

Supplementary Information for

Atomic-scale computational design of hydrophobic RE surface-doped Al₂O₃ and TiO₂

Kamil Czelej,^{a*} Marcin Roland Zemła,^a Piotr Śpiewak,^a Tomasz Wejrzanowski,^a and Krzysztof Jan Kurzydłowski

^aFaculty of Materials Science and Engineering, Warsaw University of Technology, 141 Wołoska Str., 02-507 Warsaw, Poland. E-mail: kamil.czelej@inmat.pw.edu.pl

Table S1. Detailed geometries of initial (POSCAR) and relaxed (CONTCAR) structures used in this study

POSCAR Al203_CeO				CONTCAR Al203_CeO			
1.0000000000000000				1.0000000000000000			
9.6134071999999999				9.6134071999999999			
-4.8067031000000000				-4.8067031000000000			
0.0000000000000000				0.0000000000000000			
Al O Ce				Al O Ce			
47 73 1				47 73 1			
Selective dynamics				Selective dynamics			
Direct				Direct			
0.0002347344712471	0.0001873334343984	0.1634481045620299	T T T	0.0004032306749184	0.0003521150656307	0.1643057423616298	T T T
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F F F	0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F F F
0.0019892926715705	0.0022864589529749	0.3014482768315682	T T T	0.0009315195828089	0.0008566850805072	0.3024089979475539	T T T
0.0010822415542573	0.0013286006058402	0.3954151692266298	T T T	0.0021921496005136	0.0018215281821230	0.3958699303057530	T T T
0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.3198422148333865	T T T	0.3339505195334494	0.1673392569610026	0.3208823825323002	T T T
0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.2238265317885703	T T T	0.3336194656650182	0.1670103045535683	0.2248912874025269	T T T
0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.0865275873130216	F F F	0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.0865275873130216	F F F
0.1666664937386102	0.3333349336305677	0.0087816539838670	F F F	0.1666664937386102	0.3333349336305677	0.0087816539838670	F F F
0.1667622763480105	0.3321069332414754	0.3859490814710827	T T T	0.1683733141196940	0.3334799657271308	0.3864156423085314	T T T
0.1667000942817292	0.3332616644895416	0.1450526056254778	T T T	0.1667739844406318	0.3333426079189951	0.1465162837705137	T T T
0.1667047304053145	0.3331679425893606	0.2410731951421119	T T T	0.1672528718058225	0.3336598070679745	0.2422389275217053	T T T
0.9999999978017655	0.5000000006005677	0.1633464583664817	T T T	1.0001574202292515	0.50001702617863515	0.1642421464944414	T T T
0.9999999978017655	0.5000000006005677	0.0689647452887385	F F F	0.9999999978017655	0.5000000006005677	0.0689647452887385	F F F
0.9999999978017655	0.5000000006005677	0.3020542754427103	T T T	1.0004968044937217	0.5005608983870595	0.3024643867503939	T T T
0.9999999978017655	0.5000000006005677	0.3964937548892113	T T T	1.0007830560819779	0.5009408553232181	0.3961169384182397	T T T
0.3338767341030910	0.6656226112235276	0.3170904202984705	T T T	0.3340316493210956	0.667272549977745	0.3185002059653739	T T T
0.3332067902689677	0.6666993596172353	0.2226892200458732	T T T	0.3336321162458732	0.6670436014664023	0.2239119196848504	T T T
0.3341141889254817	0.6688731214709055	0.4236342691880114	T T T	0.3346149346324397	0.6682884365283233	0.4304917513982991	T T T
0.3333334792577531	0.6666664822491555	0.0865275873130216	F F F	0.3333334792577531	0.6666664822491555	0.0865275873130216	F F F
0.1666665267184939	0.8333335354028009	0.0087816539838670	F F F	0.1666665267184939	0.8333335354028009	0.0087816539838670	F F F
0.1678930864800747	0.8346558781337841	0.3859490814710821	T T T	0.1681767396870344	0.8359129008377197	0.3864874437624075	T T T
0.1667383555920103	0.8334389648194374	0.1450526056254778	T T T	0.1667986295717968	0.8334899545358011	0.1465184184466726	T T T
0.1668320774921521	0.8335373228431625	0.2410731951421119	T T T	0.1672206221824669	0.8341201364072379	0.2422467217282272	T T T
0.4998126665656504	0.0000474010368487	0.1634481045620301	T T T	0.4999627000683417	0.0002363066778580	0.1643057423616298	T T T
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F F F	0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F F F
0.4977113541047177	-0.0002993532237044	0.3014482768315682	T T T	0.5002483545470476	1.0007026203427933	0.3023713954730313	T T T
0.4986713993941742	-0.0002463590515829	0.3954151692266298	T T T	0.4989804710316221	1.0011958431610817	0.3958013220343931	T T T
0.831746348546706	0.1661232330444186	0.3170904202984705	T T T	0.8337413712659077	0.1672545206289814	0.1849436405861244	T T T
0.8334930408825004	0.1667931768785416	0.2226892200458732	T T T	0.8336738940395378	0.1670176013081129	0.2239140666776919	T T T
0.8347594040796631	0.1658857782220264	0.4236342691880114	T T T	0.8344311856088761	0.167127229655283	0.4304588778473426	T T T
0.8333334745256380	0.1666664878897564	0.0865275873130216	F F F	0.8333334745256380	0.1666664878897564	0.0865275873130216	F F F
0.6666664795107380	0.333334929979728	0.0087816539838670	F F F	0.6666664795107380	0.333334929979728	0.0087816539838670	F F F
0.6653441367797548	0.3332377103885693	0.3859490814710827	T T T	0.6657303861201137	0.3331967454379438	0.3863967522361105	T T T
0.6665610500941015	0.3332989825448556	0.1450526056254778	T T T	0.6666510266811814	0.3333715961035495	0.1465174097833616	T T T
0.6664626920703763	0.333925653312710	0.2410731951421119	T T T	0.6667568979160180	0.3336173169603079	0.2422327946713783	T T T
0.4999525965823810	0.4997652711693525	0.1634481045620299	T T T	0.5000932396517569	0.4999253889057149	0.1643057423616298	T T T
0.4999999976192271	0.50000000056406009	0.0689647452887385	F F F	0.4999999976192271	0.50000000056406009	0.0689647452887385	F F F
0.5002993508429306	0.4980177129609290	0.3014482768315682	T T T	0.5003312396036262	0.500133833465849	0.3023513077614884	T T T
0.5002463566708045	0.498917764086342	0.3954151692266298	T T T	0.500420733685126	0.4996401321676027	0.3957656282875109	T T T
0.8343773789559191	0.668236077550459	0.3170904202984705	T T T	0.8340718687327868	0.6675978818415030	0.3185009598300784	T T T
0.8333006305622115	0.6656069155272142	0.2226892200458732	T T T	0.8336181931469213	0.6669709144144431	0.2239149771253210	T T T
0.8311268687085457	0.6652405323300532	0.4236342691880113	T T T	0.8332735849471220	0.6672176592576174	0.4304839987251412	T T T
0.8333335079302913	0.6666664818840786	0.0865275873130216	F F F	0.8333335079302913	0.6666664818840786	0.0865275873130216	F F F
0.6666665265359555	0.833333530377240	0.0087816539838670	F F F	0.6666665265359555	0.833333530377240	0.0087816539838670	F F F
0.6666665265359555	0.833333530377240	0.387590217299449	T T T	0.6675049165246604	0.8342339338976207	0.3865473108088457	T T T
0.6666665265359555	0.833333530377240	0.1450207961803517	T T T	0.6667401862622321	0.8334089488728074	0.1464126899204466	T T T
0.6666665265359555	0.833333530377240	0.2411410982216644	T T T	0.6671056692089695	0.8337919955985161	0.2420834541459114	T T T
0.1530766844042901	0.0000000000008953	0.1166193606019519	F F F	0.1530766844042901	0.0000000000008953	0.1166193606019519	F F F
0.4999999953497749	0.1530766598202220	0.1166193606019519	F F F	0.4999999953497749	0.1530766598202220	0.1166193606019519	F F F
0.3469233489453813	0.3469233455670704	0.1166193606019519	F F F	0.3469233489453813	0.3469233455670704	0.1166193606019519	F F F
0.3448746178973541	0.5010033013672656	0.3507605175439275	T T T	0.3454053159589973	0.5013608835880276	0.3498914010686868	T T T
0.9961391446511784	0.3409235203420549	0.3513219363356428	T T T	0.9998848915884023	0.3443649222734043	0.3505264212303187	T T T
0.1534304856136552	0.1543025162416426	0.5801581884545552	T T T	0.1545200356846697	0.1554495553335259	0.3504112418847977	T T T
0.4868146528472758	0.1672364192717586	0.2724192986340497	T T T	0.4868085683476401	0.1669608543108384	0.2722698297212694	T T T
0.3327635416170447	0.3195777268077334	0.2724192986340488	T T T	0.3339977293409127	0.3204094851031867	0.2722578147449638	T T T
0.1804222668768306	0.0131853306963669	0.2724192986340488	T T T	0.1805660676582529	0.0141656541740882	0.2722829239959498	T T T
0.1802568111645044	0.1666664883666016	0.0388729648861670	F F F	0.1802568111645044	0.1666664883666016	0.0388729648861670	F F F
0.3333334731701854	0.0135898160581789	0.0388729648861670	F F F	0.3333334731701854	0.0135898160581789	0.0388729648861670	F F F
0.4864101413990625	0.3197431843624301	0.0388729648861670	F F F	0.4864101413990625	0.3197431843624301	0.0388729648861670	F F F
0.3285536373731360	0.3431380022165557	0.4278211397309556	T T T	0.3285315485757011	0.3428369592687763	0.4278199221181390	T T T
0.1601292511939026	0.4873498055509350	0.4271424055682190	T T T	0.1597676072389614	0.4888658403546745	0.4273890129209667	T T T
0.0161439406012303	0.1716796244140008	0.4287680926573706	T T T	0.0147960928894061	0.1721193759239665	0.4284979973942781	T T T
0.0139320030823297	0.3339629340282538	0.1944342809276675	T T T	0.0139825535579604	0.3336558595679912	0.1942107006134244	T T T
0.1662595561193170	0.1800037333460498	0.1946108399141218	T T T	0.1669707935694923	0.1805151806624578	0.1943951213772531	T T T
0.1319645408276690	0.4862283183913824	0.1945181950828521	T T T	0.13199422358389158	0.486559267668676	0.1942711089832781	T T T
0.1530766717475842	0.50000000056406009	0.1166193606019519	F F F	0.1530766717475842	0.50000000056406009	0.1166193606019519	F F F
0.4999999915423317	0.6530766418031888	0.1166193606019519	F F F	0.4999999915423317	0.6530766418031888	0.1166193606019519	F F F
0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F F F	0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F F F
0.3456894315227281	0.0008801300832544	0.3501581884545552	T T T	0.3456894315227281	0.0008801300832544	0.3501581884545552	T T T
0.9989967080688984	0.8438712979810494	0.3507605175439275	T T T	0.9989967080688984	0.8438712979810494	0.3507605175439275	T T T
0.1590764783001451	0.6552156019607949	0.3513219363356428	T T T	0.157114126982847	0.6564465905608081	0.3505517634710396	T T T
0.4874956946501862	0.6657952630640478	0.272766096940					

