0.9986921601832663	0.3316560853318488	T	T	T
0.6666008420429252	0.9987219516862064	0.3317521169276400	T	T	T
0.3320918322598124	0.3332305088491612	0.3314425591767839	T	T	T
0.6673414697031442	0.3336848634628481	0.3369183580699445	T	T	T
0.0017255446576018	0.3335954432443548	0.3316975083785235	T	T	T
0.3335226936686252	0.6666201507210585	0.3318154076406370	T	T	T
0.6663699143406058	0.6682600424885072	0.3305436471259006	T	T	T
0.0022472976743907	0.6683449618205888	0.3312628612944708	T	T	T
0.6882857994668541	0.7522274160268655	0.5146391457280070	T	T	T
0.7194521357993493	0.7453870178527697	0.5867860529517338	T	T	T
0.6584866171651896	0.3368648557412228	0.4457245813578635	T	T	T
0.7957176773878438	0.6880076459334927	0.4795183561916048	T	T	T

0.7315693556770160	0.8932606832099249	0.4987976974699372	T	T	T
0.7053650173847845	0.4682595535328491	0.4606485996251859	T	T	T
0.8271571137301142	0.7467013575649708	0.4360344374257717	T	T	T
0.6356394780687953	0.7888230920527417	0.6143750851986342	T	T	T
0.6806922784940213	0.6054355313103865	0.6022806896049568	T	T	T
0.8644562617175013	0.8370395352981542	0.5993144674878531	T	T	T
0.5417352216246424	0.6652881912273079	0.5020318654419019	T	T	T
0.5268265401732573	0.2690718659284998	0.4548130026226962	T	T	T

TS: -238.653733 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666651	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000004	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.1111111111111182	F	F	F
0.4444444444444433	0.2222222222222214	0.1111111111111182	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.1111111111111182	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.1111111111111182	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.1111111111111182	F	F	F
0.11111111111111003	0.5555555555555571	0.1111111111111182	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.1111111111111182	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.1111111111111182	F	F	F
0.11111111111110887	0.8888888888888857	0.1111111111111182	F	F	F
0.2255061191276126	0.1108540707903982	0.2204542343979231	T	T	T
0.5601151343189904	0.1129339153502335	0.2212543174049073	T	T	T
0.8932775874792210	0.1114561408655605	0.2208387230722454	T	T	T
0.2260113688774738	0.4455455036483087	0.2207843307240838	T	T	T
0.5596909095603095	0.4448518307328584	0.2217976914569178	T	T	T
0.8908259078395606	0.4436990704689925	0.2220811255411032	T	T	T
0.5587778081814054	0.7779617951004060	0.2214045424294816	T	T	T
0.8909923127971020	0.7774323474175061	0.2224613706884749	T	T	T
0.2257811572217296	0.7775385436816041	0.2204644509577085	T	T	T
0.0126909071244029	0.0039563275280228	0.3321908259939882	T	T	T
0.3414031574335183	0.9995830900091814	0.3311871072680838	T	T	T
0.6749646715887301	0.0017981017625497	0.3312578002547408	T	T	T
0.3388376702743007	0.3345786719948362	0.3312587601287896	T	T	T
0.6766220496329448	0.3326276625665419	0.3351483467370105	T	T	T
0.0089997619437324	0.3339588519799980	0.3316785119725702	T	T	T
0.3413739361041227	0.6657702263412885	0.3345751344866812	T	T	T
0.6832058634672190	0.6739930482562319	0.3343107919739968	T	T	T
0.0137804196628606	0.6700607042706940	0.3317014147796317	T	T	T
0.6619934948785938	0.7703644329690625	0.4805156256346479	T	T	T
0.8654426742681420	0.8584405334694172	0.4957539334753191	T	T	T
0.6543863089637665	0.3441356933924963	0.4423362478755328	T	T	T
0.6011844280661507	0.6192484523057001	0.4362330502840356	T	T	T
0.6305179179783253	0.8728888392410624	0.4596299368237905	T	T	T
0.6309949002025913	0.4530527382297613	0.4463233375797475	T	T	T

0.9068668468958210	0.9715802847760440	0.5306697913282056	T	T	T
0.8992418140414029	0.7581875740176026	0.5162924513758266	T	T	T
0.9475442273861219	0.9158998373902000	0.4509247187839135	T	T	T
0.5792032424304064	0.7157925148505259	0.5252302058060457	T	T	T
0.5390106912010576	0.2338338902514284	0.4534654185744266	T	T	T
0.4463362455331014	0.5889898728139469	0.3887482140660579	T	T	T

FS: -235.253710 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

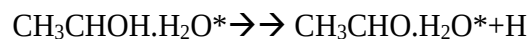
36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2215392913869108	0.1103833309200026	0.2202297265097625	T	T	T
0.5561728471743698	0.1122535867638957	0.2215718016848240	T	T	T
0.8890666915396139	0.1107306620309583	0.2205814523552952	T	T	T
0.2219290794941566	0.4441863356177310	0.2200334024109782	T	T	T
0.5571084347339624	0.4448987758145418	0.2226207344051536	T	T	T
0.8876138364421983	0.4433304874620640	0.2216603635704036	T	T	T
0.5566522816538382	0.7769931740848598	0.2219134881757146	T	T	T
0.8867492432062730	0.7767065747515802	0.2224978275540923	T	T	T
0.2222596759789360	0.7773074357890445	0.2198897688941766	T	T	T
0.0033458362013635	0.0024359758493885	0.3318700572757552	T	T	T
0.3331454295673268	-0.0011506806245557	0.3312409593965293	T	T	T
0.6668037416921875	-0.0001788806627023	0.3315049407687499	T	T	T
0.3322424826612287	0.3324533397575269	0.3303403816018282	T	T	T
0.6681398310260201	0.3306230264870790	0.3354037141974803	T	T	T
0.0027643136474936	0.3338038730493528	0.3309309124311657	T	T	T
0.3327762035091931	0.6673127155370214	0.3311412441724668	T	T	T
0.6687598486784122	0.6709605416750595	0.3368288776432486	T	T	T
0.0045999457805163	0.6687671985301210	0.3307874191790284	T	T	T
0.6891319364853645	0.7715211723339247	0.4813711163730407	T	T	T
0.8945543888682759	0.8744352785002729	0.4945460365671915	T	T	T
0.6649560129486205	0.3510334398994731	0.4405541868465107	T	T	T
0.6317391509433555	0.6266282272534677	0.4352884309072303	T	T	T
0.6435773121914125	0.8675881935854753	0.4648185559166285	T	T	T
0.6523025780003364	0.4715635714868170	0.4446564537094129	T	T	T

0.9293623359031918	0.9812615804192864	0.5316362175988444	T	T	T
0.9420134030576583	0.7809259891044316	0.5113007107493339	T	T	T
0.9708262970447317	0.9429300274242082	0.4495413266736805	T	T	T
0.6129612273934225	0.7068688063710387	0.5266799778656559	T	T	T
0.5486655974024957	0.2465541178051938	0.4547048657279106	T	T	T



IS: -235.541093 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.2222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1105460710006549	0.8883676401448883	0.1102073966555688	T	T	T
0.2219404196137032	0.1106232442838951	0.2200500284291043	T	T	T
0.5559127539893636	0.1125184834360538	0.2209510571825901	T	T	T
0.8894163649104035	0.1111995360194723	0.2202847652163225	T	T	T
0.2223216799420538	0.4443522812402639	0.2202423222312009	T	T	T
0.5581972815732217	0.4465500684412643	0.2238568458482417	T	T	T
0.8873946289774379	0.4436668056519660	0.2218361972000547	T	T	T
0.5563125036383736	0.7761060744906088	0.2219034575542929	T	T	T
0.8870924990101579	0.7770133152761340	0.2224277587369339	T	T	T
0.2218276073597114	0.7775239780966654	0.2200105119293371	T	T	T
0.0018094463711583	0.0011851514809948	0.3312169802574613	T	T	T
0.3326457714752784	-0.0008525287593602	0.3305666895883800	T	T	T
0.6666939694061693	-0.0002367607702619	0.3301801928046875	T	T	T
0.3320527008030801	0.3336463926306779	0.3309518091626688	T	T	T
0.6680906383150484	0.3341067534429676	0.3356622171181847	T	T	T
0.0024431710186682	0.3340206802054541	0.3312821464857430	T	T	T
0.3330085054490821	0.6666850678545712	0.3314812375288447	T	T	T
0.6693892260311968	0.6715509795373537	0.3430393424176513	T	T	T
0.0023481688179872	0.6683175385346741	0.3313863773974222	T	T	T
0.6545408196849744	0.6987442362128540	0.4432741462231031	T	T	T
0.8327266807437028	0.7596601436104398	0.4783288289750265	T	T	T
0.5163455040908668	0.5290997208918219	0.4687420159582162	T	T	T
0.6429470033597046	0.2934288584316760	0.4458830872971668	T	T	T

0.4013712113676620	0.4941350092491747	0.4447772019898569	T	T	T
0.8131680676404741	0.7720276197755646	0.5308144261592465	T	T	T
0.8827134334599700	0.6621110143511102	0.4722774716023455	T	T	T
0.9383849336262592	0.8946115056405939	0.4600958257649836	T	T	T
0.6088098848584687	0.8009626566547199	0.4440029117659089	T	T	T
0.5825978707749702	0.3656666726603630	0.4585040918994741	T	T	T
0.5470862812209651	0.1639653452950161	0.4475624507237927	T	T	T

TS: -234.867493 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970378064	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1105699914717402	0.8880489474872367	0.1100671223991017	T	T	T
0.2220076148898167	0.1104506372674656	0.2209953935527317	T	T	T
0.5557451720538912	0.1115719709236956	0.2210410408700216	T	T	T
0.8894573187193919	0.1105763044078582	0.2203321623915629	T	T	T
0.2229066638243143	0.4436319129425950	0.2208191958762393	T	T	T
0.5577357025655533	0.4445142774689017	0.2241719236779178	T	T	T
0.8880671915535714	0.4434403725281113	0.2215932996128483	T	T	T
0.5564261500412059	0.7749201646202792	0.2214986845735425	T	T	T
0.8872860804398899	0.7766743350072356	0.2220615120073455	T	T	T
0.2223692546911084	0.7773778586479763	0.2201012008567056	T	T	T
0.0005551276279040	0.9991822821354552	0.3317435676296722	T	T	T
0.3320674122375966	0.9980454668742601	0.3310740898670227	T	T	T
0.6662385487023877	0.9972200000185329	0.3300187011534799	T	T	T
0.3310350766989067	0.3323378891403437	0.3348075066491057	T	T	T
0.6681979069643375	0.3311284930895588	0.3354812818573201	T	T	T
0.0025845701624296	0.3329873594216282	0.3312440216449162	T	T	T
0.3320287071774412	0.6657747727856648	0.3315061044107873	T	T	T
0.6678149725325392	0.6683976921171060	0.3411234206006361	T	T	T
0.0010943013550181	0.6669078713603492	0.3312002305175869	T	T	T
0.6296237496772081	0.6753999945098110	0.4522328900350399	T	T	T
0.8157701334746317	0.7839563297738013	0.4827886965609089	T	T	T
0.5278512518529485	0.5032877913448707	0.4663537941686936	T	T	T
0.6779167740625965	0.3009024153907511	0.4440065543253348	T	T	T
0.7974415849761379	0.8046948476198902	0.5347072801430979	T	T	T
0.8930660974050126	0.7104863395897940	0.4800721173258933	T	T	T

0.8954378835757927	0.9197666190961729	0.4598179506622048	T	T	T
0.5571588203639420	0.7509831511686520	0.4387457746707977	T	T	T
0.6188287430152696	0.3738288901181533	0.4596074781539654	T	T	T
0.5873132736307182	0.1714575414176240	0.4507570602644799	T	T	T
0.3858992105084339	0.4164041245547637	0.4070481298311602	T	T	T

FS: -231.616308 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

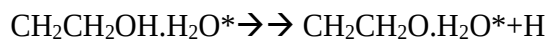
36 2 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666714	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333428	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666785	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000071	0.6666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111214	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777857	0.2222222222222285	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777928	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111214	0.5555555555555713	0.1111111111111072	F	F	F
0.4444444444444571	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.7777777777777999	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.1111111111111285	0.8888888888889142	0.1111111111111072	F	F	F
0.2228184913950506	0.1148137125752734	0.2229255257850624	T	T	T
0.5544669417637962	0.1102525111866986	0.2206826079797519	T	T	T
0.8883836076300587	0.1096153228674933	0.2202389124264048	T	T	T
0.2223007616010148	0.4430009028433657	0.2210987881150398	T	T	T
0.5565511567810586	0.4435013684763615	0.2229954858445360	T	T	T
0.8874944576912076	0.4430963470497830	0.2213427888192617	T	T	T
0.5559084837971205	0.7754868236535781	0.2207493892878090	T	T	T
0.8860063393314889	0.7763060337312068	0.2222835773714719	T	T	T
0.2206383633942502	0.7775613946763018	0.2194818951874699	T	T	T
0.9961862460587741	-0.0037995447273332	0.3323285344498643	T	T	T
0.3291451760931636	0.9956251165469657	0.3308393870610369	T	T	T
0.6655675289522672	-0.0030683128945373	0.3298797339547601	T	T	T
0.3325810589018566	0.3308147468618933	0.3369131807948918	T	T	T
0.6704096725312021	0.3297974309500954	0.3339300953838514	T	T	T
0.0013202494435815	0.3318662229964336	0.3307000881334918	T	T	T
0.3288201728922069	0.6686540195395936	0.3295340783108792	T	T	T
0.6613391912238542	0.6660757915061455	0.3394251237347656	T	T	T
-0.0012238692100154	0.6661569712690913	0.3315900990075153	T	T	T
0.5385289571461923	0.6048755057464409	0.4358816773349535	T	T	T
0.6988587475188417	0.6851998693262313	0.4823848099549324	T	T	T
0.4279342346832189	0.4242506520213146	0.4351721419190900	T	T	T
0.6447931030840734	0.2866968042640129	0.4429246106754148	T	T	T
0.5473999651459333	0.3241759071573669	0.4478645368912026	T	T	T
0.5821829192406499	0.1530296579605884	0.4471539294753737	T	T	T

0.4660743014886072	0.6853199420675063	0.4310594106951456	T	T	T
0.7824545958964151	0.8344699343282562	0.4756828898184552	T	T	T
0.6444729294143647	0.6581331752533679	0.5325418721706912	T	T	T
0.7863984831980338	0.6234023087989449	0.4767551086469396	T	T	T



IS: -235.204122 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2199524987789463	0.1102839795739233	0.2224681750273740	T	T	T
0.5543134998762088	0.1108032985788078	0.2199584774133368	T	T	T
0.8890531279316625	0.1095798538314744	0.2215853610156671	T	T	T
0.2221827287368479	0.4442953569880268	0.2202803527670858	T	T	T
0.5552952985460475	0.4455973500723122	0.2208688731048277	T	T	T
0.8888725576822307	0.4452079227432300	0.2210850492302874	T	T	T
0.5553049777043317	0.7772020628622107	0.2203012568071850	T	T	T
0.8905848864268697	0.7790788046150788	0.2236317636586027	T	T	T
0.2203010473980741	0.7770190649167086	0.2215639722202243	T	T	T
0.9991263315701190	0.0034035982390122	0.3408082529601761	T	T	T
0.3341213928125268	0.0013332735271841	0.3317461545763105	T	T	T
0.6655693885110452	0.0016651173600329	0.3307283938896577	T	T	T
0.3331516486818384	0.3334353977285451	0.3315830005000775	T	T	T
0.6645597872878604	0.3312196505322095	0.3306294684654933	T	T	T
-0.0005311145445930	0.3326001526991700	0.3304808389227109	T	T	T
0.3335192491383827	0.6667044503377330	0.3308295485133035	T	T	T
0.6645117801796009	0.6658828769004176	0.3322255982371312	T	T	T
0.0013174671254767	0.6676095994547481	0.3352987082242274	T	T	T
0.8029604923500868	0.9164711079867438	0.4718239638756134	T	T	T
0.9907177770427491	0.0149516430264715	0.4413415920632939	T	T	T
0.9659717110829548	0.6078456031154260	0.4473841063044886	T	T	T
0.7126833601510379	0.7205748563614287	0.4574419404033752	T	T	T

0.7153429787481412	0.9709921198068646	0.4540802449309902	T	T	T
0.8600074275656086	0.6270885378817723	0.4556066737639914	T	T	T
0.0575078434720116	0.1621161202407722	0.4531429652486874	T	T	T
0.0784052815229643	0.9600459095371496	0.4577113717969077	T	T	T
0.8159626515221156	0.9332525751205436	0.5253117282109632	T	T	T
0.9139370132420143	0.4747343838318933	0.4432981919896978	T	T	T
0.5852109728939124	0.6606806852552303	0.4719566957336391	T	T	T

TS: -234.444834 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 2 2 7 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333355	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444355	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.2197180503554013	0.1080466165246268	0.2220490975463131	T	T	T
0.5566989579121616	0.1125345431526434	0.2214054508684997	T	T	T
0.8909109537806351	0.1091901264738440	0.2218955167597388	T	T	T
0.2226311994913098	0.4439379853807737	0.2208102232439922	T	T	T
0.5559300369425189	0.4429987129292002	0.2217512519542035	T	T	T
0.8878301002104640	0.4417201715688950	0.2217088549845870	T	T	T
0.5550794213036281	0.7767693904735840	0.2206556751492311	T	T	T
0.8896012844412360	0.7770556302814277	0.2221360021295503	T	T	T
0.2234450992368715	0.7762433702943405	0.2205298647807782	T	T	T
0.9985297910338220	0.9957818803216264	0.3400700524520315	T	T	T
0.3332165984372628	0.9958141124140488	0.3313885761476009	T	T	T
0.6673678514210304	0.0000588380067763	0.3305463439083455	T	T	T
0.3296210820553208	0.3266104216477946	0.3310026805483459	T	T	T
0.6679445377235771	0.3295813492968336	0.3355229670773107	T	T	T
0.0025245008714518	0.3312793088773900	0.3316761218968183	T	T	T
0.3363468906736555	0.6632466832596446	0.3353793781083932	T	T	T
0.6704726175796234	0.6650038300273567	0.3315751117162054	T	T	T
0.0056562539027920	0.6656246116494251	0.3308970822502448	T	T	T
0.7542523760729209	0.8530130510964488	0.4612249641317784	T	T	T
0.9525586313451233	0.9464533993180013	0.4393189045787281	T	T	T
0.6580208327397737	0.3672459493116198	0.4443051380969553	T	T	T
0.6396498111511253	0.6723236571084454	0.4360169826660210	T	T	T
0.6924916362318825	0.9396655792301328	0.4492470135867142	T	T	T
0.6528869453336065	0.4853183081528386	0.4472304930410719	T	T	T

0.0317384670613254	0.0850911470994502	0.4603251765994854	T	T	T
0.0178799604393701	0.8643844859524445	0.4508145007520663	T	T	T
0.7502013870102933	0.8398753083618443	0.5150387558875202	T	T	T
0.5372871755836701	0.2686987832487805	0.4577764393455230	T	T	T
0.4837251575842889	0.6614516618656627	0.3917176235048705	T	T	T

FS: -231.122786 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

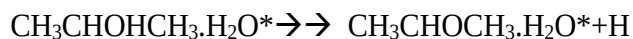
36 2 2 6 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2199677752512188	0.1094788763018795	0.2217315771449260	T	T	T
0.5562884215151176	0.1129704650074913	0.2215036835885510	T	T	T
0.8897114609071853	0.1096489728251798	0.2217634624098564	T	T	T
0.2216385445756718	0.4436786635235623	0.2198763421089424	T	T	T
0.5562089758334419	0.4443716473500341	0.2225356695972633	T	T	T
0.8874233794900531	0.4429388176455165	0.2212056893096475	T	T	T
0.5559403189493858	0.7769713066836302	0.2212695998498769	T	T	T
0.8883084918668089	0.7783033145918550	0.2222957962185015	T	T	T
0.2225664039226123	0.7777056575672067	0.2195636022118483	T	T	T
-0.0008286011478976	0.0000443258418844	0.3391673372704725	T	T	T
0.3319432800402966	0.9988899061359002	0.3311457521131769	T	T	T
0.6652865349095949	0.0003009485902353	0.3310962400763507	T	T	T
0.3293545439508964	0.3307242063946861	0.3308333403429073	T	T	T
0.6655068371571501	0.3314015876686101	0.3353301371725966	T	T	T
0.0002409305493878	0.3333770060063752	0.3307574486068844	T	T	T
0.3301559537380359	0.6662512368854409	0.3305724349064566	T	T	T
0.6638224435188136	0.6684548735122177	0.3338756777105216	T	T	T
0.0022868923712924	0.6681661010045863	0.3298599947965890	T	T	T
0.7773375117226160	0.8466107063782378	0.4616989964694447	T	T	T
0.9742301531118184	0.9620817043232173	0.4390470295878737	T	T	T
0.6783161985188434	0.3704121440537927	0.4416919818232466	T	T	T
0.6778434551823014	0.6696920264237162	0.4332572923881515	T	T	T
0.7015485319889220	0.9219688010126591	0.4537638000656783	T	T	T
0.6842891455368343	0.4972311781841498	0.4450084357729250	T	T	T

0.0397206462346175	0.1022260030928634	0.4590484110582099	T	T	T
0.0569288889689555	0.8968937775697962	0.4496885097594377	T	T	T
0.7776438155902906	0.8257518019800694	0.5151194432005421	T	T	T
0.5583505024864395	0.2784961497597204	0.4583510377519771	T	T	T



IS: -256.203132 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2219666388752141	0.1107426018285275	0.2208230240398060	T	T	T
0.5563746290684420	0.1123155010447234	0.2219968274969263	T	T	T
0.8891963320852087	0.1110220623279839	0.2209554194514900	T	T	T
0.2223460510502862	0.4445537297950162	0.2206581520719049	T	T	T
0.5564767149856733	0.4436576905088917	0.2221403407701067	T	T	T
0.8872087879026795	0.4434640975303504	0.2221924171129152	T	T	T
0.5554184657263374	0.7775742170107699	0.2206623016053421	T	T	T
0.8892827997248813	0.7779847985898620	0.2208314807529130	T	T	T
0.2222574666670324	0.7775380017051258	0.2206723947331276	T	T	T
0.0001767612148998	-0.0000941400062994	0.3318475711364636	T	T	T
0.3323589986014277	-0.0015012818902561	0.3316194138729384	T	T	T
0.6664032663735210	-0.0015450488810008	0.3317082516693182	T	T	T
0.3318975841550886	0.3333981907346457	0.3314619671495038	T	T	T
0.6675363171697184	0.3338033158685991	0.3367441145442994	T	T	T
0.0016838942667318	0.3335598194968414	0.3316676184201352	T	T	T
0.3340463480594013	0.6668489019376560	0.3324181683703618	T	T	T
0.6665949977685612	0.6681681135642100	0.3316948135315033	T	T	T
0.0018477866568693	0.6681564167926444	0.3316631009663853	T	T	T
0.5771650890430031	0.6427076198599975	0.5386647124164391	T	T	T
0.7681876835718573	0.8029887885275208	0.5239981930820332	T	T	T
0.4374045007724081	0.7022056125036130	0.5540761975504448	T	T	T
0.6631110794074407	0.3207771923053608	0.4451081605833996	T	T	T

0.5097633810499334	0.5104019581423326	0.4854771895891573	T	T	T
0.6058829672562402	0.3947720642029215	0.4618088371335329	T	T	T
0.4915445985696263	0.5672165400924909	0.4462191434204772	T	T	T
0.8214555472068211	0.8966804835359580	0.5658587174940165	T	T	T
0.8646460290742261	0.7542692128538593	0.5130843960849417	T	T	T
0.7645790205917367	0.8818805899013454	0.4818066975733750	T	T	T
0.5849117170697701	0.5626136336315305	0.5796706754453128	T	T	T
0.5735594887491234	0.1919554374164889	0.4535218934540048	T	T	T
0.3019083048994640	0.5825960667253453	0.5641679050042616	T	T	T
0.4810851371022525	0.7931214296186377	0.5967458435414088	T	T	T
0.4235923739703258	0.7778060686327384	0.5127560532162992	T	T	T

TS: -255.370960 eV

1.0000000000000000

8.3999999999999986 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.1999999999999993 7.2746133917892841 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 20.5757138393786931

36 3 2 10 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666650	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000001	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
-0.0000000000000003	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111215	F	F	F
0.4444444444444432	0.2222222222222214	0.11111111111111215	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111215	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111215	F	F	F
0.7777777777777787	0.5555555555555571	0.11111111111111215	F	F	F
0.11111111111110999	0.5555555555555571	0.11111111111111215	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111215	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111215	F	F	F
0.11111111111110855	0.8888888888888857	0.11111111111111215	F	F	F
0.2250110442351788	0.1112321505795148	0.2204438146136952	T	T	T
0.5596021292056158	0.1129778078449498	0.2213009345405244	T	T	T
0.8926170130267680	0.1117182641888710	0.2209103729218824	T	T	T
0.2253844349944761	0.4455298517019969	0.2207780422897077	T	T	T
0.5590273892804288	0.4447849769328516	0.2217453077894774	T	T	T
0.8903549012367539	0.4440254021556329	0.2220985788108247	T	T	T
0.5583944270360788	0.7782872766631689	0.2213956797674036	T	T	T
0.8904863416257462	0.7776640266892842	0.2224608307666401	T	T	T
0.2253788437223227	0.7779775067991141	0.2204324690706620	T	T	T
0.0121281062215540	0.0047178595139383	0.3321281950631099	T	T	T
0.3406237651635232	0.0002162546738914	0.3312459874867525	T	T	T
0.6742310819896992	0.0023609110867282	0.3316217535148461	T	T	T
0.3384693962118820	0.3356295433469668	0.3315053934021107	T	T	T
0.6758996288592662	0.3332928816243440	0.3351088043940378	T	T	T
0.0080780825212789	0.3344454966627416	0.3317337838254759	T	T	T
0.3401644035242329	0.6660418365398901	0.3343042157043639	T	T	T
0.6830970518726478	0.6746697062083873	0.3339354520667751	T	T	T
0.0132563052723002	0.6706769715539578	0.3317198467119362	T	T	T
0.6542430923496609	0.7736593825282576	0.4788187604368686	T	T	T
0.8550455214789866	0.8533783732009281	0.4978758683419341	T	T	T
0.5243312241987044	0.7082703597908918	0.5369936687575775	T	T	T
0.6544928770680057	0.3451011598369542	0.4425428262850250	T	T	T
0.5994443039900219	0.6203829197826417	0.4352140677517354	T	T	T
0.6388228857182958	0.8801908207211778	0.4521597917165483	T	T	T

0.6307099321139411	0.4534723923101503	0.4464270247897382	T	T	T
0.8997131430438754	0.9732983472837815	0.5297989623038941	T	T	T
0.8762393044839927	0.7504899532612160	0.5235024768078088	T	T	T
0.9431931065050815	0.8982218726955155	0.4541373915942572	T	T	T
0.5387578692722574	0.2345684810313639	0.4532715645102408	T	T	T
0.5350137572557065	0.6006274306772479	0.5637250627029310	T	T	T
0.5595748639887970	0.8231143009388722	0.5705249091710038	T	T	T
0.3814075220623852	0.6524710529840121	0.5211222608404429	T	T	T
0.4414033947245916	0.5810771401705342	0.3879041526044036	T	T	T

FS: -251.958979 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

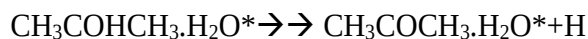
36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2216495656248322	0.1108393296037100	0.2201512993964280	T	T	T
0.5561837467075642	0.1127692483948053	0.2216066949094481	T	T	T
0.8890292001169642	0.1111431705714890	0.2205930765434418	T	T	T
0.2216834915029991	0.4446934980973349	0.2198991924673808	T	T	T
0.5569476677606657	0.4453898714386661	0.2222455082525548	T	T	T
0.8872096249861655	0.4436277337564888	0.2218041809253024	T	T	T
0.5565239579956726	0.7779513748933053	0.2216181347639807	T	T	T
0.8865908851705244	0.7770689186090015	0.2225757309692219	T	T	T
0.2219541562575453	0.7780221554739979	0.2198474067409684	T	T	T
0.0039701200211081	0.0035385411395668	0.3316785429152245	T	T	T
0.3332892771889384	0.9996734825292843	0.3312727568682579	T	T	T
0.6671167664408071	0.0010368384907743	0.3317690681931015	T	T	T
0.3321196372007321	0.3331178537733730	0.3300976720596361	T	T	T
0.6681391170686619	0.3326206250943354	0.3354071753418608	T	T	T
0.0027476211397940	0.3346800296853119	0.3309729893702524	T	T	T
0.3325868991773636	0.6682341832743607	0.3307832810267803	T	T	T
0.6693131632773087	0.6720939398071727	0.3358039765569343	T	T	T
0.0049007726116960	0.6696245335261904	0.3310121287652197	T	T	T
0.6767519355263816	0.7817606123815466	0.4776624239204719	T	T	T
0.8792789106456492	0.8706256455903898	0.4958498231651279	T	T	T
0.5496127181536904	0.7097414512001665	0.5367028097049946	T	T	T
0.6554773651851246	0.3522290356295061	0.4408217962123518	T	T	T
0.6230669766834145	0.6312582288903029	0.4336351617672290	T	T	T
0.6431379479518827	0.4713202973021486	0.4446023717378838	T	T	T

0.9198569466505498	0.9886991197970422	0.5283407913938233	T	T	T
0.9079930348193420	0.7711410120657993	0.5202486363067760	T	T	T
0.9655329951284942	0.9204151866175673	0.4516470684229852	T	T	T
0.5674246567301048	0.6049342198423745	0.5624647973771120	T	T	T
0.5813298402008510	0.8224521601196727	0.5708434513784320	T	T	T
0.4053143061476172	0.6483091313024650	0.5217157145966017	T	T	T
0.5370537448619344	0.2478231009900013	0.4533509428493176	T	T	T
0.6534578805374953	0.8856546804944002	0.4526501375672999	T	T	T



IS: -252.088957 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2239318224642376	0.1122463920364764	0.2200631437960118	T	T	T
0.5592887277174668	0.1118196243848530	0.2211076464616057	T	T	T
0.8884067001473531	0.1101798049517600	0.2217634985856438	T	T	T
0.2238955533828063	0.4443069848373418	0.2199635898788102	T	T	T
0.5577536984587470	0.4449388448691968	0.2203825096173195	T	T	T
0.8933660610963622	0.4487656946476982	0.2229800499974550	T	T	T
0.5592159756040688	0.7788505317854327	0.2209381346979127	T	T	T
0.8934662894746265	0.7771039455363875	0.2231693750212875	T	T	T
0.2218245884040435	0.7777300935856650	0.2218145598383615	T	T	T
0.0052520396818155	0.0014398521828669	0.3316809730200272	T	T	T
0.3380081468139300	0.0039860284181322	0.3300758960822289	T	T	T
0.6718038773449190	0.0022972326633321	0.3353736238114112	T	T	T
0.3391272226891595	0.3358785975574758	0.3315022293575148	T	T	T
0.6723376054969300	0.3366053594181398	0.3312552321482952	T	T	T
0.0057074594200964	0.3341787000850333	0.3315054071800427	T	T	T
0.3379301376677718	0.6669362308347420	0.3292949849716612	T	T	T
0.6738748366634848	0.6674072717583344	0.3317996969856686	T	T	T
0.0112194152522269	0.6702114098637658	0.3461623483213871	T	T	T
0.0613652839579671	0.6750461914005168	0.4473344605082681	T	T	T
0.1114011699824192	0.8611762935374894	0.4748352283434262	T	T	T
0.8898258179954328	0.5162308326866901	0.4768363985741429	T	T	T
0.6128829756472183	0.9378845863300660	0.4491796370254164	T	T	T

0.2166372255758092	0.6522989759006520	0.4563071937720175	T	T	T
0.9094735622027101	0.5158711427275616	0.5299883657478026	T	T	T
0.4798326083958529	0.8477419114566168	0.4511269727522492	T	T	T
0.1346498877028981	0.8613533133576143	0.5277368872492098	T	T	T
0.2376791242197105	0.9718594387482365	0.4525559518974270	T	T	T
0.0006648946261312	0.8921190705505146	0.4666548912639449	T	T	T
0.6718433493449936	0.8628189464252456	0.4512441703147979	T	T	T
0.8614490544148662	0.3825186561492879	0.4573859117166124	T	T	T
0.7689729921122127	0.5306292990882899	0.4674979595312410	T	T	T
0.1851712203144123	0.5288864916685582	0.4404198555522179	T	T	T

TS: -251.460339 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333354	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444344	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777770	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777780	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.2252408130868414	0.1136452845252568	0.2199313065742942	T	T	T
0.5620005470816026	0.1136844299524976	0.2209441670933600	T	T	T
0.8892856817937158	0.1111747557205017	0.2222032621344938	T	T	T
0.2249149959850414	0.4453624952992827	0.2206868551370891	T	T	T
0.5598434376810393	0.4462209205349257	0.2203850528149074	T	T	T
0.8955970609754340	0.4491823348334822	0.2231535528448485	T	T	T
0.5583171584976410	0.7790834253873754	0.2216383617412021	T	T	T
0.8945090755101008	0.7787082995852136	0.2223951685815653	T	T	T
0.2236744651498215	0.7796817585772933	0.2210714563532748	T	T	T
0.0088672878697985	0.0042965212474050	0.3318933841029344	T	T	T
0.3433322288546866	0.0088502073155503	0.3291888745578367	T	T	T
0.6769831754585792	0.0054035543764531	0.3361588630832513	T	T	T
0.3437701040041774	0.3384566497949116	0.3315895891237064	T	T	T
0.6762415545766525	0.3393066041710451	0.3311490773053389	T	T	T
0.0124188004179338	0.3366393821293334	0.3349698635189746	T	T	T
0.3416365080635621	0.6710284205342629	0.3308947638884249	T	T	T
0.6785133055454972	0.6699008087466880	0.3315700412859925	T	T	T
0.0132301148381899	0.6752718772915647	0.3428335279946998	T	T	T
0.0906643813030520	0.6751508215958889	0.4454952305672658	T	T	T
0.1537780638666840	0.8649755852922262	0.4725925752423554	T	T	T
0.9142557318232094	0.5224600895295658	0.4745227750548599	T	T	T
0.6039424763478519	0.9296673226237717	0.4476101283485699	T	T	T
0.2271479253338154	0.6356034765875406	0.4396520867851567	T	T	T
0.9396616261557511	0.5116525896049527	0.5266782298457344	T	T	T

0.4743497259734284	0.8266963634267398	0.4470198419272404	T	T	T
0.1939368225393207	0.8681448537883741	0.5239666640374744	T	T	T
0.2746650076269894	0.9718943119759845	0.4462484860118100	T	T	T
0.0443279198376157	0.8999913469823534	0.4705793440058832	T	T	T
0.6775013537237301	0.8708906246149573	0.4551003276552969	T	T	T
0.8733074822851822	0.3888339460968757	0.4518108348713939	T	T	T
0.8006424902523821	0.5510153031245959	0.4705349865272999	T	T	T
0.1571795833856555	0.4790468466052886	0.3943443206718377	T	T	T

FS: -248.516013 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

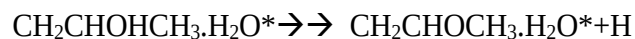
36 3 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220228570345882	0.1113475232298962	0.2208606851334766	T	T	T
0.5561188727955434	0.1124950530857208	0.2219513018471538	T	T	T
0.8892425449147290	0.1113848427044795	0.2209318248687799	T	T	T
0.2219589889708491	0.4445027522957885	0.2205816349622407	T	T	T
0.5562556175941842	0.4438096784757968	0.2218864943121441	T	T	T
0.8867710104671135	0.4436450503867780	0.2223713746828698	T	T	T
0.5553764827467768	0.7780278097883992	0.2203892949679436	T	T	T
0.8893544756962136	0.7783843223357924	0.2208151542958571	T	T	T
0.2220460210726913	0.7776743558846139	0.2204961803207549	T	T	T
0.0000379648654665	0.0004204595268565	0.3319889691975091	T	T	T
0.3320620021740876	0.9990054007542638	0.3315577561235722	T	T	T
0.6664250797643146	0.9990547715306124	0.3314254064227127	T	T	T
0.3320409303404142	0.3337942082859545	0.3314610297528274	T	T	T
0.6679436566760580	0.3351541034769011	0.3368826654060990	T	T	T
0.0016576877805738	0.3340097940916151	0.3317414192782839	T	T	T
0.3335337543128439	0.6675969980273584	0.3317768922859665	T	T	T
0.6665414838418002	0.6685093621234554	0.3309830134127325	T	T	T
0.0016896087688354	0.6685135431349472	0.3317484128207401	T	T	T
0.6438619283856248	0.6991814087373269	0.5166360290411348	T	T	T
0.8484885020203489	0.8016848170330146	0.5079933688395637	T	T	T
0.5550991402151108	0.8042828725473374	0.5414853251736128	T	T	T
0.6416427116108407	0.3073850587467221	0.4459400357574196	T	T	T
0.5486910652257044	0.5342672737107509	0.5027403654619637	T	T	T
0.6133799077033008	0.4004079690998782	0.4659937878956975	T	T	T

0.8779470989009608	0.8679109548018020	0.4593992382096797	T	T	T
0.9176436322924025	0.9118565915103836	0.5439850307357557	T	T	T
0.9040196345954343	0.7082215426290258	0.5086636913164865	T	T	T
0.5918914879084317	0.8391406687528349	0.5929902933817379	T	T	T
0.6092712481108900	0.9355304346884089	0.5153144692983309	T	T	T
0.4054337929861390	0.7226899034916170	0.5366499210004547	T	T	T
0.5263941670567095	0.1899986823895697	0.4480147990377852	T	T	T



IS: -251.924311 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2193996749559118	0.1090274971916355	0.2224754463454096	T	T	T
0.5560361284941389	0.1127944375246315	0.2214099785192946	T	T	T
0.8905486500925480	0.1097275380626866	0.2223412719421694	T	T	T
0.2220099974905235	0.4441128027438650	0.2204357959066727	T	T	T
0.5556308964189141	0.4437906265665322	0.2215920641509866	T	T	T
0.8876012804642734	0.4428094085071932	0.2215593263799230	T	T	T
0.5551896323884236	0.7772560312570139	0.2202155510229949	T	T	T
0.8893577737847805	0.7787763181810664	0.2218800194553276	T	T	T
0.2227407417871391	0.7777256572058496	0.2200771178196987	T	T	T
0.9977351961683171	0.9963909874474859	0.3414906350775874	T	T	T
0.3326673037380635	0.9984645682485489	0.3317371969384850	T	T	T
0.6662018904710838	-0.0000823844726435	0.3305068578591333	T	T	T
0.3305064874193263	0.3307587251909969	0.3314836188323984	T	T	T
0.6672663794876483	0.3318495224365674	0.3352167423331367	T	T	T
0.0012763451743257	0.3326739831924863	0.3317566364348587	T	T	T
0.3324324454938714	0.6653502492235852	0.3316048751110898	T	T	T
0.6665756536945935	0.6658891281507139	0.3311382517163366	T	T	T
0.0027577840073057	0.6667036125371032	0.3306324720994574	T	T	T
0.7849984071614750	0.8875333452077362	0.4714747753144416	T	T	T
0.9732239063611614	0.9598926722040317	0.4414929357919060	T	T	T
0.7925379723681727	0.8934540887115527	0.5456725725907258	T	T	T
0.6552689098353864	0.3554343750082509	0.4487379075880268	T	T	T