0.0126501994023786	0.6727799451835101	0.4271424055682190	T	T	T	0.0127904198994593	0.6719483789161701	0.4274247026396907	T	T	T
0.0137716887064432	0.83733671013097303	0.1945181950828521	T	T	T	0.0139763835191285	0.8336811456650109	0.1942660853984685	T	T	T
0.1660370676591998	0.6799695818869295	0.1944342809276688	T	T	T	0.1668434363573404	0.6805869614929533	0.1942061386060595	T	T	T
0.3199963077111768	0.9862563874526918	0.1946108399141219	T	T	T	0.3199523684839704	0.9867562579426669	0.1944065118992919	T	T	T
0.6530766948064297	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766948064297	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F	0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233275985637	0.3469233452019935	0.1166193606019519	F	F	F	0.8469233275985637	0.3469233452019935	0.1166193606019519	F	F	F
0.8447844056917789	0.5038608830259665	0.3513219363356428	T	T	T	0.8450434538608239	0.5015683331388268	0.3505361043726354	T	T	T
0.5008001142939786	0.3465695268730605	0.3501581884554552	T	T	T	0.5015597437258125	0.3469441499019935	0.3503640619227313	T	T	T
0.6561287086825199	0.1551254179385580	0.3507605175439275	T	T	T	0.6565522858219752	0.1560476729737592	0.3499030851939695	T	T	T
0.9853098942256247	0.1663197330943416	0.2719766778621110	T	T	T	0.9864314984558263	0.1664709133532941	0.2718946325580378	T	T	T
0.8335187959495997	0.3207301381936017	0.2724223970924781	T	T	T	0.8346320517559236	0.3210210915541399	0.2719271723138449	T	T	T
0.6783000588483883	0.0125042983369841	0.2724609594040363	T	T	T	0.6800283166574764	0.0140403591647685	0.2718663579580454	T	T	T
0.6802567797755472	0.1666648800015247	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802567797755472	0.1666648800015247	0.0388729648861670	F	F	F
0.833334729876469	0.0135898156931020	0.0388729648861670	F	F	F	0.833334729876469	0.0135898156931020	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F
0.8272200917333914	0.3398707590180179	0.4271424055682190	T	T	T	0.8297466843665550	0.3419208853107847	0.4273896831742500	T	T	T
0.6555351868447749	0.4835660557830948	0.4287680926573706	T	T	T	0.6579015015478560	0.4868516849555741	0.4284666509107084	T	T	T
0.5145839091964555	0.1714460437576891	0.4278211397309556	T	T	T	0.5203632762162547	0.1731426292218066	0.4278258514652241	T	T	T
0.5137436757119284	0.3337400424987788	0.1946108399141219	T	T	T	0.5137675606461219	0.3335122245109750	0.1943967285361304	T	T	T
0.6662632963877417	0.1800354780400062	0.1945181950828521	T	T	T	0.6668179729673740	0.180555446687811	0.1942588726980115	T	T	T
0.8208304671916784	0.4860680058486480	0.1944342809276675	T	T	T	0.8199082148753830	0.4865474774090989	0.1942167806883295	T	T	T
0.6530766715650478	0.5000000005288325	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766715650458	0.5000000055288325	0.1166193606019519	F	F	F
0.9999999601533744	0.6530766414381048	0.1166193606019519	F	F	F	0.9999999601533744	0.6530766414381048	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F	0.8469233329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F
0.843349489634776	0.0044857706939207	0.3519121536530674	T	T	T	0.8452000612172790	0.0020683923851473	0.3505650109496144	T	T	T
0.4955142181756731	0.1674460437576891	0.3519121536530674	T	T	T	0.4994104945891696	0.8439790579465228	0.3505376785450002	T	T	T
0.6611362911104749	0.6565604964462448	0.3519121536530674	T	T	T	0.6575166928102045	0.6563358679722942	0.3505481045469130	T	T	T
0.9873787461113309	0.66664481000178346	0.2724223970924781	T	T	T	0.9867929061447072	0.6663735906862330	0.2719456492837000	T	T	T
0.8342047402886137	0.8216999386850072	0.2724609694040363	T	T	T	0.8344718761436762	0.8210265568189269	0.2718588104646766	T	T	T
0.6810102522919951	0.666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F	0.6804820983373098	0.514616619338877	0.2718713010411111	T	T	T
0.6802568027780538	0.666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802568027780538	0.666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F
0.8333335080015090	0.5135898337101352	0.0388729648861670	F	F	F	0.8333335080015090	0.5135898337101352	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F
0.830037265065387	0.8423348678295726	0.4274892269587256	T	T	T	0.8291643453709944	0.8421763175710452	0.4272314304388927	T	T	T
0.6576650783355886	0.9877027894553967	0.4274892269587256	T	T	T	0.6595749819492314	0.9879705377229973	0.4271890898072483	T	T	T
0.5122971608991956	0.6699627556464870	0.4274892269587256	T	T	T	0.5137494750878986	0.6725710598299145	0.4271826083157643	T	T	T
0.5138983388583447	0.8336693231212337	0.1944738294605841	T	T	T	0.5139307186940278	0.8336259584520007	0.1941778428694187	T	T	T
0.6663307384243844	0.6802319270263432	0.1944738294605841	T	T	T	0.6668983446764328	0.6805861888558260	0.1941757399046674	T	T	T
0.8197681435116572	0.9861071721429642	0.1944738294605841	T	T	T	0.8199160855787890	0.9865996125106720	0.1941890735447657	T	T	T
0.5181872840000000	0.3696788550000000	0.5010460620000000	T	T	T	0.3383113277250596	0.172764280090021	0.5417049480893203	T	T	T
0.3333334851103160	0.166664882548332	0.4688309891169991	T	T	T	0.3346582359824573	0.1681987920709983	0.4730017283382616	T	T	T

POSCAR Al203_2CeO											
1.0000000000000000											
9.6134071999999993 0.0000000006788956 0.0000000000000000											
-4.8067031000000000 8.3254546999999999 0.0000000000000000											
0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1149997999999997											
Al 0 Ce 2											
46 74 2											
Selective dynamics											
Direct											
0.0003732951404624	0.0006815178505981	0.1642052536031388	T	T	T	0.0003281841118550	0.0003965212420209	0.1643528221885615	T	T	T
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F	0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F
0.9992979954752399	0.0013392992439697	0.3803081604336057	F	F	F	0.0008756775016557	0.0007841153567706	0.3022285952825019	T	T	T
0.0009630378618754	0.0054006934956696	0.3974207933580884	T	T	T	0.0008967812911187	0.0019958063667624	0.3954813649630929	T	T	T
0.3308727714692647	0.1677149535864626	0.3211014768797930	T	T	T	0.3341211374815468	0.1673178265147664	0.3207168978912592	T	T	T
0.3338414435127280	0.1676752005148995	0.2248985218742914	T	T	T	0.3338318039790444	0.1669044714806640	0.224796963388287	T	T	T
0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.0865275873130216	F	F	F	0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.0865275873130216	F	F	F
0.1666664937386102	0.333334933630567	0.0087816539838670	F	F	F	0.1666664937386102	0.333334933630567	0.0087816539838670	F	F	F
0.1661847000574425	0.3334452903011044	0.3877295787498123	T	T	T	0.16682040820517079	0.3323469108339323	0.3864482364892094	T	T	T
0.1667386040098549	0.3333811124333885	0.1463038628944452	T	T	T	0.1667178035821335	0.3332874738900076	0.1465878377858814	T	T	T
0.1668956521341706	0.3334576842669779	0.2421143485434223	T	T	T	0.1671386188046443	0.3333238804616749	0.2422861393593124	T	T	T
1.0001622042371272	0.50006609685621996	0.1640568414717440	T	T	T	0.0001789868902722	0.4998660381428961	0.1642818942422823	T	T	T
0.9999999978017655	0.5000000060056777	0.0689647452887385	F	F	F	0.9999999978017655	0.5000000060056777	0.0689647452887385	F	F	F
1.0007315156539949	0.4996946877670098	0.3013776324300575	T	T	T	0.0006633586811168	0.4998904307074986	0.3021630003767860	T	T	T
0.0083293705392164	0.5084635479340905	0.3939449285674438	T	T	T	0.0014327734567617	0.4999254675933718	0.3953961923521610	T	T	T
0.3345658213215783	0.6679176299309004	0.3176081957252377	T	T	T	0.3346883505095659	0.6672603198661025	0.3182196489543575	T	T	T
0.3336338367414005	0.6672918112673586	0.2233273539629333	T	T	T	0.3337866851504644	0.6669356208942397	0.2237556670036725	T	T	T
0.3353601797823808	0.6704315839143051	0.4258750254840971	T	T	T	0.3339454479948200	0.6678340424948364	0.4298357053712810	T	T	T
0.3333347392577531	0.6666664824915555	0.0865275873130216	F	F	F	0.3333347392577531	0.6666664824915555	0.0865275873130216	F	F	F
0.1666665267184939	0.8333353540280009	0.0087816539838670	F	F	F	0.1666665267184939	0.8333353540280009	0.0087816539838670	F	F	F
0.1685935176434832	0.8340295929887123	0.388157270866896	T	T	T	0.1686477510686998	0.8355636058776225	0.3858851074603245	T	T	T
0.1667609181182300	0.8335209601240262	0.1462235412812348	T	T	T	0.1668360225933635	0.8334600027109438	0.1464842835488846	T	T	T
0.1674250696840859	0.8325962109371538	0.242026624928939	T	T	T	0.1675260622544520	0.8340391564949242	0.2421310026947094	T	T	T
0.5000742662473298	0.0005848483258629	0.1641690772792719	F	F	F	0.500325863795725	0.0003955326999529	0.1643527256962740	T	T	T
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F	0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F
0.5008892222519750	0.0028443800326016	0.3012127039332991	T	T	T	0.5008999358542918	0.000833607699240	0.3022717298097932	T	T	T
0.4995375962559269	0.017538710156712	0.3938895313694232	T	T	T	0.5009479610098365	0.0016990382689703	0.395468733874932	T	T	T
0.8351957357356093	0.1682682061818741	0.3201498997494543	T	T	T	0.8341554197460076	0.1673129238750106	0.3207110188821222	T	T	T
0.8335853651499021	0.1678878396879355	0.2244107965664713	T	T	T	0.8338282370726265	0.166903647481691	0.224792421371989	T	T	T
0.833334745256380	0.1666664878897564	0.0865275873130216	F	F	F	0.833334745256380	0.1666664878897564	0.0865275873130216	F	F	F
0.6666664795107380	0.3333349299797928	0.0087816539838670	F	F	F	0.6666664795107380	0.3333349299797928	0.0087816539838670	F	F	F
0.666003578418468	0.3337151068498067	0.3847861018659419	T	T	T	0.6668710203575324	0.333254288860591	0.3864388340620674	T	T	T
0.66658651278299	0.333444756460877	0.146212916994462	T	T	T	0.6667152399312635	0.3323787783848033	0.146580770697934	T	T	T
0.6667497849132555	0.3340097522353932	0.2418439812620169	T	T	T	0.667152518158368	0.333342370867931	0.242283446309013	T	T	T
0.5000584648078904	0.4999791375544555	0.1640883935045425	T	T	T	0.5001780126699894	0.4998641218027391	0.1642816206403162	T	T	T
0.499999976192271	0.5000000050640609	0.0689647452887385	F	F	F	0.4999999976192271	0.5000000050640609	0.0689647452887385	F	F	F
0.5009752717069598	0.490122441214765	0.3025699791716767	T	T	T	0.5006477446878708	0.49980991099484	0.3021542448329446	T	T	T
0.4984797840986277	0.4941721124714089	0.3069516925262327	T	T	T	0.5014613120412897	0.4999164138958256	0.395373217732707	T	T	T
0.835881110621361	0.6687992417622652	0.3174429303055556	T	T	T	0.8346680898494953	0.6672280590407754	0.31821966638675	T	T	T
0.83384990636850	0.6672314545947664	0.2233571302181275	T	T	T	0.8337901089597963	0.6669407336050174	0.2237558936575906	T	T	T
0.832613779902972	0.6671928172763391	0.4255368605060953	T	T	T	0.8339166167700834	0.6677688742362424	0.429839558722090	T	T	T
0.83333507302913	0.6666664818848706	0.0865275873130216	F	F	F	0.83333507302913	0.6666664818848706	0.0865275873130216	F	F	F
0.666665265359555	0.833335350372740	0.0087816539838670	F	F	F	0.666665265359555	0.833335350372740	0.0087816539838670	F	F	F
0.668694610170820	0.830781496446631	0.3845500943243549	T	T	T	0.6686617158859330	0.835424697856776	0.3859121692526857	T	T	T
0.6668403796312838	0.8336099394045618	0.146142127109032163	T	T	T	0.6668359179757687	0.8334597987552518	0.1464820024286751	T	T	T
0.6674706645701819	0.8342684318146883	0.2418565480877292	T	T	T	0.6675273218341016	0.8340387371764908	0.2421252307171764	T	T	T
0.1530766844042901	0.0000000000000000	0.1166193606019519	F	F	F	0.1530766844042901	0.0000000000000000	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999953497749	0.1537656982022220	0.1166193606019519	F	F	F	0.4999999953497749	0.1537656982022220	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233489453813	0.3469233455670794	0.1166193606019519	F	F	F	0.3469233489453813	0.3469233455670794	0.1166193606019519	F	F	F
0.3452825050533497	0.529904956975979	0.3504810969705529	T	T	T	0.3456547525572655	0.5015514412486899	0.3500617271529711	T	T	T
0.0022278555512867	0.3490825480913482	0.3502064673921561	T	T	T	0.0018739272759828	0.3463937744810858	0.3505327691634708	T	T	T
0.1507975896503124	0.1564038658916701	0.3510904366308386	T	T	T	0.1548520623683178	0.15520853838078	0.3501512040320069	T	T	T
0.4863330489078815	0.1680163094489253	0.272031557007866	T	T	T	0.4868243200421437	0.1668427284075378	0.2722045145103762	T	T	T
0.3334357140414256	0.1620914525654657	0.2727063796043093	T	T	T	0.3343721310047250	0.1320423387599158	0.2722241494504580	T	T	T
0.1798159064037335	0.10454413473696095	0.2729252539562766	T	T	T	0.1806537618898262	0.1616843526731199	0.2722086413374983	T	T	T
0.1802568111645044	0.1666664838660016	0.0388729648861670	F	F	F	0.1802568111645044	0.1666664838660016	0.0388729648861670	F	F	F
0.333334737101854	0.1035898160581789	0.0388729648861670	F	F	F	0.333334737101854	0.1035898160581789	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101413990625	0.3197431843624381	0.0388729648861670	F	F	F	0.4864101413990625	0.3197431843624381	0.0388729648861670	F	F	F
0.3239596065316695	0.3401283364001146	0.4282351308013547	T	T	T	0.3202354259471558	0.3503636290812658	0.4279027694526900	T	T	T
0.1589627869834302	0.4906269777891666	0.4282163395376219	T	T	T	0.1581875451478974	0.4875176403236563	0.4283734468102289	T	T	T

0.0020538319576596	0.1725244387543224	0.4310546009996087	T	T	T	0.0240568812600538	0.1723167814980436	0.4296304638221697	T	T	T
0.0139525797190223	0.3338140480810821	0.1943799650485104	T	T	T	0.0139359289309550	0.3334559524753152	0.1943524759429211	T	T	T
0.1669491864154015	0.1806422302573694	0.1945982986387377	T	T	T	0.1670830732818923	0.1804292144955098	0.1944120405770740	T	T	T
0.3200730179974310	0.4865754395344279	0.1942772691550901	T	T	T	0.3200514610542093	0.4864191248795127	0.194214559866404	T	T	T
0.1530766717475842	0.50000000058939094	0.1166193606019519	F	F	F	0.1530766717475842	0.50000000058939094	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999915423317	0.3037664180318888	0.1166193606019519	F	F	F	0.4999999915423317	0.3037664180318888	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F	F	F	0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F	F	F
0.3470642973506928	0.0033874925781993	0.3508891886522382	T	T	T	0.3462630192766184	0.0004600786046160	0.3504960023571473	T	T	T
0.9984715359188887	0.8441645544249177	0.3507733474304532	T	T	T	-0.0002161355455418	0.8438825833397724	0.3500051356265893	T	T	T
0.1618846932633632	0.660916087204727	0.3508993739445059	T	T	T	0.1586174474364418	0.6566080657844718	0.3506190299190473	T	T	T
0.4876123100909212	0.6667671047513142	0.2720229979888290	T	T	T	0.4873801491647571	0.666237202227792	0.2717821724238254	T	T	T
0.3349633136392025	0.8216278326565716	0.2716742976480634	T	T	T	0.3348322740864971	0.8205749453240773	0.271733548392406	T	T	T
0.1809403750800184	0.5154690167887942	0.2716118176577882	T	T	T	0.1806237554915667	0.5144646410632030	0.2717849843716234	T	T	T
0.1802568029605922	0.6666644823609239	0.0388729648861670	F	F	F	0.1802568029605922	0.6666644823609239	0.0388729648861670	F	F	F
0.3333334873797753	0.5135898340752121	0.0388729648861670	F	F	F	0.3333334873797753	0.5135898340752121	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101435972970	0.8197431783567524	0.0388729648861670	F	F	F	0.4864101435972970	0.8197431783567524	0.0388729648861670	F	F	F
0.331688696441773	0.8472040753174396	0.4284509217726464	T	T	T	0.3293226801754667	0.8434446244666258	0.4280587467801271	T	T	T
0.1548847515776377	0.9883395052062341	0.4286969521217983	T	T	T	0.1523628914957790	0.9791722094453510	0.4276289834947312	T	T	T
0.0138139427475373	0.6742822101601555	0.4268645256200775	T	T	T	0.0135008009815875	0.6721890167923252	0.4270832757237916	T	T	T
0.0141839140956983	0.8341687579671980	0.1943098936620001	T	T	T	0.0141514936600876	0.8336403982227487	0.1941720203746831	T	T	T
0.1667811762185578	0.6808979945325275	0.1941090419947047	T	T	T	0.1670188195520933	0.6805293012543936	0.1941068493040152	T	T	T
0.3198524630695392	0.9871847477051907	0.1945354146485601	T	T	T	0.3201893595700490	0.9867161832587762	0.1943442153630901	T	T	T
0.6530766948064297	0.6808979945325275	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766948064297	0.6808979945325275	0.1166193606019519	F	F	F
0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F	0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233279585637	0.3469233452019935	0.3469233452019935	F	F	F	0.8469233279585637	0.3469233452019935	0.3469233452019935	F	F	F
0.8459662521171020	0.5035097879637060	0.3500148323949381	T	T	T	0.8456642242523482	0.5015348315525270	0.3500250725910653	T	T	T
0.5003080699300746	0.6808979945325275	0.3505764640063614	T	T	T	0.5018598083109607	0.3463786597345871	0.350523660895685	T	T	T
0.6558254072385196	0.1562020689728375	0.3495254150136291	T	T	T	0.65489044289112647	0.1552880254127601	0.3501366090022568	T	T	T
0.9862563604935511	0.1673865296297148	0.2722730501773514	T	T	T	0.9868227531291986	0.1668205367550268	0.2722115220892632	T	T	T
0.8339597862502303	0.3210220591034212	0.2719937103631723	T	T	T	0.8344001353888423	0.3204238372207298	0.2722200681028263	T	T	T
0.6802556599011194	0.0140744025278013	0.2720017614753713	T	T	T	0.6806554493061671	0.0138536371368664	0.2721952308422519	T	T	T
0.6802556779775542	0.1666664880015247	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802556779775542	0.1666664880015247	0.0388729648861670	F	F	F
0.8333334729876469	0.0135898156931020	0.0388729648861670	F	F	F	0.8333334729876469	0.0135898156931020	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F
0.8380791780878828	0.3583477645090324	0.4267886159242848	T	T	T	0.8302619407093642	0.3504127326265800	0.4279400173988127	T	T	T
0.6570915033598602	0.4851050222358790	0.4278695259392361	T	T	T	0.6581360135846327	0.4874773603977308	0.4283558967783848	T	T	T
0.5449005370788423	0.127532563879955	0.4308615225390074	T	T	T	0.5241253109615761	0.1723160765426084	0.4295975107126480	T	T	T
0.5137352602067082	0.3339482716243000	0.1944066190481061	T	T	T	0.5139318697590379	0.3334603993316356	0.1943531408983249	T	T	T
0.6667881834879239	0.1806872602653384	0.1943468794559348	T	T	T	0.6670838415835846	0.1804374692945174	0.1944086472471180	T	T	T
0.8200425936218422	0.48679801534222390	0.1941705345366899	T	T	T	0.8200544554622548	0.4864261856119689	0.1942144570252925	T	T	T
0.6530766715650458	0.5000000005288325	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766715650458	0.5000000005288325	0.1166193606019519	F	F	F
0.9999999601533744	0.6530766414381408	0.1166193606019519	F	F	F	0.9999999601533744	0.6530766414381408	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233239440371	0.6808979945325275	0.1166193606019519	F	F	F	0.8469233239440371	0.6808979945325275	0.1166193606019519	F	F	F
0.8449164956338532	0.10003716145284045	0.3504404849656187	T	T	T	0.8462423873870596	0.0004300177503522	0.3505026217003387	T	T	T
0.4992329261397667	0.8436018439024121	0.3502471829634291	T	T	T	0.4998110488545931	0.8439016198236052	0.3500108685653940	T	T	T
0.6595844328624788	0.6551152208356646	0.3506660366624224	T	T	T	0.6586067432697162	0.6565979479221514	0.3506149899580576	T	T	T
0.9878129910455596	0.6668764313178928	0.2718307688834579	T	T	T	0.9873811854249370	0.6662276896611008	0.271787942934962	T	T	T
0.8348573390716263	0.8211334792086465	0.2718052870650983	T	T	T	0.8348279821414566	0.8205561492817542	0.2717263751239452	T	T	T
0.6806651293121265	0.1448847856277307	0.2717456087514232	T	T	T	0.6806173871009498	0.1544540467113298	0.2717857914709281	T	T	T
0.6802568027700538	0.6666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802568027700538	0.6666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F
0.8333335000015090	0.51358983377101352	0.0388729648861670	F	F	F	0.8333335000015090	0.51358983377101352	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F
0.827382474388545	0.8425494406686343	0.4279835003934552	T	T	T	0.8293325505029224	0.8434013146159411	0.4280709275470068	T	T	T
0.6535129808111411	0.9754112153786182	0.4263501870409336	T	T	T	0.652476730206064	0.9791457395016104	0.4276651425806663	T	T	T
0.5138098612594100	0.6721330818768411	0.4265393099686371	T	T	T	0.5134749728119302	0.6721390153526272	0.42708219193677709	T	T	T
0.5140286880050564	0.8338848583489449	0.1941743677789183	T	T	T	0.514143294812046	0.8336363883160675	0.194169411758707	T	T	T
0.6667692788760410	0.6808172614191031	0.1941222665692910	T	T	T	0.6670193151315154	0.6805274437682662	0.1941046604818517	T	T	T
0.8200494679068924	0.686686160373612	0.194323881884084	T	T	T	0.8201111275379743	0.9867167686914645	0.1943395647767185	T	T	T
0.4352575340089144	0.1830415523256138	0.5379282745839790	T	T	T	0.833953906380104	0.1672424373440073	0.5410646600934441	T	T	T
0.9352575340089144	0.1830415523256138	0.5379282745839790	T	T	T	0.3341620762244046	0.1672143990248254	0.540983055412970	T	T	T
0.3484582125212142	0.169283002238964	0.454015995394791	T	T	T	0.3308987847033357	0.1668470177652998	0.4726307780257827	T	T	T
0.8050701932950137	0.1687994953035299	0.4757346500580314	T	T	T	0.8309288232673139	0.1668652838198357	0.4727019490281284	T	T	T