0.6636950682133002	0.6956472670569868	0.4509162454557549	T	T	T
0.7221280661453450	0.9675488904011249	0.4534454609139342	T	T	T
0.6648497369042851	0.4773423796366064	0.4540999772439374	T	T	T
0.0667064571592291	0.0995222779080534	0.4595303604354194	T	T	T
0.0298382454615079	0.8700130074474848	0.4530916058290135	T	T	T
0.5250390854270597	0.2656268260842762	0.4544734617060611	T	T	T
0.8543227792048924	0.8140645406591944	0.5643341782338451	T	T	T
0.8749996680970668	0.0360154948114154	0.5626949261428417	T	T	T
0.6537184941306079	0.8359750566151127	0.5662327133246078	T	T	T
0.5384931784845000	0.6748142180032065	0.4459474159843753	T	T	T

TS: -251.162692 eV
 2.8000000000000000
 2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.4999999999999998 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495283

36 3 2 9 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333354	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666642	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333358	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.6666666666666645	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444352	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777770	0.2222222222222214	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444430	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777780	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111144	0.5555555555555574	0.11111111111111071	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.7777777777777781	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111071	F	F	F
0.2198638427586958	0.1081064812791775	0.2220307831493474	T	T	T
0.5568505540433485	0.1127484844524881	0.2214070547626326	T	T	T
0.8909840935038650	0.1093404521955695	0.2218590345670331	T	T	T
0.2227876491339683	0.4440939925253041	0.2207184903069740	T	T	T
0.5562993501772671	0.4435611584973160	0.2218066513653845	T	T	T
0.8880076591994908	0.4420024797286149	0.2217356326958645	T	T	T
0.5553020104499889	0.7771449161536145	0.2206358759690277	T	T	T
0.8898366051395007	0.7772032421829673	0.2221324339732344	T	T	T
0.2236683917858346	0.7766052603483007	0.2205463106271452	T	T	T
0.9989389701159179	0.9960175421611416	0.3399678981533595	T	T	T
0.3339682280692771	0.9965274452704389	0.3314637814842233	T	T	T
0.6678867133558019	0.0008557958759745	0.3305841653460901	T	T	T
0.3302491632872494	0.3271556672894329	0.3309334291690259	T	T	T
0.6687819045790282	0.3305807611961866	0.3355710590234170	T	T	T
0.0031442045055121	0.3317423927982875	0.3315909047647463	T	T	T
0.3367865700668572	0.6635589092597234	0.3351662147824716	T	T	T
0.6720225958233830	0.6664107666197834	0.3315627539391826	T	T	T
0.0065285179708768	0.6660849558182996	0.3309553846949423	T	T	T
0.7518702528142245	0.8576404226362823	0.4612452153856602	T	T	T
0.9508693707490703	0.9496931290814203	0.4391216225634800	T	T	T
0.7370772609220118	0.8430347377940823	0.5354952087959823	T	T	T
0.6575228069974181	0.3682280219800163	0.4447299930596635	T	T	T
0.6411690439656909	0.6757333685449145	0.4351595168567493	T	T	T
0.6907942865538630	0.9419860607419912	0.4445683845810622	T	T	T

0.6534634791149594	0.4866474672120924	0.4473418145820032	T	T	T
0.0312045515902289	0.0893319515724156	0.4591545088152492	T	T	T
0.0146640680486814	0.8668675151733864	0.4518099574940855	T	T	T
0.5353888261409332	0.2703810359106656	0.4573065627183149	T	T	T
0.7980189592134028	0.7627955500319878	0.5540999690453376	T	T	T
0.8088052588762772	0.9802761998971571	0.5577373335545485	T	T	T
0.5919288183434368	0.7747984154010354	0.5500962723734479	T	T	T
0.4828114938551747	0.6610374727872197	0.3917544993857794	T	T	T

FS: -247.845020 eV

2.8000000000000000

2.9999999999999996 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.4999999999999998 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pd C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2198266160466165	0.1095127147747052	0.2217602849546637	T	T	T
0.5562598451860820	0.1130274666737944	0.2216127624061994	T	T	T
0.8897548192087369	0.1098727803740799	0.2218295482086872	T	T	T
0.2216562770450400	0.4438882790450005	0.2198621037109962	T	T	T
0.5562828337534718	0.4447850958474734	0.2225617356958791	T	T	T
0.8872733893353788	0.4430689956133309	0.2213206540087618	T	T	T
0.5559839638858346	0.7774100589577129	0.2212475139461436	T	T	T
0.8882955917223576	0.7784884183091046	0.2223044296291160	T	T	T
0.2223674860457305	0.7777383698202900	0.2195810816647978	T	T	T
0.9991860583547888	0.9997083112690449	0.3392583305359597	T	T	T
0.3321545145155017	0.9991477911671213	0.3312987808721926	T	T	T
0.6654765568428227	0.0007413089066382	0.3314062768979190	T	T	T
0.3295265309369482	0.3309986709424085	0.3307436243041227	T	T	T
0.6658497154993307	0.3321841997032584	0.3355272058593137	T	T	T
0.0005303397703272	0.3335349049250145	0.3308124293072580	T	T	T
0.3304613372383522	0.6663766430327444	0.3305522334258040	T	T	T
0.6652123101742630	0.6695163087633511	0.3339118472687115	T	T	T
0.0025761568077920	0.6682621754237477	0.3299825475882975	T	T	T
0.7725687250747362	0.8505405379448110	0.4619876962845970	T	T	T
0.9704476210256781	0.9622060144038558	0.4390486383627253	T	T	T
0.7626491108380561	0.8252587196788140	0.5360245410911694	T	T	T
0.6739877525809459	0.3705718231336576	0.4424050750365039	T	T	T
0.6753199250604701	0.6728770497739084	0.4330466922229818	T	T	T
0.6803837894245047	0.4969877912174879	0.4456166644954100	T	T	T

0.0391281997561528	0.1032974220759524	0.4582469778610926	T	T	T
0.0493320216037681	0.8934427625702134	0.4507229297245993	T	T	T
0.8345885149969069	0.7522497752391185	0.5511516695703396	T	T	T
0.8261255149445135	0.9593082473434882	0.5605953809169922	T	T	T
0.6182918980217711	0.7450851117686087	0.5513667867727551	T	T	T
0.5525202710519987	0.2789569362726135	0.4580000984953290	T	T	T
0.6994449068693371	0.9263564055298539	0.4490226505456359	T	T	T

Ir catalyst



IS: -345.875307 eV

2.740000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1113622576550806	0.8892633598694204	0.1098596243276977	T	T	T
0.2227614515742228	0.1121703270460044	0.2215917635399934	T	T	T
0.5552930083826394	0.1108272619563536	0.2204433603988432	T	T	T
0.8891926116673029	0.1112217330167400	0.2206051870394994	T	T	T
0.2230667134463794	0.4433879632281912	0.2218311674675300	T	T	T
0.5541496221136011	0.4436922295335953	0.2216454830485681	T	T	T
0.8893177568893329	0.4450256088800937	0.2202707542442011	T	T	T
0.5555715138698342	0.7775915705776194	0.2205622939182605	T	T	T
0.8895032831419485	0.7775325862172777	0.2200051370017055	T	T	T
0.2215129516561313	0.7776132968070303	0.2200748188357105	T	T	T
0.9971474407836094	0.9974638742025950	0.3295632755090417	T	T	T
0.3339664907586809	0.9978825610403871	0.3294156777544571	T	T	T
0.6669502599332304	0.0000963209909059	0.3296864966346983	T	T	T
0.3340100501083757	0.3340601740461817	0.3329764230321357	T	T	T
0.6688328603082420	0.3325369819933550	0.3292651360564725	T	T	T
0.9976663974482035	0.3330564192043375	0.3295900789102392	T	T	T
0.3338226135444474	0.6691373170556592	0.3293877654774046	T	T	T
0.6687208879028586	0.6695111330616013	0.3294132505241442	T	T	T
0.0004355161296904	0.6669603211682018	0.3298745506119957	T	T	T
0.6389447706187520	0.2039351969776173	0.5235581177905599	T	T	T
0.6384331031284760	0.3632025932647904	0.4935589245536735	T	T	T

0.3255419945949471	0.3276584898654565	0.4440509996755643	T	T	T
0.7260692587714574	0.4073734562855703	0.4555527064619365	T	T	T
0.5373773267664462	0.1568565359029080	0.5644005174609774	T	T	T
0.2213094642678709	0.2016424661756313	0.4535783802938294	T	T	T
0.4445936598644419	0.3353754743642474	0.4631671315811781	T	T	T
0.7787272244653323	0.2457539027480109	0.5436555831742690	T	T	T
0.5976081741543987	0.0889479819500938	0.4875952205847885	T	T	T

TS: -345.192428 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333356	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111191	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227529492471431	0.1108216414661124	0.2199445108736813	T	T	T
0.5562846259487937	0.1126455329377232	0.2214764929717548	T	T	T
0.8885278065435701	0.1108932617315918	0.2209188632359269	T	T	T
0.2228857029496350	0.4460574367005972	0.2204400833115928	T	T	T
0.5557661771471973	0.4451423552074015	0.2219133671128369	T	T	T
0.8865650396833136	0.4431398622635448	0.2218158638750138	T	T	T
0.5540687017178212	0.7766761610685998	0.2212932744125716	T	T	T
0.8858992040150360	0.7754938565307091	0.2221511955435359	T	T	T
0.2215742520337661	0.7781972263705659	0.2190903232558184	T	T	T
0.0017802538160445	0.0004830257354800	0.3293165721255844	T	T	T
0.3324273720342877	0.9973453804615046	0.3293110761816452	T	T	T
0.6680556743996777	0.0014474918055328	0.3293030061882817	T	T	T
0.3243371112752783	0.3238570667552489	0.3286881114959723	T	T	T
0.6661288016473896	0.3313042871950737	0.3324412444234192	T	T	T
0.0032135538923152	0.3339575054027715	0.3295557585801079	T	T	T
0.3320846461243615	0.6625214011141426	0.3336249434706470	T	T	T
0.6754441464560519	0.6736080422756218	0.3321414023807743	T	T	T
0.0068459722023017	0.6679441367099997	0.3292033111610574	T	T	T
0.6945375382479200	0.7906056739546362	0.4831468353643619	T	T	T
0.6510876484887500	0.3479628921482296	0.4430987893048078	T	T	T
0.5988303131118912	0.6352937570604211	0.4383128673370166	T	T	T
0.6818661663146535	0.9111949674367446	0.4657593790414444	T	T	T
0.6246374908934759	0.4565678397547894	0.4484065368324576	T	T	T
0.6297460317583727	0.7464060024169860	0.5325428444863265	T	T	T

0.5346813699179828	0.2331570828683627	0.4546547232088528	T	T	T
0.8444450913422399	0.8340219103614183	0.4856316435541561	T	T	T
0.4484267950240196	0.6336498897506536	0.4043586582221784	T	T	T

```

FS:          -341.931481 eV
2.740000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36  1  2  5          # Ir C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.000000000000000  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.3333333333333357  0.000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.000000000000000  0.6666666666666643  0.000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2224639656257335  0.1108914629342043  0.2199606858892308  T  T  T
0.5563811856585847  0.1127440038506676  0.2215274871935421  T  T  T
0.8890523739628999  0.1113053108672203  0.2207154774135638  T  T  T
0.2226683422850862  0.44493628444641103  0.2198897000047960  T  T  T
0.5568030047933882  0.4449438039652576  0.2225549798992655  T  T  T
0.8868861146340721  0.4437638234952299  0.2216538274877294  T  T  T
0.5568840857498386  0.7761767627242264  0.2219766894758781  T  T  T
0.8857500841975660  0.7758464557245978  0.2222365278045078  T  T  T
0.2227011813448559  0.7781542426522482  0.2193884050718456  T  T  T
0.0029146875203822  0.0013827865649695  0.3295247827424509  T  T  T
0.3310428937208282 -0.0001819936204228  0.3294920986269307  T  T  T
0.6674284812033480  0.0010913046598274  0.3291867683095248  T  T  T
0.3264178943691629  0.3294833365028754  0.3289079895420225  T  T  T
0.6670478297920303  0.3293291682234595  0.3325799579715206  T  T  T
0.0025303369664994  0.3352494558722635  0.3293830338719014  T  T  T
0.3303634192139702  0.6646042499847354  0.3292903484793054  T  T  T
0.6676980239031811  0.6734828127236743  0.3343540470967860  T  T  T
0.0081126612151282  0.6701370710384108  0.3290082140533670  T  T  T
0.7463283740574301  0.7961874516665652  0.4800322907988425  T  T  T
0.6684691288943824  0.3511505606059163  0.4397677818663560  T  T  T
0.6556993472132074  0.6406610695725906  0.4359746957604839  T  T  T
0.6849997405931106  0.8879992034013573  0.4748970822024932  T  T  T
0.6644569306720564  0.4815045038814359  0.4453736591796141  T  T  T
0.7239945843949237  0.7410947261416813  0.5311021783645561  T  T  T

```

0.5476091000705662	0.2474592510235160	0.4545157281251502	T	T	T
0.8986017501145802	0.8804290537590923	0.4699829651255474	T	T	T



IS: -341.776017 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 5 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221226601550936	0.1112338734660515	0.2195628525844706	T	T	T
0.5572957429017626	0.1104525043959759	0.2213874275826576	T	T	T
0.8871098416215052	0.1091041106322030	0.2209001187408457	T	T	T
0.2225020450302897	0.4454394986883452	0.2206346544035891	T	T	T
0.5558016383252727	0.4442549009888762	0.2202551453298376	T	T	T
0.8906377136786930	0.4469892217466210	0.2218727830714671	T	T	T
0.5551062165069122	0.7770314394370204	0.2224326568580545	T	T	T
0.8904873231328603	0.7769126055718009	0.2213366839735537	T	T	T
0.2215521477649559	0.7777405871104461	0.2208585720529822	T	T	T
0.0017622304593480	-0.0001808094205318	0.3295104781557266	T	T	T
0.3349993818791861	0.0063836456479288	0.3284236119614431	T	T	T
0.6667771120500370	0.0017640427765863	0.3320080191545879	T	T	T
0.3333458667579264	0.3327407829356085	0.3297043869831838	T	T	T
0.6658399723045229	0.3344174196737518	0.3295114967469791	T	T	T
0.0001358570263234	0.3284396166739778	0.3289343894240150	T	T	T
0.3340022675487470	0.6654317092853812	0.3301115377460993	T	T	T
0.6705130124480503	0.6638817567661268	0.3294975731404569	T	T	T
0.0043881558184363	0.6669464821040586	0.3378847834567355	T	T	T
0.0789340043956892	0.6741478161518245	0.4380046393372595	T	T	T
0.6462926672401050	0.9721002654335483	0.4479864616868449	T	T	T
0.2519704997084627	0.6615823382734466	0.4453996461533035	T	T	T

0.9659732561233949	0.5573177365829070	0.4656309652315280	T	T	T
0.5155366778913889	0.8693619040601848	0.4544965211005684	T	T	T
0.1139739504540001	0.8091668180522315	0.4603849549357540	T	T	T
0.7247439719712568	0.9145990155373844	0.4543200160411461	T	T	T
0.2143788202179121	0.5281630192430699	0.4495355102544410	T	T	T

TS: -341.136275 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 1 2 5 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111182	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223586594711660	0.1116938516770710	0.2193917637425433	T	T	T
0.5575997296205927	0.1106643551074915	0.2213677594684048	T	T	T
0.8855456575274456	0.1065934628333440	0.2200371411274880	T	T	T
0.2210124974654273	0.4444792877441094	0.2208839036837456	T	T	T
0.5558678699958238	0.4444209792291671	0.2204927164490933	T	T	T
0.8923441635235390	0.4467730341937163	0.2223444497233794	T	T	T
0.5529320582334083	0.7763372081750012	0.2232344168491632	T	T	T
0.8897732603271633	0.7776377496496970	0.2205698483410440	T	T	T
0.2213367335273453	0.7775419219935240	0.2206950427557622	T	T	T
0.0019687430269521	1.0005431616539020	0.3290596154445350	T	T	T
0.3352687682982299	0.0061273280787300	0.3280793962979175	T	T	T
0.6681930721431871	0.0041912083597459	0.3319866101704453	T	T	T
0.3353027696034312	0.3337470811369240	0.3294390421048203	T	T	T
0.6677366003625682	0.3351043537625562	0.3297731586902808	T	T	T
0.0013516879630978	0.3277360856389834	0.3326681685588710	T	T	T
0.3347955875581771	0.6673873379576170	0.3309086751180350	T	T	T
0.6713356394896097	0.6626878572243363	0.3292333264720443	T	T	T
0.0029587764863591	0.6726492892621553	0.3367410445344992	T	T	T
0.0968548510917930	0.6793090721327268	0.4353108153955830	T	T	T
0.6296102813072676	0.9597859512565802	0.4466676922660676	T	T	T
0.2387912494429380	0.6272813629004307	0.4339644170171243	T	T	T
0.9752254226190149	0.5752151907588351	0.4639356074482096	T	T	T
0.5054191529664470	0.8434931117400053	0.4504800642520881	T	T	T
0.1555544934958020	0.8208078406098235	0.4564761591451827	T	T	T

0.7226110097537904	0.9233292663683476	0.4582491091867293	T	T	T
0.1328957841857129	0.4487288773294911	0.4046958656446798	T	T	T

FS: -338.008533 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

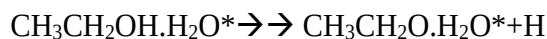
36 1 2 4 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228081893467419	0.1117860091000736	0.2212877200747700	T	T	T
0.5556428673164761	0.1108015714454313	0.2205957057638459	T	T	T
0.8909758999648424	0.1152557638995972	0.2224713056143121	T	T	T
0.2222998579735862	0.4440905413539977	0.2204882461339290	T	T	T
0.5545511392533389	0.4436187820170874	0.2213771672375847	T	T	T
0.8901401555338514	0.4466565109363288	0.2208702226314574	T	T	T
0.5512021693688695	0.7756252276312446	0.2224558106488452	T	T	T
0.8880148481310368	0.7782404974298204	0.2194425096832061	T	T	T
0.2200125800436692	0.7764992162317419	0.2208539287905600	T	T	T
-0.0001711893828908	0.9954903064696461	0.3292506230585327	T	T	T
0.3357510568447327	-0.0012789633711865	0.3291021861494681	T	T	T
0.6660111514966017	0.0007608728394769	0.3297807396011527	T	T	T
0.3377206462289947	0.3311155764992089	0.3314748270859056	T	T	T
0.6678542050014877	0.3305358829122440	0.3289235048327504	T	T	T
0.0005645210512612	0.3263863538762812	0.3321455326280480	T	T	T
0.3396885171105167	0.6658198026107855	0.3321679848704779	T	T	T
0.6711502682315471	0.6669598757090042	0.3290784999430043	T	T	T
0.9963505421314108	0.6705591621911658	0.3349648623653734	T	T	T
0.0503303738788515	0.6117234920127868	0.4312081229438879	T	T	T
0.3303543139790089	0.3368139610558991	0.4444066723770448	T	T	T
0.1491371522049681	0.5134012715629215	0.4177409147400439	T	T	T
0.2568561167191804	0.4031465849135542	0.4506384282628859	T	T	T
0.2459551640790384	0.2051649114398472	0.4560509994175694	T	T	T
0.9195722987761480	0.5194688396745170	0.4580238914229235	T	T	T

0.1418428742665120 0.7408961900587515 0.4589375245495163 T T T



IS: -362.596103 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 2 2 8 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225442775554650	0.1112258787382407	0.2205874413024451	T	T	T
0.5562356889733683	0.1124981817950055	0.2216839897845992	T	T	T
0.8885969795654698	0.1111982472921142	0.2207060927605298	T	T	T
0.2225352186177784	0.4451361673539599	0.2203491676049830	T	T	T
0.5562436164883752	0.4437382516185963	0.2218683114841490	T	T	T
0.8870175741329511	0.4434790898535674	0.2219094719351764	T	T	T
0.5551062565593397	0.7774375999486866	0.2202905916539848	T	T	T
0.8890007088952988	0.7777005147649435	0.2204569637705961	T	T	T
0.2223365216302521	0.7773407425310513	0.2201945989727375	T	T	T
0.0004225922973666	0.0005949431266754	0.3296726582325273	T	T	T
0.3309057797885535	0.9981195101590988	0.3296752298530167	T	T	T
0.6667677446367115	0.9978309669390052	0.3297068151408535	T	T	T
0.3297908291427888	0.3316901898366063	0.3294862176866363	T	T	T
0.6679905494073195	0.3350752286365162	0.3332083399167252	T	T	T
0.0024094909972765	0.3332481266003851	0.3295389179655436	T	T	T
0.3335238812551298	0.6672642371973719	0.3300605292208316	T	T	T
0.6680333858599840	0.6703128104509909	0.3294756656203638	T	T	T
0.0022300618306199	0.6692852999940474	0.3294573321744013	T	T	T
0.6119742905511747	0.6674656119548245	0.5448575410872712	T	T	T
0.8167741020056307	0.8135091359693771	0.5339232679976514	T	T	T
0.6671197212018243	0.3271662110631652	0.4441702313557050	T	T	T
0.5322587654114866	0.5318766542086021	0.4912633636100718	T	T	T

0.5250736590508955	0.7336428521589152	0.5513550177604634	T	T	T
0.6179227331379525	0.4097991135476733	0.4634688519744661	T	T	T
0.5115950946470155	0.5901004290792828	0.4516700029870814	T	T	T
0.8701212022082890	0.9088944355389477	0.5768469969792226	T	T	T
0.9031841755481468	0.7469454444568734	0.5280297094561653	T	T	T
0.8347266660141905	0.8981307993983494	0.4893426251617340	T	T	T
0.5944921102489160	0.5831540390506252	0.5894172089458752	T	T	T
0.5727345136827134	0.1970542432750306	0.4541072994825797	T	T	T

TS: -361.885621 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 8 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111230	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226849263108524	0.1107055829126207	0.2199292362102492	T	T	T
0.5563648035243203	0.1126644551271991	0.2214537058008225	T	T	T
0.8884727970909062	0.1107585099524703	0.2208756903067031	T	T	T
0.2228387518011518	0.4459683276611984	0.2203953778764051	T	T	T
0.5558778187863008	0.4452213712996325	0.2219846609974704	T	T	T
0.8865483656123055	0.4429901773600499	0.2217463498398649	T	T	T
0.5541600872157537	0.7765828486126856	0.2213469352896159	T	T	T
0.8858921429547781	0.7754198517824341	0.2221461496496292	T	T	T
0.2215334113361870	0.7782838220890667	0.2190354841120763	T	T	T
0.0019627820045419	0.0007302999663427	0.3292000043925629	T	T	T
0.3326982920481856	0.9972074633389555	0.3292358687361663	T	T	T
0.6678882474329280	0.0013386953264090	0.3293823915123147	T	T	T
0.3243334023386332	0.3236299200402208	0.3286894992505209	T	T	T
0.6660865658910492	0.3315400406990567	0.3325366627390086	T	T	T
0.0030001801134913	0.3336016292075525	0.3295261214155260	T	T	T
0.3316257962447730	0.6619918922041717	0.3333248528085969	T	T	T
0.6759100390432292	0.6740839433322965	0.3325578787284553	T	T	T
0.0068059965454063	0.6675808476944438	0.3290281644727582	T	T	T
0.6752598159655039	0.7890530701134786	0.4853124879235550	T	T	T
0.8698337568729477	0.8392759720224479	0.5088223015033322	T	T	T
0.6510215845228897	0.3479712128188713	0.4432563579214078	T	T	T
0.5974714365852534	0.6344755513652363	0.4388721245920142	T	T	T
0.6777072874361098	0.9112498358267680	0.4610478487151236	T	T	T
0.6254067610595397	0.4572177078332740	0.4489288020157401	T	T	T

0.9202484482453038	0.9542091669101895	0.5452044810232680	T	T	T
0.8699413193455990	0.7190327999184463	0.5326183922920347	T	T	T
0.9695407025634604	0.8866278286584951	0.4670224102689137	T	T	T
0.5757243893797813	0.7454994782015254	0.5272278825041528	T	T	T
0.5340374455061878	0.2333667168151173	0.4545032465446014	T	T	T
0.4434783375002584	0.6261230926141975	0.4031263257410020	T	T	T

FS: -358.602915 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

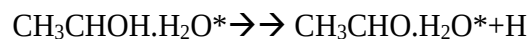
36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2223086216515461	0.1107186497124786	0.2198567633998905	T	T	T
0.5565364096180891	0.1129527413525565	0.2214322857325608	T	T	T
0.8888736782223051	0.1112711574527153	0.2207160243898671	T	T	T
0.2226291107133749	0.4450176302184209	0.2199310750652853	T	T	T
0.5567530580869015	0.4452534318257439	0.2225865108495948	T	T	T
0.8868245636248098	0.4436546905656746	0.2215900343862285	T	T	T
0.5567483912385687	0.7762785220800804	0.2218948551415420	T	T	T
0.8853090583923503	0.7757858390871077	0.2224575955107184	T	T	T
0.2224745592804461	0.7782171394516958	0.2193627349696558	T	T	T
0.0031515164380832	0.0025498746901944	0.3294527440234463	T	T	T
0.3311979212598007	0.9997605687871719	0.3294028208062014	T	T	T
0.6666492157127124	0.0007985025369984	0.3292657345415977	T	T	T
0.3262127324119759	0.3291711340494499	0.3288950197404027	T	T	T
0.6670438143598886	0.3299538845077082	0.3325847527864537	T	T	T
0.0026068750698961	0.3353043518333956	0.3294263816415123	T	T	T
0.3301029262029741	0.6651090728800959	0.3292495505609924	T	T	T
0.6686401151294143	0.6736582530281481	0.3345504435758312	T	T	T
0.0076923540744206	0.6695822057736013	0.3289446635568845	T	T	T
0.6909030668038152	0.7829236408902573	0.4837039173102791	T	T	T
0.8942502131981626	0.8907145266435930	0.5061002528284324	T	T	T
0.6647904323151194	0.3480220181346438	0.4405719807471282	T	T	T
0.6552519045422271	0.6405047720576378	0.4356858210406733	T	T	T
0.6475869898882448	0.8793265847954370	0.4622757571256638	T	T	T
0.6606168207229026	0.4760512355691187	0.4467848955313277	T	T	T

0.9122604524825568	-0.0053693550758345	0.5440933538855666	T	T	T
0.9391929635978936	0.7961724143665923	0.5271305122161407	T	T	T
0.9875203745416526	0.9668946594515982	0.4640154092658436	T	T	T
0.5970693874777852	0.7106960958852807	0.5261410503061237	T	T	T
0.5422669366154573	0.2438950159225606	0.4537961723629812	T	T	T



IS: -358.402597 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220802493789165	0.1112023152045445	0.2196141170711523	T	T	T
0.5571068602481970	0.1104110725957188	0.2213932583583328	T	T	T
0.8870491747221054	0.1088231641257257	0.2207627889296346	T	T	T
0.2224975929278050	0.4454547955796714	0.2205885178248979	T	T	T
0.5558833484012647	0.4442045101801179	0.2201880701021348	T	T	T
0.8906396969298292	0.4469270864084920	0.2219379453181905	T	T	T
0.5548334546892671	0.7767854993439556	0.2225874416942239	T	T	T
0.8905304743480209	0.7764560205697671	0.2213415664365244	T	T	T
0.2214024028080207	0.7774965122629917	0.2207786747167639	T	T	T
0.0005921572095334	0.9989530209164378	0.3293870759731430	T	T	T
0.3346466795551852	0.0051965657697177	0.3284286978070958	T	T	T
0.6673067926074409	0.0030544864028970	0.3319074846346414	T	T	T
0.3339862884972275	0.3338546257317467	0.3296418893967301	T	T	T
0.6650011242216028	0.3338048156341333	0.3294976881558843	T	T	T
0.0002343643967185	0.3272997128308780	0.3287286615914967	T	T	T
0.3332904561121034	0.6653878684971803	0.3302234433141150	T	T	T
0.6708566177962922	0.6629498857432541	0.3295668678459018	T	T	T
0.0054835936829480	0.6687616062280137	0.3390538290972105	T	T	T
0.0739217956133733	0.6611526844255076	0.4399532274321659	T	T	T
0.0987670495186686	0.8198150473084044	0.4846393058247312	T	T	T
0.6455694206382592	0.9713164727163824	0.4485088828459788	T	T	T
0.2549187573380846	0.6570997471336858	0.4436977805180704	T	T	T

0.9652672257407751	0.5250821605310746	0.4595679080061516	T	T	T
0.5148114756119353	0.8678840455319534	0.4543634620429048	T	T	T
0.1308501045124981	0.7968203982108707	0.5357838682462766	T	T	T
0.2113320565130322	0.9569344371789388	0.4671090894607335	T	T	T
0.9679947231528405	0.8251550662956421	0.4853484854430021	T	T	T
0.7237745536757350	0.9132054383140666	0.4538510080438025	T	T	T
0.2231116327646447	0.5252126525359835	0.4480046596915955	T	T	T

TS: -357.782148 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111186	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224194030414660	0.1115445834463330	0.2195567407936075	T	T	T
0.5574037224046208	0.1105695457948121	0.2213994832130775	T	T	T
0.8854606225170266	0.1062945634542203	0.2198471480011016	T	T	T
0.2209958380777654	0.4444794666383316	0.2208209592927612	T	T	T
0.5558590940724277	0.4443022339507637	0.2203811382529158	T	T	T
0.8922666802411588	0.4465385193335992	0.2222544121078884	T	T	T
0.5527561788760587	0.7760293414754786	0.2233090435084150	T	T	T
0.8899010698698142	0.7771811543099542	0.2205913273305013	T	T	T
0.2211134331277495	0.7772245633109131	0.2206281051015513	T	T	T
0.0002048949913956	0.9995942844156851	0.3289103218740553	T	T	T
0.3353468903912540	0.0051732004324025	0.3281832570572520	T	T	T
0.6691318913642708	0.0055524166778387	0.3318497687664847	T	T	T
0.3365505572150093	0.3356244757029257	0.3293629277563732	T	T	T
0.6672317389643467	0.3347404768218435	0.3296505440666759	T	T	T
0.0019727293248300	0.3268976018819059	0.3323809233474800	T	T	T
0.3337902888921957	0.6673993200649655	0.3309971926388477	T	T	T
0.6719943440407106	0.6619272392632909	0.3293543610899775	T	T	T
0.0047244040720979	0.6752459380944300	0.3379731662091887	T	T	T
0.0905890385124870	0.6704325247604005	0.4379794640205119	T	T	T
0.1513678032917248	0.8426196955141274	0.4806616303400475	T	T	T
0.6336546794066156	0.9594445093740377	0.4470692972988413	T	T	T
0.2376267407122183	0.6245435027233718	0.4340891367163235	T	T	T
0.9652698957587178	0.5480027057223055	0.4588253388318604	T	T	T
0.5085700100804149	0.84443448344448074	0.4507637640469503	T	T	T

0.1893558085349817	0.8175638891380310	0.5306469451209950	T	T	T
0.2733059351365351	0.9685649228062155	0.4597451861546387	T	T	T
0.0365961084739096	0.8736546448079882	0.4855534281680506	T	T	T
0.7250702406648422	0.9191049571092592	0.4562824303564991	T	T	T
0.1340671223337091	0.4461286937274370	0.4041340466308644	T	T	T

FS: -354.719022 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

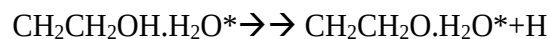
36 2 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228031612999478	0.1117700532532886	0.2212890783319618	T	T	T
0.5556094715268098	0.1107800827784601	0.2205769443194256	T	T	T
0.8909131179740222	0.1152331599869789	0.2224352162289737	T	T	T
0.2222375641500305	0.4440598278185363	0.2204945263323931	T	T	T
0.5545000300828020	0.4436947339118981	0.2213165723328063	T	T	T
0.8902269772348511	0.4467072941667029	0.2208634080329675	T	T	T
0.5512672809711013	0.7756731722298430	0.2224397616172704	T	T	T
0.8880887689965572	0.7779165683481992	0.2195402929532731	T	T	T
0.2199053681705602	0.7764469219262035	0.2207693316467878	T	T	T
0.9991309056712945	0.9954417583193998	0.3292003841599640	T	T	T
0.3361467848044917	-0.0014474478166794	0.3290268703576413	T	T	T
0.6666154802903386	0.0013547553129743	0.3297418732743780	T	T	T
0.3381830124599770	0.3320090274530696	0.3314031509594925	T	T	T
0.6676229980777034	0.3308710665712785	0.3288078632292533	T	T	T
0.0009481367316541	0.3263606422025820	0.3320285748230999	T	T	T
0.3392857028380489	0.6662893200750325	0.3320796263507738	T	T	T
0.6714178071090121	0.6665337310930995	0.3291347321566516	T	T	T
0.9976821833922298	0.6720228548736290	0.3356658852523868	T	T	T
0.0440336973432901	0.6069362200063756	0.4329578143639707	T	T	T
0.1500096897576521	0.7658375737182713	0.4815522369491913	T	T	T
0.3288960738523456	0.3363325709701543	0.4444358788378339	T	T	T
0.1453401595637093	0.5109477751538373	0.4177732321200637	T	T	T
0.2549124912039429	0.4023943389114255	0.4502491965665458	T	T	T
0.1740020626224192	0.7110604349515673	0.5283455175879765	T	T	T

0.2870279916802607	0.8726776296872358	0.4615722854551216	T	T	T
0.0658534837981098	0.8323364210996590	0.4928400358520396	T	T	T
0.2437439802108061	0.2042925896293304	0.4554135808568719	T	T	T
0.9063263433725215	0.5023810447121128	0.4531280671682234	T	T	T



IS: -358.416606 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2196812210445560	0.1095976341324885	0.2215229436845175	T	T	T
0.5554695050792632	0.1125668118880766	0.2209473536343503	T	T	T
0.8899298361241641	0.1097848376303510	0.2218154439838780	T	T	T
0.2217705363071644	0.4443068901245638	0.2201394843136391	T	T	T
0.5555505230817392	0.4445225067517912	0.2220696792759905	T	T	T
0.8867531130086098	0.4431818946547804	0.2213028682242876	T	T	T
0.5559150321357527	0.7772071597768747	0.2204946543951373	T	T	T
0.8889915843813174	0.7789548692542528	0.2219932910590487	T	T	T
0.2221160278511073	0.7780721151713880	0.2194204047340312	T	T	T
0.9991926874350713	0.9990809237269777	0.3376854484374307	T	T	T
0.3318873975824509	0.9978713379904550	0.3293872392194153	T	T	T
0.6629713889942843	0.0001696152868607	0.3287814309864595	T	T	T
0.3288904659450969	0.3319881386253762	0.3292908001062071	T	T	T
0.6691090864882350	0.3335357190488701	0.3318526618542050	T	T	T
0.0021461676379614	0.3345829127011086	0.3292844738258969	T	T	T
0.3319125642831801	0.6666800599588940	0.3297172318911237	T	T	T
0.6648055560052999	0.6668625568823754	0.3302359016273508	T	T	T
0.0045230494939759	0.6661204050775117	0.3287258974231873	T	T	T
0.7863486605015373	0.8801298895593458	0.4737908543641864	T	T	T
0.9798049508415542	0.9708214427950266	0.4435510656510927	T	T	T
0.6598286076952921	0.3414964031850888	0.4475621359267519	T	T	T
0.6664266994744394	0.6866950942720589	0.4490252152617596	T	T	T

0.7152049302309981	0.9600100203015486	0.4616841527812326	T	T	T
0.6709362925934310	0.4658044659521798	0.4558722171929719	T	T	T
0.0583070946871353	0.1147871793872966	0.4632576286632711	T	T	T
0.0535374663673065	0.8964756756330650	0.4590144976761974	T	T	T
0.7920481549115400	0.8682355099843121	0.5282374858293687	T	T	T
0.5265749612939458	0.2489368247248014	0.4535068190279223	T	T	T
0.5350025454202005	0.6584303508934005	0.4486157229422916	T	T	T

TS: -357.867184 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 2 2 7 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111179	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2203773061604742	0.1098247221111580	0.2210221519662613	T	T	T
0.5560697698590733	0.1128710787084810	0.2212494642045255	T	T	T
0.8898115832294767	0.1095964082735912	0.2218173034558353	T	T	T
0.2224629174978416	0.4454752062974027	0.2204923513684409	T	T	T
0.5551335010889211	0.4445555422099029	0.2218699075391812	T	T	T
0.8866184085109881	0.4431790879215751	0.2215413423812787	T	T	T
0.5544157465785577	0.7769329668295010	0.2206516208849606	T	T	T
0.8886108093199928	0.7785585129481823	0.2225375081611094	T	T	T
0.2219271307177969	0.7782668077791997	0.2190572056088105	T	T	T
0.9981583866990889	0.9975598261467404	0.3375867644386871	T	T	T
0.3314499437893441	0.9970025149275286	0.3292241361331740	T	T	T
0.6648158339592931	0.0033091402899453	0.3286510926455373	T	T	T
0.3256998690291364	0.3262027249452724	0.3286768398353926	T	T	T
0.6673649998542340	0.3331427452397810	0.3322323903460492	T	T	T
0.0028441340366542	0.3344330679330436	0.3293490886077509	T	T	T
0.3342386208996468	0.6649135448045342	0.3340601490695386	T	T	T
0.6685695635820870	0.6674159518941912	0.3295569396419050	T	T	T
0.0078508863340020	0.6656335779498197	0.3285978751983907	T	T	T
0.7492066035981975	0.8570193048956779	0.4645556011341436	T	T	T
0.9520442247840958	0.9499320026620020	0.4422003457782138	T	T	T
0.6564467718631517	0.3596365740456540	0.4446139086123956	T	T	T
0.6293326900729810	0.6735699995269306	0.4360009918438446	T	T	T
0.6887448996053840	0.9474234499191496	0.4511004348536958	T	T	T
0.6452508774752508	0.4758258420576632	0.4496473533374523	T	T	T

0.0293679739301950	0.0899679865283919	0.4651525557533862	T	T	T
0.0173147024216032	0.8679463828054004	0.4583102487489061	T	T	T
0.7377027633891573	0.8375648054394068	0.5190532335443021	T	T	T
0.5334329430944650	0.2534419882318885	0.4562741093258290	T	T	T
0.4749497580217387	0.6628300892632535	0.4053489108668759	T	T	T

FS: -354.716146 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

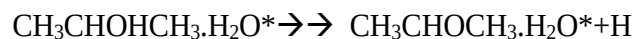
36 2 2 6 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2205023487499914	0.1099552185585274	0.2209063035000559	T	T	T
0.5566099020010435	0.1131795116830212	0.2213716662281315	T	T	T
0.8902915446137865	0.1102026588911236	0.2215032109771943	T	T	T
0.2221156578155277	0.4441690801607427	0.2198878484831240	T	T	T
0.5561757449783387	0.4445679959269621	0.2224413576413126	T	T	T
0.8867137854571321	0.4434397628592307	0.2213947945616336	T	T	T
0.5571249466124030	0.7765358831217296	0.2212632490994784	T	T	T
0.8870071380604839	0.7781028103903178	0.2232529525572209	T	T	T
0.2221902511163223	0.7782846690289248	0.2191217457613528	T	T	T
0.0017962445285664	0.0001639670811932	0.3367392981744399	T	T	T
0.3313134878850023	0.9985019803490681	0.3290038521903934	T	T	T
0.6641954885769253	0.0007199311441051	0.3289605362125364	T	T	T
0.3275122968206000	0.3304864471248235	0.3288033394324318	T	T	T
0.6678421277056256	0.3311110888954751	0.3326089491497275	T	T	T
0.0015394519045992	0.3352382122879921	0.3291370338236758	T	T	T
0.3316350297085079	0.6654639038911805	0.3289822650699407	T	T	T
0.6629898886240364	0.6696683162942995	0.3330064209318688	T	T	T
0.0090994168641042	0.6672131958775175	0.3285773255252787	T	T	T
0.7778639516876449	0.8437327110871229	0.4660540102024021	T	T	T
0.9782041481205591	0.9674054509267067	0.4420207927667811	T	T	T
0.6715484612202620	0.3584208381231798	0.4416234313937201	T	T	T
0.6804079321110863	0.6656753647457689	0.4340090119229496	T	T	T
0.6966950810547956	0.9170955986553728	0.4582573337368166	T	T	T
0.6795592825689840	0.4892647571390283	0.4471893597410391	T	T	T