POSCAR Al2O3_CeO_Ice_bL						CONTCAR Al2O3_CeO_Ice_bL					
1.000000000000000						1.000000000000000					
9.6134071999999993 0.0000000060788956 0.0000000000000000						9.6134071999999993 0.0000000060788956 0.0000000000000000					
-4.8067031000000000 8.3254546999999999 0.0000000000000000						-4.8067031000000000 8.3254546999999999 0.0000000000000000					
0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1149997999999997						0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1149997999999997					
Al O H Ce						Al O H Ce					
47 89 32 1						47 89 32 1					
Selective dynamics						Selective dynamics					
Direct						Direct					
0.0001822135694042 0.0001317731079089 0.1643248849414765 T T T						0.0002848108871369 0.0002078076725692 0.1643037419409124 T T T					
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0689647452887385 F F F						0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0689647452887385 F F F					
0.0004088889952619 0.0000386979152884 0.3023149859746281 T T T						0.0007606330214534 0.0004382725960838 0.3024817194630910 T T T					
0.0005152333892420 0.0001448557007746 0.3956491275792978 T T T						0.0015820963446032 0.000786866486790 0.3959213839554572 T T T					
0.33328082436007388 0.166657251504945 0.32087803511889756 T T T						0.3335241568069219 0.1669025326611284 0.3208990428428771 T T T					
0.3331943136371395 0.1666825243062063 0.2249021748637841 T T T						0.3333853734618602 0.1667265933042592 0.2248936974755431 T T T					
0.3333334851103160 0.1666666825483832 0.0865275873130216 F F F						0.3333334851103165 0.1666666825483834 0.0865275873130216 F F F					
0.1666664937386102 0.333334933639567 0.00087816539838670 F F F						0.1666664937386102 0.333334933639568 0.00087816539838670 F F F					
0.1675395415597413 0.332811802407909 0.3862506769737381 T T T						0.1678872866623618 0.3326009638468034 0.3865419134301645 T T T					
0.1666677084775992 0.3332754784136745 0.1465886623648377 F F F						0.1667116056880494 0.3332789122082874 0.1465280471575794 T T T					
0.1666895253686231 0.3333564108108126 0.2422835895595846 T T T						0.1668785105984714 0.3332245811266166 0.2422978001616568 T T T					
0.99999347273059932 0.1642915953030244 0.0689647452887385 F F F						0.99999347273059932 0.1642915953030244 0.0689647452887385 F F F					
0.999999978017655 0.5000000000565777 0.0689647452887385 F F F						0.999999978017655 0.5000000000565777 0.0689647452887385 F F F					
0.9995414695322888 0.5000012951688787 0.302451062073596 T T T						0.9997726766661903 0.499956815844305 0.30245238288052 T T T					
0.9995956829959132 0.5000182136340041 0.39602419383085868 T T T						0.999879607278135 0.5001980891008942 0.3961358757983152 T T T					
0.3329988215287910 0.6664109898622885 0.3185862459333804 T T T						0.3336323990227632 0.6665390867741284 0.3183386358777339 T T T					
0.3331750636404480 0.66664633419869580 0.2240029651206121 T T T						0.3333616684966708 0.6667584395859859 0.2238393402816310 T T T					
0.3331898541606237 0.6671682745444039 0.4328316798431466 T T T						0.3337610728775359 0.6674771984595336 0.4291157739978850 T T T					
0.3333334792577531 0.6666664822491555 0.0865275873130216 F F F						0.333334792578312 0.6666664822491555 0.0865275873130216 F F F					
0.1666665267184939 0.8333335540820009 0.0087816539838670 F F F						0.1666665267185696 0.8333335540820009 0.0087816539838670 F F F					
0.1665846932129679 0.834306810217481 0.3862685785708805 T T T						0.1673416667531571 0.8354207674309514 0.3865494864003901 T T T					
0.1666863314268809 0.8334047670856372 0.1465886137897625 T T T						0.1667357716260742 0.833410840269746 0.1465313168694252 T T T					
0.1665808122009038 0.8335381048491034 0.2422600064709591 T T T						0.1668413050161121 0.8337446438075099 0.2422930811925085 T T T					
0.4997330024459563 0.000171278937942 0.1643384057610798 T T T						0.4998212392058923 0.0000979279926158 0.1642887192175299 T T T					
0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.0689647452887385 F F F						0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.0689647452887385 F F F					
0.499585869195133 0.9998887079332686 0.3023760587563117 T T T						0.4995845933190097 0.0001348183774196 0.302362969636262 T T T					
0.4987570107182049 0.9997720652594081 0.39574087956144088 T T T						0.4991505841540990 0.0005956990838426 0.3958590391647026 T T T					
0.8329028318766086 0.1664044545942839 0.318389155228310831 T T T						0.8331434228504483 0.1660595174323831 0.3183161274633059 T T T					
0.833211523789372 0.1666110561742918 0.22368815228310831 T T T						0.8333800081835586 0.1667069580089921 0.2238353357421881 T T T					
0.8335463881926471 0.166043824729183 0.4296866356840624 T T T						0.8337153703363929 0.1662648567439038 0.4289911899516564 T T T					
0.8333334745256380 0.1666666487897564 0.0865275873130216 F F F						0.8333334745256387 0.1666666487897564 0.0865275873130216 F F F					
0.666666795107380 0.3333334929979728 0.0087816539838670 F F F						0.666666795108306 0.3333334929980599 0.0087816539838670 F F F					
0.6651547762348547 0.3327693544451459 0.336740473758816 0.332740473758816 T T T						0.6651547762348547 0.3327693544451459 0.336740473758816 0.332740473758816 T T T					
0.6655885727786623 0.3330778375143768 0.1465918081090833 T T T						0.6659107761673903 0.333201731798180 0.1465281043275399 T T T					
0.6661685929651804 0.3331294123890100 0.2422876360189130 T T T						0.66641341536390683 0.3332802783958105 0.2422245923321704 T T T					
0.4998698801708207 0.5000000000000000 0.395737254916521 0.1643582808756656 T T T						0.4999648830619226 0.4997845040241303 0.1643035873341948 T T T					
0.4999999976192271 0.4999000005640609 0.0689647452887385 F F F						0.4999999976192273 0.5000000005640604 0.0689647452887385 F F F					
0.4995666387096798 0.4997413332964142 0.3023353080722097 T T T						0.5001306643159983 0.4998093039291218 0.3023883386200166 T T T					
0.4998034161919280 0.499826901560512 0.3956834754570410 T T T						0.4999105735716553 0.4998227575205800 0.3958439158238686 T T T					
0.8330093326468107 0.6667328654492799 0.3187678082653297 T T T						0.8335978063411361 0.6670842398898393 0.3186136650073475 T T T					
0.8331732416004899 0.6665942895212335 0.2240493764393567 T T T						0.8333609464182341 0.6666858273627829 0.223966817245813 T T T					