0.0362116307725616	0.1087239998340229	0.4634838718096553	T	T	T
0.0666417768100468	0.9087435861042322	0.4574725063104043	T	T	T
0.7762499004794741	0.8150117130339309	0.5198540208254381	T	T	T
0.5464202202736741	0.2626080420442542	0.4562183898221557	T	T	T



IS: -379.356367 eV

2.740000000000000

3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000

-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000

0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225479428243040	0.1111803904434287	0.2205714921772531	T	T	T
0.5562825853084884	0.1126077416466670	0.2217457491673342	T	T	T
0.8887098751008842	0.1112393356118587	0.2207070626587340	T	T	T
0.2225593599604246	0.4451393492283646	0.2203486073602312	T	T	T
0.5561730288127076	0.4436082945644947	0.2218063003926754	T	T	T
0.8871697962365332	0.4435541079443114	0.2219110857924911	T	T	T
0.5551250417911867	0.7775116714567383	0.2202785674877991	T	T	T
0.8889343806407191	0.7776891767598952	0.2205280245705097	T	T	T
0.2224220443997419	0.7774253738263983	0.2201858047363537	T	T	T
0.0004806721478110	0.0005509221849355	0.3297586594677340	T	T	T
0.3309775730131398	0.9981278815343397	0.3297125448877317	T	T	T
0.6668714755800200	0.9979441832342415	0.3296639771220782	T	T	T
0.3299178510651528	0.3318970101872000	0.3295432953836191	T	T	T
0.6680820483716856	0.3350924470840737	0.3332643280969109	T	T	T
0.0023905439368664	0.3330658092738176	0.3295593961922207	T	T	T
0.3334835369334556	0.6671821629636687	0.3300702331839948	T	T	T
0.6678752905484494	0.6699491562524565	0.3292917249348812	T	T	T
0.0024465790101539	0.6694815545663571	0.3294771743746263	T	T	T
0.6844272647804466	0.7382748988307302	0.5218989345480211	T	T	T
0.7932615161561071	0.7049287307297348	0.5758081529906227	T	T	T
0.5705689845479766	0.8249528779365147	0.5473055384683309	T	T	T
0.5575303395790574	0.5552850317481169	0.4919101779301456	T	T	T

0.6707405233121936	0.3332532875610786	0.4440056717768174	T	T	T
0.4941953609213890	0.5746755700030747	0.4536082511355840	T	T	T
0.6979086816776949	0.6116796954037053	0.6144975479358900	T	T	T
0.8724911205671515	0.6415051547938246	0.5552840518660010	T	T	T
0.8937243993403706	0.8389414436608342	0.5991022761075940	T	T	T
0.6302868082806252	0.4236721185399835	0.4630051101872246	T	T	T
0.5731218164070632	0.2062462337999676	0.4560351028101648	T	T	T
0.4729432348894274	0.7375093707259333	0.5865193608111837	T	T	T
0.4886701388185203	0.8390687308958041	0.5067784799035807	T	T	T
0.6644257835768431	0.9656400779032789	0.5676668094332941	T	T	T
0.7819823684051475	0.8287068407924201	0.4827890509784095	T	T	T

TS: -378.607285 eV
 2.7400000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333364	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666647	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333408	0.3333333333333452	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666727	0.3333333333333452	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000024	0.3333333333333452	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333446	0.6666666666666831	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666738	0.6666666666666831	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000048	0.6666666666666831	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111180	0.2222222222222283	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444496	0.2222222222222283	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777851	0.2222222222222283	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444522	0.5555555555555718	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777882	0.5555555555555718	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111193	0.5555555555555718	0.11111111111111075	F	F	F
0.4444444444444567	0.88888888888889134	0.11111111111111075	F	F	F
0.7777777777777971	0.88888888888889134	0.11111111111111075	F	F	F
0.1111111111111249	0.88888888888889134	0.11111111111111075	F	F	F
0.2226985145562288	0.1106340258241694	0.2199377670394752	T	T	T
0.5564232628190773	0.1125672874671857	0.2214645385868405	T	T	T
0.8885018144156515	0.1106931716847303	0.2208755065438473	T	T	T
0.2228773575658340	0.4459061654124007	0.2203829448592400	T	T	T
0.5559079123795163	0.4451976530301190	0.2219760605849176	T	T	T
0.8865407399142595	0.4429270580939004	0.2217566796663563	T	T	T
0.5542643164470082	0.7765495009223741	0.2213252475609464	T	T	T
0.8859299739453783	0.7753282776940882	0.2221696190296464	T	T	T
0.2215973770952717	0.7781881049446288	0.2190252928725169	T	T	T
0.0020464840273705	0.0006107691827433	0.3291657392269430	T	T	T
0.3327816969655006	0.9970063566564439	0.3292576442103692	T	T	T
0.6680353040968363	0.0012762631812868	0.3294263600119620	T	T	T
0.3244222229443519	0.3235570220598013	0.3286831299874683	T	T	T
0.6660765541918456	0.3314044643881379	0.3324852256328490	T	T	T
0.0030576760022214	0.3335178377169110	0.3295037975684817	T	T	T
0.3315960192431597	0.6618203096408090	0.3333059324259398	T	T	T
0.6758842161127978	0.6738667031965109	0.3325943766526687	T	T	T
0.0069218897107103	0.6674937074390287	0.3290460865749751	T	T	T
0.6742418494211941	0.7897994374057983	0.4856645496903545	T	T	T
0.8696088356533120	0.8368748170125262	0.5078594328901468	T	T	T
0.5354751356434212	0.7360149498698504	0.5428914302857835	T	T	T
0.6514886024266529	0.3477892474092270	0.4432953208343883	T	T	T
0.5981911442039348	0.6346477467502082	0.4387172920575885	T	T	T
0.6835910908852030	0.9123669413181720	0.4589004583375283	T	T	T

0.6262131618142828	0.4572700811436925	0.4489050951629561	T	T	T
0.9273683173549019	0.9567235116704899	0.5422858944725883	T	T	T
0.8659551980672293	0.7168451286482405	0.5334304879921293	T	T	T
0.9651953173078166	0.8749074255451015	0.4650559832729784	T	T	T
0.5341761157663178	0.2333739730951586	0.4543753775749790	T	T	T
0.5211428620017038	0.6125642763863515	0.5694328513098642	T	T	T
0.5851873690127778	0.8526045127464617	0.5785354889697972	T	T	T
0.3963623354258393	0.7033653555314993	0.5247637371565170	T	T	T
0.4432729097039465	0.6255365150740909	0.4029476323181200	T	T	T

FS: -375.323088 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

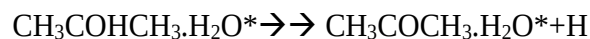
36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2224017577592663	0.1106659168933235	0.2198062797553219	T	T	T
0.5565592710899377	0.1127871496701690	0.2214713015611708	T	T	T
0.8888445809252234	0.1111785990971393	0.2207142810670011	T	T	T
0.2226572706597937	0.4449395752550305	0.2199393392205629	T	T	T
0.5566256307240086	0.4450859860050652	0.2225678938492620	T	T	T
0.8868395146549214	0.4435907974492733	0.2216255199399436	T	T	T
0.5567228393284123	0.7761631801935830	0.2219104381277302	T	T	T
0.8851411036090110	0.7755993949504011	0.2224983528656796	T	T	T
0.2224576701547047	0.7781183888852059	0.2193516301215323	T	T	T
0.0032599353105298	0.0025006524998720	0.3293676050988583	T	T	T
0.3311949856314639	-0.0004280746695936	0.3294297348712250	T	T	T
0.6667889154966612	0.0005391993904181	0.3293782294086429	T	T	T
0.3260934914468709	0.3287508524105581	0.3288912684899716	T	T	T
0.6669730133412034	0.3299368031093726	0.3325718500708021	T	T	T
0.0026979001642785	0.3350482441148731	0.3294597059392466	T	T	T
0.3298310409234785	0.6649872566422332	0.3292424081975394	T	T	T
0.6689152248756742	0.6732873898643464	0.3344674776842317	T	T	T
0.0075736070266997	0.6693460822367187	0.3289764118100297	T	T	T
0.6871266650748774	0.7859111706801974	0.4831113009441482	T	T	T
0.8849423546470869	0.8741139605199165	0.5115066242837969	T	T	T
0.5338980849003793	0.6976863898449928	0.5357446717013868	T	T	T
0.6640487808534327	0.3476967114203851	0.4408074330277857	T	T	T
0.6564234312774051	0.6427529146923247	0.4352903351195632	T	T	T
0.6601983036538326	0.4749367681283093	0.4470134822285112	T	T	T

0.9095834029567670	-0.0142160887642111	0.5470144948991905	T	T	T
0.9061830623713036	0.7682498239879405	0.5373202363869598	T	T	T
0.9899137589369765	0.9363951360407090	0.4715174172621244	T	T	T
0.5437100663499234	0.5867238121766279	0.5628788853894494	T	T	T
0.5487034845413419	0.8042704356023923	0.5720026923119675	T	T	T
0.3942869825458054	0.6362979087220677	0.5128141956817911	T	T	T
0.5410783780918997	0.2438865757136461	0.4537983638123959	T	T	T
0.6718826079429381	0.8950911961795985	0.4560370491871077	T	T	T



IS: -374.999867 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220954539111535	0.1111974107609185	0.2195734098793862	T	T	T
0.5571812431899137	0.1104000212168299	0.2213428256790602	T	T	T
0.8872257459124852	0.1090371128831792	0.2206941383737068	T	T	T
0.2226368027939312	0.4457323300457607	0.2205041267006208	T	T	T
0.5558915999411270	0.4442855871043435	0.2201219864811778	T	T	T
0.8908356686892502	0.4473475725924918	0.2218542439086464	T	T	T
0.5548164836653885	0.7767504890860041	0.2225950022221693	T	T	T
0.8906981826590213	0.7763299236012060	0.2213570942851289	T	T	T
0.2212870594299853	0.7773757580112892	0.2208430985759079	T	T	T
-0.0000113662549348	-0.0010760499422507	0.3292592893754924	T	T	T
0.3353476234062956	0.0057599316911064	0.3282298373311598	T	T	T
0.6676470126930000	0.0033564678547735	0.3317206588346188	T	T	T
0.3340730253555563	0.3340935134860552	0.3294377810205639	T	T	T
0.6653116717036341	0.3343202916786266	0.3292439240250596	T	T	T
0.0005164425392778	0.3280554879052482	0.3286786869983657	T	T	T
0.3330140473177336	0.6651221368103026	0.3304677079873827	T	T	T
0.6715418221232430	0.6631926210932567	0.3296334765804312	T	T	T
0.0062107013918177	0.6697331052347024	0.3406520773445731	T	T	T
0.0831533821725131	0.6755076826791597	0.4429533191635520	T	T	T
0.1460965606260636	0.8612128912113335	0.4782708609825159	T	T	T
0.9345065263632792	0.5133402168258815	0.4836958767763657	T	T	T
0.6484473402957659	0.9668839032580493	0.4491224014131986	T	T	T

0.2581982742205721	0.6571328378224149	0.4435262961117171	T	T	T
0.9842882223731934	0.5206643985765559	0.5351595546713863	T	T	T
0.5179904547675941	0.8624346055440537	0.4546446393418632	T	T	T
0.1843008278155518	0.8523788075430073	0.5301720389519576	T	T	T
0.2678974435425372	0.9792863057184181	0.4537862072839818	T	T	T
0.0322900750376907	0.8943181770138994	0.4781404206510204	T	T	T
0.7264640530409138	0.9077285133499194	0.4513607865519855	T	T	T
0.8964153368680505	0.3756410773546752	0.4623532219793702	T	T	T
0.8056594395048018	0.5221552639675662	0.4851541166042110	T	T	T
0.2175894833641707	0.5229607468551492	0.4481383061270206	T	T	T

```

TS:          -374.348891 eV
2.740000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533200  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495292
36 3 2 9          # Ir C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333356 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666631 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333356 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666640 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333356 0.6666666666666641 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666641 0.6666666666666641 0.000000000000000 F F F
0.0000000000000005 0.6666666666666641 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111142 0.2222222222222213 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444422 0.2222222222222213 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777783 0.2222222222222213 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111191 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444426 0.8888888888888853 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888853 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111152 0.8888888888888853 0.11111111111111072 F F F
0.2223483692872787 0.1116403799025562 0.2195761992756399 T T T
0.5571097121271450 0.1104906433752117 0.2214635689048062 T T T
0.8852315220354469 0.1061658898163350 0.2197314702909225 T T T
0.2208368406923648 0.4445573756012982 0.2207594805185641 T T T
0.5556973253313404 0.4443595163598382 0.2202776188122730 T T T
0.8922082761583437 0.4466310753173153 0.2221362573877824 T T T
0.5525828469717791 0.7758830083242683 0.2232265557649063 T T T
0.8899443076428792 0.7769777575395048 0.2206312745125789 T T T
0.2206376359873014 0.7770092851625164 0.2206967634638078 T T T
-0.0004018018528328 0.9993103816728892 0.3288484461561741 T T T
0.3353221077709598 0.0051708672643909 0.3281634068403733 T T T
0.6695167715345756 0.0057921638256104 0.3316789187639083 T T T
0.3365067772640435 0.3359947166246565 0.3291861866403164 T T T
0.6670526769994780 0.3350554432871555 0.3293421231773491 T T T
0.0022526762573772 0.3275736471673351 0.3322379752500106 T T T
0.3335542810921623 0.6676238817955356 0.3311193929099455 T T T
0.6721729408403987 0.6620486107971701 0.3293496675226472 T T T
0.0040539380710585 0.6748765374875119 0.3392361768254326 T T T
0.0956342231394724 0.6775412984155522 0.4407075559610976 T T T
0.1826600685436726 0.8694668396912516 0.4739537894073440 T T T
0.9365809307379969 0.5320042372089491 0.4838333171846756 T T T
0.6352103879096952 0.9544562626772185 0.4474874485590031 T T T
0.2395444746987459 0.6260769378609894 0.4343641925806708 T T T
-0.0079622461031334 0.5314570592666975 0.5337388361092499 T T T

```

0.5092125639150303	0.8402006870567903	0.4506020972741248	T	T	T
0.2335496300558458	0.8613936624833424	0.5239438903819950	T	T	T
0.3038696245413299	0.9797907614747906	0.4459690647228600	T	T	T
0.0797671839601895	0.9166958288143549	0.4788566303401179	T	T	T
0.7248284226271886	0.9103306069582606	0.4541166851164044	T	T	T
0.8747887313048875	0.3899751142518581	0.4629891706466768	T	T	T
0.8247672662785306	0.5671426918707699	0.4889707644692799	T	T	T
0.1331926656558561	0.4469343915862678	0.4034650596086406	T	T	T

FS: -371.615299 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

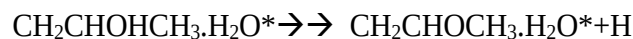
36 3 2 8 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2227429654329053	0.1119028624876339	0.2212365243245524	T	T	T
0.5555468898421322	0.1109725914346189	0.2206603124706822	T	T	T
0.8908792129169134	0.1152848841967143	0.2223919942083626	T	T	T
0.2222068606103104	0.4442181529232391	0.2204254410335147	T	T	T
0.5545140360488954	0.4437184649083417	0.2213288093702584	T	T	T
0.8903593933933884	0.4469417667832921	0.2207448175861886	T	T	T
0.5511371881685718	0.7756784443476341	0.2224021054576873	T	T	T
0.8883875022948680	0.7779349891110902	0.2197066145177262	T	T	T
0.2197485926042124	0.7763756528415852	0.2207586649663864	T	T	T
-0.0004420737890039	0.9957385020344899	0.3292531745936886	T	T	T
0.3355202655983728	-0.0012321716142935	0.3288169660183770	T	T	T
0.6660465787226492	0.0008003521068331	0.3296098864661239	T	T	T
0.3370634667893544	0.3319656909663961	0.3313175422424015	T	T	T
0.6680513730352154	0.3310291279307008	0.3286716881750580	T	T	T
0.0005314452103490	0.3268882331632984	0.3318875671134512	T	T	T
0.3391310346279712	0.6660819679147397	0.3319725759675235	T	T	T
0.6710457218617139	0.6672015366889169	0.3290910281093407	T	T	T
0.9956876919199208	0.6714061410844008	0.3366849567657799	T	T	T
0.0477258092661113	0.6138440678921788	0.4355833731865927	T	T	T
0.1752965631232582	0.7862983924373474	0.4770833014200811	T	T	T
0.8726670598681586	0.4843386898803235	0.4755156069251409	T	T	T
0.3279873555551107	0.3383326864569071	0.4445992384578732	T	T	T
0.1473656757238306	0.5160166013473928	0.4180289199509375	T	T	T
0.9137450541218295	0.4513233099119782	0.5237125664384161	T	T	T

0.2552368994761641	0.4060949222255963	0.4498738056253391	T	T	T
0.2101699352842002	0.7423085850337509	0.5242926215857665	T	T	T
0.3075300372873898	0.8813820898833721	0.4512550750479870	T	T	T
0.1016848983306895	0.8632749473295158	0.4888855614836152	T	T	T
0.2410324885650329	0.2067018450150570	0.4555312731414350	T	T	T
0.7824040075683133	0.3509774434023325	0.4494524988635262	T	T	T
0.7895664667511089	0.5526606961068111	0.4851049421197961	T	T	T



IS: -375.137426 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2197169768425745	0.1096775451927776	0.2214949640826676	T	T	T
0.5553861925674436	0.1125464665808438	0.2209326583289774	T	T	T
0.8899349878834596	0.1097922460827111	0.2218530295713851	T	T	T
0.2217807810003988	0.4443031203034536	0.2201378466439359	T	T	T
0.5555643315220563	0.4446340383414758	0.2221293129662432	T	T	T
0.8867851250656853	0.4432986523161987	0.2213241207396954	T	T	T
0.5558782821786384	0.7772053612663548	0.2205277675773004	T	T	T
0.8888471143051780	0.7789044113807627	0.2220747815493414	T	T	T
0.2220776807476926	0.7781435707809110	0.2194239425321880	T	T	T
0.9990901507366722	0.9986431879161227	0.3377236534849787	T	T	T
0.3316878537713378	0.9980481280868810	0.3294454755476591	T	T	T
0.6627201491485031	0.0003736815581645	0.3287547017921154	T	T	T
0.3285652876937600	0.3317920805993119	0.3293267155901608	T	T	T
0.6693758721357681	0.3334412093691254	0.3317781123762389	T	T	T
0.0022187726031672	0.3347663916151376	0.3293119613006127	T	T	T
0.3317763896883130	0.6665045089344519	0.3296732724660829	T	T	T
0.6648071804220468	0.6669357233714052	0.3303859299724541	T	T	T
0.0045958923755541	0.6661753913714247	0.3287770508557021	T	T	T
0.7802170608821577	0.8818744975132221	0.4732135451478433	T	T	T
0.9750742913190911	0.9696770460974379	0.4434207012521414	T	T	T
0.7771389103245072	0.8728559500566813	0.5487296482180378	T	T	T
0.6591269950033667	0.3405193908273156	0.4479836756948959	T	T	T

0.6649245849701100	0.6867449293987109	0.4474314969763036	T	T	T
0.7097106772408326	0.9587144490412773	0.4555888415541813	T	T	T
0.6707049345036215	0.4651442954036172	0.4557950902762463	T	T	T
0.0561085317374226	0.1135112505538163	0.4629589911303678	T	T	T
0.0447897593824468	0.8920283376444134	0.4598286301339539	T	T	T
0.5252151591794956	0.2486515228535162	0.4529196290773548	T	T	T
0.8447980143268795	0.7950579248776867	0.5668834910217577	T	T	T
0.8532694485713398	0.0159068851305810	0.5691162803626448	T	T	T
0.6326449327710049	0.8050652496961173	0.5679271385615436	T	T	T
0.5319193851068139	0.6534666770272328	0.4482014087754867	T	T	T

TS: -374.589432 eV
 2.740000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495292

36 3 2 9 # Ir C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666631	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666640	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333356	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333356	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666641	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000000000005	0.6666666666666641	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111142	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444422	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777783	0.2222222222222213	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111168	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444426	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111152	0.8888888888888853	0.11111111111111072	F	F	F
0.2205036387143140	0.1099028615501384	0.2209912432372735	T	T	T
0.5561125375107222	0.1128325128406879	0.2212754141009924	T	T	T
0.8898016195784710	0.1095485393422606	0.2218147493540973	T	T	T
0.2225283324302700	0.4454523458639200	0.2204181468923870	T	T	T
0.5553321799238654	0.4447288046424960	0.2218884218058155	T	T	T
0.8866866661366439	0.4432208268848944	0.2214732486983100	T	T	T
0.5544333334457692	0.7769636302810924	0.2205886512558044	T	T	T
0.8886890164047720	0.7785440896509581	0.2224459080254561	T	T	T
0.2219905825193887	0.7783612194432706	0.2190576522069594	T	T	T
0.9983894256856982	0.9973579465298901	0.3374612440671603	T	T	T
0.3314173477217197	0.9972475259810294	0.3292110832406159	T	T	T
0.6646074288300258	0.0033529080698979	0.3287023831416283	T	T	T
0.3257453854295623	0.3263210909714923	0.3286636699254857	T	T	T
0.6678224783004083	0.3332689386549218	0.3321391049300527	T	T	T
0.0031799534731008	0.3348710400751309	0.3292899516172443	T	T	T
0.3342538377094861	0.6646644903312735	0.3339526007236693	T	T	T
0.6690510174050621	0.6678712237642843	0.3296386606502272	T	T	T
0.0077336602941802	0.6657620461258696	0.3285630612866882	T	T	T
0.7473393309124035	0.8616596931134285	0.4646080733355990	T	T	T
0.9507709418636053	0.9524585392901843	0.4419371917396570	T	T	T
0.7246741327552373	0.8427400802515654	0.5398781859992333	T	T	T
0.6571464396239649	0.3599211529184934	0.4449546544105198	T	T	T
0.6306755404322744	0.6765598063750878	0.4357197225203505	T	T	T
0.6882096891714369	0.9501286547746542	0.4460774417087899	T	T	T

0.6472130129636567	0.4766549866880621	0.4498123117681715	T	T	T
0.0299990138525204	0.0930693480326404	0.4642956952221639	T	T	T
0.0136150295717301	0.8689014741781672	0.4589858857618089	T	T	T
0.5328396923402430	0.2545790877563189	0.4558477176507644	T	T	T
0.7844093104419368	0.7591067032359068	0.5596067242694960	T	T	T
0.7979713023973654	0.9820962805509625	0.5632721835540114	T	T	T
0.5756565199016408	0.7742726509034425	0.5537892292559602	T	T	T
0.4751636606969300	0.6633033566549131	0.4052903749696302	T	T	T

FS: -371.438796 eV

2.7400000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Ir C O H

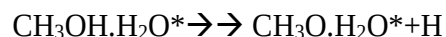
Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2205316608856558	0.1099473189056839	0.2208989849383497	T	T	T
0.5566252425374614	0.1131093912456965	0.2214059944943758	T	T	T
0.8902729550241244	0.1101627586366183	0.2215444947997642	T	T	T
0.2221246533599603	0.4441840173227761	0.2198790408955257	T	T	T
0.5562083985169761	0.4446523968370916	0.2224637599784753	T	T	T
0.8867199403049014	0.4434365374490684	0.2213845392079543	T	T	T
0.5571407447296872	0.7765738768369524	0.2212478599779322	T	T	T
0.8870025422463823	0.7780699476691989	0.2232266258857464	T	T	T
0.2222176369987326	0.7783384151327097	0.2191268653096352	T	T	T
0.0017942213484606	-0.0000249318163172	0.3367288480179505	T	T	T
0.3313229052791455	0.9985908256819177	0.3290437007515628	T	T	T
0.6639144502762763	0.0006574397425717	0.3290352369449831	T	T	T
0.3273581611706937	0.3304057486132448	0.3287969842535655	T	T	T
0.6681753636690945	0.3314094510699102	0.3325843137591262	T	T	T
0.0017134940863889	0.3353646805969046	0.3291245634185684	T	T	T
0.3316982403985959	0.6654623654605518	0.3289703927703314	T	T	T
0.6634135930538078	0.6697762235678695	0.3330010059366905	T	T	T
0.0090767694466313	0.6671974164150698	0.3285725684280271	T	T	T
0.7744105543357847	0.8460961569460838	0.4663206247303117	T	T	T
0.9756032365798933	0.9676838919951801	0.4418134593798417	T	T	T
0.7634878495204546	0.8120250690731796	0.5411526079457157	T	T	T
0.6705550280976603	0.3583018718492752	0.4418676512833919	T	T	T
0.6802521584151077	0.6673334869195460	0.4338148861972579	T	T	T
0.6792796300985521	0.4890244089850910	0.4474006886365199	T	T	T

0.0357430936187569	0.1095639345724566	0.4629431273300892	T	T	T
0.0614041140946385	0.9064982349748157	0.4580247125825616	T	T	T
0.8404632186261342	0.7396426387803544	0.5550686402953156	T	T	T
0.8258465345946436	-0.0536633792087929	0.5679526913033731	T	T	T
0.6166115223577695	0.7260209368328462	0.5570657879405088	T	T	T
0.5442062921341354	0.2632273490403245	0.4556397220650169	T	T	T
0.6949238173555140	0.9192085366737921	0.4536044174058173	T	T	T

Pt catalyst



IS: -252.273973 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1110994562741757	0.8888100622802967	0.1112376461486016	T	T	T
0.2241158210477657	0.1136057487497195	0.2215470598879735	T	T	T
0.5567741171751265	0.1122588485331222	0.2205704383271776	T	T	T
0.8901330469339621	0.1124190822196075	0.2205986494027699	T	T	T
0.2246059345706125	0.4449888410124740	0.2218697224137235	T	T	T
0.5545779591796490	0.4447764206196407	0.2219778905894310	T	T	T
0.8903523625781963	0.4461313281980676	0.2203254009987194	T	T	T
0.5568866278369351	0.7792698182414078	0.2206732291034509	T	T	T
0.8899931783117333	0.7784515889725070	0.2202983245621674	T	T	T
0.2229055010932350	0.7785046716297249	0.2203491301585802	T	T	T
0.0012136059878647	0.0016307216861899	0.3318537475482308	T	T	T
0.3370701949609053	0.0017105549909201	0.3317299750268294	T	T	T
0.6701761248773163	0.0035726327700174	0.3323257837133561	T	T	T
0.3377132826666045	0.3378512359302447	0.3358766940955791	T	T	T
0.6725944353825217	0.3368483900317121	0.3319784845282532	T	T	T
0.0012623435879957	0.3365411302167453	0.3318800579089675	T	T	T
0.3369386157890989	0.6722717138029326	0.3319815962205888	T	T	T
0.6719668149635081	0.6723048170517518	0.3320481901934410	T	T	T
0.0035820627352751	0.6703421201764881	0.3325110942742219	T	T	T
0.6285110058126752	0.2001638815812992	0.5187946140778324	T	T	T
0.6272343509451601	0.3530072518823403	0.4884327783350568	T	T	T

0.3214305319026401	0.3237514876703709	0.4448868620415046	T	T	T
0.7001890855655940	0.3840266987856483	0.4482778658470138	T	T	T
0.5398391845030832	0.1641644298412962	0.5612430325741185	T	T	T
0.2203140505144007	0.1997922156994705	0.4518370453563096	T	T	T
0.4363342500191348	0.3283044232815449	0.4627362454357696	T	T	T
0.7674127968801442	0.2389782862092810	0.5344571418987515	T	T	T
0.5767880311208101	0.0822995788177654	0.4860064433301527	T	T	T

TS: -251.456019 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 1 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111144	0.2222222222222217	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444428	0.2222222222222217	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777788	0.2222222222222217	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444434	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777792	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111145	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444436	0.88888888888888939	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777792	0.88888888888888939	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111148	0.88888888888888939	0.11111111111111072	F	F	F
0.2262828039837723	0.1089433893655903	0.2195933930872206	T	T	T
0.5611664221383149	0.1130167298604219	0.2213270584332896	T	T	T
0.8941751507538936	0.1113039505501913	0.2206812267090603	T	T	T
0.2269567441852604	0.4461172279133143	0.2206616698360916	T	T	T
0.5610071478367152	0.4451120595529180	0.2214765981290282	T	T	T
0.8914891419868409	0.4429232336574184	0.2224519114836966	T	T	T
0.5592374281795132	0.7777286141660616	0.2215495562588793	T	T	T
0.8894008809672878	0.7746870074441033	0.2231741624011904	T	T	T
0.2272520253014032	0.7764657439293975	0.2209591942186743	T	T	T
0.0153951992270088	0.0036599802871793	0.3325820632195723	T	T	T
0.3440461747068837	0.9988379060245056	0.3323281831151087	T	T	T
0.6799478486841345	0.0027853799345416	0.3318247576739803	T	T	T
0.3389927455917530	0.3290063894485036	0.3295869835822498	T	T	T
0.6809424693958196	0.3343979691267607	0.3350570266948939	T	T	T
0.0136099694052312	0.3338791068538437	0.3328562935883485	T	T	T
0.3453013345485129	0.6656877765452165	0.3374313528167449	T	T	T
0.6882962120750493	0.6750390775306666	0.3352836667078939	T	T	T
0.0189201918976477	0.6702855288153442	0.3332679183574367	T	T	T
0.7020406123689074	0.7840797649436515	0.4798449796555584	T	T	T
0.6519286984743828	0.3511350257105136	0.4434898752948833	T	T	T
0.6046472774011622	0.6342621545864262	0.4363541901543631	T	T	T
0.6977093097299278	0.9055451809674939	0.4629851619639305	T	T	T
0.6270110191071983	0.4575940379282237	0.4462673105468111	T	T	T
0.6359665462147797	0.7431092574609868	0.5274984447664712	T	T	T

0.5362455990651105	0.2407016399981400	0.4530397959084596	T	T	T
0.8455456137711820	0.8188596909707667	0.4837066102271385	T	T	T
0.4422538181169476	0.6395467417068862	0.4033877318042602	T	T	T

FS: -247.971582 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

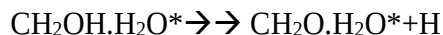
36 1 2 5 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231625215440289	0.1125783366562038	0.2199467685814219	T	T	T
0.5574394356743303	0.1151616698296630	0.2214219987903030	T	T	T
0.8899146760921501	0.1132347531088031	0.2206011670140949	T	T	T
0.2232130887990617	0.4469718476438125	0.2199055764046036	T	T	T
0.5579404042646137	0.4470179627660308	0.2224745047389333	T	T	T
0.8878296873652459	0.4455322029472802	0.2216356355592967	T	T	T
0.5579973816539064	0.7783635403180914	0.2222937663172584	T	T	T
0.8875319610485459	0.7790143836469557	0.2222205842855396	T	T	T
0.2238961248032816	0.7802400776293180	0.2195898924411866	T	T	T
0.0046062380160192	0.0073373381459396	0.3320097333834345	T	T	T
0.3332320002681675	0.0032260672213064	0.3321750880122670	T	T	T
0.6688627189870104	0.0056643316764843	0.3320955867442659	T	T	T
0.3316271064844983	0.3361639137699592	0.3306510312048033	T	T	T
0.6700231757075578	0.3356680758081024	0.3350547577824755	T	T	T
0.0045445473217540	0.3380812108768012	0.3317734535980546	T	T	T
0.3329305465527469	0.6715008102815255	0.3317369310414633	T	T	T
0.6695710029381187	0.6773995835768510	0.3371808598129921	T	T	T
0.0068373346738937	0.6739200929304909	0.3309692595409330	T	T	T
0.7526800396949340	0.7913859549261537	0.4780756551067844	T	T	T
0.6678818510396693	0.3574852699761257	0.4399243257308419	T	T	T
0.6532583738500006	0.6394755448298043	0.4363337059292144	T	T	T
0.7031844167778546	0.8890136102769598	0.4733835233827041	T	T	T
0.6637740608147122	0.4840844974669206	0.4439448594685306	T	T	T
0.7285721118054860	0.7383677058426730	0.5278809143107218	T	T	T

0.5490558854908067	0.2573632778187130	0.4533888623560463	T	T	T
0.9007107358423447	0.8630129768460866	0.4681568461051455	T	T	T



IS: -248.518937 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 1 2 5 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225806355999144	0.1121720154794405	0.2201082006830364	T	T	T
0.5557096269890502	0.1135099945131114	0.2206970496506163	T	T	T
0.8889012253828036	0.1120664707260169	0.2204340813368531	T	T	T
0.2226565354120661	0.4455931291466406	0.2203144113707621	T	T	T
0.5584573672617849	0.4476815360704811	0.2238934662595699	T	T	T
0.8870444687241561	0.4450599669831046	0.2217831554725525	T	T	T
0.5557943708078829	0.7764285428966677	0.2217659128357999	T	T	T
0.8866586373636901	0.7779509823200175	0.2224690896490109	T	T	T
0.2218639915031929	0.7782029946098304	0.2199875760737794	T	T	T
0.0012880453960986	0.0035277055415687	0.3319557973987373	T	T	T
0.3312174868288785	0.0011184907074374	0.3317571770696948	T	T	T
0.6667438840068995	0.0016760672887859	0.3307625990631895	T	T	T
0.3304817542121491	0.3350291363794592	0.3318720166290580	T	T	T
0.6675434865217267	0.3367012785802048	0.3352468965684204	T	T	T
0.0019755691595128	0.3358555155362526	0.3317620716079212	T	T	T
0.3321489733671375	0.6692398834956953	0.3321033359227792	T	T	T
0.6681190422830949	0.6731666132960530	0.3433369696211220	T	T	T
0.0027246884390423	0.6717463955580197	0.3322289807623777	T	T	T
0.6648422200434070	0.6921297670892561	0.4431479690975241	T	T	T
0.5320401145101578	0.5281325639901736	0.4732572010918303	T	T	T
0.6557147526765401	0.3035237183869682	0.4455151106921117	T	T	T

0.4119044663559252	0.4948767526868108	0.4551597902930511	T	T	T
0.5943365561396458	0.3735981395697477	0.4598210571404995	T	T	T
0.5649282484774378	0.1739954826249479	0.4496008804613307	T	T	T
0.6379760753354092	0.8039941667377870	0.4531403325547660	T	T	T
0.7982916345726849	0.7216579273188803	0.4615355111441025	T	T	T

TS: -247.788316 eV
2.8200000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
36 1 2 5 # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666642 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333356 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666641 0.3333333333333356 0.0000000000000000 F F F
-0.0000000000000001 0.3333333333333356 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000001 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111142 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777787 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777787 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111145 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111145 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.2250668437706196 0.1156117110687941 0.2212476624427304 T T T
0.5576004553540442 0.1151543994973751 0.2209631888256438 T T T
0.8910049803771729 0.1136355324544953 0.2205233705017214 T T T
0.2255855903860582 0.4467327520199214 0.2208875789029106 T T T
0.5593432584691840 0.4478088403528628 0.2245544693636023 T T T
0.8889036476402338 0.4465886651907205 0.2216701546798656 T T T
0.5580865970813568 0.7782501802536596 0.2214408433801255 T T T
0.8891136241669816 0.7798540208232051 0.2219865939191206 T T T
0.2239920458101461 0.7804576713542556 0.2197499863140012 T T T
0.0041102736716041 0.0057887614451341 0.3324734996873754 T T T
0.3346103915823151 0.0045505350800089 0.3315399455725991 T T T
0.6703722778148188 0.0040826324950233 0.3307874171853773 T T T
0.3338706306191012 0.3390365227753583 0.3376107481371453 T T T
0.6721460176725003 0.3390905371117232 0.3355460663727681 T T T
0.0062774279777558 0.3388635973254505 0.3314171754083203 T T T
0.3353481881361480 0.6732017566917222 0.3313518759789016 T T T
0.6720626174666289 0.6771683568113033 0.3416934963708763 T T T
0.0056974185717955 0.6749662186710519 0.3319564539970915 T T T
0.6416621427314904 0.6764541018158722 0.4471333000410977 T T T
0.5369300074143430 0.5074214373971959 0.4679073073422922 T T T
0.6803170372335346 0.3238063494960515 0.4405167578347433 T T T
0.6170923313054258 0.4005426040171683 0.4570650351817475 T T T
0.5986390882952990 0.1956380331074262 0.4512958807707556 T T T
0.5815734475376830 0.7655644016911622 0.4506887154527131 T T T

0.3788305509566477	0.3980463110299182	0.4125164094753124	T	T	T
0.7868493057219205	0.7419578696764394	0.4610897584890308	T	T	T

FS: -244.233483 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

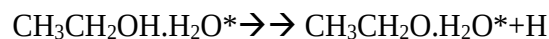
36 1 2 4 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.33333333333333428	0.33333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666714	0.33333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.33333333333333428	0.0000000000000000	F	F	F
0.33333333333333428	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.66666666666666785	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.00000000000000071	0.66666666666666856	0.0000000000000000	F	F	F
0.11111111111111214	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777857	0.2222222222222285	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444500	0.5555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777928	0.5555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111214	0.5555555555555713	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444571	0.88888888888889142	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777999	0.88888888888889142	0.11111111111111072	F	F	F
0.11111111111111285	0.88888888888889142	0.11111111111111072	F	F	F
0.2217191199908737	0.1142650260603417	0.2231241478026560	T	T	T
0.5536482640737075	0.1098088529972210	0.2206019052816273	T	T	T
0.8870115540734675	0.1089167465042521	0.2206389384397352	T	T	T
0.2218827847289336	0.4422185220761273	0.2211631382303464	T	T	T
0.5558852226903004	0.4432064220966966	0.2225030545615694	T	T	T
0.8857506337403952	0.4420034348996953	0.2214300741545654	T	T	T
0.5539467012806172	0.7743343341629693	0.2208118980949975	T	T	T
0.8845339317173353	0.7753403067104850	0.2223402917206093	T	T	T
0.2186150402188118	0.7768199912815460	0.2191244195782223	T	T	T
0.9928998165086018	0.9939976456001541	0.3332918220523720	T	T	T
0.3260995065891331	0.9936194973688489	0.3314246827814955	T	T	T
0.6627677796079537	0.9940927963497982	0.3312841218278473	T	T	T
0.3293137304793650	0.3302215601286430	0.3368239906111284	T	T	T
0.6697158691432400	0.3274059063496877	0.3335999831556661	T	T	T
-0.0012593299495607	0.3290640575925461	0.3315588969855116	T	T	T
0.3256219291184059	0.6673379499057754	0.3297955498121063	T	T	T
0.6589969950563148	0.6637885257796774	0.3395943561461326	T	T	T
0.9963818073010211	0.6657327996608238	0.3322629400385512	T	T	T
0.5523154373225801	0.5903172475073480	0.4345658494857895	T	T	T
0.4205642147996793	0.4097147958506955	0.4348610662991435	T	T	T
0.6445220395733217	0.2967589480701637	0.4413143674073297	T	T	T
0.5358218767402281	0.3211417569216650	0.4453909263553926	T	T	T
0.5973459554451529	0.1665255642070040	0.4483417136428542	T	T	T
0.4988093447743844	0.6823715087183582	0.4454882962635500	T	T	T

0.6737107051525033 0.6183168746965055 0.4631275549141849 T T T



IS: -268.973225 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 2 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2235757914290275	0.1116377538555255	0.2206510528113483	T	T	T
0.5581210312969418	0.1134553471259494	0.2217344860130694	T	T	T
0.8906079129259297	0.1116796396378135	0.2207402898032100	T	T	T
0.2235759110677549	0.4453830937872212	0.2202246549389457	T	T	T
0.5577804064590950	0.4443618066944595	0.2214326964986313	T	T	T
0.8881534945490088	0.4439344826566796	0.2220394565338708	T	T	T
0.5566915110975614	0.7784979532493708	0.2201116430374626	T	T	T
0.8907089508562507	0.7787690859370002	0.2206617497582997	T	T	T
0.2238771779426472	0.7782751324045165	0.2201109635387155	T	T	T
0.0041849569073733	0.0018191460616848	0.3328440917244535	T	T	T
0.3351478766836138	0.0000210679845409	0.3318436798178794	T	T	T
0.6708113605920687	0.0000865564431791	0.3319015220985122	T	T	T
0.3349045284075061	0.3345698374138166	0.3317501197405406	T	T	T
0.6717066520139028	0.3356291809742302	0.3358782872370014	T	T	T
0.0057799657892090	0.3347162350723423	0.3320339105945820	T	T	T
0.3372275029767806	0.6685212780226379	0.3320467616047864	T	T	T
0.6704963063766129	0.6705527821811330	0.3313931482259846	T	T	T
0.0063500866460728	0.6706537577269671	0.3318862642323026	T	T	T
0.6671498124302815	0.7258720880312453	0.5167690776624454	T	T	T
0.7240046605492907	0.7678032691188292	0.5867761228345643	T	T	T
0.6574779089480103	0.3294189735775390	0.4453054340028260	T	T	T
0.7827014076998964	0.6685991095167907	0.4840411352190941	T	T	T

0.6792095034136096	0.8458786196845125	0.4916299111539857	T	T	T
0.7004852241110342	0.4587919146477830	0.4615937651388933	T	T	T
0.8248305723741183	0.7348586864512612	0.4427421760337253	T	T	T
0.6336362647586711	0.8057131224882710	0.6121226269712352	T	T	T
0.7150654966159138	0.6484455621125065	0.6112527944134030	T	T	T
0.8647769606277294	0.8814372829615920	0.5908822667735549	T	T	T
0.5241057421054123	0.6155778235776950	0.5125038560812527	T	T	T
0.5258933200427123	0.2587781704188217	0.4527049266704708	T	T	T

TS: -268.168503 eV
 1.0000000000000000
 8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 2 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2265003925657890	0.1088405596079032	0.2196340308951712	T	T	T
0.5615024480404387	0.1130858593009357	0.2213602316209197	T	T	T
0.8942627793987064	0.1110381857369673	0.2207367396503237	T	T	T
0.2272317295866081	0.4457196597715435	0.2204871868098602	T	T	T
0.5616248980486624	0.4453799727348772	0.2216351326188576	T	T	T
0.8916720036970081	0.4427538197668033	0.2223637156920197	T	T	T
0.5598583255098848	0.7777446744846835	0.2216064526604911	T	T	T
0.8895798945858939	0.7746991085436292	0.2231930365175199	T	T	T
0.2276533196152869	0.7764783862482335	0.2208644820712146	T	T	T
0.0167420019540338	0.0041227922610802	0.3326566051075611	T	T	T
0.3452066255116615	0.9991640156939084	0.3323790350668346	T	T	T
0.6804767424391626	0.0030369869904307	0.3320013418947874	T	T	T
0.3403122430166423	0.3291766951970816	0.3296168493506966	T	T	T
0.6820063899325925	0.3352062368888895	0.3352532478317189	T	T	T
0.0140979343892885	0.3337382915020246	0.3326941653244661	T	T	T
0.3451464982519146	0.6651206859153718	0.3367134694720540	T	T	T
0.6895625152412385	0.6763375259739055	0.3361197519398337	T	T	T
0.0196128086238230	0.6704786674092426	0.3329517302989077	T	T	T
0.6786156427997297	0.7861596921868976	0.4812959696065366	T	T	T
0.8748744797941287	0.8523439965110227	0.5001012427408019	T	T	T
0.6543932393646220	0.3523591696804464	0.4440341151552402	T	T	T
0.6045227216368992	0.6345965921559629	0.4371511319865436	T	T	T
0.6656901745614260	0.8985438301978783	0.4593676235082733	T	T	T
0.6313431965410544	0.4598617790611816	0.4474122212350702	T	T	T

0.9202043443720911	0.9638638622403032	0.5353870525205625	T	T	T
0.8912688886190496	0.7427131854804430	0.5216172666311251	T	T	T
0.9648589480284623	0.9055556485895635	0.4574839434231875	T	T	T
0.5888650403572340	0.7381201088428280	0.5241124504379105	T	T	T
0.5377581931530119	0.2427106352364157	0.4532655046480433	T	T	T
0.4359848951549412	0.6304487760163601	0.4020345903182730	T	T	T

FS: -264.669565 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

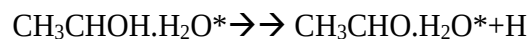
36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2230139623287002	0.1111068734736875	0.2200037277960689	T	T	T
0.5578038956451863	0.1138504857888947	0.2213044827478967	T	T	T
0.8903148248814006	0.1118885201071151	0.2206610358532757	T	T	T
0.2236202796626401	0.4457380892410967	0.2198088528239950	T	T	T
0.5583703236035120	0.4459908869819600	0.2223210803877009	T	T	T
0.8881501287627458	0.4440900549675391	0.2216025951884504	T	T	T
0.5582406039999910	0.7776034337849751	0.2219724884945364	T	T	T
0.8873101827944936	0.7774908542256611	0.2226622182289546	T	T	T
0.2238543652701210	0.7789224191946218	0.2195374593044832	T	T	T
0.0065012442767696	0.0054878881797649	0.3323534101333223	T	T	T
0.3349342852700161	0.0009228526197163	0.3320064684163739	T	T	T
0.6703825411414002	0.0030174975495214	0.3320933109013851	T	T	T
0.3328083677576643	0.3339704027830663	0.3304468397873634	T	T	T
0.6716460114354561	0.3333948151624639	0.3348345142045162	T	T	T
0.0057649442920393	0.3358970166951849	0.3318041584256051	T	T	T
0.3342853697346300	0.6693304102771762	0.3313227323512109	T	T	T
0.6721530190169958	0.6749054964815357	0.3374566992519874	T	T	T
0.0080734220976453	0.6716348255577174	0.3311372242369828	T	T	T
0.6912918909045729	0.7700706428083208	0.4823491018230257	T	T	T
0.8935691382012223	0.8737554688059532	0.4978450151162122	T	T	T
0.6661360722542398	0.3506997953976025	0.4404801501436566	T	T	T
0.6396533513194882	0.6276127745899203	0.4359874540780666	T	T	T
0.6450079395128228	0.8638472020045285	0.4651638562022100	T	T	T
0.6566346412930955	0.4723358572099841	0.4450666675621591	T	T	T

0.9221683332721611	0.9767567340781582	0.5353233541384554	T	T	T
0.9409340295378286	0.7815783851814118	0.5149467416651845	T	T	T
0.9734508698665181	0.9456285124489909	0.4544317261627739	T	T	T
0.6112733818877913	0.7019312408357763	0.5261258285357613	T	T	T
0.5476682304597986	0.2476710006553944	0.4526881110487153	T	T	T



IS: -265.226057 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1108547302945086	0.8887962642150532	0.1103451307248473	T	T	T
0.2237805529105471	0.1122025151095036	0.2198509819769047	T	T	T
0.5569520628162211	0.1135587523742819	0.2205747972678131	T	T	T
0.8901473388802725	0.1122136648658288	0.2203665006870171	T	T	T
0.2239312897439729	0.4458357978741759	0.2202726827965962	T	T	T
0.5600125898939911	0.4481486308469377	0.2239552414258378	T	T	T
0.8881618800751044	0.4449105640383721	0.2217825665278150	T	T	T
0.5573623283489814	0.7766378941088600	0.2217905808998210	T	T	T
0.8879381243320886	0.7780350818636883	0.2224291345508376	T	T	T
0.2230324424280328	0.7784890720268610	0.2196786803632645	T	T	T
0.0042714496740499	0.0042456093005840	0.3317339497677068	T	T	T
0.3340869676359227	0.0017317418569723	0.3314294124924587	T	T	T
0.6696048394054545	0.0021365699585411	0.3307259953041010	T	T	T
0.3335390257447859	0.3359392810537393	0.3317250210402388	T	T	T
0.6705986209963150	0.3375910807780345	0.3351599218202431	T	T	T
0.0047964466087247	0.3364059125419085	0.3318042932012203	T	T	T
0.3353972704797972	0.6700022940337335	0.3318795150579726	T	T	T
0.6719674748117291	0.6742631623587446	0.3447858022898289	T	T	T
0.0054521399189473	0.6719730659507018	0.3319181504310457	T	T	T
0.6579224858889610	0.6924083135751148	0.4458055697249813	T	T	T
0.8344556006875573	0.7515235133034182	0.4811403085939814	T	T	T
0.5219339322633595	0.5219374647997695	0.4713498450586879	T	T	T
0.6525634709898499	0.2990139048247878	0.4458490427067508	T	T	T

0.4076828905474356	0.4846514383232259	0.4473622191021038	T	T	T
0.8118355135220644	0.7574662318758835	0.5333177196750918	T	T	T
0.8860359366742403	0.6568094490115796	0.4735662121081898	T	T	T
0.9389117521626209	0.8876836135824128	0.4647928074736897	T	T	T
0.6115615663302932	0.7925706250588320	0.4498865454265151	T	T	T
0.5905893700351793	0.3688756014135243	0.4594882118564327	T	T	T
0.5602530728789131	0.1694408148760904	0.4481261571134283	T	T	T

TS: -264.545621 eV
 1.0000000000000000
 8.4600000381469691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106401 7.3265748023986799 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190186009

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970378064	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1105803121166957	0.8884106866259813	0.1101139524834664	T	T	T
0.2249897872125644	0.1149224301713261	0.2209287621827016	T	T	T
0.5574543890825581	0.1143912455011318	0.2207952693739870	T	T	T
0.8908118394950222	0.1130800266274647	0.2203774323183723	T	T	T
0.2256242979877783	0.4463690762260484	0.2208599613172879	T	T	T
0.5593414511076773	0.4471550852722075	0.2243791348934252	T	T	T
0.8890129216100746	0.4460403957260297	0.2214604461171916	T	T	T
0.5580829939669343	0.7774246440664143	0.2213514432531483	T	T	T
0.8892983889841517	0.7793570904741500	0.2217302551736751	T	T	T
0.2238803860543612	0.7802018554587917	0.2195049581906048	T	T	T
0.0043946619352226	0.0054984029962739	0.3320471030948724	T	T	T
0.3345978707788646	0.0039798589138940	0.3314422482766304	T	T	T
0.6704182512078063	0.0030701975502154	0.3306887023250553	T	T	T
0.3343484725283190	0.3387195366529596	0.3374468956132120	T	T	T
0.6721199153286435	0.3390190950250087	0.3351179942994804	T	T	T
0.0062172973286465	0.3383204905336612	0.3313260627660810	T	T	T
0.3356668688274098	0.6727930795878407	0.3312379750202155	T	T	T
0.6726182058447776	0.6760099719646462	0.3416720874033885	T	T	T
0.0054984464929859	0.6741012288122619	0.3318044639373170	T	T	T
0.6303751947020046	0.6721565884280807	0.4538878225006044	T	T	T
0.8157451865747376	0.7762966973639323	0.4847160321639237	T	T	T
0.5282536232338586	0.5007815581797601	0.4692467316130049	T	T	T
0.6774062165965660	0.3129187020706397	0.4424369836644644	T	T	T
0.7954446730954814	0.7870851945917110	0.5368519963377807	T	T	T
0.8931651323702425	0.7046347461844391	0.4792868694486998	T	T	T

0.8951972215140458	0.9145476773182679	0.4647268370033686	T	T	T
0.5574790523108533	0.7486413911003282	0.4457805262722232	T	T	T
0.6165276975712501	0.3854018725568338	0.4591033029044453	T	T	T
0.5907568185466090	0.1836600602567486	0.4498807882655171	T	T	T
0.3803517336584292	0.3994240346695577	0.4123392783377469	T	T	T

FS: -261.067497 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
-0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

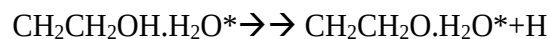
36 2 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970377922	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1110614224172721	0.8891073032308938	0.1112015284783112	T	T	T
0.2233193158984506	0.1132368193747411	0.2207092283678023	T	T	T
0.5569320458134044	0.1141719851182543	0.2214326636020303	T	T	T
0.8899248392426031	0.1131823276251325	0.2206149836760432	T	T	T
0.2232319116167787	0.4467870508418343	0.2202528536167705	T	T	T
0.5576324884004720	0.4456484116876993	0.2217041936119060	T	T	T
0.8877176577751484	0.4456472717610183	0.2219222234418936	T	T	T
0.5560843517235909	0.7794330882725831	0.2201850946005450	T	T	T
0.8901795734595979	0.7802187172176431	0.2206980569612185	T	T	T
0.2231035449764462	0.7793934286655073	0.2202960981651003	T	T	T
0.0024717936632044	0.0051171129651237	0.3325058967535952	T	T	T
0.3336275809689013	0.0032154787746492	0.3320697640311536	T	T	T
0.6694476476390321	0.0032873275255909	0.3316805039886859	T	T	T
0.3335440390523488	0.3379556348527331	0.3317885527467723	T	T	T
0.6699445541856690	0.3397548977144069	0.3356033568030199	T	T	T
0.0042756344859427	0.3380391318059282	0.3318572407602005	T	T	T
0.3357262394187117	0.6718688561387012	0.3322078668439445	T	T	T
0.6690906690593792	0.6734487943735488	0.3317564111332700	T	T	T
0.0043573855836101	0.6736396219749636	0.3321103826679561	T	T	T
0.6513699651869302	0.6854946360796816	0.5222716360452182	T	T	T
0.8528505649852249	0.7917922471211156	0.5145644433414276	T	T	T
0.5527210921395707	0.5243322424463059	0.5074329282900649	T	T	T
0.6567668450694981	0.3122678379166075	0.4462131197489470	T	T	T
0.9161412760779726	0.8704443893644367	0.5587461116295032	T	T	T
0.9103054426365702	0.7051740253962464	0.5016760095087065	T	T	T

0.8847174685266310	0.8930384326645608	0.4756800871416687	T	T	T
0.5859544855586094	0.7604832739035174	0.5427294370444145	T	T	T
0.6188585352816531	0.3958708349216025	0.4671564417617233	T	T	T
0.5518719207887415	0.1888878275176609	0.4499167867655629	T	T	T



IS: -264.911406 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.88888888888888928	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.88888888888888928	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.88888888888888928	0.11111111111111072	F	F	F
0.2169830195832619	0.1080804815872826	0.2225996964137130	T	T	T
0.5548055513028972	0.1126178606192026	0.2217355987564434	T	T	T
0.8878057109738912	0.1076968427344713	0.2228856327928253	T	T	T
0.2197073749633769	0.4428946375468919	0.2203755712413917	T	T	T
0.5530205059192528	0.4415193924506429	0.2205929486006734	T	T	T
0.8856499643797469	0.4416690532508404	0.2209890242805396	T	T	T
0.5529744143334194	0.7772358889886947	0.2199842296386553	T	T	T
0.8882996223249716	0.7786441011638980	0.2215015951417678	T	T	T
0.2211461974920492	0.7771276632677818	0.2201025666512998	T	T	T
0.9928360999799098	0.9936665577699724	0.3445476474789538	T	T	T
0.3277182861942958	0.9957943541282164	0.3321500589946962	T	T	T
0.6612451656591517	0.9960978375651928	0.3323871619999120	T	T	T
0.3261289353587042	0.3290270240820443	0.3319722968982993	T	T	T
0.6623616307815053	0.3309239669797144	0.3353341911142467	T	T	T
0.9963185604259478	0.3291831979633389	0.3322218169073029	T	T	T
0.3279082823306053	0.6631139525037114	0.3322545612201859	T	T	T
0.6603631556293639	0.6639663549072188	0.3294104307168864	T	T	T
0.9975632944163046	0.6645657513946095	0.3306617422689492	T	T	T
0.8235796265977299	0.8982533591938759	0.4831440685135452	T	T	T
0.9999003441856809	0.9740641202524202	0.4452265026637966	T	T	T
0.6773087915155372	0.3723104661975773	0.4490296297373676	T	T	T
0.6935105629491427	0.7069207203524510	0.4739437101391504	T	T	T

0.7554450366888058	0.9783434034481577	0.4745418809942456	T	T	T
0.6998767263197500	0.4981301294044228	0.4579902811614694	T	T	T
0.0913968110945727	0.1157316925754245	0.4608347857876618	T	T	T
0.0667219580229564	0.8932149809115014	0.4542754772639757	T	T	T
0.8598840872260046	0.9109353287588947	0.5348309672850265	T	T	T
0.5519578374970702	0.2901176695837406	0.4628118383799584	T	T	T
0.6139569274231984	0.6977798333133457	0.4373132736853440	T	T	T

TS: -264.142777 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 2 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111148	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444431	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777796	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444434	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777792	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111145	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444451	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777799	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111162	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.2202108269703456	0.1054336346788129	0.2222826916657016	T	T	T
0.5579527070639743	0.1123864967920286	0.2209546587427672	T	T	T
0.8932648922028815	0.1088054849762639	0.2220078991583156	T	T	T
0.2250984343538135	0.4440602318860688	0.2212508227040387	T	T	T
0.5580966905468834	0.4435893467696079	0.2215081604563363	T	T	T
0.8894811237366385	0.4404404337846974	0.2215903914477922	T	T	T
0.5569480371842415	0.7763920828284523	0.2207403647893511	T	T	T
0.8909359718621398	0.7749998814051469	0.2223460211169009	T	T	T
0.2262142142826384	0.7750460286796953	0.2209888654868691	T	T	T
0.0026410710182771	0.9943816784188669	0.3426718111207178	T	T	T
0.3373278503289753	0.9941464551057200	0.3326951404049683	T	T	T
0.6726621552508205	1.0015063465401828	0.3304847498157090	T	T	T
0.3317495222480831	0.3229588576485949	0.3312571434048099	T	T	T
0.6739368628991127	0.3298333884773534	0.3349798895132510	T	T	T
0.0084922309122494	0.3310113147235553	0.3331317336669485	T	T	T
0.3423227027213718	0.6620781831680328	0.3387314543550919	T	T	T
0.6766520102993780	0.6649891110536337	0.3314690844575641	T	T	T
0.0128970936734311	0.6638747756702797	0.3319316977674858	T	T	T
0.7511603776080247	0.8530032433836371	0.4617336940845143	T	T	T
0.9499486342413186	0.9421751970067345	0.4416452284062136	T	T	T
0.6558650646576539	0.3652269521579833	0.4470323563346212	T	T	T
0.6332758301686388	0.6750673661303151	0.4349367062954388	T	T	T
0.6951096984023286	0.9430885999593496	0.4491451212360252	T	T	T
0.6472747466283892	0.4796420352290645	0.4486722128643328	T	T	T

0.0269582884588821	0.0768099403115815	0.4647810635223700	T	T	T
0.0099296740420434	0.8577547609859838	0.4550474607877411	T	T	T
0.7424900712922644	0.8359693436646136	0.5148819924771196	T	T	T
0.5330727632999328	0.2652680429903604	0.4565248844633551	T	T	T
0.4688716116108014	0.6638209074981619	0.4035822993858945	T	T	T

FS: -260.787880 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

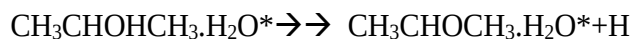
36 2 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2195214682659845	0.1098147557244493	0.2218817916423264	T	T	T
0.5565051548688911	0.1143405811045372	0.2211001754015057	T	T	T
0.8899677646404026	0.1102833935589414	0.2221950365722772	T	T	T
0.2217875044522822	0.4444976515765108	0.2200100512992657	T	T	T
0.5565585674158059	0.4456937839788496	0.2223162336691599	T	T	T
0.8871823283541352	0.4433475626863895	0.2208666484945681	T	T	T
0.5563606414796954	0.7767948635863982	0.2215943831384838	T	T	T
0.8885034042186538	0.7792202969649643	0.2224134666545270	T	T	T
0.2235010890973847	0.7791026576741057	0.2194013964933453	T	T	T
0.0000530559391780	0.0021579536113391	0.3410938317675464	T	T	T
0.3310486847368701	0.9993072693992171	0.3321168057654128	T	T	T
0.6646329559409205	0.0020191790255581	0.3316426808428501	T	T	T
0.3285059884696281	0.3318570485159900	0.3313961371029929	T	T	T
0.6666303034703630	0.3322414436289522	0.3348007797340429	T	T	T
0.0012422140029345	0.3344054219027567	0.3319288230377268	T	T	T
0.3296002520799626	0.6668796122328052	0.3314210988144503	T	T	T
0.6648028943479672	0.6711098476719266	0.3347190275004490	T	T	T
0.0039545880826819	0.6689979379789309	0.3300126467257857	T	T	T
0.7779456222595754	0.8447571793302622	0.4631979276920949	T	T	T
0.9739317394070816	0.9642583656243101	0.4412199692105674	T	T	T
0.6757085284608505	0.3676350527042777	0.4423993610763853	T	T	T
0.6822484833151907	0.6695229506434245	0.4340240518328541	T	T	T
0.7000094046670390	0.9167146435213138	0.4553991139891539	T	T	T
0.6850229760930708	0.4946823549136596	0.4458799986980320	T	T	T

0.0328551659889139	0.1013052958192809	0.4625058783973137	T	T	T
0.0582694963301096	0.9034434603272188	0.4537549392721393	T	T	T
0.7772831058218023	0.8203001396830079	0.5158519081646303	T	T	T
0.5531169351359393	0.2778744836199164	0.4567443492659318	T	T	T



IS: -285.758757 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 3 2 10 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2236383682948428	0.1115669621974860	0.2204410726412291	T	T	T
0.5578696840928359	0.1132645730784390	0.2216655769387543	T	T	T
0.8902684533536913	0.1117927804619328	0.2206305248351796	T	T	T
0.2236026684079278	0.4456337705748368	0.2203145685255947	T	T	T
0.5580058284200078	0.4445217417523750	0.2216665798873336	T	T	T
0.8881497272369216	0.4441246452457293	0.2220152742469779	T	T	T
0.5564055323488830	0.7782160540065419	0.2203568857109630	T	T	T
0.8904115808629456	0.7785188559810265	0.2205333458011296	T	T	T
0.2237548552784432	0.7780045578174111	0.2203191342534438	T	T	T
0.0037298720432233	0.0018585005615037	0.3321009879166255	T	T	T
0.3351932074335764	0.0000809319173030	0.3319099351384054	T	T	T
0.6706360935490352	0.0003203938529523	0.3320286343183341	T	T	T
0.3341406539338649	0.3342049636009747	0.3314369788157308	T	T	T
0.6714406939150734	0.3364640269041033	0.3358859669076821	T	T	T
0.0055474415972867	0.3350321078670362	0.3319234390009669	T	T	T
0.3373448069852927	0.6687570582830276	0.3328598024193141	T	T	T
0.6707815620649811	0.6712536142185712	0.3318682103166850	T	T	T
0.0059308027894929	0.6709201940646068	0.3319045611058513	T	T	T
0.5776073192969022	0.6411508134240478	0.5396775970694350	T	T	T
0.7668777976398431	0.8013022954224098	0.5254417467388350	T	T	T
0.4375992347569095	0.6987327386083990	0.5547913828266431	T	T	T
0.6646391933076288	0.3258143560091540	0.4452618487300199	T	T	T

0.5118820328001945	0.5105811727980338	0.4865372715696239	T	T	T
0.6078850378551408	0.4001231547461543	0.4618599102479521	T	T	T
0.4910672118045341	0.5664263352985230	0.4480542189594701	T	T	T
0.8186269682674947	0.8938187319163902	0.5671569865161672	T	T	T
0.8636345590738159	0.7541174692855108	0.5146718830803039	T	T	T
0.7631520548597308	0.8797253746056626	0.4836370616199588	T	T	T
0.5853176080969078	0.5613166791333271	0.5802581491736376	T	T	T
0.5748376085342315	0.1978277231777454	0.4533038649718932	T	T	T
0.3035616319655006	0.5794988952603219	0.5650073449412076	T	T	T
0.4804375831682819	0.7895739548044034	0.5969754199714927	T	T	T
0.4230146182305745	0.7728348493491453	0.5136408108224018	T	T	T

TS: -284.884280 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 10 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2241611006760849	0.1082694270396658	0.2195750475889540	T	T	T
0.5592202511190294	0.1124862597673655	0.2213918892265738	T	T	T
0.8918017771881139	0.1103845099385055	0.2207124635244284	T	T	T
0.2248166101229927	0.4450729563619262	0.2204032434785148	T	T	T
0.5593017887852056	0.4448048153974042	0.2216648457660497	T	T	T
0.8892527613725747	0.4422845004556351	0.2223544964175801	T	T	T
0.5575710289305320	0.7771858136330181	0.2215682625723119	T	T	T
0.8871255219414493	0.7741158533968289	0.2233650858079415	T	T	T
0.2251544068655136	0.7758381725170267	0.2208254965838350	T	T	T
0.0111138845510368	0.0021578559529729	0.3325888238689885	T	T	T
0.3398530503906656	0.9974128995406915	0.3322528928348021	T	T	T
0.6754357640396478	0.0009030115179414	0.3320900609642550	T	T	T
0.3348922130499403	0.3272170005054562	0.3295292868717752	T	T	T
0.6764680783377415	0.3329138210398099	0.3351993124685180	T	T	T
0.0087475558563028	0.3318209623348238	0.3326241307980524	T	T	T
0.3391158900206221	0.6634341226603766	0.3363062561135948	T	T	T
0.6831874218205982	0.6733933036543789	0.3362727799893861	T	T	T
0.0141022998474583	0.6687466041213739	0.3330550441148361	T	T	T
0.6703784856260668	0.7809986638694326	0.4816777300005342	T	T	T
0.8593608343468162	0.8266794423625825	0.5043578098783001	T	T	T
0.5331620117306457	0.7291997632971459	0.5366527441244813	T	T	T
0.6466972267633722	0.3478866375955150	0.4438996829154647	T	T	T
0.5970942533172732	0.6298886136804214	0.4366605962122350	T	T	T
0.6801984954510161	0.9002748992741232	0.4556314671480166	T	T	T

0.6231131704896882	0.4552300979370472	0.4471836744466131	T	T	T
0.9149117275492031	0.9434934288020926	0.5376279258127354	T	T	T
0.8546046219231158	0.7100004860382754	0.5295911241180562	T	T	T
0.9530031890859476	0.8629545231322027	0.4630006544556196	T	T	T
0.5298148782211101	0.2377807492039778	0.4524697149046091	T	T	T
0.5171152223349651	0.6087218868034228	0.5626513203276602	T	T	T
0.5805706781070512	0.8424835561845896	0.5712315536059336	T	T	T
0.3990511728654553	0.6985265364895383	0.5181941127285228	T	T	T
0.4240485058474874	0.6266777222409132	0.4020506920993441	T	T	T

FS: -281.375524 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

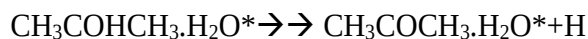
36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2234389813795235	0.1120962045450084	0.2199479085924959	T	T	T
0.5580426548303657	0.1148108277089601	0.2213714147552743	T	T	T
0.8905548679774996	0.1130962366734886	0.2206574376630297	T	T	T
0.2238291551171440	0.4467160168869253	0.2197527764545003	T	T	T
0.5586467315923639	0.4469092496130635	0.2221912145544792	T	T	T
0.8883899768200960	0.4452310102310567	0.2216788065952227	T	T	T
0.5584742532009268	0.7788339475326911	0.2218891138758692	T	T	T
0.8875131186528363	0.7786454731999620	0.2227242335223585	T	T	T
0.2240069331888387	0.7798892435511443	0.2195683880278055	T	T	T
0.0074533322925976	0.0077606705870168	0.3322639069020948	T	T	T
0.3359619190126690	0.0033729127195135	0.3320938577254960	T	T	T
0.6712184662033095	0.0054035586564762	0.3322775655145163	T	T	T
0.3334687872826803	0.3360022945775320	0.3303787253170017	T	T	T
0.6726251360004913	0.3362110435210179	0.3349212913218679	T	T	T
0.0063194528117646	0.3379955533565362	0.3318227201096147	T	T	T
0.3350071338443094	0.6713990636341242	0.3312454024580372	T	T	T
0.6735665397008832	0.6773632351528124	0.3370235161791835	T	T	T
0.0090611664906504	0.6739775199127456	0.3312575451442502	T	T	T
0.6866051822996456	0.7773470558223622	0.4811795650407113	T	T	T
0.8861279669446607	0.8659604845017452	0.5010823118530459	T	T	T
0.5551916098082930	0.6952985831013697	0.5379910707931628	T	T	T
0.6657122232434745	0.3548816750296681	0.4407014605878016	T	T	T
0.6387694801093603	0.6326512387414883	0.4352744247989305	T	T	T
0.6559696971798724	0.4757341715635328	0.4451472831425788	T	T	T

0.9206707701690434	0.9772472973472255	0.5356076473141201	T	T	T
0.9151416991778418	0.7654769969370888	0.5236334721322369	T	T	T
0.9754733022521125	0.9239121693739247	0.4585326060797376	T	T	T
0.5723971518532059	0.5886512162278084	0.5618205527409122	T	T	T
0.5822209534467075	0.8015341170683066	0.5739036080647971	T	T	T
0.4132095542920416	0.6350930809017373	0.5216557850134727	T	T	T
0.5469197782235157	0.2519588749413020	0.4526957112333839	T	T	T
0.6625826858708616	0.8807715043988877	0.4573818050375117	T	T	T



IS: -281.760109 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469727 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.2300004959106445 7.3265748023986816 0.0000000000000000
 -0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190185547

36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225360566194121	0.1124299881180544	0.2200736916113104	T	T	T
0.5555142117702926	0.1132687992091179	0.2202355596459195	T	T	T
0.8892498544131678	0.1122774357987426	0.2201282642628154	T	T	T
0.2229117879759191	0.4454554363955574	0.2202937192927098	T	T	T
0.5591235378133914	0.4482062558490417	0.2245695588504416	T	T	T
0.8871490660046478	0.4452111069087678	0.2216486683821586	T	T	T
0.5561529527275191	0.7753563569774771	0.2219631421374993	T	T	T
0.8860280476522698	0.7777862603538199	0.2229800683638522	T	T	T
0.2219010248241658	0.7780381424172232	0.2199077581038243	T	T	T
0.0013834972162854	0.0040149418571074	0.3320574838786278	T	T	T
0.3308422432225748	0.0014695309783237	0.3313245976276136	T	T	T
0.6672649909659852	0.0022228790081152	0.3296332431206662	T	T	T
0.3309563004351009	0.3361159082713929	0.3321992959266485	T	T	T
0.6669371513485365	0.3379565571157928	0.3349186848380100	T	T	T
0.0021632739326238	0.3366821086604325	0.3315652733636740	T	T	T
0.3325129711171250	0.6696891542446185	0.3318905132006201	T	T	T
0.6684425934007487	0.6759646088799434	0.3484016663183866	T	T	T
0.0020364712413868	0.6719719761671555	0.3320591826499606	T	T	T
0.6602054431866200	0.6857616003108474	0.4513531588458173	T	T	T
0.8407950817036701	0.7247866484311167	0.4804610406623597	T	T	T
0.6052509059465176	0.8226115209484470	0.4741242324984779	T	T	T
0.5248762673650170	0.5070000750133227	0.4728661970339788	T	T	T

0.6476674700397516	0.2841843459252553	0.4448091861788759	T	T	T
0.4100424877457592	0.4735177762967512	0.4499864294236008	T	T	T
0.8266557135712270	0.7150189509346619	0.5335014801844830	T	T	T
0.8832268181163969	0.6281870348775526	0.4640942008652467	T	T	T
0.9481195956290187	0.8632877807323392	0.4677317432937647	T	T	T
0.5898086382247859	0.3577274469193921	0.4593352468244843	T	T	T
0.5500228359712244	0.1563006011229617	0.4444213192745927	T	T	T
0.6032484122089138	0.8214792167727318	0.5274068477588908	T	T	T
0.4686337945370006	0.7871333099825371	0.4566444068578990	T	T	T
0.7041674702947062	0.9612101686361098	0.4576883361295620	T	T	T

TS: -281.111213 eV
2.820000000000000
3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
-1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336
36 3 2 9 # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666642 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666641 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
-0.0000000000000001 0.3333333333333356 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.0000000000000001 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111142 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777787 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777787 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111145 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444428 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111145 0.8888888888888855 0.11111111111111072 F F F
0.2243664150302022 0.1152821385559634 0.2210855689681800 T T T
0.5567947487960021 0.1142866040335813 0.2204692205888535 T T T
0.8907428586221596 0.1135214667871826 0.2202925827947237 T T T
0.2252115353418098 0.4463036658095045 0.2209041762846048 T T T
0.5590542180356395 0.4476904010746446 0.2247666557728685 T T T
0.8885032201274190 0.4464656071559329 0.2214361201741604 T T T
0.5577184043896061 0.7772085870629550 0.2214560642310256 T T T
0.8882197215679959 0.7794852315828128 0.2222166498931994 T T T
0.2233154247976151 0.7798672917558473 0.2197573220455218 T T T
0.0032159961530495 0.0060873761533199 0.3325498607316631 T T T
0.3332263397954991 0.0048768513800123 0.3312960715631846 T T T
0.6699952504669235 0.0043299906730274 0.3300696225398325 T T T
0.3341276238407323 0.3403368035791293 0.3380690814896591 T T T
0.6707691086040949 0.3398935710782963 0.3348123693714718 T T T
0.0052614915949471 0.3389933726102273 0.3313778514596242 T T T
0.3342708643481642 0.6730664544661925 0.3311540846622893 T T T
0.6698477295838158 0.6776481848181615 0.3436019659716995 T T T
0.0035310529910896 0.6746669392367127 0.3319899343327306 T T T
0.6286471309312487 0.6606388685349962 0.4611782662563412 T T T
0.8222800382997190 0.7344293297861855 0.4847142110794950 T T T
0.5458832387233875 0.7788643260654147 0.4751819354327141 T T T
0.5175630114118707 0.4840756481777517 0.4685911232309033 T T T
0.6695675059404057 0.2991736645837180 0.4423101991210702 T T T
0.8183188988983139 0.7314955403088447 0.5380490381306958 T T T

0.8805574589067348	0.6509856629312161	0.4684902651103529	T	T	T
0.9110456454163616	0.8760822128451646	0.4692419887886263	T	T	T
0.5264344607738916	0.7759093203098414	0.5280353347617126	T	T	T
0.4110344450275093	0.7247956575022566	0.4523803679591001	T	T	T
0.6362365199758744	0.9208128462706325	0.4601276084132975	T	T	T
0.6054696117085557	0.3697530368445184	0.4580117872947064	T	T	T
0.5797355165561452	0.1692173111145320	0.4461013172412469	T	T	T
0.3895402715256292	0.4048687147676135	0.4141264826068457	T	T	T

FS: -278.039190 eV

1.0000000000000000

8.4600000381469691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-4.2300004959106401 7.3265748023986799 0.0000000000000000
-0.0000009058180126 -0.0000015689229258 20.7227001190186009

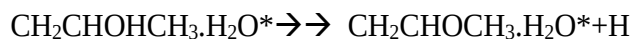
36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238778997	0.1111111119389534	F	F	F
0.44444444179534912	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111110970378064	0.5555555224418640	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1105803121166957	0.8884106866259813	0.1101139524834664	F	F	F
0.2249897872125644	0.1149224301713261	0.2209287621827016	F	F	F
0.5576454543138387	0.1147312172009563	0.2214635645436101	T	T	T
0.8908123372901648	0.1138933572554790	0.2205863584871084	T	T	T
0.2238196811566423	0.4475477018306652	0.2202769923341840	T	T	T
0.5584528694695984	0.4466053356401909	0.2216649612421529	T	T	T
0.8880379887405212	0.4460911621558137	0.2220366495289729	T	T	T
0.5567656601709357	0.7801462366374426	0.2201528914301570	T	T	T
0.8915336950316174	0.7813227388608087	0.2203943906732163	T	T	T
0.2235562206334300	0.7804058564455857	0.2199811283648010	T	T	T
0.0034733301242507	0.0057762803298720	0.3324417639120478	T	T	T
0.3347115260521831	0.0040250191296888	0.3320873230795595	T	T	T
0.6704039637953071	0.0042699192747218	0.3316932752159239	T	T	T
0.3345688050088469	0.3390911409850743	0.3319349771142938	T	T	T
0.6713296444580977	0.3409110278632278	0.3357325208964952	T	T	T
0.0051667375704069	0.3387461912477367	0.3319168987380357	T	T	T
0.3367350695118171	0.6727005238541419	0.3320309861964163	T	T	T
0.6703981541005049	0.6745169575653426	0.3315377030503330	T	T	T
0.0057058527549642	0.6747160314273434	0.3319786017749812	T	T	T
0.6191218158578246	0.6769127697684267	0.5154711269365267	T	T	T
0.8238175879333256	0.7794770796767932	0.5162197590222131	T	T	T
0.5228889432148904	0.7810300277539307	0.5303308692371044	T	T	T
0.5305035789126025	0.5129485964693408	0.5012217799659318	T	T	T
0.6521818227008023	0.3128526175326282	0.4458797242803696	T	T	T

0.8781845200527252	0.8833455411792713	0.5543875652235024	T	T	T
0.8779141143953791	0.6862928300627911	0.5206432554251852	T	T	T
0.8708122877931751	0.8521907361344202	0.4696070343840754	T	T	T
0.5553782623917065	0.8361656616322256	0.5796886769201430	T	T	T
0.3752527286645215	0.6941707801549699	0.5243666216560283	T	T	T
0.5744622684374344	0.8991597319650940	0.4975779952112960	T	T	T
0.6115824381018355	0.3960546518312772	0.4662633546326127	T	T	T
0.5456275565578397	0.1900258648953642	0.4482223306830769	T	T	T