0.83233163793706	0.6662466270067140	0.4329706889142689	T	T	T	0.8327347769631342	0.6665070220928143	0.4314167511647560	T	T	T
0.833335079392913	0.6666664818840786	0.0865275873130216	F	F	F	0.833335079393974	0.6666664818842633	0.0865275873130216	F	F	F
0.6666665265359555	0.833335350377240	0.0087816539838670	F	F	F	0.6666665265359555	0.833335350377240	0.0087816539838670	F	F	F
0.6660040086507006	0.8327522362595664	0.3864836774487081	T	T	T	0.6667697820545901	0.8331428616006473	0.3866030692158155	T	T	T
0.6666189352976718	0.833022175272938	0.1464882818763589	T	T	T	0.6666649516626478	0.8333419932981866	0.1464218524842656	T	T	T
0.6664387537668411	0.8332116738871027	0.2421050761070949	T	T	T	0.666714091966899399	0.8333561626057845	0.2420798356384554	T	T	T
0.1530766844042901	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F	0.1530766844042901	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999953497749	0.1530766598202220	0.1166193606019519	F	F	F	0.4999999953497751	0.1530766598202222	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233489453813	0.3469233455670704	0.1166193606019519	F	F	F	0.3469233489453813	0.3469233455670704	0.1166193606019519	F	F	F
0.3443969927455945	0.5002102091413517	0.349710222341927	T	T	T	0.3446659790284867	0.5009715916340477	0.3500036800489369	T	T	T
0.998054383362803	0.3431408371199393	0.3505449346219356	T	T	T	0.9988947690805232	0.3430972708012714	0.3506314224566028	T	T	T
0.1537376061322230	0.15655927718247257	0.350324748352432	T	T	T	0.15393464944568588	0.1547914246288985	0.35037817584055	T	T	T
0.4862614960278978	0.1665320020056889	0.2722754814897789	T	T	T	0.4865321786464579	0.1666012062925133	0.2722861536447029	T	T	T
0.3334825822065118	0.3198203314617117	0.272212980832570	T	T	T	0.3336602542645730	0.3201845964566737	0.2722959631380164	T	T	T
0.180103980856258	0.013694037885398	0.2721694877191031	T	T	T	0.1802887731151574	0.0138236079995621	0.2722418521538272	T	T	T
0.1802568111645044	0.1666664883666016	0.0388729648861670	F	F	F	0.1802568111645044	0.1666664883666016	0.0388729648861670	F	F	F
0.3333343731701854	0.0135898160581789	0.0388729648861670	F	F	F	0.3333343731701854	0.0135898160581789	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101413990623	0.3197431843624307	0.0388729648861670	F	F	F	0.4864101413990630	0.3197431843624307	0.0388729648861670	F	F	F
0.3276675808974208	0.3479462580073523	0.427690767757844	T	T	T	0.3280487277372544	0.3477705391207115	0.4278455641067933	T	T	T
0.1586751399685231	0.4880798773826243	0.4272934118432098	T	T	T	0.1587472753496150	0.4879155000070339	0.4273760514275085	T	T	T
0.0139720006032354	0.1708810310191534	0.4283557030014595	T	T	T	0.0142081138917687	0.1711587090471985	0.4285468731937238	T	T	T
0.013605944470414	0.3333011354577587	0.1941723672840386	T	T	T	0.0137690141245601	0.3334173274081669	0.1942084100680102	T	T	T
0.1666705789393725	0.180258364030398	0.1943675790385896	T	T	T	0.166796807574853	0.1803385237781823	0.1944092645887838	T	T	T
0.3195452723309401	0.4862354021435359	0.1942410614065041	T	T	T	0.3196808121054440	0.4863086788758401	0.1942669374119499	T	T	T
0.1530766717475842	0.5000000058939904	0.1166193606019519	F	F	F	0.1530766717475844	0.5000000058939101	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999915423317	0.6530766418031888	0.1166193606019519	F	F	F	0.4999999915424378	0.6530766418031888	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F	F	F	0.3469233227244360	0.8469233035273281	0.1166193606019519	F	F	F
0.3450241069096069	0.999010088332979	0.3504211257339257	T	T	T	0.3454962728922352	0.9992914094380853	0.3503474773363153	T	T	T
0.9994696435783760	0.8445879332114813	0.3496432371913707	T	T	T	0.9997605220961240	0.8445777403751208	0.3498975505787467	T	T	T
0.1555140350599178	0.535969571256282	0.3503789137548175	T	T	T	0.1567565696401822	0.6557923608997982	0.3506623219397557	T	T	T
0.4860682929534923	0.665967814515370	0.2717554081764928	T	T	T	0.4864455054912084	0.6660254441961513	0.271842606878245	T	T	T
0.3337469216954664	0.8199282257267387	0.2718632075365284	T	T	T	0.3340884070855987	0.8200080137274639	0.2718549210856663	T	T	T
0.179121798496778	0.513526334395683	0.2719109947403836	T	T	T	0.17936351812775187	0.5136379735069974	0.2719662875541246	T	T	T
0.1802568029605922	0.6666664823609239	0.0388729648861670	F	F	F	0.1802568029605924	0.6666664823609254	0.0388729648861670	F	F	F
0.3333334873797753	0.5135898340752121	0.0388729648861670	F	F	F	0.3333334873797753	0.5135898340752121	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101435972970	0.8197431783567524	0.0388729648861670	F	F	F	0.4864101435973750	0.8197431783567524	0.0388729648861670	F	F	F
0.328362775788015	0.842454581323584	0.4284541648913864	T	T	T	0.3288422927223980	0.8430335170130941	0.4284849555675425	T	T	T
0.1517857757948081	0.9795474943748470	0.4276986393662305	T	T	T	0.1525931094381730	0.9803205502630342	0.4280404426225449	T	T	T
0.0120082759834401	0.6707885521049383	0.4273286718883957	T	T	T	0.0119006340963213	0.6710305448565578	0.4274244842038257	T	T	T
0.0135932068033926	0.833336714537473	0.1942388009974946	T	T	T	0.0137349455386454	0.8334372771370672	0.1942809530716203	T	T	T
0.1665480539448690	0.6803136212597880	0.1941832028486670	T	T	T	0.1666205254742847	0.6803652490439320	0.1942056321762544	T	T	T
0.3196418058197060	0.9864571886194888	0.1943576064243102	T	T	T	0.3197579947222413	0.98651800809034984	0.1944022277324094	T	T	T
0.6530766948064297	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766948064299	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F	0.0000000055693771	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233279586737	0.3469233252019935	0.1166193606019519	F	F	F	0.8469233279586877	0.3469233252020815	0.1166193606019519	F	F	F
0.8441019873805773	0.50091712897071803	0.3502803056043967	T	T	T	0.8445924064712811	0.5007668213243830	0.3504281279074822	T	T	T
0.5007898376981710	0.3460606869956266	0.3504500175274171	T	T	T	0.5011408859785512	0.3465219819686235	0.3503746647627684	T	T	T
0.6558424211203651	0.15521704400817305	0.3499075596308884	T	T	T	0.6562718513026647	0.1553060345063288	0.3499788077863242	T	T	T
0.9857649284624090	0.1657238147641930	0.2718406736873613	T	T	T	0.985968406179303	0.1658741936477960	0.2718741589508162	T	T	T
0.8340466794902699	0.3202598312090438	0.2718316908430179	T	T	T	0.8342035257702514	0.3204418095277095	0.27188291944710558	T	T	T
0.6794012483746492	0.01348380838178844	0.2717919800395332	T	T	T	0.6794305805945606	0.0134201343465326	0.2719017110988025	T	T	T
0.6802567797755472	0.1666664880015247	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802567797755472	0.1666664880015247	0.0388729648861670	F	F	F
0.8333343729876649	0.0135898156931020	0.0388729648861670	F	F	F	0.8333343729876649	0.0135898156931021	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101412165242	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F
0.8287067799486915	0.3409088478292492	0.4272876493356145	T	T	T	0.8290406691763792	0.3412507582806754	0.4273662208584423	T	T	T
0.6570772354826115	0.0385369523103107	0.4285197319912667	T	T	T	0.6574039118874071	0.4862975109394210	0.4285868509788696	T	T	T
0.5198305714463185	0.1720954885180877	0.4278247606289609	T	T	T	0.5199617205448474	0.1724892526464968	0.4277981255045295	T	T	T
0.5133939790559569	0.3331462368925162	0.1943769453776683	T	T	T	0.5135536525878608	0.3332858361423475	0.1944068884732665	T	T	T
0.6664690832095674	0.1802782631147685	0.194215559618609	T	T	T	0.666602844859513	0.1803380837759727	0.1942561074646637	T	T	T
0.8195204376196068	0.4862480959958257	0.1941913297004652	T	T	T	0.819706977994086	0.4863263074301261	0.1942236423585081	T	T	T
0.6530766715650488	0.5000000005288325	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766715650488	0.500000005288341	0.1166193606019519	F	F	F
0.9999999601533744	0.6530766414381048	0.1166193606019519	F	F	F	0.9999999601534868	0.6530766414381048	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F	0.8469233329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F
0.8440680315209553	0.0016675648515514	0.3505832706284301	T	T	T	0.8446139462550042	0.0016462257348384	0.3507318346386678	T	T	T
0.4986455499568474	0.8434631584041384	0.3503518081497971	T	T	T	0.4983261770246109	0.8427899000341890	0.3506329403152278	T	T	T
0.655707730886383	0.535206820515659	0.3503262919147364	T	T	T	0.6567147179406602	0.6555904550694238	0.3504803459986831	T	T	T
0.9859532802479231	0.6657931694309948	0.2718387661250400	T	T	T	0.9864969931960411	0.6660139655541814	0.2719718230962930	T	T	T
0.8336676829638241	0.8402478899840433	0.2718452602193555	T	T	T	0.8340724336148667	0.8206866342154248	0.2719337863074241	T	T	T
0.6796816167341778	0.5139434990025195	0.2718666275736119	T	T	T	0.6801845208800537	0.5142475203194189	0.2718638017099512	T	T	T
0.6802568027780538	0.6666664819958470	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802568027781311	0.6666664819960287	0.0388729648861670	F	F	F
0.833335080015090	0.5135898337101352	0.0388729648861670	F	F	F	0.833335080016413	0.5135898337103055	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F	0.98641					

0.0079313520000000	0.4536464510000000	0.7240048100000000	T	T	T
0.4575020220000000	0.4543429140000000	0.7700048100000000	T	T	T
0.9436059500000000	0.3419402840000000	0.7703707860000000	T	T	T
0.6792109010000000	0.5517405870000000	0.7703699520000000	T	T	T
0.9268684390000000	0.5729040500000000	0.7801199600000000	T	T	T
0.4482524100000000	0.3040399500000000	0.7801190660000000	T	T	T
0.9436912540000000	0.7478588200000000	0.7801180530000000	T	T	T
0.4782727360000000	0.6162113550000000	0.7801203180000000	T	T	T
0.3325209585728882	0.1665568501495339	0.4721883027604890	T	T	T

0.0321417953846751	0.4960690846271553	0.7251432215196625	T	T	T
0.4829782656940484	0.5657223826602014	0.7704296096426767	T	T	T
0.9699447143144853	0.3800798383389185	0.7698923134643658	T	T	T
0.6470156248852197	0.5587684084780087	0.7695264431217958	T	T	T
0.9299215116507714	0.5958841734887999	0.7744436344132444	T	T	T
0.4192248257646455	0.2723804053244999	0.777959538908444	T	T	T
0.8857690515675203	0.6634309136607679	0.8189959918125380	T	T	T
0.4263867682839845	0.7796795760663997	0.7776633619826314	T	T	T
0.3341267549860507	0.1673679461229739	0.4727294054809604	T	T	T

POS CAR A1203_2Ceo_Ice-bl					
1.0000000000000000					
9.6134071999999993	0.0000000060788956	0.0000000000000000			
-4.8067031000000000	8.3254546999999999	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	28.1149997999999997			
Al O H Ce					
46	90	32	2		
Selective dynamics					
Direct					
0.0000749577941676	0.0002157109999793	0.1643829306212720	T	T	T
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F
0.00021002746712005	0.0000080813433706	0.3021875545279023	F	T	T
0.9995459475513270	0.0005878545116808	0.3953537832515034	T	T	T
0.3333064014379900	0.1667191496171938	0.3207159011432211	T	T	T
0.3333309137180733	0.1665525312693026	0.2248069031041350	T	T	T
0.3333334851103160	0.1666664882548332	0.0865275873130216	F	F	F
0.1666664937386102	0.333334933630567	0.0087816539838670	F	F	F
0.1661370325135451	0.3319542045519647	0.3863759564874176	F	F	F
0.1666132267135632	0.333244780238913	0.1466558269052406	T	T	T
0.16648497800556426	0.3328848839454716	0.2423294059693845	T	T	T
0.9999226352062606	0.4997052210477476	0.1643226908605517	T	T	T
0.999999978017655	0.5000000060056777	0.0689647452887385	F	F	F
0.999664451463850	0.4994782512513822	0.3028098281944127	T	T	T
0.0004649911657312	0.4995771421313602	0.3952333111911866	T	T	T
0.3334919533048534	0.6664675443543150	0.3183695606318638	T	T	T
0.3333015693955565	0.6666262154611665	0.2238288753644706	T	T	T
0.3325996950197438	0.6668456703715819	0.4316314108347508	T	T	T
0.3333347392577531	0.666664862491555	0.0865275873130216	F	F	F
0.1666665267184939	0.833335354028009	0.0087816539838670	F	F	F
0.1670958997345762	0.8334871645969249	0.3857034596891765	T	T	T
0.1667117972118640	0.8333863058109077	0.1465456656797071	T	T	T
0.1668095808147056	0.8335783849670475	0.2421411518606192	T	T	T
0.5000690020589209	0.0002186476211329	0.1643806638035586	T	T	T
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0689647452887385	F	F	F
0.5001751984432193	0.0000790724716257	0.3021568868283557	T	T	T
0.4994852569636247	0.000298496225457	0.3952985879644222	T	T	T
0.8333300900550088	0.1666638920537746	0.3207014250682708	T	T	T
0.833332798933720	0.1665493612458242	0.2247999525957120	T	T	T
0.8333334742556380	0.1666664878897564	0.0865275873130216	F	F	F
0.6666664795107380	0.3333349299797828	0.0087816539838670	F	F	F
0.6660413144422533	0.33319217757668702	0.3863449339684624	T	T	T
0.6666152456922018	0.3332366413808395	0.1466567152306167	T	T	T
0.6664943054189030	0.332897881130194	0.2423265836047875	T	T	T
0.4999277408318253	0.4997065825744031	0.164323840776250	T	T	T
0.499999976192271	0.5000000056406009	0.0689647452887385	F	F	F
0.4997334652297853	0.4995405000662417	0.3020922431900531	T	T	T
0.5005900168102528	0.4995904208562536	0.3952488181066097	T	T	T
0.8335429488576074	0.6664766375871070	0.3184212618820256	T	T	T
0.8332980541041782	0.6666212034965523	0.224810989638262	T	T	T
0.8327238155579544	0.6669203751939691	0.4320270124215280	T	T	T
0.833333079302913	0.6666664818840786	0.0865275873130216	F	F	F
0.6666665265359555	0.833333530377240	0.0087816539838670	F	F	F
0.6671439562450232	0.834170158213634	0.385632888924192	T	T	T
0.6667153567298859	0.833388388534804	0.1465453011444536	T	T	T
0.6668337558677491	0.8335660939492786	0.2421395623539413	T	T	T
0.1530766844042901	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999953497749	0.1530766598202220	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233489453813	0.3469233455670704	0.1166193606019519	F	F	F
0.3445369720554812	0.5004402919569604	0.3498156455156218	T	T	T
0.0009274817310349	0.3454913720938414	0.3506054182094449	T	T	T
0.1540264593102079	0.154620358254978	0.3501663657468898	T	T	T
0.4861809105396379	0.1662853962337562	0.2722077166553107	T	T	T
0.33371089493050475	0.3198591449853004	0.2721847302359184	T	T	T
0.1800756384553017	0.01349712763741179	0.2721241384558253	T	T	T
0.1802568116450404	0.1666664883666016	0.0388729648861670	F	F	F
0.3333334731701854	0.0135898160581789	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101413990625	0.3197431843624301	0.0388729648861670	F	F	F
0.329450175175022	0.3503602356015316	0.4278503705831716	T	T	T
0.1569034223375212	0.154620358254978	0.4283820973522491	T	T	T
0.0236814909999185	0.1712564784869239	0.4297149971245675	T	T	T
0.0134979083743784	0.331330839332766	0.1943368911655453	T	T	T
0.1667152993178813	0.1802140998638343	0.1943898080136770	T	T	T
0.319625144621656	0.486144221182160	0.1941840757143450	T	T	T
0.1530766717475842	0.50000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.4999999915423317	0.6530766418031888	0.1166193606019519	F	F	F
0.3469233227244359	0.8469233035273263	0.1166193606019519	F	F	F
0.3451457749479590	0.9996705469877453	0.3504929600273570	T	T	T
0.9991026613696059	0.8436793416789387	0.3497323138072058	T	T	T
0.1567506740991742	0.6557134128616013	0.3503790971134533	T	T	T
0.4863713051409294	0.657263798777469	0.2716501799872602	T	T	T
0.3339534593474424	0.820603474026478	0.2716828878282748	T	T	T
0.1796775081576197	0.5138629250052392	0.2717579825908032	T	T	T
0.1802568029605922	0.666664823609239	0.0388729648861670	F	F	F
0.3333334873797753	0.5135898340752121	0.0388729648861670	F	F	F
0.4864101435927970	0.8197431783567524	0.0388729648861670	F	F	F
0.3279184213256242	0.842166717632379	0.4279689800764595	T	T	T
0.15805524852574644	0.9773492615640855	0.4275684940981836	T	T	T
0.0118270099135947	0.8197431783567524	0.4279689800764595	T	T	T
0.0137314657698000	0.8333746890431373	0.1941483465810936	T	T	T
0.1666669198910287	0.6803003937936640	0.1940746772543314	T	T	T
0.3197373383719246	0.9846819424218587	0.1942972902629926	T	T	T
0.6530766948064297	0.00000000000008953	0.1166193606019519	F	F	F
0.0000000055693761	0.1530766594551380	0.1166193606019519	F	F	F
0.8469233279585637	0.3469233452019935	0.1166193606019519	F	F	F
0.8445603518022591	0.5002789384843462	0.3498015255562512	T	T	T
0.5009808713283864	0.3455976740060708	0.3505798094558280	T	T	T
0.6540521555034694	0.1546271400507803	0.3501281921963466	T	T	T
0.9861783581195026	0.16626941909179417	0.2722131613987821	T	T	T
0.8337208092438643	0.3198321733727140	0.2721684220559793	T	T	T
0.6800648649585403	0.013456472729212	0.2721215496875781	T	T	T
0.6802567797755472	0.1666664880015247	0.0388729648861670	F	F	F
0.833334729876469	0.0135898156931021	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101412165240	0.3197431839973532	0.0388729648861670	F	F	F
0.8294371369646416	0.3503007274113342	0.428164336273849	T	T	T
0.6570651319390979	0.4870138959817940	0.4283938947987783	T	T	T
0.5237176513822174	0.1712339226542405	0.4296232686856190	T	T	T