IS: -281.599736 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2184122688244529	0.1072268932040058	0.2226220581671659	T	T	T
0.5553254716854817	0.1116631244250410	0.2209123523593498	T	T	T
0.8894028173695582	0.1076206310001079	0.2224189942144255	T	T	T
0.2213967777265297	0.4423070467847079	0.2204625071131973	T	T	T
0.5548894254758255	0.4425179539220338	0.2210510834552342	T	T	T
0.8868522429357015	0.4410363920107505	0.2209234124037764	T	T	T
0.5545770939519087	0.7757892115584417	0.2202052317260370	T	T	T
0.8890307313102583	0.7773007337411673	0.2218933289599229	T	T	T
0.2223428213283532	0.7762349158116315	0.2200378738686750	T	T	T
0.9972511213343016	0.9938887527895325	0.3429249042936443	T	T	T
0.3310317022592215	0.9944091157664003	0.3322610404203642	T	T	T
0.6641398944147056	0.9960170627544807	0.3312737912892859	T	T	T
0.3291735601496118	0.3273819931768916	0.3322812131001178	T	T	T
0.6668713258857175	0.3284526472970858	0.3342924563915251	T	T	T
0.0005188711386482	0.3290246699364243	0.3322262790897444	T	T	T
0.3309438393241144	0.6615403081059500	0.3325141894813923	T	T	T
0.6651200830554496	0.6625238794357237	0.3310760821923034	T	T	T
0.0018746058566670	0.6629956270421149	0.3310402988177615	T	T	T
0.7954791689957408	0.8941331587677094	0.4743767350093973	T	T	T
0.9818556165319513	0.9696361068729874	0.4433893039419410	T	T	T
0.8088278762330096	0.9071284802415741	0.5478461024180994	T	T	T
0.6599821507126546	0.3553791598651692	0.4505328641846467	T	T	T

0.6777826429369231	0.7013479527643086	0.4563470872687886	T	T	T
0.7288903947972777	0.9690333947575805	0.4559652953390515	T	T	T
0.6772444962511841	0.4796527115732740	0.4556458584598322	T	T	T
0.0704984318182621	0.1094664755752291	0.4610141505607175	T	T	T
0.0429475901500027	0.8857692206675011	0.4564655167252332	T	T	T
0.5288303203720711	0.2724620392985297	0.4554833269780483	T	T	T
0.8752044095484917	0.8334315092455075	0.5667426770136853	T	T	T
0.8885628825736142	0.0505206896746945	0.5629632166950050	T	T	T
0.6724702558583081	0.8483918366315842	0.5695576656922494	T	T	T
0.5530017050957465	0.6784967926588442	0.4509146126961898	T	T	T

TS: -280.864725 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 2 9 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333359	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666644	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000002	0.3333333333333361	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111148	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444431	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777796	0.2222222222222226	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444434	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777792	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111145	0.5555555555555579	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444451	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777799	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111162	0.88888888888888903	0.11111111111111072	F	F	F
0.2203849471789415	0.1058808093366395	0.2223286235638097	T	T	T
0.5580458943893826	0.1127161222519852	0.2209314790989646	T	T	T
0.8934725409394199	0.1093386307396543	0.2220291401431942	T	T	T
0.2252042774570312	0.4445417323970870	0.2212408590561776	T	T	T
0.5582901753874339	0.4440014638526694	0.2215673901589476	T	T	T
0.8896127597393431	0.4409513549331722	0.2215991289628590	T	T	T
0.5570953786824605	0.7769286937270038	0.2207402632426772	T	T	T
0.8911120968963754	0.7754075123441033	0.2222792337594213	T	T	T
0.2262952891783944	0.7754636585480973	0.2209933454215584	T	T	T
0.0027706426650375	0.9948187325508999	0.3426992280703406	T	T	T
0.3377065925166166	0.9952012128524995	0.3326929285344460	T	T	T
0.6728472629982772	0.0027847083560139	0.3305151844016998	T	T	T
0.3319699290720270	0.3239451069413060	0.3312600414448161	T	T	T
0.6744201548139535	0.3311270575826058	0.3349278124052019	T	T	T
0.0088264493339231	0.3319471739486806	0.3331463125904108	T	T	T
0.3424579269098676	0.6628773724544912	0.3386341821354167	T	T	T
0.6777865638810621	0.6666266894226870	0.3314685904699687	T	T	T
0.0133567482550521	0.6647350911771884	0.3320700482854570	T	T	T
0.7489066760302825	0.8566946935821890	0.4619117186090211	T	T	T
0.9484385390088448	0.9443969110184957	0.4415838832168447	T	T	T
0.7281947221594813	0.8380323971447818	0.5352248985129513	T	T	T
0.6549153672637241	0.3655102615425805	0.4474959766186001	T	T	T
0.6343478636640225	0.6775501512206995	0.4343117689904323	T	T	T
0.6943806873506839	0.9451556253481084	0.4446089059736641	T	T	T

0.6474796829282239	0.4804247196830406	0.4488755699314962	T	T	T
0.0266751399330701	0.0798385280791089	0.4640069195119750	T	T	T
0.0067728413722908	0.8590675863724526	0.4559620948570599	T	T	T
0.5309897597448869	0.2662569081042249	0.4560082351691694	T	T	T
0.7845333950520568	0.7549323015060297	0.5540376224808033	T	T	T
0.8001900344753099	0.9730234001938367	0.5582219202104226	T	T	T
0.5833447662146035	0.7725564705387228	0.5485200168936214	T	T	T
0.4689227655997901	0.6641737415099981	0.4034596419367936	T	T	T

FS: -277.512740 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2194387885773079	0.1097289603875606	0.2218632107853626	T	T	T
0.5564307192982840	0.1142492315081990	0.2211162084536699	T	T	T
0.8897398915855392	0.1100992012344209	0.2222037857581387	T	T	T
0.2217348198277982	0.4443877995170153	0.2199989785793265	T	T	T
0.5565460280978930	0.4457049386921038	0.2223841622743266	T	T	T
0.8870887314111444	0.4432742351634991	0.2208761224761319	T	T	T
0.5563488963910800	0.7767929836656279	0.2216447323728127	T	T	T
0.8883772334916371	0.7790368870002279	0.2223569137627132	T	T	T
0.2234857038038642	0.7790504008286251	0.2194137098068456	T	T	T
0.9995727872115622	0.0013888491399165	0.3409369925437411	T	T	T
0.3309188944467364	0.9993602681634383	0.3321505493797512	T	T	T
0.6643555384718105	0.0022246292114729	0.3317626323042017	T	T	T
0.3283395948181705	0.3317572078263917	0.3313828114359743	T	T	T
0.6666413279231485	0.3326936988851950	0.3348461074392534	T	T	T
0.0011280954380222	0.3342573885163610	0.3319040919937904	T	T	T
0.3295878943504996	0.6667645190408630	0.3313950868743690	T	T	T
0.6653620020451425	0.6714509037777354	0.3349222879654003	T	T	T
0.0039847194146654	0.6688377915773907	0.3300414198616501	T	T	T
0.7754672880712991	0.8472242722460450	0.4636916213084535	T	T	T
0.9719559414710405	0.9642135544081009	0.4409044166854288	T	T	T
0.7670101121667473	0.8181733516955406	0.5368054838742593	T	T	T
0.6746276543298839	0.3670056153302083	0.4429493970686684	T	T	T
0.6819463188668140	0.6711981550511471	0.4340411117154634	T	T	T
0.6840631658439641	0.4936064573395403	0.4464861682688173	T	T	T

0.0336779745628978	0.1021143076832528	0.4615994546957797	T	T	T
0.0535779920262205	0.9006857942413369	0.4540608717194656	T	T	T
0.8422900844948287	0.7488250339908840	0.5508558677310480	T	T	T
0.8273608448538278	0.9500643218863031	0.5619421146843288	T	T	T
0.6244647365150081	0.7349590151857119	0.5524501796703027	T	T	T
0.5514289949058307	0.2773307452434630	0.4567853338595573	T	T	T
0.6992261909751848	0.9190014812208471	0.4514038227548888	T	T	T

b) Glycerol / 1,2-PDO structures

We list here the various reaction intermediate structures we used in order to predict activation barriers of glycerol and 1,2-PDO dehydrogenation. Several configurations were tested, but we only report here the most stable for each intermediates.

Glycerol dehydrogenation intermediates on Rh catalyst

Glycerol: -322.660000 eV

2.7200000000000002

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 8 #Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2225699254805972	0.1120144633749286	0.2201922193147066	T	T	T
0.5563143882182303	0.1128504808368704	0.2208198763285843	T	T	T
0.8889859770507662	0.1114583434660098	0.2192693343581999	T	T	T
0.2227275554642510	0.4436648469816560	0.2201209110744816	T	T	T
0.5551893446064596	0.4429344881225201	0.2213229176882335	T	T	T
0.8872152820894835	0.4434824248580473	0.2203409477157419	T	T	T
0.5553954239543706	0.7777437492055150	0.2189410428126204	T	T	T
0.8890957004003718	0.7771192776171211	0.2184219786327386	T	T	T
0.2224432180107438	0.7777895561766976	0.2186738913094032	T	T	T
0.9970229304374426	0.9970148689298708	0.3285320426293555	T	T	T
0.3301417084574242	0.9950886432521127	0.3284496556376301	T	T	T
0.6672931411598290	0.9974932195402468	0.3289778472588287	T	T	T
0.3335365047471073	0.3353379632731704	0.3317528091690045	T	T	T
0.6680347899921435	0.3333408102014586	0.3334677165841958	T	T	T
0.0001717897566294	0.3326966014371984	0.3280429562526466	T	T	T
0.3339877288313799	0.6691467324029711	0.3285121823543154	T	T	T
0.6687355860894239	0.6717229923011554	0.3279233376748287	T	T	T

0.0024821443057257	0.6697599517678930	0.3281403376582813	T	T	T
0.5313282139564058	0.2256904153677935	0.4895348169904161	T	T	T
0.3931241044069331	0.2943668474289133	0.5067497809713445	T	T	T
0.4887559276435184	0.4952443329944171	0.5349361716886608	T	T	T
0.6829959869677260	0.3508879970924516	0.4454696371800008	T	T	T
0.2767343054703729	0.2878469020144518	0.4510557183428237	T	T	T
0.6419327837944920	0.6322940317934491	0.4941948790202763	T	T	T
0.2982713435708763	0.1994491976526686	0.5462639263475103	T	T	T
0.5526566453365760	0.4969657352830965	0.5835373100417652	T	T	T
0.3816389483954698	0.5377292427168036	0.5426802999629894	T	T	T
0.7120569392158477	0.4819656955186040	0.4569905896007572	T	T	T
0.5911366534145622	0.6648563562271337	0.4545766292256649	T	T	T
0.1853578687459308	0.1552106092155571	0.4391916636776524	T	T	T
0.4572371484840130	0.0865562900561602	0.4648014114147739	T	T	T
0.5946115348638605	0.2111767157774857	0.5364050581561928	T	T	T

GAL: -315.240000 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2239201262546881	0.1140331493052893	0.2203808595673229	T	T	T
0.5552838500454277	0.1104893254829308	0.2188611359217189	T	T	T
0.8887937414169018	0.1116504935924306	0.2188273960301387	T	T	T
0.2235382458850346	0.4443218257647757	0.2206892598672906	T	T	T
0.5559564189715760	0.4436615401259652	0.2201604344321724	T	T	T
0.8883765861674141	0.4444387883529462	0.2197779750419306	T	T	T
0.5567993523877546	0.7757615545639905	0.2216824085734108	T	T	T
0.8888478670540448	0.7774996679887779	0.2189487528339997	T	T	T
0.2192836705783049	0.7759799965008894	0.2217763210993307	T	T	T
0.0023589872281766	0.0071702325267657	0.3274488897011348	T	T	T
0.3376181330192295	0.0007886866838066	0.3281917054937279	T	T	T
0.6674270955993775	0.0043071388187038	0.3284109799668562	T	T	T
0.3339942741455100	0.3346877146512593	0.3330474320490750	T	T	T
0.6668304020064879	0.3298427993154298	0.3331696711223824	T	T	T
0.0020493816277167	0.3328399024307566	0.3282280785838785	T	T	T
0.3326862195568138	0.6693232680815790	0.3285999014653724	T	T	T
0.6736344096662100	0.6746879389432809	0.3315496201139693	T	T	T
0.0007987593948141	0.6737469063119672	0.3322509977504813	T	T	T
0.7121130879624673	0.4354823083373548	0.4303249623122284	T	T	T
0.5370098963594230	0.3628563137212647	0.4745649576387793	T	T	T
0.5804896056018661	0.4800503697143823	0.5391731882669183	T	T	T
0.8072676089908241	0.6315624193011368	0.4189171811955824	T	T	T
0.3779078262171415	0.3679407862962543	0.4436307695106694	T	T	T
0.5927045180423663	0.6576917552446522	0.5244940880114697	T	T	T

0.4875824496634075	0.2134477929467083	0.4858854982793400	T	T	T
0.7114893151513659	0.4989947098390042	0.5622672497869323	T	T	T
0.4639040051462464	0.4077181513087482	0.5750508103336096	T	T	T
0.6996792568687924	0.7242129240108601	0.4934818930838131	T	T	T
0.3977064572924421	0.4945540346389733	0.4552594598410997	T	T	T
0.8096989065724735	0.3941135710949715	0.4530323402784960	T	T	T

DHA: -315.230000 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2221147031931797	0.1109150473253269	0.2189210495787950	T	T	T
0.5571972892767747	0.1144227952746837	0.2204060396671927	T	T	T
0.8904990187323382	0.1143984842124864	0.2203149755182890	T	T	T
0.2226250605332107	0.4441924493889407	0.2198590209155578	T	T	T
0.5548608688348693	0.4442348203520483	0.2198625873547976	T	T	T
0.8889178720057493	0.4444964905598374	0.2210908491855682	T	T	T
0.5558958255728770	0.7785794026181623	0.2185582915526232	T	T	T
0.8852620224822397	0.7761561845900021	0.2213160035283742	T	T	T
0.2242069954918140	0.7762124283709223	0.2213684055991388	T	T	T
0.0031477866736660	0.0006980055619223	0.3283414838381163	T	T	T
0.3304838858311450	0.0007547602068283	0.3283740959572136	T	T	T
0.6692493302349093	0.0048826230952953	0.3274410539603410	T	T	T
0.3304203441899435	0.3276253009793269	0.3328331996579232	T	T	T
0.6661455897441233	0.3331783026304033	0.3313413621704159	T	T	T
0.0001621132416655	0.3333346366062558	0.3314001826838839	T	T	T
0.3405155608422803	0.6742653760409155	0.3316046613871346	T	T	T
0.6664663970660242	0.6742495830347999	0.3315770810117565	T	T	T
0.0027155789026161	0.6724313038218558	0.3280241753614341	T	T	T
0.3801016658886314	0.4272283785924111	0.4318697141018064	T	T	T
0.4989182157517000	0.3653870107844434	0.4726417427365854	T	T	T
0.1992597980583078	0.3646394051453069	0.4726409387920688	T	T	T
0.0594432614978439	0.3995768807053001	0.4422888959402070	T	T	T
0.6737203825371271	0.4006325680188249	0.4422175017916882	T	T	T
0.4774522174986592	0.6226623710687715	0.4192983719550007	T	T	T

0.5353334841903309	0.4392428727497593	0.5214579676102017	T	T	T
0.4172227865263760	0.2120971656945159	0.4810871900384310	T	T	T
0.1280542181922770	0.2113294087551797	0.4809755354684787	T	T	T
0.2363900129238181	0.4381768846742096	0.5215235855643338	T	T	T
0.1158876224708916	0.5376213971604571	0.4360887895435428	T	T	T
0.7546908368117161	0.5386736541914231	0.4356150066320530	T	T	T

Enol: -315.253408 eV
 1.0000000000000000
 8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.0800000000000001 7.0667672948810312 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107218

36 3 3 6 # Rh C O H

Selective Dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000040063028	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.2246711410791045	0.1157314619529587	0.2210941512796066	T	T	T
0.5562078042404506	0.1133061342039069	0.2193396311851779	T	T	T
0.8891767899712248	0.1114871039209177	0.2190076885867793	T	T	T
0.2234953599810217	0.4425414639020752	0.2209307894600400	T	T	T
0.5531215506835578	0.4422081841827208	0.2218173851575130	T	T	T
0.8889284554096599	0.4444257477671900	0.2206206501670076	T	T	T
0.5549947452736649	0.7771604630850951	0.2185759083485653	T	T	T
0.8886771318162302	0.7773388792189554	0.2189622517892186	T	T	T
0.2213796925912865	0.7771958064200041	0.2191462733243457	T	T	T
0.9972646030365196	0.9979541017443219	0.3279184454986182	T	T	T
0.3331440993030780	0.9978750054060398	0.3275145084718152	T	T	T
0.6659500663845018	0.9973275987090068	0.3273315117989915	T	T	T
0.3336737282402382	0.3335608798117177	0.3481629528074340	T	T	T
0.6645603974518617	0.3284491493770989	0.3316795800814585	T	T	T
0.9976842592645221	0.3285334674168081	0.3292158264486987	T	T	T
0.3383602234449836	0.6715781861215748	0.3293697572268784	T	T	T
0.6681186290643724	0.6704132998249244	0.3280311358807935	T	T	T
0.9985450361297882	0.6721210606762600	0.3291509764457262	T	T	T
0.3656584314280010	0.2857666893626054	0.4524753874253309	T	T	T
0.2701717800361512	0.3919864756412429	0.4495669224323651	T	T	T
0.5658518218771816	0.3818343067671372	0.4776232156815485	T	T	T
0.6704355595511881	0.3061491746537691	0.4433169302283588	T	T	T
0.0828503835038126	0.3071227925475298	0.4684365393586623	T	T	T
0.2487226939753235	0.1000242980464186	0.4764042483034001	T	T	T

0.3445813114851584	0.5445381467378806	0.4576096639956543	T	T	T
0.2432516500809648	0.0088178965029607	0.4425350991976025	T	T	T
0.0411381551467152	0.1712245256109688	0.4733536885713823	T	T	T
0.6336789293532809	0.5355074409299404	0.4688785727945462	T	T	T
0.5658484213881805	0.3524626056438764	0.5315229654791147	T	T	T
0.8028196100154950	0.3702776022431823	0.4578997689458988	T	T	T

dirad1: -314.950000 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495292

36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231734739789056	0.1131287300890585	0.2195957974692442	T	T	T
0.5566187400330391	0.1134000059654365	0.2199747469611250	T	T	T
0.8892992450638973	0.1110591153492046	0.2187255421605446	T	T	T
0.2235028912052267	0.4431442584511907	0.2196709370749943	T	T	T
0.5559909576570965	0.4455346434418295	0.2220604160627770	T	T	T
0.8873373285825515	0.4440372435847933	0.2203130716073244	T	T	T
0.5570394702044369	0.7766700195340516	0.2200664489445141	T	T	T
0.8875325661904897	0.7772737627488496	0.2208171837935150	T	T	T
0.2223877140146026	0.7774907058698757	0.2194276488281315	T	T	T
0.0014402679873193	0.0025785499276859	0.3286265084089215	T	T	T
0.3303672711360076	0.9969674530275590	0.3277190028558100	T	T	T
0.6680934921600443	0.0011674118600323	0.3273671748025184	T	T	T
0.3313215166109874	0.3304077209148643	0.3367024758229725	T	T	T
0.6671270918021186	0.3298952401462614	0.3329193829139764	T	T	T
0.0000333232566093	0.3324385470010670	0.3276448164321957	T	T	T
0.3302902450038726	0.6662031568569484	0.3286711615029245	T	T	T
0.6650089366914449	0.6693833782794723	0.3335426799227105	T	T	T
0.0044461305994482	0.6683321591517151	0.3279705612822730	T	T	T
0.4640850032761447	0.2537484439231958	0.4682960790056703	T	T	T
0.3549277054180640	0.3480071104282978	0.4422753126858194	T	T	T
0.4611118688145384	0.5606837485752260	0.4601132548526840	T	T	T
0.6553408267711376	0.3469864768072759	0.4424440061868191	T	T	T
0.1753198423430481	0.2501078968252072	0.4724458057142346	T	T	T
0.6483893681398395	0.6542459959654666	0.4358128712299312	T	T	T

0.4657261428692575	0.5759910480402863	0.5154716710882422	T	T	T
0.3790494265169188	0.6283197312181044	0.4408454990333151	T	T	T
0.6937829558236795	0.4880469426243686	0.4444633754113652	T	T	T
0.0990424055074168	0.3047826318645906	0.4565800447468450	T	T	T
0.3938295684615977	0.1032412157815094	0.4539667131952675	T	T	T
0.4724541249805484	0.2629967310133445	0.5235615558750063	T	T	T

```

dirad2:      -315.140000 eV
2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 3 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2231606163708787 0.1154596963100420 0.2214112038826655 T T T
0.5551624057135698 0.1125767554345065 0.2198020655501040 T T T
0.8884936457265559 0.1114000094698235 0.2186738089347024 T T T
0.2228967480776240 0.4453092785737671 0.2197275818404237 T T T
0.5563535914090711 0.4439335163654718 0.2195879892495166 T T T
0.8885988703389265 0.4447451586256118 0.2194132674567217 T T T
0.5550624040969957 0.7786926492002595 0.2193390040308927 T T T
0.8858779879616266 0.7762574134272913 0.2221043153316403 T T T
0.2181876543366927 0.7777973815115620 0.2214578575148859 T T T
0.0010964754442461 0.0042191462515261 0.3285836147361402 T T T
0.3340845680968232 0.0013700819365124 0.3285687557939898 T T T
0.6691107644959084 0.0039438957338102 0.3281803038343907 T T T
0.3378566134235476 0.3347740197814166 0.3326773741838567 T T T
0.6748932135001788 0.3349544469557186 0.3347032432964471 T T T
-0.0000777802471727 0.3287906794541624 0.3276114771517645 T T T
0.3319183179221780 0.6734338445796877 0.3275348394865546 T T T
0.6611932493652835 0.6669120280466997 0.3310122584455447 T T T
0.0007657960996313 0.6672318765467196 0.3329874637431568 T T T
0.7305276136165809 0.4193807006441557 0.4345733416667040 T T T
0.5726959296822507 0.4464309193257384 0.4638274813991387 T T T
0.6341073904594208 0.5846959775924232 0.5229868309928870 T T T
0.9158678152517268 0.5909788179650880 0.4374852520742327 T T T
0.4892291961341036 0.5145729855414138 0.4154723002896916 T T T
0.7786362985776767 0.7728973414181941 0.5033005248034403 T T T

```

0.4607221012966419	0.3064926882011781	0.4813842725025788	T	T	T
0.6971801934692006	0.5413926599775293	0.5628578981866603	T	T	T
0.5104634687331525	0.5881668570527204	0.5431985266734101	T	T	T
0.8981918477246595	0.6936750362682595	0.4586387453478593	T	T	T
0.7251846364636386	0.8161497873387540	0.4679772215720688	T	T	T
0.7447689693989786	0.3095776727493952	0.4614402879305552	T	T	T

```

dirad3:      -314.950000 eV
2.7200000000000002
  3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
 -1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36  3  3  6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F  F  F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F  F  F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F  F  F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F  F  F
0.2244562943647210  0.1143266600396664  0.2206924876114898  T  T  T
0.5575304359442801  0.1147432154692475  0.2204356254758870  T  T  T
0.8890863366523427  0.1117335648166833  0.2188489946894629  T  T  T
0.2222498995842775  0.4450788438548823  0.2185590684429745  T  T  T
0.5562840084614671  0.4473383209114297  0.2217001929869266  T  T  T
0.8861300521696167  0.4436503686342032  0.2203832940868663  T  T  T
0.5555420500115439  0.7772965710562895  0.2208652139224944  T  T  T
0.8896448913780668  0.7784545903472863  0.2188102473417929  T  T  T
0.2252449793327566  0.7770559267406079  0.2210627331786326  T  T  T
0.0007985552082658  0.0005960102837829  0.3276500114430057  T  T  T
0.3327418611264378  -0.0030054020453042  0.3283052696515765  T  T  T
0.6684384243305566  0.0052100691469007  0.3280386814458683  T  T  T
0.3281144084667524  0.3320522143271389  0.3295260211722805  T  T  T
0.6604195109926739  0.3303142505330172  0.3345733897296526  T  T  T
0.9937201273678328  0.3319609286663089  0.3275596125803156  T  T  T
0.3295588034534900  0.6616165564982008  0.3325939095486168  T  T  T
0.6776191345256345  0.6781121208551661  0.3311507338618171  T  T  T
0.0051817769119995  0.6712982158524350  0.3273252986210233  T  T  T
0.4833860886678455  0.3382413574112330  0.4814503110676929  T  T  T
0.4251515731195422  0.4902361216189238  0.4737993235639372  T  T  T
0.5966509552488304  0.6912650468103387  0.4770943712852130  T  T  T
0.6517891849291724  0.3767398481341834  0.4439861473420201  T  T  T
0.3143893611952858  0.4646360878978579  0.4152424908342129  T  T  T
0.7424691757024027  0.7157345614086725  0.4324939172340012  T  T  T

```

0.3322205686684483	0.4723112553941733	0.5169137547123426	T	T	T
0.6552855951568427	0.7179140906641076	0.5284394291382676	T	T	T
0.5487199364168621	0.7937418959262402	0.4664442563253294	T	T	T
0.7256366114619774	0.5238104871526131	0.4411953865000571	T	T	T
0.3667767608652447	0.1993128486565645	0.4658952420147600	T	T	T
0.5151074282957193	0.3312594423228994	0.5347039069536408	T	T	T

```

dirad4:      -315.046933 eV
2.7200000000000002
  3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
  0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 3 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2217223421949241 0.1103734621299434 0.2194443903281480 T T T
0.5572417157590787 0.1131681479243286 0.2214147107439113 T T T
0.8844063722799281 0.1097841634915210 0.2212817652793564 T T T
0.2224464107330318 0.4482756221190010 0.2212524633264560 T T T
0.5554375327181889 0.4452577224422279 0.2194579260231732 T T T
0.8861435637519738 0.4433883244303752 0.2199279034961789 T T T
0.5562026686027361 0.7771369288048612 0.2195457209936883 T T T
0.8866713045198703 0.7767026743647685 0.2196120131479713 T T T
0.2222104247984506 0.7773535727903168 0.2191231778797399 T T T
0.0011128706001795 0.0015076593158294 0.3282524092929310 T T T
0.3274046967487821 0.0018569053513879 0.3279413319457898 T T T
0.6666654511146238 0.9930577170137522 0.3321206176179865 T T T
0.3263269626706329 0.3270669583676048 0.3274357111091667 T T T
0.6666587139336843 0.3373594830758685 0.3334040822489138 T T T
0.9993257607489283 0.3332939507840784 0.3285920296157383 T T T
0.3357872172838054 0.6662109160324509 0.3319517488256326 T T T
0.6711283281273204 0.6627274981824350 0.3342237854353181 T T T
0.0019953493976717 0.6666597888687417 0.3273381545689680 T T T
0.6796917803337941 0.6096569471406946 0.4355075013733511 T T T
0.5373746508667445 0.6257500258598419 0.4811607923443759 T T T
0.5345972451297439 0.8114336956853890 0.4762785939390818 T T T
0.6501975257798480 0.4189116238455955 0.4419518877196628 T T T
0.3540510188249904 0.4598659838484602 0.4756786862728333 T T T
0.4801179502338210 0.8540178439483255 0.4135014666979945 T T T

```

0.5799885307788964	0.6204731339904871	0.5333618291996957	T	T	T
0.6760460522712339	0.9290643974150109	0.4895426701824797	T	T	T
0.4324806188016425	0.8052182969481693	0.5138412242907808	T	T	T
0.5129886632303584	0.3404979581115745	0.4519523959567299	T	T	T
0.2946231107748231	0.4678916239180918	0.4330611852692210	T	T	T
0.8258270426397617	0.7056248820494005	0.4520072350856841	T	T	T

dirad5: -315.040000 eV
 2.72000000000000020
 3.0000000000000000 .0000000000000000 .0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 .0000000000000000
 .0000000000000000 .0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2228482485432006	.1126215441795072	.2199888492499481	T	T	T
.5552026032913381	.1105252303189606	.2184676543286488	T	T	T
.8888722803377501	.1106641226806306	.2194177811606650	T	T	T
.2241315508887874	.4454444287822644	.2206692872185240	T	T	T
.5535137842067733	.4444297186735994	.2206116443316489	T	T	T
.8898203367172414	.4449784224037309	.2189973067898992	T	T	T
.5534080563883511	.7749063891821351	.2210732224399505	T	T	T
.8878812402472299	.7770364469793645	.2212006138691396	T	T	T
.2232759820283168	.7771995194009953	.2204712240091847	T	T	T
.0010540189371365	.0020053795609515	.3279069887322474	T	T	T
.3347266402782280	.0011254012776379	.3279472750575951	T	T	T
.6673285898276523	.0023412860729654	.3283668139447588	T	T	T
.3322885436260629	.3302608761993407	.3367523371462295	T	T	T
.6688048053854027	.3308018671871158	.3271642090475192	T	T	T
.9979515395531539	.3321740929229609	.3285866385259831	T	T	T
.3323283152169081	.6675949902161011	.3383258473105431	T	T	T
.6701939344115238	.6666819194185110	.3322261662620362	T	T	T
.0014289184487881	.6647446138816384	.3281779679939553	T	T	T
.3465489928482783	.6582912494781831	.4428374870090372	T	T	T
.4409153765729712	.5484540618495691	.4659538134510784	T	T	T
.3433457140758125	.3456648050735133	.4414548024796470	T	T	T
.4533968080101055	.8402233433782075	.4725349494346762	T	T	T
.6395875548149390	.6449792624539061	.4438685123996773	T	T	T
.4226166506308708	.2410573397826967	.4698708344843827	T	T	T

.1974113643414402	.5871895751435141	.4592232401091827	T	T	T
.3963887219082287	.9180699801631801	.4617646393094501	T	T	T
.4489808155827354	.5507917858156539	.5214220219889472	T	T	T
.6944734076088381	.7770655605844182	.4583876288622311	T	T	T
.1944637115904753	.2737386858751593	.4573835389361681	T	T	T
.5582254845627389	.3083444089357594	.4592118999580777	T	T	T

dirad6: -314.760000 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
 36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226961544686192	0.1117864757911757	0.2191125407744358	T	T	T
0.5565340255376865	0.1131513287337429	0.2201005778380527	T	T	T
0.8882095727277826	0.1111964905890329	0.2188798182971232	T	T	T
0.2232517881774129	0.4446434024396648	0.2209864904417659	T	T	T
0.5553717473891741	0.4431760766225446	0.2219098403740687	T	T	T
0.8855493768974992	0.4423134450039105	0.2208147823149860	T	T	T
0.5551764012157751	0.7775144142467102	0.2181383539019157	T	T	T
0.8855272021155431	0.7750809762308271	0.2207578971420422	T	T	T
0.2220458637190587	0.7749239328636175	0.2204558171586529	T	T	T
0.0023884228069238	0.0010321623230500	0.3274360985388405	T	T	T
0.3286575934679811	-0.0031276153005096	0.3267732192694208	T	T	T
0.6703230700041154	0.0043691503391989	0.3276938973132762	T	T	T
0.3274202150357676	0.3277588692686185	0.3321129143044939	T	T	T
0.6714643313299266	0.3354209389429748	0.3349148468643285	T	T	T
-0.0023111577693153	0.3312802257277966	0.3283176896418132	T	T	T
0.3361544743281472	0.6705627357171864	0.3306392542571832	T	T	T
0.6680003253199325	0.6735722679745270	0.3306146848432408	T	T	T
0.0023109823519474	0.6681098166359627	0.3283970490654013	T	T	T
0.6690264479291544	0.4662793901398501	0.4750007790541427	T	T	T
0.4697846697850055	0.4459741549354260	0.4866264409970623	T	T	T
0.4596457269879662	0.6251122661066392	0.4768919609958827	T	T	T
0.6507474315747964	0.3121532451818052	0.4369534175314340	T	T	T
0.3355642730092978	0.2940038597402303	0.4441784902442928	T	T	T

0.5149139105952463	0.7099589681493564	0.4124630453099130	T	T	T
0.4238208840377283	0.3990760308320664	0.5385285845357386	T	T	T
0.5544015444630610	0.7296605545819873	0.5142408370896766	T	T	T
0.3143826526245912	0.5948501849827507	0.4870355407594893	T	T	T
0.4057428974112249	0.2222870748519509	0.4373481304327799	T	T	T
0.7309232875177183	0.4648481067441433	0.5240197843692692	T	T	T
0.7654084989515343	0.6035125892389637	0.4507974055091650	T	T	T

monoradical CHO₂CHOHCH₂OH : -318.838607 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231569302959552	0.1129567900938384	0.2195909768735912	T	T	T
0.5576290025750856	0.1142085865827332	0.2202658579414578	T	T	T
0.8888563021158666	0.1115290086314562	0.2193096453369302	T	T	T
0.2231369863739217	0.4444514290081593	0.2208251673583106	T	T	T
0.5549482883257921	0.4433513319213377	0.2208943404471800	T	T	T
0.8867173264747765	0.4432332059281872	0.2197882059994750	T	T	T
0.5575658586254747	0.7776227323880343	0.2213555864515521	T	T	T
0.8881595718455749	0.7770853484351455	0.2193697166425916	T	T	T
0.2239372320777052	0.7790396481110695	0.2183669525327693	T	T	T
0.9994040511947759	-0.0003408033630516	0.3277784549910763	T	T	T
0.3333818626263151	-0.0023830831631525	0.3279010768886647	T	T	T
0.6684937207775108	0.0043626396898307	0.3290232813452686	T	T	T
0.3279726638527826	0.3294163706330362	0.3320353867194197	T	T	T
0.6683049053557266	0.3408585541064127	0.3378245862677287	T	T	T
0.9971416249327766	0.3333545465550489	0.3286017447910418	T	T	T
0.3326937586727929	0.6709192949113844	0.3283690238905393	T	T	T
0.6670345879963756	0.6708252643462967	0.3313787038902554	T	T	T
0.0073861797239770	0.6694276168251536	0.3273596419585189	T	T	T
0.6663153035216199	0.4108738127211505	0.4379164715562472	T	T	T
0.4808563697400645	0.2981698381014442	0.4751923383990320	T	T	T
0.4855081896495312	0.3679812065720433	0.5472748792873132	T	T	T
0.7200294747725507	0.6113358474410708	0.4441282592693007	T	T	T
0.3247570009970029	0.3051733332115852	0.4426547315551939	T	T	T
0.4617325980699209	0.5307829941961815	0.5466295291942449	T	T	T

0.4445662842822404	0.1488977795925846	0.4751787628596710	T	T	T
0.6178428804206999	0.3979429299636388	0.5723991562561274	T	T	T
0.3656875809121590	0.2592289977918653	0.5759825392090633	T	T	T
0.8567006632738916	0.6888856057668397	0.4330805934842704	T	T	T
0.5727608898400882	0.6308913182199759	0.5234795469083561	T	T	T
0.3211993820961858	0.4123577578169799	0.4644618753505038	T	T	T
0.7759093925590607	0.3905538437135319	0.4623975301408064	T	T	T

monoradical CH₂OHCOHCH₂OH: -318.954214 eV
 2.72000000000000020
 3.0000000000000000 .0000000000000000 .0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 .0000000000000000
 .0000000000000000 .0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2236031403321622	.1138476269132659	.2198921323719448	T	T	T
.5563455506362940	.1125789160713403	.2198183487391086	T	T	T
.8899711801124043	.1130453959832187	.2200071031073654	T	T	T
.2222279583761348	.4426918090745472	.2206595648655693	T	T	T
.5542505450387564	.4425943298142868	.2209112787464482	T	T	T
.8878593846821217	.4420757137852175	.2220708031569097	T	T	T
.5552370131164932	.7772364607865023	.2184327646832966	T	T	T
.8886969916668542	.7771296468559916	.2191327815172254	T	T	T
.2213065942034415	.7775852489821774	.2184626145056637	T	T	T
-.0013392158492754	-.0039838926168980	.3281146930037972	T	T	T
.3309501742076572	-.0042079050503964	.3279274283598117	T	T	T
.6649044180430582	-.0039022896859170	.3278503614406652	T	T	T
.3337841746829803	.3337141785807097	.3373382701752096	T	T	T
.6642079846417422	.3311251799402424	.3324992716490209	T	T	T
.0027617232200629	.3324963728181833	.3323244008036703	T	T	T
.3353630578453930	.6707757994337281	.3273825605219149	T	T	T
.6681735960979537	.6701842137975539	.3280617205058929	T	T	T
.0018147525770623	.6700110372415318	.3278842956933111	T	T	T
.3385110272423673	.3397554806184817	.4434628595015915	T	T	T
.4378978655580424	.2371405472656243	.4708026026895561	T	T	T
.1390496353566629	.2510709433599975	.4720483352900081	T	T	T
.0397967610663563	.3419037824509564	.4439361299855591	T	T	T
.6339203907035598	.3311181836971329	.4483257862434802	T	T	T
.4547993956195473	.5297748553341731	.4685356830021178	T	T	T

.4407164695466215	.2411863391367346	.5261700430813094	T	T	T
.3711787862046663	.0894678881174334	.4536740079406286	T	T	T
.4404079840346561	.6171822360303529	.4381257275391140	T	T	T
.0605845310562492	.0981220135683954	.4604524392281960	T	T	T
.1451761806472759	.2728006960631612	.5267895779826417	T	T	T
.9131849330532400	.2879532946463375	.4634869899824934	T	T	T
.6774061685614560	.4671387771768039	.4538337234893101	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOCH₂OH: -319.028233 eV
 2.7200000000000002
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2228411756485253	0.1130905665859429	0.2205571779238172	T	T	T
0.5561092300201588	0.1101255895227061	0.2204157835627911	T	T	T
0.8863877064281444	0.1099910454950952	0.2207050401664698	T	T	T
0.2217726117787963	0.4440963303277260	0.2190670028254945	T	T	T
0.5553071837182144	0.4441411499546213	0.2190110159703511	T	T	T
0.8885381694229758	0.4439357374812096	0.2189577027125164	T	T	T
0.5560991225787743	0.7789439938519122	0.2194189175848867	T	T	T
0.8857917862011246	0.7757612542555941	0.2209615774177821	T	T	T
0.2226657895709217	0.7753010362699239	0.2212540489528832	T	T	T
0.0023548524154081	0.9998068285708477	0.3284075174262098	T	T	T
0.3298939107768390	0.0002262234664517	0.3283225549594956	T	T	T
0.6687003829179217	0.0034831716796113	0.3341371737148677	T	T	T
0.3294416033702283	0.3265109525563205	0.3300678078369238	T	T	T
0.6694422328372435	0.3326527176831676	0.3282090776410617	T	T	T
0.9961351061544942	0.3329454298922565	0.3281747567055593	T	T	T
0.3310015465400271	0.6680107269942833	0.3300058550047624	T	T	T
0.6696549486368411	0.6668561332528904	0.3298583136858168	T	T	T
0.9988181641027201	0.6657726080327155	0.3289529299091937	T	T	T
0.6624331443784439	0.8362230148249726	0.4827756343022445	T	T	T
0.4876866225395366	0.6395522499413843	0.4755105325701275	T	T	T
0.3092049746451362	0.6276869110207826	0.5055199174566443	T	T	T
0.6459522853067891	0.9824081842951632	0.4474460125070825	T	T	T
0.4568947143568027	0.5806944940028829	0.4068960437951157	T	T	T
0.2804545789190778	0.7810100751106548	0.4854144350820317	T	T	T