CONT CAR A1203_2CeO_Ice-bl									
1.0000000000000000									
-9.6134071999999993		0.0000000060788956		0.0000000000000000					
-4.8067031000000000		8.3254546999999999		0.0000000000000000					
0.0000000000000000		0.0000000000000000		28.1149997999999997					
Al O H Ce									
46 90 32 2									
Selective dynamics									
Direct									
0.0000946670666884		0.0002727151544463		0.1643574720518576		T		T	
0.0000000000000000		0.0000000000000000		0.0689647452887385		F		F	
0.0002205162307999		0.00037436467797228		0.3022939494826393		T		T	
0.9999768580132048		0.0012636084973017		0.3955884372378635		T		T	
0.3333740690796436		0.1669378507943994		0.3207694298135362		T		T	
0.3333982795114170		0.1666506630752786		0.2248315840595603		T		T	
0.3333334851103165		0.1666664882548334		0.0865275873130216		F		F	
0.1666664937386102		0.333334933630568		0.0087816539838670		F		F	
0.1657542414221093		0.3315533691764897		0.3866551630695955		T		T	
0.1666258064892006		0.3323371158366328		0.1466044248002663		T		T	
0.16653399887323102		0.3229430377760361		0.2423097216664803		T		T	
0.9999456827737575		0.4997163793433323		0.1642853313641969		T		T	
0.9999999978018234		0.5000000000605677		0.0689647452887385		F		F	
0.9998233167257636		0.4993028222999962		0.3021945885725514		T		T	
0.0002014408099804		0.4991648949783756		0.3954329815183113		T		T	
0.3338015347731409		0.6666657606587261		0.3189080077071029		T		T	
0.3333487196000796		0.6666898672808973		0.2237125205427398		T		T	
0.3327368794352536		0.6670764611954402		0.4286995361385499		T		T	
0.3333334792577785		0.6666664822491555		0.0865275873130216		F		F	
0.166666267185186		0.8333353540828009		0.0087816539838670		F		F	
0.1676623523416130		0.8351004977982159		0.3859395587570038		T		T	
0.16667289576430565		0.8334376897772197		0.1464996375262269		T		T	
0.1666603614921733		0.8337531854928062		0.2421525640165189		T		T	
0.5000099237129101		0.0000822137351029		0.1643476255472113		T		T	
0.0000000000000000		0.0000000000000000		0.0689647452887385		F		F	
0.5001428051396473		0.0004400835279759		0.3222902249325143		T		T	
0.0000065448380103		0.0014495373487819		0.3055000000000002		T		T	
0.3333376379232401		0.16658006276736074		0.3207765127474730		T		T	
0.8333729491323572		0.1666270712875382		0.2248363541215959		T		T	
0.833334745256387		0.1666664878097566		0.0865275873130216		F		F	
0.6666664795107724		0.3333345929979987		0.0087816539838670		F		F	
0.6659398680225814		0.3317501996155030		0.3866229515406912		T		T	
0.666625984364886		0.3332351736119768		0.1466134681028695		T		T	
0.6666544590915752		0.3329723561161592		0.2423066372003465		T		T	
0.4999757759172395		0.4997383819958534		0.164277869277597		T		T	
0.4999999976192273		0.50000000056406514		0.0689647452887385		F		F	
0.5001173450324558		0.4995823668283008		0.302217995395588		T		T	
0.5005335631586449		0.4993014950124514		0.3954608315156083		T		T	
0.8338648994465102		0.666706926736074		0.3182993965280375		T		T	
0.8333698911615012		0.666686252877487		0.2238015976186106		T		T	
0.8329568139634309		0.6671101473283832		0.4302074212061406		T		T	
0.8333357093803256		0.666666481881382		0.0865275873130216		F		F	
0.6666665263595555		0.8333353503777420		0.0087816539838670		F		F	
0.6677979676235350		0.8348848725145962		0.3859617342635472		T		T	
0.6667267753818259		0.83343198917019291		0.1456045678528932		T		T	
0.6669826412167260		0.8336993828515153		0.2421558341609341		T		T	
0.1530766844042901		0.0000000000008953		0.1166193606019519		F		F	
0.4999999953497751		0.1530766592022222		0.1166193606019519		F		F	
0.3469233489453813		0.3469233455670704		0.1166193606019519		F		F	
0.3446118761859840		0.501184451795384		0.3501881759534531		T		T	
0.0009008089552684		0.3457492736687466		0.3506137390864404		T		T	
0.15493932712674318		0.1547537323168526		0.3502985407753365		T		T	
0.4862391972283923		0.1665330818677619		0.2722814513808669		T		T	
0.3337483742572341		0.320127523448406		0.272393191569351		T		T	
0.1800745705556151		0.0135631741948507		0.2722636164667528		T		T	
0.1802568111645084		0.666666483666016		0.038772964861670		F		F	
0.3333334731701854		0.0135898160581789		0.038772964861670		F		F	
0.4864101413999630		0.3197431843624307		0.038772964861670		F		F	
0.3294929321711011		0.350510581398469		0.4281443129462579		T		T	
0.156856881219155		0.4867235827616653		0.4281443129462579		T		T	
0.0233503345203064		0.171438698607607		0.4298161620752972		T		T	
0.0135652248086127		0.3332296613544878		0.1944088534949797		T		T	
0.1667628830800788		0.1802696392531483		0.1944606380318624		T		T	
0.3191737862989692		0.4862027743112091		0.1942431917712774		T		T	
0.1530766717475864		0.5000000005893901		0.1166193606019519		F		F	
0.4999999915423681		0.630766418031888		0.1166193606019519		F		F	
0.3469233227244360		0.84692332057523281		0.1166193606019519		F		F	
0.3454192176152352		0.10000162059771645		0.3505405231230083		T		T	
0.9990157947383314		0.8434577511013616		0.3500646558725313		T		T	
0.1579700822667442		0.650695160985173		0.3507410333576084		T		T	
0.486596377496912		0.655794948085138		0.2718148895550993		T		T	
0.3342892086771261		0.02821709692313435		0.271778208819681		T		T	
0.1802580248948479		0.51404777879579318		0.2718148895550993		T		T	
0.1802568029605924		0.51568684823609254		0.038772964861670		F		F	
0.3333334877797753		0.5138949075021211		0.038772964861670		F		F	
0.4864101435973223		0.8197431783567524		0.038772964861670		F		F	
0.3271327996148586		0.8427859312542524		0.4280522954647928		T		T	
0.1508437243844419		0.9778888790378371		0.4278686626344376		T		T	
0.18024270859426839		0.6714885012848567		0.4712429024746105		T		T	
0.0180738082624816		0.83345293332885303		0.194227793697171		T		T	
0.166685736847116		0.680380268668664		0.1941354745718908		T		T	
0.319757124745629		0.985308423828011		0.1943736624307091		T		T	
0.6530766948062429		0.00000000000008953		0.1166193606019519		F		F	
0.0000000055693761		0.1530766594551380		0.1166193606019519		F		F	
0.8469233279585988		0.3469233452020197		0.1166193606019519		F		F	
0.8447886023734763		0.5008729218977766		0.3500785097146014		T		T	
0.5010324054935623		0.345914567601773		0.3506401543766638		T		T	
0.654037451761308		0.154634545129403		0.3502865430185139		T		T	
0.9862094945516348		0.166449683665070		0.2722891142794646		T		T	
0.8336358104434287		0.3199207659733352		0.2722910898243227		T		T	
0.679954559435935		0.0133846441583294		0.2723010000191371		T		T	
0.6802567797755472		0.1666664880051247		0.038772964861670		F		F	
0.833333479876469		0.0135898156931321		0.038772964861670		F		F	
0.9864101412165242		0.3197431839975332		0.038772964861670		F		F	
0.8293798817039378		0.3503007721413342		0.428164362273849		T		T	
0.6571210900446433		0.4869659957506392		0.4285837817781210		T		T	
0.5233327245590614		0.171611429042303		0.4297592219870950		T		T	