0.5166778599562862	0.5395140932107085	0.5033470929827897	T	T	T
0.3234186333789408	0.6369487939342258	0.5603030405798639	T	T	T
0.1852199107758714	0.4904200758532316	0.4924231674451623	T	T	T
0.5159701240669046	0.9570702257523347	0.4582964764185766	T	T	T
0.2195711743184707	0.7515474965799918	0.4405449285238351	T	T	T
0.7875242000625428	0.8364771656828170	0.4622588539523994	T	T	T
0.6865177494356897	0.8746318001492730	0.5362543851704576	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOHCH₂O: -318.840000 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000020031479	0.3333333432674408	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.000000000000000	F	F	F
0.0000000040063028	0.6666666865348816	0.000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2228774618711294	0.1123138720028874	0.2196506081010625	T	T	T
0.5569520842245389	0.1133207090417836	0.2204983163829397	T	T	T
0.8892073782387055	0.1113386397150615	0.2188502880593913	T	T	T
0.2231427894772769	0.4433826798031687	0.2197557665601915	T	T	T
0.5564326081319436	0.4450755536438261	0.2226377747458789	T	T	T
0.8873184144617288	0.4437851811695044	0.2195821999829021	T	T	T
0.5575267297068732	0.7766619746745712	0.2204614477552574	T	T	T
0.8865759916580461	0.7763346215100386	0.2195250687105389	T	T	T
0.2227120744638479	0.7778778923051388	0.2181516342911570	T	T	T
-0.0011940362149949	0.9986018588784764	0.3275440185180886	T	T	T
0.3306066876610666	0.9955118536535742	0.3278497470390640	T	T	T
0.6678309353990795	0.0003928842620578	0.3282542618610544	T	T	T
0.3298676571706533	0.3329979750726564	0.3312324769740637	T	T	T
0.6668008568675238	0.3284350007183043	0.3332659634682094	T	T	T
-0.0007112045247452	0.3327929507083175	0.3274776967090509	T	T	T
0.3307152667629852	0.6691235792397670	0.3276719162862674	T	T	T
0.6652703914830005	0.6693512662034957	0.3346098252808489	T	T	T
0.0057875054830582	0.6700786948923634	0.3270212916290207	T	T	T
0.5664601384568905	0.2940275411234280	0.4919094003054101	T	T	T
0.4379154497457650	0.3808939180250313	0.4931483951258920	T	T	T
0.5451232438576091	0.5971496807177084	0.4848071609022787	T	T	T
0.7114727413510966	0.3759338280164286	0.4416801230866407	T	T	T
0.2899318657329836	0.3006467647488859	0.4425368367587520	T	T	T
0.6979349673067213	0.6669296110673651	0.4385525796137473	T	T	T

0.3645398894096042	0.3471697967678881	0.5419263366663920	T	T	T
0.6051971678836441	0.6596572570140169	0.5341887921432372	T	T	T
0.4423438149364417	0.6421017406756728	0.4710180795927496	T	T	T
0.7374244006283480	0.5194822594472968	0.4396494311538426	T	T	T
0.2233068743187136	0.1616105881491693	0.4442585242545152	T	T	T
0.4834012677282351	0.1398441388141948	0.4839575653028240	T	T	T
0.6370034552180360	0.3193911450478955	0.5410765720685581	T	T	T

Glycerol dehydrogenation intermediates on Pt catalyst

Glycerol: -283.951657 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2216401481187423	0.1108622005928281	0.2202805526057778	T	T	T
0.5540440146795976	0.1103896317910378	0.2203226686491073	T	T	T
0.8873922687799772	0.1103791618704271	0.2204790171305606	T	T	T
0.2209389682873497	0.4437221203542345	0.2206825402125812	T	T	T
0.5551095900771569	0.4455590773724756	0.2215618302942368	T	T	T
0.8875704291511792	0.4438600045869850	0.2206092868639865	T	T	T
0.5546928556943977	0.7758687957187346	0.2216288984053431	T	T	T
0.8862318083016538	0.7762501415320268	0.2213142836465098	T	T	T
0.2209553810956329	0.7774218285100425	0.2202135427242304	T	T	T
0.9975129494244298	0.9996315401421407	0.3314303252982367	T	T	T
0.3294548285669061	0.9974046048806169	0.3321103016771000	T	T	T
0.6633669903660746	0.9994480536133550	0.3317108739910732	T	T	T
0.3279303921691261	0.3291049983440958	0.3321656014416456	T	T	T
0.6634369368130391	0.3294216017416651	0.3321161417506762	T	T	T
0.9964467743776316	0.3314621462433918	0.3320301521518873	T	T	T
0.3281888020239878	0.6652038020024333	0.3321953388001620	T	T	T
0.6615725081058812	0.6634445373157227	0.3355060058344277	T	T	T
0.9978649945493929	0.6647812655614453	0.3319200922756651	T	T	T
0.4059630670242045	0.4524469279955349	0.4910787771373418	T	T	T
0.6113745034397996	0.5631671219220911	0.5005374054269811	T	T	T
0.7063619401776430	0.4508804787737643	0.5009034985142010	T	T	T
0.3195664659079577	0.5592753311357288	0.4942870371124093	T	T	T

0.6924658372739381	0.7026779531893894	0.4505745451482046	T	T	T
0.8972901399187295	0.5806379093141337	0.5057782473545974	T	T	T
0.3463571633631085	0.3494665738160027	0.5295403455750044	T	T	T
0.3756075868950479	0.3778133652394020	0.4439048004025097	T	T	T
0.3500401642903844	0.6324944994829003	0.4544973223492417	T	T	T
0.6395642860160747	0.6386434538391051	0.5465485949471063	T	T	T
0.8245728938682485	0.7474047538105975	0.4534143342566753	T	T	T
0.6584749512354233	0.3550186617562107	0.5419804654036531	T	T	T
0.9697559741142293	0.5240203371042498	0.4946701933244085	T	T	T
0.6758848291821323	0.3715086926419735	0.4552553600760785	T	T	T

GAL: -276.060811 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2226548617388594	0.1154653116027271	0.2206404489697903	T	T	T
0.5574735406990979	0.1176078635568262	0.2220484855961435	T	T	T
0.8885695812849047	0.1158995823699728	0.2207284696328879	T	T	T
0.2231523575768009	0.4474565869229074	0.2215376845703491	T	T	T
0.5545022906732694	0.4470548583627011	0.2217610385043774	T	T	T
0.8866757749740853	0.4479505220343613	0.2214760659576742	T	T	T
0.5591197151186390	0.7805724300929884	0.2236131347163332	T	T	T
0.8884414535631615	0.7812599156109192	0.2206935162824328	T	T	T
0.2246087562137792	0.7819104885432341	0.2191997490311311	T	T	T
-0.0013742002226607	0.0094566103387096	0.3309997523095641	T	T	T
0.3348215607761339	0.0083288042377681	0.3314531509825110	T	T	T
0.6674203191992897	0.0138847808632513	0.3334956728758814	T	T	T
0.3263376262812922	0.3405458318203349	0.3335411278386068	T	T	T
0.6659426768095879	0.3462347763891148	0.3396617604667479	T	T	T
-0.0025733716622545	0.3434403322028531	0.3323468337780856	T	T	T
0.3331552886529444	0.6788736945819862	0.3326111698921392	T	T	T
0.6675063526331639	0.6796500506367117	0.3355891367742626	T	T	T
0.0074163284839168	0.6793831001667663	0.3299195031205620	T	T	T
0.6659111304944425	0.4417794774839564	0.4348427163724944	T	T	T
0.4899015129599431	0.3213072169669895	0.4722857976526146	T	T	T
0.5054662069772522	0.4015210377335071	0.5404886720101805	T	T	T
0.7032071762342337	0.6187807234296029	0.4308346347768531	T	T	T
0.3318985676762695	0.3173351236745048	0.4433977872636035	T	T	T
0.4874309901362718	0.5605706608303791	0.5359688155353148	T	T	T

0.4623030071798441	0.1799465803740164	0.4742064262540651	T	T	T
0.6354627097448121	0.4316818925491221	0.5631897984881943	T	T	T
0.3923901611975955	0.3034581662578785	0.5708763019595049	T	T	T
0.5847263441339635	0.6441224942938245	0.5061614574493565	T	T	T
0.3316197259210431	0.4249731347018683	0.4622920562595266	T	T	T
0.7812977097047679	0.4318723045954271	0.4557035196770169	T	T	T

DHA: -276.014249 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2234752295542279	0.1133582577589665	0.2218031252802525	T	T	T
0.5560540139191466	0.1116169999097938	0.2205595518367925	T	T	T
0.8892960258865343	0.1116752653626937	0.2205740386425459	T	T	T
0.2235218128710777	0.4440345769500481	0.2217765804525725	T	T	T
0.5541080850994006	0.4440967675957863	0.2217149753926565	T	T	T
0.8895360048065032	0.4454024919300237	0.2201519863476094	T	T	T
0.5561097176544489	0.7785043733534145	0.2205214357407501	T	T	T
0.8895803442071680	0.7782254030251454	0.2202523248970061	T	T	T
0.2222489246167849	0.7782058127743772	0.2201787078774844	T	T	T
-0.0008889748920531	-0.0004044867849381	0.3319331578650379	T	T	T
0.3348927616313402	-0.0001583850384427	0.3317153657350897	T	T	T
0.6677750005880154	0.0012912260240256	0.3323295124355073	T	T	T
0.3339683659611147	0.3350079062235108	0.3360255355877405	T	T	T
0.6694705653379934	0.3343474126709132	0.3316971273691401	T	T	T
-0.0012844987268508	0.3343204294814017	0.3319174711834770	T	T	T
0.3347848743963700	0.6701271422272649	0.3315333916590277	T	T	T
0.6702858901694335	0.6702324293468049	0.3319573488757985	T	T	T
0.0012639541611938	0.6681554614685872	0.3321641429011082	T	T	T
0.2326741769752699	0.3721602697133787	0.4882278701177438	T	T	T
0.3239730015042824	0.5690361325546761	0.5123968724343499	T	T	T
0.5284039068685820	0.6998018915727041	0.5047855901188865	T	T	T
0.3410474350011830	0.3256370014751788	0.4470207878112113	T	T	T
0.2299761198063935	0.6215292107436807	0.5392969405397701	T	T	T
0.6314703728429433	0.6101783618465185	0.4908401610747086	T	T	T

0.1078991641405858	0.3434452080644321	0.4620263047175431	T	T	T
0.1912755315593024	0.2828404448202998	0.5311546114056458	T	T	T
0.4713133096311258	0.4134768126690112	0.4592565218878638	T	T	T
0.5445658285787789	0.7958906504497560	0.4657707399669021	T	T	T
0.5780846965799261	0.7780417219579850	0.5499112374409267	T	T	T
0.7097723046312263	0.6689024140924832	0.4528787380082465	T	T	T

Enol: -276.604422 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000040063028	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111119389534	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.1111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.1111111119389534	F	F	F
0.2253839151127409	0.1159126082474743	0.2230554907783010	T	T	T
0.5559415359800093	0.1112949057269232	0.2207195855788101	T	T	T
0.8892935093453261	0.1108953950875783	0.2202878954089720	T	T	T
0.2242034256062568	0.4459860136704419	0.2223845000032491	T	T	T
0.5539447083134649	0.4439199584120373	0.2221328916138014	T	T	T
0.8896297595829245	0.4461993920983185	0.2200628388589945	T	T	T
0.5544523387105685	0.7772122038793305	0.2221053605050143	T	T	T
0.8912043778804113	0.7797489465109644	0.2197764887002325	T	T	T
0.2254570607353228	0.7780061161604028	0.2225120462340022	T	T	T
0.0037058594667440	0.0026023536335368	0.3326901557870878	T	T	T
0.3370559029947445	0.0032928946812490	0.3331513831986816	T	T	T
0.6683789062369556	0.0018712733139270	0.3323325786407474	T	T	T
0.3354085402789492	0.3398000839920965	0.3426531962657605	T	T	T
0.6695227331080654	0.3338948441813546	0.3319416758415968	T	T	T
-0.0014737541344723	0.3337598693430837	0.3304825061048788	T	T	T
0.3336579556033705	0.6653994792277441	0.3416438460461994	T	T	T
0.6745499617955284	0.6722045482055888	0.3307295923416957	T	T	T
0.0034969355043720	0.6695674788236146	0.3317591976998824	T	T	T
0.3706665784233434	0.4332372261272973	0.4400347236760780	T	T	T
0.3333069916034053	0.5915617340613913	0.4410752908933667	T	T	T
0.2485899098393377	0.2734634309606802	0.4852884769725639	T	T	T
0.0578421076061601	0.2091066998798586	0.4782458547460878	T	T	T
0.1787662603452690	0.5645046000539161	0.4718418751423079	T	T	T
0.5556651171403109	0.5064911254289899	0.4571526037409972	T	T	T

0.4524734392942845	0.7191788215389120	0.4573735051943832	T	T	T
0.5972995815626031	0.4220612957862552	0.4428901228873249	T	T	T
0.0901844733200593	0.4300118920824341	0.4728720909876976	T	T	T
0.2795314629820320	0.1624039375844404	0.4795636777143339	T	T	T
0.2832059047223848	0.3260993612905365	0.5349843599596603	T	T	T
0.0169146032681222	0.1437160222442041	0.4363008267454115	T	T	T

dirad1: -276.026043 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2230745405076099	0.1128358915505375	0.2217542127055686	T	T	T
0.5557850916537974	0.1121417366543911	0.2210086998520155	T	T	T
0.8887962593923843	0.1104337922297139	0.2203552714214085	T	T	T
0.2229004563297117	0.4418272660627071	0.2217880445305708	T	T	T
0.5548435565083464	0.4436865838366559	0.2234965113073424	T	T	T
0.8863101591140263	0.4423006960131395	0.2211671915151326	T	T	T
0.5555732052028288	0.7755854546276717	0.2213631003075509	T	T	T
0.8858229356668726	0.7758510650569432	0.2219223824048876	T	T	T
0.2213904699146173	0.7767876278132860	0.2190927143196354	T	T	T
0.0006330662685078	0.0003322027906430	0.3317397821145943	T	T	T
0.3292155787368951	0.9949215900574205	0.3314221506284074	T	T	T
0.6660788094984835	-0.0014039205485135	0.3310596853259021	T	T	T
0.3314975187503815	0.3300387939284334	0.3409656351115961	T	T	T
0.6671037785873403	0.3283980605622538	0.3343355355104085	T	T	T
0.0002414326481564	0.3314166339373858	0.3320678642998226	T	T	T
0.3284917123607399	0.6651708595268736	0.3311098818909068	T	T	T
0.6663252096225516	0.6684476771319751	0.3358674000667624	T	T	T
0.0023820718938723	0.6667501696924335	0.3313261799004013	T	T	T
0.4649149290207483	0.2582115792712975	0.4672327807040351	T	T	T
0.3619339008792661	0.3526172759439050	0.4429883927431679	T	T	T
0.4692632113401873	0.5583907686818341	0.4598265183806152	T	T	T
0.6500398364637094	0.3463408918244214	0.4432758644884743	T	T	T
0.1908214067464200	0.2629838403794809	0.4722075598555435	T	T	T
0.6496758550233809	0.6474108369077446	0.4358305124640754	T	T	T

0.4787662334036513	0.5702074368190672	0.5132377952190783	T	T	T
0.3915902088023310	0.6254268219150627	0.4430573983201399	T	T	T
0.6894386678112644	0.4827294100022451	0.4442820966171106	T	T	T
0.1179386628524553	0.3160961795782765	0.4564206595731452	T	T	T
0.3956062895207851	0.1137806547132468	0.4527371542476572	T	T	T
0.4709490053714976	0.2661864823612061	0.5205025454836305	T	T	T

```

dirad2:      -275.755986 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 3 6      # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2216688552381307 0.1121222030073916 0.2220346745480731 T T T
0.5548099193920123 0.1123573725996089 0.2216432259571803 T T T
0.8873563024087567 0.1109267433506337 0.2205483489571200 T T T
0.2226351802992769 0.4415817301765282 0.2228991862721768 T T T
0.5541526099281051 0.4427849964622369 0.2227888395398086 T T T
0.8845257745660802 0.4423071859501669 0.2220256172891909 T T T
0.5542427076131989 0.7767179788138026 0.2202417030242625 T T T
0.8865866630507820 0.7764114465100818 0.2203765151139149 T T T
0.2199115150226019 0.7757031023690345 0.2194235971113447 T T T
0.9948784043835649 0.9978899481286059 0.3314709215704545 T T T
0.3274107767856828 0.9935912931823530 0.3306017147287565 T T T
0.6628080740787718 0.9986356657553889 0.3316377992865450 T T T
0.3276141209951973 0.3316503666229038 0.3379268648066714 T T T
0.6616852456540346 0.3312262879821603 0.3408717192527410 T T T
0.9934577501220812 0.3313144069271183 0.3324668290189481 T T T
0.3278085001995009 0.6663285563976727 0.3315886850429589 T T T
0.6647736565629536 0.6689183737975767 0.3321846411588146 T T T
0.9965613192017387 0.6645760033921969 0.3318553123543280 T T T
0.6202630668086931 0.3009452854473599 0.4411307097672777 T T T
0.5008156268658771 0.3749944453892513 0.4682638739138512 T T T
0.6004435439233184 0.5841414374065619 0.4770905969047168 T T T
0.7867384458167773 0.3814566543796077 0.4745140988184440 T T T
0.3344495183018306 0.3089410766570317 0.4356903068873332 T T T
0.7384360963161368 0.6553883842393603 0.5233220360525225 T T T

```

0.4627333053128088	0.3182135145333643	0.5179217042798736	T	T	T
0.5006686842001815	0.6265473548062229	0.4889599095576202	T	T	T
0.6582530944578536	0.6479891806274721	0.4265948791433036	T	T	T
0.8607731307393213	0.3297498881106055	0.4587639963081062	T	T	T
0.8140322803223928	0.5988918721980656	0.5164201874709454	T	T	T
0.5474687731613680	0.1505497050570320	0.4449960646533287	T	T	T

dirad3: -275.262471 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000040063028	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2202159310490432	0.1096926857161263	0.2214007069748998	T	T	T
0.5537748898702181	0.1113706446940036	0.2218234789454373	T	T	T
0.8852314621575799	0.1077183182170990	0.2200714773873963	T	T	T
0.2199304670990923	0.4409661659991048	0.2213991035849866	T	T	T
0.5510067856370970	0.4410687148937372	0.2248284462674116	T	T	T
0.8836643750403170	0.4407723393230794	0.2203728267460114	T	T	T
0.5536114578375884	0.7726877253570148	0.222273873838028	T	T	T
0.8836453893869858	0.7731328569939240	0.2206013772993296	T	T	T
0.2204849332887009	0.7755315997331839	0.2189010366862273	T	T	T
0.9914442718939789	0.9921662442392115	0.3304297495236450	T	T	T
0.3227530517872046	0.9880550328326750	0.3316822612480320	T	T	T
0.6588379091975949	0.9923551075312914	0.3317699016480040	T	T	T
0.3234964110727206	0.3246665168730009	0.3366893466829388	T	T	T
0.6576987860226089	0.3193878236511484	0.3354699110747029	T	T	T
0.9915993092498232	0.3259362461383357	0.3305349838371918	T	T	T
0.3226455563471347	0.6615786422127703	0.3315372024915006	T	T	T
0.6572567707574880	0.6629732942691244	0.3369580041057077	T	T	T
0.9960493506955990	0.6616469549015197	0.3298679400542307	T	T	T
0.5324899627060693	0.2854317117041543	0.4833631835605978	T	T	T
0.4162718991911308	0.3784024470255300	0.4791233942813004	T	T	T
0.5338927548476945	0.5889985929569572	0.4772023121460541	T	T	T
0.6899115253414714	0.3654037038763322	0.4406766601494231	T	T	T
0.2770373170338941	0.3029121171374817	0.4326392087053006	T	T	T
0.6893647596490264	0.6582941264408380	0.4359548595226912	T	T	T

0.3396706139925738	0.3461951476371362	0.5253456445622176	T	T	T
0.5892841181828161	0.6378167936203455	0.5261397290232667	T	T	T
0.4452108187438780	0.6453663952322317	0.4643141157527366	T	T	T
0.7247056793490113	0.5028696650242414	0.4393334686762429	T	T	T
0.4491111103115593	0.1396764603679113	0.4717528099522631	T	T	T
0.5872529476223497	0.3002024875941336	0.5326907333439809	T	T	T

dirad4: -275.886414 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000020031479	0.3333333432674408	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333432674408	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666865348816	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000040063028	0.6666666865348816	0.0000000000000000	F	F	F
0.111111119389534	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.222222238779068	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.5555555820465088	0.111111119389534	F	F	F
0.4444444477558136	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.7777777910232544	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.1111111044883728	0.8888888955116272	0.111111119389534	F	F	F
0.2262252109864375	0.1155101800708646	0.2215208229077079	T	T	T
0.5590347174636143	0.1126382588797983	0.2205387887894423	T	T	T
0.8926668861814476	0.1122370410753201	0.2200445911383992	T	T	T
0.2278597443032230	0.4463074979798625	0.2240514288052315	T	T	T
0.5568554563240535	0.4445305262036512	0.2216958548684972	T	T	T
0.8904172136945673	0.4435232097847613	0.2214642266494047	T	T	T
0.5562267718153967	0.7772936934314529	0.2218848066157467	T	T	T
0.8924542849419284	0.7789627546320899	0.2196263155172978	T	T	T
0.2250539988086789	0.7759859666191836	0.2208780669718028	T	T	T
0.0069922583247924	0.0015872794441190	0.3319160146524929	T	T	T
0.3375851504732707	0.9992678083237200	0.3297122070623726	T	T	T
0.6757723208560611	0.0030951666698807	0.3312565886755602	T	T	T
0.3436288478061113	0.3345877026647773	0.3421019335678923	T	T	T
0.6735665519586808	0.3344571928565135	0.3332860932150262	T	T	T
0.0063224680943799	0.3321226942545982	0.3325350106383514	T	T	T
0.3393226334613188	0.6656833786740556	0.3376210737991187	T	T	T
0.6780084057690414	0.6721368178912798	0.3308078021949682	T	T	T
0.0049171853443119	0.6685220163948447	0.3314745126843163	T	T	T
0.3957984061810436	0.4642216545529674	0.4870102403385893	T	T	T
0.2607606123635807	0.5320963609296411	0.4738986331724800	T	T	T
0.3970626116072652	0.3220074830097452	0.4406301807438155	T	T	T
0.5698037886463456	0.3343971471883972	0.4463500392049472	T	T	T
0.3409649347680251	0.6904397165645276	0.4353765124071797	T	T	T
0.5764401063576098	0.6178772024520102	0.4908767830031051	T	T	T

0.1313132201869356	0.4210612626372005	0.4536214699083851	T	T	T
0.2291248831447777	0.5743833885735017	0.5203740492311387	T	T	T
0.5710704506119519	0.7128209686107200	0.4644973818565020	T	T	T
0.2916935965319934	0.1818905343273217	0.4528388983410397	T	T	T
0.3643887727705515	0.3977861647819000	0.5349223792745182	T	T	T
0.6519070985241643	0.4649797286728151	0.4585251232344199	T	T	T

dirad5: -276.026043 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533200 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495301

36 3 3 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2230745405076099	0.1128358915505375	0.2217542127055686	T	T	T
0.5557850916537974	0.1121417366543911	0.2210086998520155	T	T	T
0.8887962593923843	0.1104337922297139	0.2203552714214085	T	T	T
0.2229004563297117	0.4418272660627071	0.2217880445305708	T	T	T
0.5548435565083464	0.4436865838366559	0.2234965113073424	T	T	T
0.8863101591140263	0.4423006960131395	0.2211671915151326	T	T	T
0.5555732052028288	0.7755854546276717	0.2213631003075509	T	T	T
0.8858229356668726	0.7758510650569432	0.2219223824048876	T	T	T
0.2213904699146173	0.7767876278132860	0.2190927143196354	T	T	T
0.0006330662685078	0.0003322027906430	0.3317397821145943	T	T	T
0.3292155787368951	0.9949215900574205	0.3314221506284074	T	T	T
0.6660788094984835	-0.0014039205485135	0.3310596853259021	T	T	T
0.3314975187503815	0.3300387939284334	0.3409656351115961	T	T	T
0.6671037785873403	0.3283980605622538	0.3343355355104085	T	T	T
0.0002414326481564	0.3314166339373858	0.3320678642998226	T	T	T
0.3284917123607399	0.6651708595268736	0.3311098818909068	T	T	T
0.6663252096225516	0.6684476771319751	0.3358674000667624	T	T	T
0.0023820718938723	0.6667501696924335	0.3313261799004013	T	T	T
0.4649149290207483	0.2582115792712975	0.4672327807040351	T	T	T
0.3619339008792661	0.3526172759439050	0.4429883927431679	T	T	T
0.4692632113401873	0.5583907686818341	0.4598265183806152	T	T	T
0.6500398364637094	0.3463408918244214	0.4432758644884743	T	T	T
0.1908214067464200	0.2629838403794809	0.4722075598555435	T	T	T
0.6496758550233809	0.6474108369077446	0.4358305124640754	T	T	T

0.4787662334036513	0.5702074368190672	0.5132377952190783	T	T	T
0.3915902088023310	0.6254268219150627	0.4430573983201399	T	T	T
0.6894386678112644	0.4827294100022451	0.4442820966171106	T	T	T
0.1179386628524553	0.3160961795782765	0.4564206595731452	T	T	T
0.3956062895207851	0.1137806547132468	0.4527371542476572	T	T	T
0.4709490053714976	0.2661864823612061	0.5205025454836305	T	T	T

dirad6: -274.852791 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336
 36 3 3 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2626111117304999	0.1902895379844419	0.2302233958347825	T	T	T
0.5964502170588889	0.1922642275279032	0.2311540775605439	T	T	T
0.9292211415640288	0.1928608776437067	0.2305335093485911	T	T	T
0.2635990728738072	0.5241521176548632	0.2319253717282136	T	T	T
0.5969141461239154	0.5253830569946859	0.2347215095850534	T	T	T
0.9265130136218601	0.5263382477812560	0.2343566534241424	T	T	T
0.5950051583797837	0.8582342420107737	0.2322233372854612	T	T	T
0.9302408617493871	0.8590413551874382	0.2304300582471648	T	T	T
0.2665198637286409	0.8568833531244693	0.2350652921451075	T	T	T
0.0880163770830325	0.1809781405182330	0.3511559852419213	T	T	T
0.4219525372191846	0.1810742306801388	0.3511595828831064	T	T	T
0.7577929232421945	0.1844583746302469	0.3517574867915230	T	T	T
0.4172522381924994	0.5127663358280664	0.3532553056656632	T	T	T
0.7578632132516909	0.5192089327897913	0.3598918304365701	T	T	T
0.0869979172091919	0.5144689973424894	0.3533822756724780	T	T	T
0.4225562296302655	0.8495923554712331	0.3592989702807497	T	T	T
0.7590120354171879	0.8514667905155425	0.3504296818309116	T	T	T
0.0912571726266803	0.8506384824560579	0.3530269218512799	T	T	T
0.7189666571380982	0.6840041758910589	0.4909366395384208	T	T	T
0.5100995518691789	0.6130109965762633	0.5097760884731254	T	T	T
0.4356626839948824	0.7527798844902741	0.5078426088866271	T	T	T
0.7399677515122626	0.5360380726123843	0.4645763432776502	T	T	T
0.3942637828912642	0.4533074743501435	0.4668755485874307	T	T	T

0.5032958401506441	0.8912949565741528	0.4575929262999058	T	T	T
0.4849079166417595	0.5548708203035820	0.5611163895574499	T	T	T
0.4783548885216095	0.8332412797410765	0.5553973726033333	T	T	T
0.2792257675758224	0.6668901901090735	0.5081954744370368	T	T	T
0.4725438114130445	0.3905430152280558	0.4630131599734138	T	T	T
0.8123336182896393	0.7452368815229217	0.5348994265776643	T	T	T
0.7672698133926069	0.8058810802539649	0.4542820400481393	T	T	T

monoradical CHO₂CHOHCH₂OH : -280.246284 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2209198100094328	0.1128866987351515	0.2212391847424633	T	T	T
0.5548456124408251	0.1142673354623385	0.2222547140094295	T	T	T
0.8867403668851840	0.1121106047421712	0.2207332967308631	T	T	T
0.2213216938872481	0.4436224186591018	0.2216435359913466	T	T	T
0.5537894801541685	0.4436723670955992	0.2225580177161232	T	T	T
0.8842189712795628	0.4439852663747813	0.2223250576987447	T	T	T
0.5534847583263266	0.7786450327881043	0.2202530849772323	T	T	T
0.8873782643888578	0.7784358967912176	0.2201535568671870	T	T	T
0.2205645320307423	0.7776660297191158	0.2196104986453500	T	T	T
0.9940704187787005	-0.0001927439958713	0.3317137473076213	T	T	T
0.3286861294208174	-0.0023117155588900	0.3312523338593277	T	T	T
0.6625329721214592	0.0010990995402662	0.3323116375568401	T	T	T
0.3275937500753711	0.3351542166962332	0.3344997110995827	T	T	T
0.6614511985223934	0.3339090102735278	0.3422434706408480	T	T	T
0.9940542359174098	0.3344786672698133	0.3323769982497574	T	T	T
0.3293552419138832	0.6695606761150344	0.3323315369236064	T	T	T
0.6638681556578431	0.6706775182715665	0.3310919815183240	T	T	T
0.9978384901158186	0.6689442267176720	0.3319658615811924	T	T	T
0.6547651657619601	0.3490971361100235	0.4430236367672042	T	T	T
0.4645040155669011	0.2566172333299639	0.4727988716887639	T	T	T
0.4706406422950830	0.2923221370754385	0.5460194333971166	T	T	T
0.7502406438342036	0.5323354508381243	0.4645459039919398	T	T	T
0.3444357534941825	0.3157077032550614	0.4459256226038033	T	T	T
0.4990565394604232	0.4713975656125157	0.5578868478336725	T	T	T

0.3992671876876778	0.1093004820975272	0.4628876348753493	T	T	T
0.5763093718546248	0.2717509819659225	0.5691449743055611	T	T	T
0.3377815126341113	0.1967613318185325	0.5674060332432920	T	T	T
0.8675738520105757	0.5974465485244534	0.4410338459892350	T	T	T
0.6215542150904696	0.5568778505812462	0.5415663682143135	T	T	T
0.3736379843414891	0.4287655556784647	0.4692925742712010	T	T	T
0.7255515246601826	0.2749973794200808	0.4576946347976573	T	T	T

monoradical CH₂OHCOHCH₂OH: -280.246221 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2242444649255737	0.1161909235599771	0.2222676356558966	T	T	T
0.5557510603814746	0.1137195417656019	0.2206442484154260	T	T	T
0.8896240856053096	0.1148175855119423	0.2211955650982728	T	T	T
0.2225972354425463	0.4446934394638771	0.2229326080329696	T	T	T
0.5526401002674040	0.4449833197374265	0.2225483233022547	T	T	T
0.8903739825589519	0.4452545826057341	0.2218454426361856	T	T	T
0.5559909801670990	0.7798548024685438	0.2199845824799769	T	T	T
0.8885866770344729	0.7788326335615405	0.2197665568455693	T	T	T
0.2219607581079980	0.7800610320774052	0.2200388239064992	T	T	T
-0.0007512260149735	0.0007175341501955	0.3307304996658148	T	T	T
0.3339780678016254	0.0038570855840760	0.3319876062753216	T	T	T
0.6652755773707020	0.0031556863470925	0.3318086119852769	T	T	T
0.3328690790032505	0.3367530967700885	0.3441631601560350	T	T	T
0.6656078233287879	0.3370009722260401	0.3327846672028799	T	T	T
-0.0010030201999891	0.3372295997735272	0.3352590916401240	T	T	T
0.3345110143465289	0.6735384929410294	0.3308260178033817	T	T	T
0.6670321266200167	0.6711934111243992	0.3314856476107555	T	T	T
-0.0000992656360890	0.6718550511490433	0.3322582551363821	T	T	T
0.3382935035817036	0.3603506411589381	0.4464263666622132	T	T	T
0.2204940459513401	0.4410001294540178	0.4686574869540790	T	T	T
0.2774211521119465	0.1753767042520448	0.4799632459351159	T	T	T
0.0843222021880929	0.0535829120878150	0.4789277864636799	T	T	T
0.0331001565674329	0.3361226726910584	0.4477974635709714	T	T	T
0.5171699459080203	0.4877034351705986	0.4653367954530085	T	T	T

0.2220790354356302	0.4461330518342166	0.5219690761724733	T	T	T
0.5998049251642114	0.4443761329270326	0.4509470560440491	T	T	T
-0.0024943921484793	0.2075052681478921	0.4584458691606373	T	T	T
0.3516390067695435	0.1100630651106076	0.4599857529501208	T	T	T
0.3142160944884708	0.2067721323209474	0.5312889518442961	T	T	T
0.0531352545095482	-0.0179478336364340	0.4381083329081644	T	T	T
0.2761687762477183	0.5807188883734161	0.4499453901762124	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOCH₂OH: -279.524727 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 3 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2211925494506524	0.1096905723175096	0.2193264958829521	T	T	T
0.5575852965371354	0.1132918514315498	0.2211307406934575	T	T	T
0.8886165574734556	0.1130809119786141	0.2215513576507513	T	T	T
0.2237755708489940	0.4471107329057565	0.2196737283166143	T	T	T
0.5568290548374043	0.4470994100620151	0.2196782539699935	T	T	T
0.8910993740552168	0.4484843978234192	0.2206559409401148	T	T	T
0.5577486499497718	0.7816868651363920	0.2210444697338603	T	T	T
0.8861314763229643	0.7774150327569648	0.2236660194501685	T	T	T
0.2247900832015566	0.7776409482255916	0.2235078623699949	T	T	T
0.0078510803426797	0.0100911185030516	0.3334413369674418	T	T	T
0.3364754146906641	0.0106788250170523	0.3330676981082679	T	T	T
0.6754453476332525	0.0162385342288936	0.3342676304983606	T	T	T
0.3318244234286441	0.3297696244439883	0.3279708236554520	T	T	T
0.6723151750326417	0.3440476427053586	0.3313423865679975	T	T	T
0.0063469426481340	0.3440564596823474	0.3315482440057151	T	T	T
0.3339279902491082	0.6813429085454734	0.3330715486583263	T	T	T
0.6825063209034599	0.6808128631919671	0.3332167894871568	T	T	T
0.0047693371703180	0.6747334276507221	0.3350692690889971	T	T	T
0.6816300329798874	0.8718660383397437	0.4799350563328340	T	T	T
0.5153818145416147	0.6810692707184912	0.4737579398090537	T	T	T
0.3428413274653957	0.6663510847708028	0.5039895402599832	T	T	T
0.6596830882959462	0.0098424624438666	0.4465940425419426	T	T	T
0.4789854682831285	0.6166561756906025	0.4085913187709191	T	T	T
0.3097522614639067	0.8108942351915840	0.4847912341925942	T	T	T

0.5468643126768490	0.5870575869410477	0.5007150516366008	T	T	T
0.3601768930521267	0.6775203304134931	0.5567051929932206	T	T	T
0.2245961843603115	0.5322099987306824	0.4923434337020611	T	T	T
0.5323457931124376	0.9803857704954817	0.4567518780989192	T	T	T
0.2431368670604749	0.7777029472392507	0.4432658433466001	T	T	T
0.8027774002425774	0.8751283572698049	0.4591570923568506	T	T	T
0.7073270668109370	0.9095818162478271	0.5314261474180246	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOHCH₂O: -279.532021 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533200 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495301

36 3 3 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2188425046510937	0.1086621714109953	0.2199658003544841	T	T	T
0.5531415541050360	0.1114767984501018	0.2218155359837684	T	T	T
0.8844987204480647	0.1081110777028134	0.2204310265552198	T	T	T
0.2187313082538761	0.4416520961496341	0.2200997965312697	T	T	T
0.5535242648919180	0.4429183005669532	0.2231836870231299	T	T	T
0.8839847089355585	0.4410966697319681	0.2210545964359286	T	T	T
0.5530124170542650	0.7732850417993838	0.2224408062923400	T	T	T
0.8836272600576852	0.7743753096569848	0.2214166422416634	T	T	T
0.2199131418000368	0.7759096746148716	0.2193404822918639	T	T	T
-0.0078890867079768	-0.0049527377183869	0.3313531417164680	T	T	T
0.3219256429101288	0.9906070847232488	0.3321830219051606	T	T	T
0.6576981387126631	-0.0060643735707078	0.3321660195217254	T	T	T
0.3196267895944979	0.3240132530026556	0.3311634196325272	T	T	T
0.6562943397766818	0.3213283410440098	0.3356955897471342	T	T	T
-0.0083159629924226	0.3268333210922679	0.3317103132302109	T	T	T
0.3215564486125688	0.6609122343320702	0.3319831217824235	T	T	T
0.6561199051153347	0.6644076765450539	0.3375646714683631	T	T	T
-0.0052181294230212	0.6624723749593029	0.3303319776296399	T	T	T
0.5308759204398737	0.2914278988129311	0.4879458032510353	T	T	T
0.4164301303123731	0.3830666329545069	0.4784420505657012	T	T	T
0.5300434663537444	0.5928754038973473	0.4783564164850756	T	T	T
0.6869260949891561	0.3663957185107740	0.4450187397210742	T	T	T
0.2808780125858391	0.3150368480951689	0.5270660822262423	T	T	T
0.6855378119453495	0.6632566176544246	0.4372763421303011	T	T	T

0.5830840889192166	0.6384880299516671	0.5277664088805385	T	T	T
0.4414512542082777	0.6500437622378411	0.4659121694860390	T	T	T
0.7242681441280820	0.5026574898412302	0.4421884693859637	T	T	T
0.1894182769112745	0.3491030802872352	0.5168389416582495	T	T	T
0.4488893553643807	0.1439675862136922	0.4793777687362217	T	T	T
0.5830818510044739	0.3144954519125855	0.5378839878170599	T	T	T
0.3490257992765662	0.3397436883106235	0.4288355802679104	T	T	T

1,2-PDO dehydrogenation intermediates on Rh catalyst

1,2-PDO: -316.031824 eV

2.72000000000000020

3.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000
-1.5000000000000000	2.5980762113533160	.0000000000000000
.0000000000000000	.0000000000000000	7.3484692283495336

36 3 2 8 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

.0000000000000000	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.0000000000000000	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.3333333333333357	.0000000000000000	F	F	F
.3333333333333357	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.6666666666666643	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.0000000000000000	.6666666666666643	.0000000000000000	F	F	F
.1111111111111143	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.2222222222222214	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.5555555555555571	.11111111111111072	F	F	F
.4444444444444429	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.7777777777777786	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.1111111111111143	.8888888888888857	.11111111111111072	F	F	F
.2226701748520025	.1114272540277696	.2184001577926138	T	T	T
.5552150861327563	.1107865872046351	.2191376343339433	T	T	T
.8889642340270061	.1110094041148691	.2190829266881753	T	T	T
.2230377942659173	.4459661239532408	.2204123423531596	T	T	T
.5565103050040984	.4460413510878988	.2205433344860225	T	T	T
.8891658328147578	.4447133818953110	.2194516676991623	T	T	T
.5551112380951052	.7766009078970414	.2211230557019140	T	T	T
.8873706798194256	.7772091900171313	.2199188530286261	T	T	T
.2224249568512920	.7769184895886186	.2200116886909699	T	T	T
.0021396150534252	.0021940639809711	.3283715171206235	T	T	T
.3323145105689675	.0015962972910981	.3284850841814257	T	T	T
.6694531128232558	.0046901242607634	.3282157145054565	T	T	T
.3300171094199347	.3273765927087651	.3282542454566044	T	T	T
.6670059360798393	.3309069392906940	.3287062323627390	T	T	T
.9974035015639942	.3307579648847030	.3288008892373003	T	T	T
.3328680210401625	.6658977471510281	.3318960109758922	T	T	T
.6655850649558466	.6641291390483385	.3327455066239709	T	T	T
.9995365548536003	.6667634390905086	.3282441376548349	T	T	T
.4700492684716706	.7817090957535870	.4912671275933317	T	T	T
.5758513304629475	.6743585469435973	.5026526212176942	T	T	T
.4485400975532662	.4637093029702479	.5139405518667925	T	T	T
.3095794868651849	.6774698836471235	.4475220352121018	T	T	T