0.5134956900263695	0.3331358479207235	0.1943390619406607	T	T	T	0.5135656625433729	0.3332484257924909	0.1944042446702137	T	T	T
0.6667114301974246	0.1802100197300445	0.1943868840499441	T	T	T	0.6667181190683551	0.1802223438352048	0.1944638629999115	T	T	T
0.8196343697498086	0.4865152677601921	0.1941868739212117	T	T	T	0.8197337227203287	0.4862143451460399	0.1942537663771287	T	T	T
0.6530766715650458	0.500000005288325	0.1166193606019519	F	F	F	0.6530766715650488	0.500000005288341	0.1166193606019519	F	F	F
0.9999999601533744	0.6530766414381408	0.1166193606019519	F	F	F	0.9999999601534323	0.6530766414381408	0.1166193606019519	F	F	F
0.846923329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F	0.846923329440371	0.8469233031622423	0.1166193606019519	F	F	F
0.8451969934563998	0.9996410880729045	0.3504980782327499	T	T	T	0.8453878086624753	0.9999014659017020	0.3506018350417586	T	T	T
0.498983488852731	0.8435725071559370	0.3497151871328596	T	T	T	0.4986401658962140	0.8429979379426183	0.3501392157752589	T	T	T
0.6566672652636550	0.6556761618232786	0.3503404626121221	T	T	T	0.6575462520737364	0.6559725389331431	0.3506044391897997	T	T	T
0.9864105682948985	0.6657467526726319	0.271673568151648	T	T	T	0.9868128881492007	0.6658661781232890	0.2718673607171296	T	T	T
0.8339726789651743	0.8200643325229633	0.2716994988150871	T	T	T	0.8341932762948688	0.6201925546500575	0.2718013303644727	T	T	T
0.6797288030460121	0.51388243269558620	0.2717560127112226	T	T	T	0.6800181960413110	0.514077532382044	0.2718340871122585	T	T	T
0.6802568027780538	0.6566648195858470	0.0388729648861670	F	F	F	0.6802568027780788	0.6666648195859059	0.0388729648861670	F	F	F
0.8333350800150900	0.51358983377101352	0.0388729648861670	F	F	F	0.833335080015440	0.51358983377101931	0.0388729648861670	F	F	F
0.9864101642190306	0.8197431779916755	0.0388729648861670	F	F	F	0.9864101642190310	0.8197431779916761	0.0388729648861670	F	F	F
0.8278419374221572	0.8420746736407194	0.4279811106946159	T	T	T	0.8281965439846282	0.8425934785142171	0.4281333337335662	T	T	T
0.6508679744242595	0.9776084451057807	0.4273527307923421	T	T	T	0.6509155579920622	0.9779307473992325	0.4278083524296635	T	T	T
0.5119220590930336	0.6713881879514794	0.4270332763527460	T	T	T	0.5125354458927155	0.6715366296853692	0.4271678024872269	T	T	T
0.513737863895636	0.9373818942417484	0.1941400261394452	T	T	T	0.5138226929875136	0.8334620689082696	0.194212462553193	T	T	T
0.6666791680040791	0.6803040983644805	0.1940774547864866	T	T	T	0.6666914633150776	0.6803585398402995	0.1941497360257280	T	T	T
0.8197420089124128	0.9846723238217851	0.194297682006396	T	T	T	0.8197759937696224	0.9865260659975108	0.194387177267295	T	T	T
0.8200018187050686	0.1578493191531332	0.5410437186841872	T	T	T	0.8396913451760561	0.1650884138016329	0.5418041056097769	T	T	T
0.3319599487545372	0.1668615136775199	0.5412380758777030	T	T	T	0.3423362085593744	0.1669473890261745	0.541771121955112	T	T	T
0.0736123700000000	0.0591144520000000	0.795920610000000	T	T	T	0.0387837977512303	0.0105336234062009	0.7647610260727113	T	T	T
0.4327359860000000	0.8286669300000000	0.7923678210000000	T	T	T	0.3850331734643464	0.6670939794526998	0.7918534984322851	T	T	T
0.3854923840000000	0.1914390330000000	0.7923672250000000	T	T	T	0.3742179313931696	0.1647548656722046	0.7923719525129332	T	T	T
0.5178309080000000	0.0181277730000000	0.7923675820000000	T	T	T	0.5362295091524925	0.0035908961018143	0.7664916827703019	T	T	T
0.8296998740000000	0.1441328200000000	0.7923678210000000	T	T	T	0.8707176577305422	0.1766684961517394	0.7952615910529388	T	T	T
0.8770369890000000	0.6365729870000000	0.7923675820000000	T	T	T	0.8724895216738825	0.6637347390668356	0.7644720684203404	T	T	T
0.0093261000000000	0.4560747740000000	0.795920610000000	T	T	T	0.0430158985663080	0.4938864268752797	0.767982568690184	T	T	T
0.5650747420000000	0.5033199100000000	0.7959517630000000	T	T	T	0.5303511515403702	0.5007234113829752	0.7616602672643769	T	T	T
0.3431192899341197	0.6635191962503501	0.6329416428524305	T	T	T	0.3726738155836273	0.6681248397927475	0.6398787190737100	T	T	T
0.3638952686069290	0.1806383652407496	0.6340206582172678	T	T	T	0.3619822159073198	0.1777465409724055	0.6370876234013485	T	T	T
0.5309179315763229	0.5045169608530827	0.6477008579445478	T	T	T	0.5258591501099656	0.5068627576518379	0.6657831567005382	T	T	T
0.5360740775023360	0.0164552921704622	0.6549443899933980	T	T	T	0.5344960108657636	0.0125495058000808	0.6655230305004953	T	T	T
0.8519391820852495	0.172335040079413	0.6346198529243755	T	T	T	0.8627688703755808	0.1681691848736512	0.6371311731819163	T	T	T
0.8734706943271663	0.6693130748685795	0.6226187547334454	T	T	T	0.8723593608406452	0.6749609687702401	0.6656157478937176	T	T	T
0.0106950874415428	0.490283937663342	0.652113320376435	T	T	T	0.037007345091668	0.495963789939017	0.6668000834664892	T	T	T
0.0124511119151644	0.987163509631388	0.6548891159122686	T	T	T	0.0323907817710270	0.0124293544296357	0.6653305355071197	T	T	T
0.4144414313834912	0.7801719768691967	0.6357328438125202	T	T	T	0.3778599081002873	0.6684148476626860	0.605332685978581	T	T	T
0.4108639321436715	0.6136073999071489	0.6352041756773778	T	T	T	0.4275335350202796	0.6064825967998537	0.6501795048285872	T	T	T
0.3498050531892362	0.1732802158025738	0.5984338629127721	T	T	T	0.358433839232363	0.1740919528219391	0.6014487511958814	T	T	T
0.5447919113670464	0.515584453762803	0.6819981647575207	T	T	T	0.5223193048941510	0.5007882633650427	0.7016804820579600	T	T	T
0.4710964499373829	0.3847516216975771	0.6421765426862429	T	T	T	0.4713458204927178	0.393127072600540	0.6548631840298574	T	T	T
0.4255236460618367	0.1253013488695572	0.6409146194420354	T	T	T	0.4199260195277202	0.1208704869303194	0.6465061438696809	T	T	T
0.6554730255063553	0.0781121725542894	0.6475471029006890	T	T	T	0.6487171467602281	0.0659606628664991	0.6551127989147012	T	T	T
0.5383653179143337	0.9979822478371687	0.6890532854301117	T	T	T	0.4859738504795532	0.8983747595843541	0.6565009928338994	T	T	T
0.7569403617561786	0.6168625190259778	0.6282459422002388	T	T	T	0.7554598640641030	0.6228988829931983	0.6592800507836822	T	T	T
0.9114871299041108	0.2903043852490175	0.6415344707683344	T	T	T	0.9216028994230050	0.2830014331397434	0.6467513325073585	T	T	T
0.8473389337879087	0.1648967460154114	0.5990183340492533	T	T	T	0.8569821582751742	0.16095354006081623	0.601581962322832	T	T	T
0.9200770246919419	0.7827782034932843	0.6325463413574009	T	T	T	0.9213159014173110	0.7923522765555201	0.6599771845792886	T	T	T
0.963309609719762	0.557309741723883	0.6405110855377599	T	T	T	0.9867762281270502	0.5627907340442362	0.6612047299984395	T	T	T
0.1270940708187071	0.5524789851632730	0.644828065000351	T	T	T	0.1503939058876970	0.5589418253101258	0.6564047150958039	T	T	T
0.1283540735739839	0.4533082558711718	0.6484822499801325	T	T	T	0.1454554619022983	0.0708360239286160	0.6539398602301991	T	T	T
0.9652223861748215	0.05550870538122672	0.6477578112792400	T	T	T	0.9788703059690266	0.0719115366904766	0.6537219940590053	T	T	T
0.8722173600000000	0.0556686178000000	0.7240048100000000	T	T	T	0.8398589573837001	0.0188932788807217	0.7294372301680107	T	T	T
0.0078920640000000	0.9449798460000000	0.7703707860000000	T	T	T	0.9855672798510022	0.8932695609038996	0.7704941559792200	T	T	T
0.3201387520000000	0.4539483613000000	0.7801187090000000	T	T	T	0.2692593505481864	0.6112726245378920	0.7839161344964871	T	T	T
0.4694107770000000	0.0775444800000000	0.7703658990000000	T	T	T	0.4778193187928780	0.0690407952365726	0.7763523895824878	T	T	T
0.5167993130000000	0.0132264240000000	0.7240015320000000	T	T	T	0.5368351104785718	0.008404435771510	0.7312361532523698	T	T	T
0.2733070550000000	0.1459183690000000	0.7801192450000000	T	T	T	0.2601376458871377	0.1135104573320850	0.7826413321213003	T	T	T
0.7170991900000000	0.0942846690000000	0.7801187090000000	T	T	T	0.7569887970403198	0.1164711795729784	0.7848864191072734	T	T	T
0.8791955710000000	0.0817431730000000	0.7801088140000000	T	T	T	0.9204779028789096	0.1130857032964723	0.7849899487757356	T	T	T
0.0079313520000000	0.6346464510000000	0.7240048100000000	T	T	T	0.0440594557101917	0.4887043776111120	0.7327739902731700	T	T	T
0.4575020220000000	0.4543429140000000	0.7700048100000000	T	T	T	0.4833403480420587	0.5668205703199080	0.7737428238844847	T	T	T
0.9436059590000000	0.5279040284000000	0.7703707860000000	T	T	T	0.9806459845592719	0.3786495950059646	0.7783559121972084	T	T	T
0.6792109010000000	0.5517405870000000	0.7703699520000000	T	T	T	0.6470156901654008	0.5589437097043276	0.7688602552115926	T	T	T
0.9268684390000000	0.5279040284000000	0.7703707860000000	T	T	T	0.9289421787754595	0.6030733835134848	0.7717229359209418	T	T	T
0.4482524100000000	0.3040399550000000	0.7801190660000000	T	T	T	0.4242194945301369	0.2779649387944930	0.7821467098607550	T	T	T
0.9436912540000000	0.7843588200000000	0.7801180530000000	T	T	T	0.8736761803084366	0.6672935723722886	0.7290213363153939	T	T	T
0.4782727360000000	0.6162113550000000	0.7801203180000000	T	T	T	0.4300820743900221	0.7812260426063196	0.7826768018696931	T	T	T
0.3296969518584984	0.1658680792204072	0.4720888314106909	T	T	T	0.33007882					