.7052991311550748	.6976448904948380	.4483004084897053	T	T	T
.5662248420015638	.9231244661929692	.4700323393364689	T	T	T
.4170451405335189	.7991681402785188	.5399680752509946	T	T	T
.2434472836819505	.7497296171630909	.4412875742729286	T	T	T
.6654124224760015	.7389867830624329	.5472016883701876	T	T	T
.8037613896740455	.8315678532370974	.4441680175354583	T	T	T
.3644966646739324	.3955833053428063	.4688414810652857	T	T	T
.3505130067604660	.4387467488374652	.5554427180204610	T	T	T
.5338140096335965	.3980032473395798	.5259426254380536	T	T	T

acetol: -308.661331 eV
 1.0000000000000000
 8.1600000000000001 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.0800000000000001 7.0667672948810196 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 19.9878363011107325

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1118362510635222	0.2215093340342733	0.1103859296196674	F	F	F
0.4441923562067345	0.2213340841474647	0.1104933185539423	F	F	F
0.7782979374372800	0.2225335009940537	0.1100803487912927	F	F	F
0.4447079281820265	0.5555744356332468	0.1102838927660272	F	F	F
0.7789125835584656	0.5560093500507151	0.1104149738013618	F	F	F
0.1123608070587849	0.5572157248700478	0.1103156188073200	F	F	F
0.4439718436967226	0.8889680411330758	0.1100732222203504	F	F	F
0.7785281739567012	0.8893497020972774	0.1101871426097816	F	F	F
0.1121474922490293	0.8890705888917196	0.1085272899905192	F	F	F
0.2247443076771560	0.1142116851377395	0.2208081395584571	T	T	T
0.5563648951654230	0.1121764324557262	0.2195984523702776	T	T	T
0.8888733071441806	0.1108878969279843	0.2180767467885616	T	T	T
0.2230213002398003	0.4449549988339712	0.2179596341855685	T	T	T
0.5567896399194794	0.4460931923338052	0.2192162569291014	T	T	T
0.8868248985778777	0.4435101945025508	0.2196991602807685	T	T	T
0.5563948048916671	0.7771427807726923	0.2187540751824031	T	T	T
0.8902768037973985	0.7785863997642934	0.2180268190747441	T	T	T
0.2244431615793587	0.7770720845951615	0.2207225443956631	T	T	T
0.9973119085633257	0.9969925933159303	0.3275551799323964	T	T	T
0.3311786374516217	0.9973241407700542	0.3275307282968001	T	T	T
0.6673685881475535	0.0021487939330740	0.3273075763349240	T	T	T
0.3267400565712393	0.3330179173802108	0.3309752242017936	T	T	T
0.6672541583468643	0.3332579272393232	0.3311978601734751	T	T	T
0.9941453373015321	0.3289226272528865	0.3267012703542989	T	T	T
0.3267681937781148	0.6604013838298570	0.3310762650492975	T	T	T
0.6729656732704399	0.6718129689248897	0.3335133149190952	T	T	T
0.9999151445046621	0.6705439756096681	0.3274647183154613	T	T	T
0.6342913446476715	0.5002773970438170	0.4723807857248872	T	T	T
0.5673634403453462	0.6158571928577388	0.4323221016533267	T	T	T
0.6161453647414064	0.7939907329941960	0.4718926116895190	T	T	T
0.6041463885892000	0.3262705630819056	0.4422525094477194	T	T	T
0.3739090754138914	0.5122715820047077	0.4169220343848536	T	T	T
0.5613184392303197	0.4631266673234293	0.5213378321459032	T	T	T

0.7872432986895888	0.5859238119108952	0.4806238138350380	T	T	T
0.5693906477944708	0.8817059613934433	0.4450388029184538	T	T	T
0.7690464935963774	0.8796414849239582	0.4806477640714206	T	T	T
0.5424491630703443	0.7557276457827768	0.5206666227551580	T	T	T
0.4666732783156391	0.2395434388621140	0.4379685559371751	T	T	T

lactaldehyde: -308.674398 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2233115221728110	0.1122242694298790	0.2204567549732541	T	T	T
0.5565218536516893	0.1141022420709618	0.2216755558939717	T	T	T
0.8886129656054326	0.1104604505990759	0.2188254812561480	T	T	T
0.2236770741579701	0.4431460772152364	0.2204292951252063	T	T	T
0.5561321269677616	0.4456327676335410	0.2201526793358755	T	T	T
0.8888843972189917	0.4446122373095935	0.2188851682582947	T	T	T
0.5553890267014013	0.7780671765362613	0.2189013591865020	T	T	T
0.8882637408612052	0.7770911096574475	0.2196843389511616	T	T	T
0.2191911381046096	0.7762034008966279	0.2217284275386548	T	T	T
0.0019031354905367	0.0021708793540347	0.3281486621069213	T	T	T
0.3324085961654251	0.9969713940070999	0.3285207075433178	T	T	T
0.6673927700064517	0.9968705387686130	0.3283987878209973	T	T	T
0.3329453917960457	0.3325678968787112	0.3325685974217799	T	T	T
0.6735256188970473	0.3322608943141995	0.3319404937941154	T	T	T
0.0018692477261451	0.3281034249959786	0.3274845397057288	T	T	T
0.3374432711152439	0.6702190330590930	0.3283550590237312	T	T	T
0.6662038537740717	0.6705168928540314	0.3333068839900170	T	T	T
-0.0001873879443693	0.6604286851576759	0.3322214696531773	T	T	T
0.7134002060222402	0.6104747674742057	0.4309025347390705	T	T	T
0.5399226650445634	0.5025868767791994	0.4756063809164259	T	T	T
0.4538264407668262	0.6201278011358667	0.4981435567187010	T	T	T
0.8086069666228549	0.5113709182376353	0.4176581484164100	T	T	T
0.3890284450943374	0.3302803105214706	0.4445394083584389	T	T	T
0.5857439611889382	0.4539736736539687	0.5197646684267303	T	T	T

0.3976992792190624	0.6608026590026029	0.4549078933611185	T	T	T
0.5612915566450059	0.7504971694073902	0.5225639805976767	T	T	T
0.4337404262223259	0.2388191631413724	0.4402733219485782	T	T	T
0.8112074446828751	0.7490670474713642	0.4536973099731160	T	T	T
0.3378797074830853	0.5401147103199965	0.5334712692684018	T	T	T

```

enol1:      -308.635107 eV
1.0000000000000000
 8.1600000000000001  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-4.0800000000000001  7.0667672948810196  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  19.9878363011107325

```

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1110105360531151	0.2218978480080125	0.1106909280566057	F	F	F
0.4450466600200684	0.2225133563792880	0.1104058180049563	F	F	F
0.7781105262443546	0.2227797258452995	0.1101151270328984	F	F	F
0.4450624606811431	0.5556618384194323	0.1105074879070784	F	F	F
0.7785769424288702	0.5562970595805865	0.1098488021711646	F	F	F
0.1104801981935708	0.5559944377596011	0.1100641118819823	F	F	F
0.4442342611177139	0.8885223652789733	0.1099500234929209	F	F	F
0.7780788100470488	0.8878023352748414	0.1100825160436614	F	F	F
0.1108765872009698	0.8881490084521531	0.1098496804875708	F	F	F
0.2242916163648161	0.1142714466641266	0.2200600357596514	T	T	T
0.5560055079052546	0.1111489169726454	0.2179141141632144	T	T	T
0.8898176069701194	0.1121983894820673	0.2190568515862452	T	T	T
0.2230686983204606	0.4425349025736338	0.2197949976524924	T	T	T
0.5522637854424488	0.4420602726585301	0.2202281289312467	T	T	T
0.8893796147739437	0.4427722121080038	0.2198579429552296	T	T	T
0.5557879966854244	0.7774643647499602	0.2177713938056272	T	T	T
0.8891456176202794	0.7771945268777856	0.2181922071557949	T	T	T
0.2217762413410611	0.7770420475257112	0.2184657438044013	T	T	T
0.9960473454552741	0.9929969592834240	0.3271723112331983	T	T	T
0.3350973449725458	0.9973972898540637	0.3274491889848150	T	T	T
0.6654227536199286	0.9984059024107808	0.3274604906949961	T	T	T
0.3328458129128862	0.3333901355947617	0.3439785663933037	T	T	T
0.6658698738495232	0.3315316333220011	0.3276465686904260	T	T	T
0.9981559951368695	0.3343810788448991	0.3305852478625297	T	T	T
0.3376295243125114	0.6724386015906205	0.3271529944447522	T	T	T
0.6683560544161224	0.6683371355533154	0.3275613582166557	T	T	T
0.9996414102069764	0.6684293567567750	0.3273363815742414	T	T	T
0.4950878519500321	0.3080243379855645	0.4847007256270146	T	T	T
0.3135489311225115	0.2609891720263420	0.4497994471278943	T	T	T
0.2565810419998797	0.3980771054188281	0.4386676017648412	T	T	T
0.1582298567628655	0.0825645864908893	0.4662421549088052	T	T	T
0.0617658984506591	0.3370654291269375	0.4430355065403617	T	T	T
0.5465879551930257	0.2128128630369517	0.4686904958989828	T	T	T

0.4697685810000252	0.2909108006687404	0.5391454107669986	T	T	T
0.6059901562520622	0.4540244890836789	0.4740406628282230	T	T	T
0.3436393703157492	0.5455899665514821	0.4538288982424987	T	T	T
0.1665863875755633	0.9827563373020780	0.4408417361173065	T	T	T
0.0001927128265393	0.1991782730987524	0.4521033895414774	T	T	T

enol2: -308.548977 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2242216432730260	0.1145646147799653	0.2206094846000610	T	T	T
0.5565985763630366	0.1132669048241652	0.2198927172909038	T	T	T
0.8893754412066883	0.1117219647578622	0.2191238779739422	T	T	T
0.2238004704561618	0.4435126819048136	0.2203671234881597	T	T	T
0.5524776474872155	0.4420299586528031	0.2219423470174533	T	T	T
0.8881553578522841	0.4439070028216108	0.2203774548536330	T	T	T
0.5555717720533622	0.7775883147789884	0.2187681343433638	T	T	T
0.8886374464443847	0.7779518867921524	0.2194663032733573	T	T	T
0.2219523299362578	0.7785789464838473	0.2182279285084689	T	T	T
0.9983012259555792	0.9974366178294218	0.3284232723854359	T	T	T
0.3324187978521493	0.9957195564115295	0.3282131197739986	T	T	T
0.6659602580309851	0.9974238451255246	0.3282624623318853	T	T	T
0.3307587375316672	0.3330747472193991	0.3442491284458171	T	T	T
0.6690204215768460	0.3316372432461705	0.3317285764634548	T	T	T
0.0001336609999782	0.3343471438441412	0.3281386009014753	T	T	T
0.3344373312221194	0.6711740141799893	0.3279025636500137	T	T	T
0.6696715230878141	0.6713690335816622	0.3282825171434354	T	T	T
0.0034967430628683	0.6700548381344404	0.3276667407821279	T	T	T
0.4081502674708304	0.3834359287416333	0.4496626376664778	T	T	T
0.5045868392354436	0.2816346765407687	0.4766293788054625	T	T	T
0.2081948407110232	0.2924420699641956	0.4430398053029023	T	T	T
0.6875879616518645	0.3462105594869200	0.4454661524866452	T	T	T
0.5192452926135047	0.5749821510435780	0.4655607135575437	T	T	T
0.5276614284900916	0.3070945508593041	0.5309669706183371	T	T	T

0.4209610918213613	0.1293037817649179	0.4667301619298811	T	T	T
0.4762571116244132	0.6492089409863198	0.4389551007402162	T	T	T
0.1252882951261824	0.1419510680360929	0.4553228850200881	T	T	T
0.1375438661465509	0.3732129155823074	0.4539977716386190	T	T	T
0.7616150447911352	0.4844055469743083	0.4506739386370739	T	T	T

dirad1: -308.382679 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231828205908952	0.1109632547766995	0.2193849078122065	T	T	T
0.5556665723950567	0.1115375471361413	0.2205672906304692	T	T	T
0.8884474841733762	0.1110861994569642	0.2186068691028304	T	T	T
0.2222811665939294	0.4442486260988979	0.2186882823673522	T	T	T
0.5577580255018121	0.4456736567631664	0.2207287119976784	T	T	T
0.8862242300887521	0.4447971027727509	0.2215243198046061	T	T	T
0.5562099661756976	0.7762101313268935	0.2199699392939638	T	T	T
0.8870819836803018	0.7766841978851723	0.2196788451232258	T	T	T
0.2190881389302818	0.7756228752419284	0.2213832908763841	T	T	T
0.0016311742276230	0.0043079316905324	0.3277093911664107	T	T	T
0.3332177753627222	0.9978907541957063	0.3281458459168776	T	T	T
0.6677641394009201	0.9958614146999164	0.3277400893955482	T	T	T
0.3307106736653395	0.3333008269882226	0.3285996809014042	T	T	T
0.6624322541148200	0.3227892854203718	0.3327873743013285	T	T	T
0.0041979717190818	0.3323160242701030	0.3277669591512199	T	T	T
0.3353641344106824	0.6636527668996247	0.3281712940001641	T	T	T
0.6724258038271423	0.6673593999635204	0.3377293800687751	T	T	T
0.0031059719613719	0.6711603484880543	0.3326821974025676	T	T	T
0.5949064019009562	0.4402126730410538	0.4617735686661783	T	T	T
0.7348404204484094	0.6434522347693304	0.4384971094504212	T	T	T
0.7423619309082269	0.7983498482211153	0.4819839716030020	T	T	T
0.6516293257706238	0.3165063537454790	0.4351087905714479	T	T	T
0.9191136910812344	0.6541524354931600	0.4391702528259778	T	T	T
0.4474004567729446	0.4001538985531912	0.4477500562714460	T	T	T

0.5998725404700181	0.4325051647510363	0.5172575884681150	T	T	T
0.8785009830724215	0.5151368411279399	0.4429161671321658	T	T	T
0.8481807185960968	0.9396316524862687	0.4639838823942090	T	T	T
0.6041371471831540	0.7906749440683724	0.4825072210263376	T	T	T
0.7797070521761659	0.7825515581944024	0.5337656638692774	T	T	T

```

dirad2:      -308.464150 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2223981199957801 0.1107473404873616 0.2189727979656287 T T T
0.5563247864239863 0.1129126822432093 0.2198130461042670 T T T
0.8896037648947347 0.1116726886490687 0.2189755904356303 T T T
0.2239226436081729 0.4445438129258688 0.2207989465180794 T T T
0.5546599828756994 0.4452791951717495 0.2200913053511592 T T T
0.8861501704102823 0.4423863937598555 0.2214325619281885 T T T
0.5553640659629053 0.7774370776027979 0.2184978074745056 T T T
0.8869955837900508 0.7753430578340463 0.2215959221627748 T T T
0.2228361330745646 0.7744932402466631 0.2214745205791800 T T T
0.0028362142691620 0.0026146686978670 0.3282330175290600 T T T
0.3289042538434011 -0.0039443746185381 0.3275151731869808 T T T
0.6710801695930088 0.0068378249718625 0.3273505470533904 T T T
0.3322510673737926 0.3238419039163313 0.3347316854188753 T T T
0.6682342603632738 0.3362450177360508 0.3326197724776412 T T T
-0.0007549105848869 0.3311381331865875 0.3288298844819749 T T T
0.3382858315601763 0.6687070096287183 0.3327340283722825 T T T
0.6687183804153406 0.6750668189386664 0.3310065238038177 T T T
0.0034848441773715 0.6667940976441487 0.3289240242756132 T T T
0.4532906106658952 0.5353934586778071 0.4644307521213074 T T T
0.2866753591139250 0.5243890534854242 0.5027058141101041 T T T
0.4074717062167689 0.3444147711955916 0.4350671018514296 T T T
0.5771143874153394 0.3247721613653657 0.4405797018628971 T T T
0.5155900782782086 0.6830833486954430 0.4146739316283612 T T T
0.2507165452830326 0.4295004403560644 0.5460170257199695 T T T

```

0.3229835459914276	0.6655099456545533	0.5208358547289811	T	T	T
0.2929547661727032	0.2258957017880497	0.4626199755357320	T	T	T
0.5750968547015298	0.5814916581517460	0.4986627516517819	T	T	T
0.5340392699335815	0.1897518786038433	0.4466049448576414	T	T	T
0.1621062716275986	0.4721491990656265	0.4698569450657153	T	T	T

dirad3: -308.256413 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2250121113042284	0.1137818160359419	0.2217022257810476	T	T	T
0.5555068991987608	0.1114093453046103	0.2186595715436663	T	T	T
0.8892331489754959	0.1109507656576724	0.2192797348812802	T	T	T
0.2233780051570130	0.4445493179514708	0.2198539459728350	T	T	T
0.5544619255055856	0.4426906048735664	0.2208952982967866	T	T	T
0.8867085838629682	0.4439765131627650	0.2208994517025582	T	T	T
0.5560283121654352	0.7777622764998356	0.2192888360500183	T	T	T
0.8890795425000060	0.7779918239287635	0.2187966557366522	T	T	T
0.2229942839974108	0.7807233046526866	0.2213772849910027	T	T	T
-0.0046271917204793	0.9949393715296957	0.3285499590128054	T	T	T
0.3366332714095949	0.0004138626718072	0.3323605775257756	T	T	T
0.6694316277443225	0.9968026473043836	0.3280766584583891	T	T	T
0.3264125942990184	0.3349730776101469	0.3329427035835316	T	T	T
0.6691063229318882	0.3310671320958619	0.3315569546729691	T	T	T
0.0002137427537550	0.3357865393630851	0.3276829995152951	T	T	T
0.3325204932798652	0.6661453702975023	0.3280419420639861	T	T	T
0.6690663400850478	0.6702718997914097	0.3286006349685112	T	T	T
-0.0018406338562840	0.6674563849696623	0.3286730371221305	T	T	T
0.4304037689394288	0.4341267040505191	0.5418787006845854	T	T	T
0.4591960293516821	0.3755980660827548	0.4722220127037217	T	T	T
0.4834653789875040	0.2012699175648073	0.4757715959079322	T	T	T
0.3036720988963295	0.3406339367352909	0.4317534417153845	T	T	T
0.5236276834754440	0.1472279998561568	0.4126843980903883	T	T	T
0.5515887704432290	0.4669595714028330	0.5744493504614185	T	T	T

0.3011575705542936	0.3203675599442380	0.5649479811568311	T	T	T
0.5924378482378185	0.4923625350629742	0.4500176898647546	T	T	T
0.6024153223223946	0.2314099531290351	0.5095096288164510	T	T	T
0.3528072387655804	0.0803663238823994	0.4956050659470642	T	T	T
0.4159960894397509	0.5604687343167006	0.5380544418360861	T	T	T

```

dirad4:      -308.020252 eV
2.720000000000000
3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2235921186215369 0.1131987714402884 0.2198666603049289 T T T
0.5558715829273793 0.1109672210331269 0.2187175941069641 T T T
0.8892440546994649 0.1103081499831181 0.2182640337592420 T T T
0.2245290101282215 0.4444181968343980 0.2210526542342320 T T T
0.5555041248981355 0.4456689023733872 0.2216074343343117 T T T
0.8895923354806010 0.4445815867092201 0.2192654345390432 T T T
0.5559090564844478 0.7746240307107065 0.2217569888593065 T T T
0.8876351683311863 0.7770017228032271 0.2203940081838022 T T T
0.2230605284448577 0.7768090950428648 0.2202931036627072 T T T
0.0016481089493553 0.0033908420290188 0.3280538099957099 T T T
0.3337592899965072 0.0015591741174063 0.3274106714683759 T T T
0.6694361575666012 0.0039560476233366 0.3276976021908130 T T T
0.3313563500706171 0.3294743472800921 0.3372104723358411 T T T
0.6690622908072638 0.3297938316010074 0.3287955623862306 T T T
0.9969842372588511 0.3299155837493274 0.3280794224943708 T T T
0.3322810356122048 0.6698002225882267 0.3321041550363363 T T T
0.6660513424562665 0.6660535800219535 0.3339031653664178 T T T
0.0001498728933413 0.6658715932667847 0.3273161598950287 T T T
0.4229878361110440 0.6458884356644522 0.4911003451490524 T T T
0.5151160992690210 0.5290701636681568 0.4706836911316950 T T T
0.3763141441199411 0.3353492563729024 0.4410387049631544 T T T
0.2915715371741351 0.6507293530650918 0.4431178529029079 T T T
0.6801462947305005 0.6370601814996925 0.4320559367991122 T T T
0.5336265620702623 0.7939779588131156 0.4978663998676643 T T T

```


0.3451726367776383	0.5911482328527864	0.5384153528968076	T	T	T
0.1738603463873685	0.5277430558631354	0.4429791845604564	T	T	T
0.5679399027130758	0.5044982761480060	0.5189306184992604	T	T	T
0.2364885814916976	0.2711130903639578	0.4654201043449187	T	T	T
0.4326116946811349	0.2389534324464851	0.4487794335082050	T	T	T

```

dirad5:      -308.271038 eV
2.720000000000000
 3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
 0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2231837042451698 0.1115399111143120 0.2196359843934143 T T T
0.5559670967464233 0.1119329479818227 0.2192097230089597 T T T
0.8893176054671481 0.1106609949662470 0.2194347821917166 T T T
0.2237604771602909 0.4452327679024264 0.2209800535744821 T T T
0.5546241852908276 0.4449691972878025 0.2201559601218626 T T T
0.8868302618401457 0.4423467920814782 0.2209493024447181 T T T
0.5537804757180123 0.7755501739528127 0.2207042361350571 T T T
0.8890162140090602 0.7768061065854861 0.2204447409056727 T T T
0.2230852940689595 0.7754255476595046 0.2198246967008693 T T T
0.0022828108672880 0.0018092958756470 0.3277961771724286 T T T
0.3323828964071595 0.9944974595027342 0.3275124370039239 T T T
0.6667090119511082 0.0015863263479887 0.3280972123283378 T T T
0.3360640484501731 0.3293931602991839 0.3340303365329378 T T T
0.6673280631539790 0.3320843679781865 0.3315083459495325 T T T
-0.0014675499068368 0.3289859045198494 0.3288060532732030 T T T
0.3316335139776243 0.6631303129747037 0.3386485210745209 T T T
0.6741599783876479 0.6724728413127654 0.3299717788863809 T T T
0.0052137172923209 0.6669510538650287 0.3280692614844903 T T T
0.4639209246585104 0.5467029215540592 0.4633672162343812 T T T
0.3302851017422293 0.6158956759482478 0.4424117201635279 T T T
0.4043054329826832 0.3526006967492726 0.4350518975385521 T T T
0.5540848847441769 0.3094931628160794 0.4459702810997955 T T T
0.6585189383071937 0.6753237121321203 0.4406383807471900 T T T
0.1844600647771549 0.5112533440391218 0.4569327471609186 T T T

```

0.3669463839268442	0.7499343912580130	0.4677083662544391	T	T	T
0.6855203425298620	0.8056635518423604	0.4473270360485779	T	T	T
0.2738530097913124	0.2459695775713760	0.4599574738624998	T	T	T
0.4757178579965670	0.5439917432044195	0.5186512007093538	T	T	T
0.4970483040277285	0.1711515800646849	0.4423427194431349	T	T	T

```

dirad6:      -308.029889 eV
2.720000000000000
3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Rh C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2231956976225856 0.1131624246622406 0.2199437920088652 T T T
0.5548704748805714 0.1102977872251278 0.2183528974436992 T T T
0.8891405673745426 0.1115697925338854 0.2187493795038725 T T T
0.2252060592955028 0.4462790430046434 0.2218174070160368 T T T
0.5540346350666638 0.4444755631571575 0.2209699720865575 T T T
0.8893552499494192 0.4447779588296127 0.2192223727660778 T T T
0.5534857497617340 0.7752465960990615 0.2214368808032764 T T T
0.8869975458634534 0.7767735329707167 0.2204411422056118 T T T
0.2233794414933334 0.7772409780019294 0.2201197761842054 T T T
0.0000471275638413 0.0013802085390121 0.3277699066637724 T T T
0.3348167192424864 0.0031832551154641 0.3276875376660863 T T T
0.6681081136860400 0.0035293474252828 0.3277893202896563 T T T
0.3327513016537205 0.3293703693694480 0.3368399977656831 T T T
0.6685686728349249 0.3299500383126299 0.3279122673659050 T T T
0.9964984736944236 0.3294020585954151 0.3287413327115381 T T T
0.3308107328098610 0.6673229492157958 0.3335784768711538 T T T
0.6682870821085127 0.6675512582555427 0.3322497464576299 T T T
-0.0018733573472265 0.6667037299271029 0.3273096025815711 T T T
0.3879494690840992 0.6526745318286822 0.4820294093812876 T T T
0.4738662636135316 0.5240211652551922 0.4753677472243604 T T T
0.3504017567932538 0.3342969047268517 0.4420908168455187 T T T
0.2687121894882460 0.6472160579543278 0.4304061827359143 T T T
0.6612072419778583 0.6362143608764405 0.4429410017002778 T T T
0.5061136774063348 0.7986689639820701 0.4902524962349473 T T T

```

0.3010844411521090	0.6085166052765842	0.5281380533838942	T	T	T
0.5085314986317485	0.5013800545003865	0.5268602194594141	T	T	T
0.7275405582885696	0.5637798261572200	0.4455011320065441	T	T	T
0.2036608068231699	0.2739344177124772	0.4597749215099606	T	T	T
0.3999128463403165	0.2351599874539392	0.4551723069038220	T	T	T

monoradical CHO₂CHOHCH₃: -312.337553 eV
 2.7200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231042833702486	0.1131606738704199	0.2197536857536495	T	T	T
0.5575431537384704	0.1141236568913259	0.2202563999276075	T	T	T
0.8888151849462743	0.1116913527616087	0.2193405780269926	T	T	T
0.2229095250514319	0.4448497998693481	0.2205654829903080	T	T	T
0.5549213658403342	0.4434341176749446	0.2207489924274729	T	T	T
0.8866813244291749	0.4434172275521778	0.2197762672826859	T	T	T
0.5576612073083420	0.7776194705833596	0.2214509562382624	T	T	T
0.8880040841071453	0.7771548897490940	0.2194313132413238	T	T	T
0.2235457088803712	0.7791210192347532	0.2183027733856296	T	T	T
0.9993300408394801	-0.0003171252261242	0.3278898801231975	T	T	T
0.3332463478968785	0.9982103445504680	0.3280015592125313	T	T	T
0.6682100384607258	0.0043530312580202	0.3290499185519870	T	T	T
0.3268916807335653	0.3295467678835602	0.3316064415073509	T	T	T
0.6683140016297729	0.3408058192427791	0.3375865445284589	T	T	T
0.9970657927195916	0.3335080414674241	0.3286220685816695	T	T	T
0.3325134848026973	0.6713066016495515	0.3282651757336830	T	T	T
0.6669286058801149	0.6703781100290752	0.3316793412549853	T	T	T
0.0070484194416779	0.6696485904222876	0.3274386901542941	T	T	T
0.6644437641618958	0.4104273449132853	0.4376410482375184	T	T	T
0.4762134767225876	0.2958444095850244	0.4736988100556724	T	T	T
0.4855251821289631	0.3324891982300501	0.5487770621321213	T	T	T
0.7110799402497556	0.6079307559201985	0.4432100646150858	T	T	T
0.3335127154805880	0.3327858218302379	0.4441133748705254	T	T	T
0.4226217224115137	0.1449377883289773	0.4636265192057701	T	T	T

0.5804665913980583	0.2909417628246514	0.5727623645420933	T	T	T
0.3445738580647216	0.2492194320272874	0.5712614952292075	T	T	T
0.8489985803037297	0.6894711800082632	0.4363688171112020	T	T	T
0.3727308122950132	0.4659098572683304	0.4525809163314048	T	T	T
0.7754769142052040	0.3934890283026548	0.4624960859525704	T	T	T
0.5400496253147008	0.4832177494728330	0.5592660471352101	T	T	T

monoradical CH₂OHCOHCH₃: -312.293646 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2232342475983669	0.1144769450795641	0.2203763161411873	T	T	T
0.5564071541411784	0.1130364463093506	0.2197466076883463	T	T	T
0.8892089126935814	0.1116286941517839	0.2192358815260406	T	T	T
0.2234241913840731	0.4431891531880466	0.2198246980651497	T	T	T
0.5547794005320740	0.4434398770334855	0.2208757663129182	T	T	T
0.8885593424613241	0.4449781352880129	0.2204778274919824	T	T	T
0.5558160322879531	0.7773036632074916	0.2193396688957809	T	T	T
0.8863025594535638	0.7775833490794576	0.2213318051525716	T	T	T
0.2218285078652657	0.7789779289925409	0.2183495289147797	T	T	T
0.0025973477071359	0.0039583774893002	0.3289578551436835	T	T	T
0.3307460647626497	0.9980017560655624	0.3280988637038079	T	T	T
0.6668215223092091	0.9995113710721025	0.3277817924143260	T	T	T
0.3380426038976945	0.3405512126088520	0.3391178394052302	T	T	T
0.6681318160249448	0.3288975936769600	0.3312720384941225	T	T	T
0.0018850199359042	0.3327827043099028	0.3283484221252990	T	T	T
0.3292925098531893	0.6699032705919236	0.3272512450880322	T	T	T
0.6683073436824738	0.6693085378984190	0.3318294210678356	T	T	T
0.0045742235160873	0.6709934095753612	0.3281775360781259	T	T	T
0.4076705350197303	0.4104751287350170	0.4407863450279135	T	T	T
0.4900567940515086	0.2987973486932872	0.4731692400854826	T	T	T
0.2424110202712823	0.3909101726845755	0.4820684831315682	T	T	T
0.6682161821190521	0.3371308733046301	0.4438120918166198	T	T	T
0.5660751485528193	0.6075274190926602	0.4436244979682983	T	T	T
0.5164289956632931	0.3346042289344026	0.5269528580048277	T	T	T

0.3930034094275813	0.1463407594507657	0.4675148877022442	T	T	T
0.5134296444472563	0.6928636179468711	0.4398268998823012	T	T	T
0.1256932891515346	0.2436713643384585	0.4812871583982642	T	T	T
0.2856557912416583	0.4329827202184607	0.5345846876464962	T	T	T
0.7591537350354954	0.4720113355985650	0.4504741080239433	T	T	T
0.1873318531301535	0.4791452888720429	0.4616066476361445	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOHCH₂: -312.001759 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2233108953442687	0.1135906445754337	0.2203356853362650	T	T	T
0.5553128718330251	0.1112205707337398	0.2186591140610382	T	T	T
0.8893273871689780	0.1113291186055606	0.2190947877776197	T	T	T
0.2239649107978577	0.4431737692525100	0.2205076077818729	T	T	T
0.5542611440324672	0.4445437363732496	0.2209434465522344	T	T	T
0.8891839179596456	0.4449195572201770	0.2193630671288888	T	T	T
0.5564284187661013	0.7762597627642275	0.2202609260984612	T	T	T
0.8872139484445675	0.7772487000254992	0.2209270808914718	T	T	T
0.2223140550060743	0.7779240422390953	0.2192412911648891	T	T	T
0.0011906610684052	0.0025329890427872	0.3282202106135688	T	T	T
0.3344361458589971	-0.0000389603623991	0.3283200924232499	T	T	T
0.6669614299530026	0.0019751792791381	0.3281635945423599	T	T	T
0.3340101745605800	0.3328308109616067	0.3374256733741460	T	T	T
0.6684113031745729	0.3298328303034275	0.3281101915095216	T	T	T
-0.0011920852488919	0.3328539442848053	0.3287441627761646	T	T	T
0.3311198795106812	0.6695032873892300	0.3284095448348474	T	T	T
0.6684853544633772	0.6682343198919721	0.3328769878106239	T	T	T
0.0028076065226196	0.6664606860515058	0.3280604449459725	T	T	T
0.5364529414236707	0.5049740186677670	0.5483644029328291	T	T	T
0.5404782291390675	0.4638491941397268	0.4736034651307963	T	T	T
0.3454695620974931	0.3541638184167367	0.4423468504241710	T	T	T
0.4826692298848987	0.6466407466179430	0.5574734241936259	T	T	T
0.6592988888607728	0.6500651321058456	0.4428979529336064	T	T	T
0.6793904603720357	0.5663461732406397	0.5695535739039921	T	T	T

0.4416931500038282	0.3738488417446363	0.5756415541085114	T	T	T
0.3461249266137602	0.5872985953032139	0.5519848285757754	T	T	T
0.6196369802441548	0.3884860456844979	0.4661342711761578	T	T	T
0.6166347376063820	0.7331690166187793	0.4624422199156857	T	T	T
0.2572476020572778	0.4168853305368259	0.4555607027253810	T	T	T
0.2749291623597069	0.2077629139589342	0.4611774017795389	T	T	T

monoradical CH₂OCHOHCH₃: -312.163097 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2233829098334823	0.1126974841619131	0.2199718105673014	T	T	T
0.5567806096636332	0.1138597811609827	0.2206661275845008	T	T	T
0.8887282230337732	0.1113869838040813	0.2191810655721085	T	T	T
0.2228630992140594	0.4434398782917199	0.2202655825350348	T	T	T
0.5546203225643822	0.4423645189571701	0.2208843939296941	T	T	T
0.8855791477708834	0.4426308858110986	0.2208575046435328	T	T	T
0.5565346008425394	0.7780435837109181	0.2191745672966263	T	T	T
0.8882612669502592	0.7774252279502889	0.2191042410265780	T	T	T
0.2220313845642039	0.7774510431737838	0.2182600826870456	T	T	T
0.9993341258989545	0.9991450477132346	0.3281114363309570	T	T	T
0.3317339898621441	0.9958992464847043	0.3281208068562762	T	T	T
0.6669423748560064	0.9987284254319917	0.3284774212773414	T	T	T
0.3288277423673733	0.3340925804556178	0.3324253071539474	T	T	T
0.6711673696087672	0.3370834563830485	0.3343345641311046	T	T	T
0.0008148674546149	0.3331055516873320	0.3281324317771066	T	T	T
0.3338504823680353	0.6710893808263805	0.3278277538996619	T	T	T
0.6681913753115651	0.6706030262045743	0.3294773188048978	T	T	T
0.0058150122541392	0.6714952368805811	0.3276823554614339	T	T	T
0.6546969699592893	0.4979251994842571	0.4646811030902143	T	T	T
0.4550743695765576	0.4161821763890927	0.4938152869561705	T	T	T
0.4054162490844533	0.5649978317331374	0.5134697517899909	T	T	T
0.6848074130187456	0.3620009077338437	0.4350958568974761	T	T	T
0.3143868772352434	0.2874045291470182	0.4459895669262082	T	T	T
0.4442433270502946	0.3280030939744520	0.5373427120622125	T	T	T

0.4065324220658724	0.6459372540793709	0.4691590636804008	T	T	T
0.5096973957497752	0.6644437059619221	0.5493982064003617	T	T	T
0.3366758468998654	0.1801418374476711	0.4401628945627678	T	T	T
0.7604490674442772	0.5733005651882834	0.5046256934200315	T	T	T
0.6765663619586064	0.6161930030961571	0.4279856433336278	T	T	T
0.2647437073791323	0.5000406420665371	0.5365614292945651	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOCH₃: -312.316934 eV
 2.720000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Rh C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2231624034056358	0.1133491862782787	0.2207194014090562	T	T	T
0.5560909837777145	0.1102419017099172	0.2203188872793231	T	T	T
0.8869441828270700	0.1101819240700352	0.2204563495586333	T	T	T
0.2220182705554594	0.4442078036321178	0.2191649549966620	T	T	T
0.5554616393206416	0.4441074731990653	0.2190128322245078	T	T	T
0.8887739679823394	0.4440577667291823	0.2190752202965732	T	T	T
0.5559491505783699	0.7783655929540477	0.2193517559306799	T	T	T
0.8860034169176052	0.7757161812038630	0.2211026640250491	T	T	T
0.2231159067637246	0.7756685484460898	0.2212411757300830	T	T	T
0.0027009374602299	-0.0000295179480380	0.3285003917137421	T	T	T
0.3304721014669244	-0.0003516246822936	0.3286890993462753	T	T	T
0.6690924271051313	0.0033653039335792	0.3328045655910693	T	T	T
0.3300799305026175	0.3266788416339175	0.3305035066740643	T	T	T
0.6694686619590758	0.3321586498999469	0.3282444898963245	T	T	T
0.9963854405066166	0.3324860361251081	0.3280912749668670	T	T	T
0.3311071405901701	0.6684698728516698	0.3301630334973557	T	T	T
0.6706799666855982	0.6669255112413113	0.3299514068115826	T	T	T
-0.0003227876083912	0.6661282784332673	0.3288427341067086	T	T	T
0.6538563014902231	0.8317541178896306	0.4843213385021516	T	T	T
0.4836575093916531	0.6327671749407671	0.4757155465706575	T	T	T
0.3003762721738849	0.6085074821081834	0.5048600454560772	T	T	T
0.6429407892268062	0.9800738868025989	0.4483046662054177	T	T	T
0.4566329885117262	0.5780962705314331	0.4064975924660695	T	T	T
0.5217642921115117	0.5371994464739923	0.5020192292000745	T	T	T

0.3168238939176900	0.6425801034055209	0.5585248714321090	T	T	T
0.1857630217096562	0.4618293903904359	0.4984618565713413	T	T	T
0.5202179280683936	0.9712774469044974	0.4558907189189663	T	T	T
0.7817571074790615	0.8358659487982285	0.4647619417124197	T	T	T
0.6734169315756491	0.8681133310099295	0.5379800823248776	T	T	T
0.2562830023026542	0.6993295789422946	0.4788848640940869	T	T	T

1,2-PDO dehydrogenation intermediates on Pt catalyst

1,2-PDO: -277.284009 eV

2.8200000000000000

3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 8 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2217561976967497	0.1089425328912070	0.2200306194160809	T	T	T
0.5548230584632706	0.1088580138157192	0.2203745268652464	T	T	T
0.8886767557165557	0.1087977786409590	0.2203563803926039	T	T	T
0.2223378206017928	0.4433139556396867	0.2212078306691494	T	T	T
0.5557900761562995	0.4434565103002029	0.2212709216504505	T	T	T
0.8883837599802532	0.4421013311541004	0.2207078588326883	T	T	T
0.5543997436752520	0.7745529519001292	0.2214657874717208	T	T	T
0.8873540544985736	0.7752710361740170	0.2209678482470477	T	T	T
0.2220454233255187	0.7752860240831594	0.2209160447578075	T	T	T
-0.0002400378664846	-0.0041375327759516	0.3321434250894625	T	T	T
0.3322210992149766	-0.0042493304032065	0.3320723916141743	T	T	T
0.6672927601690832	-0.0023733132183089	0.3316397281584838	T	T	T
0.3306587959151827	0.3246316577106467	0.3321690109143224	T	T	T
0.6656071853855681	0.3266726395926652	0.3322517529564764	T	T	T
0.9974103687869352	0.3268082080441567	0.3320901993355814	T	T	T
0.3319304407886868	0.6596996596295408	0.3333745976910248	T	T	T
0.6647626999153152	0.6586004891488283	0.3338741974350146	T	T	T
0.9984273902478731	0.6610427937405612	0.3319538666256907	T	T	T
0.4685433570132441	0.7835304020050966	0.4930655383043124	T	T	T
0.5777212284091590	0.6879624381911238	0.5064731401162130	T	T	T
0.4603739816647068	0.4850586972570424	0.5194715747821883	T	T	T
0.3125103010354664	0.6727253351260863	0.4526964328531499	T	T	T

0.7036440671068729	0.7090930529136920	0.4550032430268266	T	T	T
0.5566248202014628	0.9175897828026806	0.4701198093002941	T	T	T
0.4190079396972674	0.8055994993342224	0.5395813563524658	T	T	T
0.2429672277994477	0.7358190308053724	0.4464320926076500	T	T	T
0.6621936495685280	0.7563762269074751	0.5493803875981362	T	T	T
0.7879878674238014	0.8391718274212705	0.4469680515431609	T	T	T
0.3806354786069711	0.4142530934986824	0.4763835304777509	T	T	T
0.3650009244901367	0.4608660410776511	0.5592103387263334	T	T	T
0.5468893784957360	0.4274673057255911	0.5324767336627402	T	T	T

acetol: -269.775494 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2232280886637810	0.1124439311601480	0.2205385022809479	T	T	T
0.5573332475166468	0.1139248662340542	0.2214684663792724	T	T	T
0.8900579881010537	0.1125902893973085	0.2205432437112682	T	T	T
0.2233064152719641	0.4462731037295423	0.2201229092410054	T	T	T
0.5576847470592958	0.4454733671222297	0.2214354280172600	T	T	T
0.8883650330679711	0.4452190466681907	0.2215594192116170	T	T	T
0.5564454788541596	0.7790414994536756	0.2202598865335638	T	T	T
0.8900747349264863	0.7793736984349391	0.2206973009750616	T	T	T
0.2233817088396965	0.7790294740678431	0.2202354612709967	T	T	T
0.0028891406493896	0.0038345768308536	0.3322851194772703	T	T	T
0.3342523405641629	0.0022743236467243	0.3319664649182430	T	T	T
0.6698521935295703	0.0022978915003910	0.3316939412760603	T	T	T
0.3344378839733322	0.3370403716472112	0.3314807110629455	T	T	T
0.6704854234372285	0.3376956521090638	0.3349834189252653	T	T	T
0.0044418241767730	0.3368333734883193	0.3318029518879661	T	T	T
0.3362930578971652	0.6705142923946089	0.3319117387936243	T	T	T
0.6698900535664755	0.6720767205512242	0.3320308649682546	T	T	T
0.0045373435890822	0.6721831954468335	0.3320172221556522	T	T	T
0.4436726082406768	0.3279459787526910	0.5222157475849072	T	T	T
0.5103455271115451	0.2175078058101521	0.4853916991094669	T	T	T
0.2660960945784778	0.2286363582844149	0.5575675622381875	T	T	T
0.6727828844926887	0.3394594872449609	0.4511154609259412	T	T	T
0.5379605837446522	0.4954403099063350	0.5200243827474199	T	T	T
0.5391243824959310	0.1341423585790037	0.5191526639264725	T	T	T

0.4039761253074677	0.1228983225217948	0.4512259497736362	T	T	T
0.1546375494488988	0.1815235035543747	0.5219872077488037	T	T	T
0.2508413011731525	0.1065280752022596	0.5820282734909041	T	T	T
0.6921501511900315	0.4622591656411938	0.4629649721218121	T	T	T
0.2530626246002141	0.3194087783695090	0.5921090095841970	T	T	T

lactaldehyde: -269.560312 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220648119834605	0.1146096260631216	0.2208666518612317	T	T	T
0.5567778560390150	0.1164189438685268	0.2221145498457072	T	T	T
0.8879510489728121	0.1144553366693477	0.2207554141792302	T	T	T
0.2221668506092034	0.4464924867110270	0.2211934914878620	T	T	T
0.5539457042541204	0.4458950532377800	0.2217746916483670	T	T	T
0.8863132157000436	0.4467709512259048	0.2213887448458085	T	T	T
0.5583348486920614	0.7793435924516530	0.2233822599470603	T	T	T
0.8875972320824069	0.7799615825750781	0.2209599910906590	T	T	T
0.2238878967893674	0.7810959756997921	0.2191858838158697	T	T	T
0.9972415409758592	0.0060456450335353	0.3313821284585209	T	T	T
0.3337132721620746	0.0056810103348107	0.3317061781984806	T	T	T
0.6664183063224809	0.0106943790357888	0.3333260337280525	T	T	T
0.3237170052234090	0.3359403536899362	0.3333210817269648	T	T	T
0.6662469087309387	0.3445656973240295	0.3394774772036610	T	T	T
0.9962329518534597	0.3404629580437162	0.3322655956199089	T	T	T
0.3324118026837858	0.6760476824409244	0.3322297564537883	T	T	T
0.6666564521893429	0.6754526189059590	0.3358602096066129	T	T	T
0.0061779777366860	0.6764419211161766	0.3301773709862494	T	T	T
0.6612679460125074	0.4361400653748381	0.4355786739339934	T	T	T
0.4814481678224301	0.3046764595659519	0.4698860250105202	T	T	T
0.4996114491497006	0.3302818079641339	0.5428806842525694	T	T	T
0.6838892971181324	0.6067784904320437	0.4322476838075786	T	T	T
0.3416195041968705	0.3428715365774611	0.4466425911640120	T	T	T
0.4340693471017765	0.1621163144471872	0.4566371238482639	T	T	T

0.5985608513569959	0.2932236559465269	0.5613446193381157	T	T	T
0.3674989900452800	0.2425459946245597	0.5662017746659640	T	T	T
0.4001754987259937	0.4772378179208024	0.4493895187882552	T	T	T
0.7813472377763980	0.4342264594731672	0.4558488989865860	T	T	T
0.5478395892150995	0.4732582557488518	0.5558628237185005	T	T	T

```

enol1:      -270.064352 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
 0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
 36 3 2 6      # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333432674408 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666865348816 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333432674408 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F
0.6666666865348816 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F
0.0000000020031479 0.3333333432674408 0.0000000000000000 F F F
0.3333333432674408 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F
0.6666666865348816 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F
0.0000000040063028 0.6666666865348816 0.0000000000000000 F F F
0.1111111119389534 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F
0.4444444477558136 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F
0.7777777910232544 0.222222238779068 0.1111111119389534 F F F
0.4444444477558136 0.5555555820465088 0.1111111119389534 F F F
0.7777777910232544 0.5555555820465088 0.1111111119389534 F F F
0.1111111044883728 0.5555555820465088 0.1111111119389534 F F F
0.4444444477558136 0.8888888955116272 0.1111111119389534 F F F
0.7777777910232544 0.8888888955116272 0.1111111119389534 F F F
0.1111111044883728 0.8888888955116272 0.1111111119389534 F F F
0.2241808649313520 0.1152270035321226 0.2231591988319984 T T T
0.5546509287624575 0.1109923250217694 0.2208809379047290 T T T
0.8881687574869508 0.1103078873095819 0.2202098319798016 T T T
0.2228897227921699 0.4453754165710507 0.2223828435694042 T T T
0.5527560507853125 0.4439032409358525 0.2221554370194236 T T T
0.8882178659299027 0.4453216737946959 0.2201645331218407 T T T
0.5530299971090686 0.7769882440922168 0.2218982658546983 T T T
0.8900917827246887 0.7786533515908347 0.2195989931961417 T T T
0.2240711672965772 0.7770277475185887 0.2227380594713489 T T T
0.0009209264072347 0.0007517014150198 0.3323183095365563 T T T
0.3348590752944199 0.0022020649117158 0.3333107822553033 T T T
0.6665419253740106 0.0010101771758796 0.3321598660423267 T T T
0.3331819649879260 0.3383982383102443 0.3427064016943071 T T T
0.6665382104035169 0.3347223094242103 0.3318620703423125 T T T
0.9958197493184949 0.3326603631999014 0.3304163160336693 T T T
0.3338213905241845 0.6650753115060317 0.3418016475900092 T T T
0.6716593766991258 0.6704147150642192 0.3308062956931863 T T T
0.0014533705070320 0.6690969449893278 0.3319687732786794 T T T
0.3185304834194184 0.4030278778051353 0.4406386301330808 T T T
0.3428758786727898 0.5945464490594102 0.4404843632644615 T T T
0.4629450650067445 0.3884751562080305 0.4799596697654371 T T T
0.2163806294378287 0.6133769805845023 0.4761083544034135 T T T
0.1407174385569917 0.2846622918702240 0.4647455336652626 T T T
0.4809664386125459 0.7022088900016792 0.4534903382594512 T T T

```

0.0969935948873808	0.1611725527697226	0.4477734870669425	T	T	T
0.1057287091097831	0.4917231985321790	0.4777095696299485	T	T	T
0.4490771385773837	0.4178516537454073	0.5308717020969628	T	T	T
0.4448989953985450	0.2509300650191557	0.4768596135721391	T	T	T
0.6009071583726365	0.4867598980037058	0.4630417618924225	T	T	T

enol2: -269.657948 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2253618291990236	0.1134380267041877	0.2228176174018870	T	T	T
0.5574990578014649	0.1118420465553172	0.2211980345321223	T	T	T
0.8904660452889814	0.1106349365734047	0.2202064166189359	T	T	T
0.2260974279289343	0.4433418577030039	0.2224627920932036	T	T	T
0.5516363742441257	0.4402833079033428	0.2245561176759736	T	T	T
0.8882909747599541	0.4439005472125146	0.2204091855383936	T	T	T
0.5563706110360727	0.7771462653775316	0.2203312676552827	T	T	T
0.8901410930967941	0.7765588211667875	0.2198616022107203	T	T	T
0.2235311968607334	0.7771110134935384	0.2199786863353523	T	T	T
0.0003920469238849	0.9950295238025646	0.3310050542076510	T	T	T
0.3351581671935975	0.9956079133265661	0.3321911415509788	T	T	T
0.6698980362741480	0.9977620591775960	0.3320111556470167	T	T	T
0.3348272039825417	0.3312424864997965	0.3460468263899230	T	T	T
0.6730583613016279	0.3315824887705219	0.3336669400399686	T	T	T
0.0018046102779792	0.3337628928210563	0.3300913313786467	T	T	T
0.3374505572029776	0.6687154560725830	0.3330166370463132	T	T	T
0.6732322052898567	0.6697211629495428	0.3309511827426377	T	T	T
0.0053417143884005	0.6676781944430559	0.3323801641376747	T	T	T
0.4128343785686113	0.3823261805835401	0.4550629597169618	T	T	T
0.5094237911448047	0.2864973317957507	0.4801461420158546	T	T	T
0.2228943870943638	0.2899566058019545	0.4434347956174705	T	T	T
0.6889189717700717	0.3554861201117276	0.4534852344597198	T	T	T
0.5124875788502550	0.5646244638907163	0.4683803061051464	T	T	T
0.5208635064423532	0.3043967426052632	0.5331144095982268	T	T	T

0.4322504161827965	0.1407115286431520	0.4684607180899931	T	T	T
0.4667884852834447	0.6320188008343521	0.4422680746901761	T	T	T
0.1455945138723891	0.1434076824078474	0.4527332912590580	T	T	T
0.1483775682667741	0.3627355825673035	0.4513200263483412	T	T	T
0.7524998110975645	0.4892871621973711	0.4550784321663599	T	T	T

```

dirad1:      -269.430508 eV
2.820000000000000
3.000000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
-1.500000000000000  2.5980762113533160  0.000000000000000
0.000000000000000  0.000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.000000000000000 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.3333333333333357 0.000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.000000000000000 0.6666666666666643 0.000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2226259813420972 0.1097952475032050 0.2200508566299998 T T T
0.5579761648454469 0.1125827258874531 0.2222638524864468 T T T
0.8896085833328784 0.1096031160263757 0.2206350849534254 T T T
0.2228603990302661 0.4435597636824009 0.2199412647554839 T T T
0.5580756367873367 0.4449475583710630 0.2229666697956007 T T T
0.8869752821917872 0.4417677831882172 0.2222955100150478 T T T
0.5573914253572215 0.7748812275463531 0.2219145932021732 T T T
0.8865422378636567 0.7752719838355404 0.2220451193030679 T T T
0.2237927979626397 0.7767938961370355 0.2193502186035774 T T T
0.0025186780171357 0.9981541237551363 0.3320334604039783 T T T
0.3333822047588927 0.9951742505447724 0.3311517154113880 T T T
0.6692983553236652 0.9957270601723376 0.3318141909676710 T T T
0.3329147178886592 0.3305826206024163 0.3308786528034512 T T T
0.6697910490913306 0.3299759592056694 0.3372555357884854 T T T
0.0040966336594205 0.3313268505601447 0.3318265499213253 T T T
0.3359192800784240 0.6649246870359283 0.3317803867421568 T T T
0.6694462119684360 0.6658621246013736 0.3432061434813208 T T T
0.0058171547694282 0.6673437165375837 0.3305029524806214 T T T
0.5663598296357929 0.4251433894438078 0.4589811108965034 T T T
0.6718539456226152 0.6328007543692848 0.4474472909600101 T T T
0.5938921508914246 0.7382517298409416 0.4799472683002083 T T T
0.6608816736426678 0.3407764831056169 0.4357504045586958 T T T
0.8521101086782636 0.7017580111948403 0.4654591386945008 T T T
0.4244977205911051 0.3642287796122962 0.4391494096002543 T T T

```

0.5537956183297307	0.4029158571838059	0.5120478794005238	T	T	T
0.8790899360177894	0.6023418642849140	0.4569084545540266	T	T	T
0.6744510420207087	0.8844727367293860	0.4687808794517311	T	T	T
0.4521666278581772	0.6877767493600916	0.4649088770936474	T	T	T
0.5975533539639453	0.7220337415045558	0.5326927795234125	T	T	T

```

dirad2:      -269.242548 eV
2.8200000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.0000000000000000 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.3333333333333357 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.6666666666666643 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0000000000000000 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.1111111111111143 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.2222222222222214 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.5555555555555571 0.11111111111111072 F F F
0.4444444444444429 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.7777777777777786 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.1111111111111143 0.8888888888888857 0.11111111111111072 F F F
0.2215569989669158 0.1127956376049196 0.2219446747408852 T T T
0.5549374265860909 0.1135424717894036 0.2217434045356373 T T T
0.8873503003960315 0.1118029867461017 0.2204846868486643 T T T
0.2229103766825308 0.4424818230208284 0.2230924164771043 T T T
0.5538079550242774 0.4430931265441410 0.2229546339752389 T T T
0.8846718806484640 0.4433331719044255 0.2219944381052658 T T T
0.5539973904223318 0.7780712461321595 0.2199599671221025 T T T
0.8872487487938031 0.7774822704147818 0.2200381133708967 T T T
0.2199841040320129 0.7765414008752581 0.2195560562314343 T T T
0.9951999262685249 0.0000003962163716 0.3312635242887266 T T T
0.3283981080932010 0.9966156800836138 0.3306307682182900 T T T
0.6635224891737628 0.0009144330575967 0.3316257212262742 T T T
0.3299706209087026 0.3360640765061477 0.3385186156625057 T T T
0.6626660954154852 0.3347944126420881 0.3417229786721870 T T T
0.9941004270717462 0.3337748077034781 0.3323193861473995 T T T
0.3291329825495261 0.6690124824635589 0.3315993351330614 T T T
0.6657530602497078 0.6712099993632072 0.3309680184605470 T T T
0.9966213120051095 0.6672432096945639 0.3319205736814165 T T T
0.6222462795872098 0.3036267847331165 0.4430819628895670 T T T
0.4953757375351059 0.3691319122272242 0.4698944245243900 T T T
0.5874123318085812 0.5732480952304182 0.4828670384362657 T T T
0.7876819035427371 0.3889063638092630 0.4752840432131678 T T T
0.3300483274414968 0.2964718903374512 0.4351075510289718 T T T
0.4513299727092743 0.3003548858461331 0.5176655103035334 T T T

```

0.4866635732003171	0.6075422535608492	0.5012438103234628	T	T	T
0.6468098816489991	0.6530149378611493	0.4376807362932053	T	T	T
0.8587465264869628	0.3309707684400914	0.4628632941878653	T	T	T
0.5549156851955416	0.1531377289207917	0.4451054925181420	T	T	T
0.6996636863122263	0.6167663958300942	0.5175349117769198	T	T	T

dirad3: -268.569777 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2206389359546015	0.1127311440436789	0.2224003257471569	T	T	T
0.5544119409749588	0.1137032331977776	0.2227339714995435	T	T	T
0.8860941871420774	0.1103061636521652	0.2201304346687648	T	T	T
0.2213667475445540	0.4432928292838431	0.2216369008878428	T	T	T
0.5526586085220461	0.4420045094799260	0.2238885515257664	T	T	T
0.8855255793623822	0.4440627132603286	0.2205790797806870	T	T	T
0.5529566336182629	0.7771435508026889	0.2199220271465985	T	T	T
0.8857537397368536	0.7768440078111137	0.2197422106937514	T	T	T
0.2200468149849092	0.7778694226905071	0.2193195047034700	T	T	T
0.9916765662834048	0.9963759202598838	0.3314942188763927	T	T	T
0.3238899589274339	0.9931799326636929	0.3317449584546427	T	T	T
0.6603910583540896	0.9959458863192399	0.3316770025059858	T	T	T
0.3244612733549980	0.3326687422146335	0.3368696946840170	T	T	T
0.6565297100388440	0.3271299051260751	0.3369051381138112	T	T	T
0.9925492055390317	0.3311129852784481	0.3302666815190586	T	T	T
0.3267201355337395	0.6678979547967573	0.3312323133362559	T	T	T
0.6623084292939281	0.6696057934612061	0.3317988874086815	T	T	T
0.9950122162121147	0.6667793911867279	0.3307716749848069	T	T	T
0.4077039995783836	0.4610152358372100	0.5367070139596307	T	T	T
0.4677971795596454	0.4279813511495090	0.4708680323388237	T	T	T
0.5714188325593977	0.3202473665049820	0.4770166165225214	T	T	T
0.3091138150649829	0.3332385971927246	0.4332633003018515	T	T	T
0.7101082233832008	0.3647852802361268	0.4318110487107719	T	T	T
0.5274065803158858	0.5417024309190902	0.5674682048831504	T	T	T

0.3170948246974792	0.3308042451630853	0.5608599618977753	T	T	T
0.5652837318965908	0.5618092161072809	0.4479205383218350	T	T	T
0.6421776617955722	0.3542378053090282	0.5241683719140876	T	T	T
0.4686618939695851	0.1728287381555849	0.4765808883578874	T	T	T
0.3335266481400612	0.5355305946833691	0.5306772366679483	T	T	T

dirad4: -268.940531 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2200665377879699	0.1123529785192197	0.2229891067493888	T	T	T
0.5524300450041023	0.1103182557409757	0.2209387080345362	T	T	T
0.8850533656020466	0.1080104873108256	0.2202934652394644	T	T	T
0.2199666847961453	0.4414378356841901	0.2213219468628436	T	T	T
0.5527930059829607	0.4422162360436021	0.2237054218289050	T	T	T
0.8848255245601143	0.4423246389774005	0.2204793106848372	T	T	T
0.5524260104348789	0.7734183565303197	0.2214198113981830	T	T	T
0.8822629538252926	0.7734847581668134	0.2220610088431583	T	T	T
0.2182208975245758	0.7762695355515286	0.2193767626952955	T	T	T
0.9890790059260205	0.9920628846098104	0.3321219542804210	T	T	T
0.3219666270605475	0.9900919439869708	0.3321082609153113	T	T	T
0.6580187933866855	0.9935294198263508	0.3311364063592631	T	T	T
0.3212169469106247	0.3256267554562852	0.3372645191884513	T	T	T
0.6553648570372508	0.3252697656155178	0.3334377021644597	T	T	T
0.9900231395965652	0.3269426715629246	0.3305585000762088	T	T	T
0.3224757103630201	0.6638713831413212	0.3303455636180890	T	T	T
0.6590098564376227	0.6634979009740897	0.3408522604993593	T	T	T
0.9928120906189100	0.6629206220637819	0.3322809088278533	T	T	T
0.5734830194213842	0.3514587044394554	0.4882524757934972	T	T	T
0.4852307345951846	0.4648924850924991	0.4683204740860676	T	T	T
0.6187467634814581	0.6534793752364680	0.4405723664320928	T	T	T
0.7028939069874410	0.3469853971638271	0.4434843784461046	T	T	T
0.3209291381101417	0.3623198799241640	0.4338466943445353	T	T	T
0.4379830273630811	0.4916209584979711	0.5151549272704232	T	T	T

0.7541863771643234	0.7129809807741734	0.4633894333806835	T	T	T
0.8153321800122862	0.4664746562781628	0.4423979315432012	T	T	T
0.4657901069049429	0.2087102221622491	0.4940093901294665	T	T	T
0.6453315621082718	0.4025918849545967	0.5345605729327597	T	T	T
0.5654098224308143	0.7465035369663183	0.4488086183741989	T	T	T

dirad5: -269.821017 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 6 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2262867268176264	0.1138154825915587	0.2219507592343542	T	T	T
0.5580991695182557	0.1111634504553144	0.2204076559328492	T	T	T
0.8917776160138468	0.1110885648977989	0.2204426260332883	T	T	T
0.2265883167532885	0.4455960361791376	0.2230506370763121	T	T	T
0.5566911067669867	0.4445016843132841	0.2222986771537270	T	T	T
0.8918767226585134	0.4450349310783872	0.2202216161066860	T	T	T
0.5561542612682859	0.7764505001795592	0.2226395919956281	T	T	T
0.8892282543638106	0.7770468248539188	0.2209597566496190	T	T	T
0.2261039382832710	0.7767548245745287	0.2215523242685628	T	T	T
0.0073597424128837	0.0030234389902586	0.3325457194705739	T	T	T
0.3388071961813325	0.0012389585559185	0.3321640075639677	T	T	T
0.6732672203908115	0.0031411096301658	0.3319640445341827	T	T	T
0.3392520064307540	0.3352506807496931	0.3405681054052452	T	T	T
0.6733903363233338	0.3330163495151404	0.3314372204028821	T	T	T
0.0038178281067498	0.3329508456258289	0.3315112515953315	T	T	T
0.3363102736164646	0.6680106828167754	0.3404819775133754	T	T	T
0.6769372666420518	0.6695600486351619	0.3331496858083163	T	T	T
0.0072075860233264	0.6685040372035469	0.3318664974169047	T	T	T
0.4416335817979916	0.5561368204215513	0.4644431620547642	T	T	T
0.3406952304080055	0.6507204008750980	0.4407235367310225	T	T	T
0.3549069065390538	0.3596040951714383	0.4416346725151567	T	T	T
0.4482612859415384	0.2785118638480516	0.4684657846198653	T	T	T
0.6342456737569013	0.6519672145449295	0.4463127666048186	T	T	T
0.1978637491871679	0.5754898708616951	0.4569752962398429	T	T	T

0.4034749743798651	0.7905109859771228	0.4598387167287392	T	T	T
0.6848766511165895	0.7816868494260257	0.4559424722052307	T	T	T
0.2085608385900774	0.2867523649277464	0.4543880658459102	T	T	T
0.4407226229272616	0.5537706788236259	0.5180027959047920	T	T	T
0.3942174309175364	0.1540812088995154	0.4510006097861966	T	T	T

```

dirad6:      -268.981340 eV
2.8200000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
-1.5000000000000000  2.5980762113533160  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  7.3484692283495336
36 3 2 6      # Pt C O H
Selective dynamics
Direct
0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.0000000000000000  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.0000000000000000  0.3333333333333357  0.0000000000000000  F F F
0.3333333333333357  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.6666666666666643  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.0000000000000000  0.6666666666666643  0.0000000000000000  F F F
0.1111111111111143  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.2222222222222214  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.1111111111111143  0.5555555555555571  0.11111111111111072  F F F
0.4444444444444429  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.7777777777777786  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.1111111111111143  0.8888888888888857  0.11111111111111072  F F F
0.2237453354677167  0.1144358555318213  0.2216886393249094  T T T
0.5560748245994553  0.1108211682607744  0.2199214247921043  T T T
0.8890831756149147  0.1109211093537193  0.2200027308459129  T T T
0.2249535186473263  0.4449815580986365  0.2236377467571877  T T T
0.5542406837274888  0.4436796166583653  0.2224104413863745  T T T
0.8898471682371795  0.4448727437791740  0.2199063485287009  T T T
0.5538246244876888  0.7752667965796364  0.2238014551096420  T T T
0.8868170448974015  0.7779038579996719  0.2203413778773766  T T T
0.2239730659211589  0.7778833548943354  0.2208698357672363  T T T
0.0030272025544639  0.0025006025114602  0.3318727825045045  T T T
0.3353533369896571  0.0030998787530081  0.3308365386473722  T T T
0.6696114079347115  0.0041798866132300  0.3319668624858524  T T T
0.3345166662022886  0.3332570057516032  0.3417127349250005  T T T
0.6698101384876424  0.3328405519153091  0.3313044844187784  T T T
-0.0019955999645780  0.3315333446755134  0.3311188430519096  T T T
0.3329718868243070  0.6669632454276019  0.3374167627946816  T T T
0.6710625237691727  0.6705222845280434  0.3338236322798868  T T T
0.0011344848253766  0.6677801036010319  0.3303342213932978  T T T
0.4217079935299149  0.6710743352932506  0.4761938075803793  T T T
0.4817805185647186  0.5266805824279754  0.4733276534129584  T T T
0.3479946137734124  0.3449302970710451  0.4426283177702973  T T T
0.2848605163837359  0.6497797519084683  0.4331702804745319  T T T
0.6646863682745109  0.6160951733940161  0.4444674506556723  T T T
0.5460952330558911  0.8071842770734388  0.4721816543485107  T T T

```

0.3626867592890918	0.6631236178197842	0.5245888262532206	T	T	T
0.5034015607019915	0.4979529653892513	0.5237027537138156	T	T	T
0.7060473226906848	0.5264085293109330	0.4404912011155920	T	T	T
0.2090215451881637	0.3039546998433829	0.4588324603787175	T	T	T
0.3805171568391949	0.2391178711930263	0.4566656433652064	T	T	T

monoradical CHOHCHOHCH3: -273.785503 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336
 36 3 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2218080818599715	0.1137390229254006	0.2212816653194072	T	T	T
0.5557105687198349	0.1148759416648202	0.2222563121540598	T	T	T
0.8876193391896992	0.1127807040989547	0.2207685645775794	T	T	T
0.2220100452069519	0.4445352169451535	0.2214431952073752	T	T	T
0.5547667413542563	0.4443940818639085	0.2224987167520667	T	T	T
0.8851648983662778	0.4447209875245702	0.2223347485336400	T	T	T
0.5542307335755963	0.7793134633540316	0.2202923092430824	T	T	T
0.8882969862212594	0.7792016834083231	0.2202050487679936	T	T	T
0.2212601010592177	0.7784538829181589	0.2196766045508852	T	T	T
0.9956725265369812	0.0013250715159533	0.3318724188936871	T	T	T
0.3301398655219455	0.9993542480463035	0.3313590758571940	T	T	T
0.6640600627263304	0.0026466941814961	0.3323650567925546	T	T	T
0.3288622142251751	0.3359536236878179	0.3343129024877362	T	T	T
0.6636977524747252	0.3356249102457819	0.3424093988183063	T	T	T
0.9958864916044036	0.3359825554009302	0.3323592397713748	T	T	T
0.3309133680178685	0.6709039857086480	0.3322994817587161	T	T	T
0.6654376176147642	0.6721080436077914	0.3311167137511087	T	T	T
0.9990718294420525	0.6701533029723672	0.3320839322432779	T	T	T
0.6556548452878653	0.3495185901073253	0.4436304634458950	T	T	T
0.4633186369440155	0.2539130889535079	0.4716676815715038	T	T	T
0.4621349180289734	0.2524446660182709	0.5452939510578935	T	T	T
0.7400947277009742	0.5315558768644953	0.4648748132729306	T	T	T
0.3616488175035062	0.3404413597021685	0.4486541478191400	T	T	T

0.3882341803648769	0.1137518268270237	0.4526105324618386	T	T	T
0.5326519963071492	0.1820789669721966	0.5635201238153367	T	T	T
0.3210267687730987	0.1800811389876167	0.5629824871766912	T	T	T
0.8578947619993584	0.6022355358969790	0.4421531412100707	T	T	T
0.4410745352358051	0.4723762207004356	0.4551051299505209	T	T	T
0.7318891256347515	0.2810443334406089	0.4582437663754119	T	T	T
0.5319943933488511	0.3919362371410695	0.5646332076331659	T	T	T

monoradical CH₂OHCOHCH₃: -273.737903 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2253879989098203	0.1135583468913360	0.2224617930054430	T	T	T
0.5580499422449149	0.1117759393622420	0.2211637979874884	T	T	T
0.8911421933849675	0.1107495468033212	0.2205780027383527	T	T	T
0.2259906663734525	0.4426891691767210	0.2224290319968114	T	T	T
0.5553936264722282	0.4422850348050751	0.2230052261382094	T	T	T
0.8885906892786376	0.4428773474947305	0.2212040198028605	T	T	T
0.5573310810278247	0.7772228422148095	0.2201811775762973	T	T	T
0.8910045804101053	0.7773729466099983	0.2202218202320285	T	T	T
0.2237738498021572	0.7764634815947373	0.2198112497984003	T	T	T
0.0023868919792693	0.9981225994293185	0.3324938185795314	T	T	T
0.3353545079352857	0.9967752481984526	0.3310693773488979	T	T	T
0.6708989372533261	0.9980064123704128	0.3320767611693974	T	T	T
0.3368843453732294	0.3327321311108579	0.3445014867667452	T	T	T
0.6728043442646969	0.3335527798098298	0.3340625406879765	T	T	T
0.0048516762860850	0.3321584999989136	0.3317349499006046	T	T	T
0.3373080043390136	0.6663544573778855	0.3317973257367643	T	T	T
0.6714420835724717	0.6682443125911869	0.3315256266289499	T	T	T
0.0054353334567897	0.6679194323085396	0.3319278570497788	T	T	T
0.3450693344913771	0.3162067296921837	0.4469560356286926	T	T	T
0.2392504807311338	0.3983135614839683	0.4777506247899267	T	T	T
0.5416008624706364	0.4095545998775624	0.4712978688106202	T	T	T
0.6406828642552662	0.3225691778366378	0.4485064895476095	T	T	T
0.2732169929232037	0.1307336011915882	0.4645420543429940	T	T	T
0.2999007504419129	0.5435782593626961	0.4655219850968686	T	T	T

0.0964077774517863	0.3280526552226232	0.4615657385450641	T	T	T
0.1537673181347952	0.0566409560432503	0.4433039714280582	T	T	T
0.6184358813512371	0.5527248823646994	0.4559082305073694	T	T	T
0.5386739431650777	0.4026103547242455	0.5245870231155830	T	T	T
0.5576591363293411	0.1906142845954164	0.4537375198615443	T	T	T
0.2404447924880753	0.3836356315143947	0.5306474797446683	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOHCH₂: -273.414571 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.3333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.6666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2257122144248963	0.1158872709450653	0.2222220219642468	T	T	T
0.5572945204715331	0.1127247516499085	0.2201685411993971	T	T	T
0.8911942308268220	0.1133598202572829	0.2206796954019160	T	T	T
0.2254271071627452	0.4456396182269684	0.2221090452230472	T	T	T
0.5556458823800161	0.4460808695985934	0.2225773306352089	T	T	T
0.8911178657920041	0.4468090805903455	0.2201595941321611	T	T	T
0.5582397067496141	0.7793037874932567	0.2213100138226511	T	T	T
0.8884164705246438	0.7788485263340743	0.2215620601173678	T	T	T
0.2237225957023157	0.7804796542471441	0.2198688708125507	T	T	T
0.0055397193374267	0.0057932172599905	0.3321527974157184	T	T	T
0.3374412155208038	0.0037578063308685	0.3318726329303716	T	T	T
0.6711180800760606	0.0059671819201315	0.3321508824490221	T	T	T
0.3363841838941578	0.3374195996692942	0.3414705794721400	T	T	T
0.6718442975045129	0.3360157014273304	0.3311887831951792	T	T	T
0.0031963670566780	0.3378194243037874	0.3318377811605549	T	T	T
0.3350985721823156	0.6720212179167169	0.3312912426423056	T	T	T
0.6723562304709806	0.6724097025721637	0.3343146688157133	T	T	T
0.0057285210099822	0.6709145904674093	0.3320211955257494	T	T	T
0.5221725774313484	0.4792020476056356	0.5451227385870206	T	T	T
0.5320562163550662	0.4605485837946904	0.4720331388255246	T	T	T
0.3435132670529603	0.3546256778872377	0.4418353773945021	T	T	T
0.4423410421295884	0.5921378892446530	0.5561049170263007	T	T	T
0.6428909823412704	0.6450222276115208	0.4465561097808610	T	T	T
0.6612069258941181	0.5428359791791818	0.5653001283854823	T	T	T

0.4385964998891162	0.3428564419915865	0.5668534636367705	T	T	T
0.4635797616083694	0.6336153343172806	0.6006288181798776	T	T	T
0.6121421387295209	0.3934473382075958	0.4616436359875695	T	T	T
0.5856121478137274	0.7152228089695492	0.4608605290513043	T	T	T
0.2590123290875948	0.4146217847069898	0.4551216322837950	T	T	T
0.2764901607160236	0.2127874911862493	0.4591582931462470	T	T	T

monoradical CH₂OCHOHCH₃: -273.035624 eV
 2.8200000000000000
 3.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -1.5000000000000000 2.5980762113533160 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.0000000000000000	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.3333333333333357	0.0000000000000000	F	F	F
0.3333333333333357	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.6666666666666643	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.0000000000000000	0.6666666666666643	0.0000000000000000	F	F	F
0.1111111111111143	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.2222222222222214	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.5555555555555571	0.11111111111111072	F	F	F
0.4444444444444429	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.7777777777777786	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.1111111111111143	0.8888888888888857	0.11111111111111072	F	F	F
0.2220847707700850	0.1117835270560058	0.2202014322350699	T	T	T
0.5565057976161261	0.1137969583882696	0.2221900624179874	T	T	T
0.8889787406066615	0.1120579399961548	0.2204952137861725	T	T	T
0.2221499799772883	0.4454640253425844	0.2199906081621436	T	T	T
0.5566655797619887	0.4448524918193301	0.2222005090902638	T	T	T
0.8863369459356377	0.4440614540108607	0.2225076220452474	T	T	T
0.5561785610653787	0.7773683569653853	0.2206242158496211	T	T	T
0.8882959296069151	0.7782018055409460	0.2207153293575974	T	T	T
0.2227570567669668	0.7782895665263398	0.2196965483095313	T	T	T
0.0014814506780657	0.0031776989126020	0.3319156559544194	T	T	T
0.3309810746247362	-0.0011804997146985	0.3311519542167607	T	T	T
0.6674065994563178	0.0010998784095576	0.3315355615232847	T	T	T
0.3315528264748582	0.3344831556229291	0.3313060770597328	T	T	T
0.6682094014407923	0.3336009530204234	0.3380627763507777	T	T	T
0.0032815094864603	0.3353579038112905	0.3318023962413729	T	T	T
0.3328352250512533	0.6684849479524495	0.3320699227943232	T	T	T
0.6673881867628436	0.6721043359220171	0.3332826955128981	T	T	T
0.0033597457663390	0.6700809944017213	0.3312724557116655	T	T	T
0.5652510263219560	0.3864649244648430	0.4707760453729709	T	T	T
0.6746745025361823	0.5942031457347492	0.4791874667072905	T	T	T
0.5913116259670806	0.6747495926085053	0.5233529191724351	T	T	T
0.6638089961314870	0.3212632402145963	0.4362410778247928	T	T	T
0.8538784218078780	0.6501024922047881	0.4975455116391908	T	T	T
0.6778575344492801	0.6518329629650296	0.4267710716965475	T	T	T

0.6768310649175711	0.8239058587772344	0.5247555081132679	T	T	T
0.5807953303976124	0.6221840975393081	0.5726520932232171	T	T	T
0.8849669032589379	0.5651780353451925	0.4761544934599853	T	T	T
0.4305170583818202	0.3462635966471647	0.4484180465234267	T	T	T
0.5405089923639904	0.3225415752474008	0.5191661616514808	T	T	T
0.4546926055342941	0.6397748172468898	0.5063489954713676	T	T	T

monoradical CH₂OHCHOCH₃: -272.861052 eV
 2.820000000000000
 3.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
 -1.500000000000000 2.5980762113533160 0.000000000000000
 0.000000000000000 0.000000000000000 7.3484692283495336

36 3 2 7 # Pt C O H

Selective dynamics

Direct

0.000000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.000000000000000	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.333333333333357	0.000000000000000	F	F	F
0.333333333333357	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.666666666666643	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.000000000000000	0.666666666666643	0.000000000000000	F	F	F
0.111111111111143	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.222222222222214	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.555555555555571	0.1111111111111072	F	F	F
0.444444444444429	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.777777777777786	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.111111111111143	0.888888888888857	0.1111111111111072	F	F	F
0.2213282990892861	0.1092760625742445	0.2193068104254334	T	T	T
0.5566040439529196	0.1156896129645785	0.2200829809782943	T	T	T
0.8924991511265910	0.1154555616645686	0.2199762744767106	T	T	T
0.2243258124004079	0.4483414456604738	0.2205137842155439	T	T	T
0.5574720528854092	0.4482403555912164	0.2205204681289447	T	T	T
0.8908913949240795	0.4487557051864578	0.2208796176427844	T	T	T
0.5578408981599224	0.7820059945431953	0.2205795268489590	T	T	T
0.8851799469905710	0.7775587601846310	0.2242380993700787	T	T	T
0.2259511947036286	0.7776159684683805	0.2238919015251785	T	T	T
0.0070670980525062	0.0132310987843349	0.3333728182617264	T	T	T
0.3395447071907912	0.0124994325377085	0.3331335091179093	T	T	T
0.6772841421580075	0.0202845211744407	0.3297043253706614	T	T	T
0.3336178091755554	0.3333222332385744	0.3286479559396370	T	T	T
0.6728799386352912	0.3450549603263862	0.3323444406144143	T	T	T
0.0060900113243469	0.3453740840998082	0.3319680465273331	T	T	T
0.3393267191124004	0.6837989680056795	0.3352457718980613	T	T	T
0.6792788995146305	0.6842650065881333	0.3354709263287410	T	T	T
0.0065936601913458	0.6782111329201619	0.3341704472379271	T	T	T
0.4334602630644754	0.5376942121728717	0.4624950778587972	T	T	T
0.5885906380165306	0.5565707965143194	0.5061614808820393	T	T	T
0.2884136166511211	0.5531512658312455	0.5006773577211783	T	T	T
0.7082897594471663	0.5042947899471687	0.4776864182189531	T	T	T
0.5077526682094518	0.6797784375801073	0.4143659476241343	T	T	T
0.6638972586053136	0.6983412375051521	0.5242761437922101	T	T	T

0.5260980013215720	0.4647763189480361	0.5475820835688224	T	T	T
0.2255872338221739	0.4425204817291605	0.5363442470501871	T	T	T
0.3478717067775342	0.6847412687744603	0.5259819317604507	T	T	T
0.7807621299284296	0.5920653619773502	0.4437380096074962	T	T	T
0.3721242097831532	0.4016550195231584	0.4378490770340315	T	T	T
0.1805144974433830	0.5422571208621274	0.4683069663548424	T	T	T