0.3199829025885387	0.7499804696788952	0.1926941593311721	T	T	T	0.3196911543670043	0.7499816940981420	0.1926284781960678	T	T	T
0.3199523594561427	0.4999754866936385	0.1926759796877762	T	T	T	0.3197797783827631	0.4998044049432642	0.1927480454471042	T	T	T
0.3199128304318335	0.2499862257823767	0.1926862454172569	T	T	T	0.3197812546920419	0.2499874061462368	0.192736458315669	T	T	T
0.3296984716816742	0.7499430626744437	0.4484101821022394	T	T	T	0.3306395609202346	0.7499613682297245	0.4476031723314762	T	T	T
0.3296503463901374	0.4999411909383492	0.4483500888482980	T	T	T	0.3302808123858763	0.5021489331643429	0.4483429887530171	T	T	T
0.3296437785962784	0.2499560615202034	0.4483633081791422	T	T	T	0.3412576074744442	0.249957753226370	0.4493373858464538	T	T	T
0.7113758009531695	0.7499746238722559	0.1926478958673247	T	T	T	0.7111907046178827	0.7499716605911816	0.1925012590535156	T	T	T
0.7113472764121381	0.4999732870223482	0.1926588787507772	T	T	T	0.7110832835809908	0.4998019731644514	0.1926613438613484	T	T	T
0.7113092297676586	0.2499713834096879	0.1926469104394501	T	T	T	0.7109760468814261	0.2499700028075804	0.1926140008301899	T	T	T
0.7031674983650600	0.7499556878108106	0.4488979204323197	T	T	T	0.7037691340276012	0.7499609616071083	0.4475291577583091	T	T	T
0.7031579053910942	0.4999602489698605	0.4489451718268920	T	T	T	0.7031016696836042	0.5020373221976687	0.4485116977045562	T	T	T
0.7031175754152636	0.2499424149706086	0.4489386611054249	T	T	T	0.6809451771721523	0.2499594466149574	0.4515631688791118	T	T	T
0.0161578765672356	0.1249706643800877	0.2405453234465842	T	T	T	0.0155649556495824	0.1252386109312449	0.2405723711027583	T	T	T
0.0161702321538081	0.6249598479260378	0.240545288548165	T	T	T	0.0156320232849042	0.6249077966700377	0.2404367308260457	T	T	T
0.0160934940897680	0.3746991517627125	0.2405433756055835	T	T	T	0.0155694166987638	0.3747113200438085	0.2409508833490776	T	T	T
0.0173639217239284	0.1249573877779803	0.4919358875724563	T	T	T	0.0179793790437164	0.0971752941728370	0.5014612213177796	T	T	T
0.0173569612009243	0.6249578034050242	0.4919329787066399	T	T	T	0.0169573043554424	0.6321167360582597	0.4928569954045172	T	T	T
0.0174664921599836	0.3749457283449273	0.4919387453444340	T	T	T	0.0179973741391586	0.4027713437773248	0.5014682352761609	T	T	T
0.5150620940000010	0.1249995499999998	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.1249995499999998	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.6249996419999988	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996419999988	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F
0.5160453808349308	0.1249709006193395	0.2688731804294101	T	T	T	0.5162660853059248	0.1258823934701513	0.2689160138156193	T	T	T
0.5160744841933835	0.62496006467351800	0.2688718090682037	T	T	T	0.5163493968768538	0.6247870360891210	0.2684069947427367	T	T	T
0.5160271732194384	0.3749503367024238	0.2688731929524913	T	T	T	0.5162726290668811	0.3740587469336935	0.2689174615907930	T	T	T
0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.2097717520000018	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F	0.2097717520000018	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F
0.2097717520000018	0.2499998959999985	0.0685163959999997	F	F	F	0.2097717520000018	0.2499998959999985	0.0685163959999997	F	F	F
0.2134909829642802	0.7499500416002794	0.3180874719086521	T	T	T	0.2137221555794697	0.7499700967592609	0.3169876760395697	T	T	T
0.2135629343872939	0.37499370797261732	0.3181323821557838	T	T	T	0.2138208636845838	0.5000329017175303	0.3178065942606534	T	T	T
0.2134165196915026	0.2499784821559991	0.3181141516768977	T	T	T	0.2129653445591737	0.2499702560706969	0.3204314819606613	T	T	T
0.8203522599999996	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522599999996	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522599999996	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522599999996	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522599999996	0.2499998959999985	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522599999996	0.2499998959999985	0.0685163959999997	F	F	F
0.8193467280866140	0.7499607068539995	0.3178300037199733	T	T	T	0.8191122379727499	0.7499648950684044	0.3170752134718384	T	T	T
0.8193875756039012	0.4999820687142340	0.3178446418204679	T	T	T	0.8189851769944800	0.5001704986130131	0.3177693758803306	T	T	T
0.8192765761981643	0.2499367719062772	0.3178215941751010	T	T	T	0.8195747627778102	0.2499699232091293	0.3203875326462490	T	T	T
0.5150620940000010	0.1249995499999998	0.1171944219999972	F	F	F	0.5150620940000010	0.1249995499999998	0.1171944219999972	F	F	F
0.5150620940000010	0.6249996419999988	0.1171944219999972	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996419999988	0.1171944219999972	F	F	F
0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.1171944219999972	F	F	F	0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.1171944219999972	F	F	F
0.5173623178943480	0.1249579926100041	0.3663146321627577	T	T	T	0.5171871618248078	0.1241457398062628	0.3662299664323662	T	T	T
0.5173598357941205	0.6249637481382334	0.3663137341320025	T	T	T	0.5167196160355498	0.6252609149202543	0.3655704631054481	T	T	T
0.5174193425278679	0.3749519498237981	0.3663140948179320	T	T	T	0.5172227234154509	0.375784633750380	0.3662338308580088	T	T	T
0.0154444759999990	0.1249548790000006	0.1418015810000028	F	F	F	0.0154444759999990	0.1249548790000006	0.1418015810000028	F	F	F
0.0154768299999992	0.6249957679999980	0.1418021920000001	F	F	F	0.0154768299999992	0.6249957679999980	0.1418021920000001	F	F	F
0.0151764140000026	0.3749757410000001	0.1417940110000018	F	F	F	0.0151764140000026	0.3749757410000001	0.1417940110000018	F	F	F
0.0155976118226910	0.1249469275049956	0.3945888243857993	T	T	T	0.0156548134197095	0.1157890996173479	0.3966831204965203	T	T	T
0.0156396853450144	0.4994559720197466	0.3945846457618321	T	T	T	0.0168571427198138	0.6269917388451207	0.3937179243523803	T	T	T
0.0153191509506333	0.3749563751726435	0.394590202926875	T	T	T	0.0156591762480185	0.3841475332473345	0.3966852494759051	T	T	T
0.3199910855367439	0.9999748835367182	0.1926801545264305	T	T	T	0.3197961043711683	0.0001445853996365	0.1927552174563504	T	T	T
0.3296599890577213	0.9995234923365158	0.4483711506119034	T	T	T	0.3302696516549085	0.9977522119108565	0.4483435581030800	T	T	T
0.71138346669560504	0.0000146841075447	0.192654530959215432	T	T	T	0.7110915860606829	0.0001605640344949	0.1926580288153003	T	T	T
0.7031175766423524	0.9999465247773980	0.4489287874614242	T	T	T	0.7030862635211967	0.9978879178393527	0.4485180695998081	T	T	T
0.0161699361465799	0.87497717870929882	0.2405464978974585	T	T	T	0.015615606401937	0.87503709246411896	0.2404350847764050	T	T	T
0.0173052523336617	0.8749418751848969	0.4919322403449095	T	T	T	0.0169373739557382	0.8678184397226076	0.4928543873617927	T	T	T
0.5150620940000010	0.8749996419999988	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.8749996419999988	0.0198387880000013	F	F	F
0.5160936961505935	0.8749568441022558	0.2688727652928304	T	T	T	0.5163621582390363	0.8751467609133224	0.2684050266105512	T	T	T
0.2097717520000018	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F	0.2097717520000018	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.2136008988074742	-0.0000311905347880	0.3181191165651521	T	T	T	0.213811893982323	0.9998995449462050	0.3178017037993362	T	T	T
0.8203522599999996	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522599999996	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.8194258577249323	0.9999416434438604	0.3178545847180569	T	T	T	0.8189758372085950	0.9997706598701434	0.3177665078161828	T	T	T
0.5150620940000010	0.8749996419999988	0.1171944219999972	F	F	F	0.5150620940000010	0.8749996419999988	0.1171944219999972	F	F	F
0.5173409274790960	0.8749491384262731	0.3663136833627734	T	T	T	0.5167160773849688	0.8746719939126172	0.3655696610801592	T	T	T
0.0154444759999990	0.8749545809999972	0.1418015810000028	F	F	F	0.0154444759999990	0.8749545809999972	0.1418015810000028	F	F	F
0.0156722881112173	0.8749506071460749	0.3945838282571940	T	T	T	0.0168500844037084	0.87293989313168594	0.3937158347837599	T	T	T
0.0163862647543242	0.2499509212064902	0.4497207941411693	T	T	T	0.015905930324885	0.2499736046792508	0.4634473686256205	T	T	T

POSCAR TiO2_3Ce						CONTCAR TiO2_3Ce					
1.0000000000000000						1.0000000000000000					
6.6390976905999999						6.6390976905999999					
0.0000000000000000						0.0000000000000000					
0.0000000000000000						0.0000000000000000					
0.0000000000000000						0.0000000000000000					
26.5563907623000013						26.5563907623000013					
Ti O Ce						Ti O Ce					
29 64 3						29 64 3					
Selective dynamics						Selective dynamics					
Direct						Direct					
0.0157237879491816						0.0157237879491816					
0.7499720393688111						0.7499720393688111					
0.1938110539791435						0.1938110539791435					
T T T						T T T					
0.5165937691315463						0.5165937691315463					
0.6249948258055744						0.6249948258055744					
0.0156809299509583						0.0156809299509583					
0.4999706686586223						0.4999706686586223					
0.1938040831861071						0.1938040831861071					
0.0156396122863882						0.0156396122863882					
0.249970183128710						0.249970183128710					
0.1938088464408063						0.1938088464408063					
0.0164290588562760						0.0164290588562760					
0.4497147297642863						0.4497147297642863					
0.5156146268216837						0.5156146268216837					
0.1249847242304307						0.1249847242304307					
0.1564441501838003						0.1564441501838003					
0.6249836253299229						0.6249836253299229					
0.1555973551657782						0.1555973551657782					
0.3497774398517217						0.3497774398517217					
0.1565745046957279						0.1565745046957279					
0.1249497282466711						0.1249497282466711					
0.0150622869999992						0.0150622869999992					
0.6249995499999998						0.6249995499999998					
0.0150622869999992						0.0150622869999992					
0.6249995499999998						0.6249995499999998					
0.0150622869999992						0.0150622869999992					
0.6249995499999998						0.6249995499999998					
0.016393128162177						0.016393128162177					
0.1249562364208723						0.1249562364208723					
0.6249995499999998						0.6249995499999998					
0.0162429128401382						0.0162429128401382					
0.349757416984171						0.349757416984171					
0.015620940000010						0.015620940000010					
0.0000000000000000						0.0000000000000000					
0.5150620940000010						0.5150620940000010					
0.4999999710000005						0.4999999710000005					
0.0150620940000010						0.0150620940000010					
0.4999999859999985						0.4999999859999985					
0.5165140627521159						0.5165140627521159					
0.7499563628205119						0.7499563628205119					
0.5164751444762505						0.5164751444762505					
0.4999548564502356						0.4999548564502356					
0.5164166236928456						0.5164166236928456					
0.9999690760444871						0.9999690760444871					
0.0157273289237807						0.0157273289237807					
0.9999696919210140						0.9999696919210140					
0.0164385254055327						0.0164385254055327					
0.9999482775445337						0.9999482775445337					
0.5156666329454345						0.5156666329454345					
0.7499789491184808						0.7499789491184808					
0.5165946167713767						0.5165946167713767					
0.8749562473594666						0.8749562473594666					
0.0150622869999992						0.0150622869999992					
0.6249996419999988						0.6249996419999988					
0.0164017069473092						0.0164017069473092					
0.7499581994238874						0.7499581994238874					
0.5150620940000010						0.5150620940000010					
0.0000000000000000						0.0000000000000000					
0.5165356673111381						0.5165356673111381					
0.9999578875946644						0.9999578875946644					
0.3145899689691557						0.3145899689691557					
0.199829025885387						0.199829025885387					
0.7499804676788952						0.7499804676788952					
0.1926941593311721						0.1926941593311721					
0.199523594561427						0.199523594561427					
0.499975486693635						0.499975486693635					
0.19267597687762						0.19267597687762					
0.199112830418335						0.199112830418335					
0.2499862257823767						0.2499862257823767					
0.3296984716816742						0.3296984716816742					
0.7499430672644437						0.7499430672644437					
0.4484101821022394						0.4484101821022394					
0.3296504639081374						0.3296504639081374					
0.4996111909383492						0.4996111909383492					
0.7499560884282980						0.7499560884282980					
0.3368157785041373						0.3368157785041373					
0.3365160861525256						0.3365160861525256					
0.7111982038692324						0.7111982038692324					
0.749758786373247						0.749758786373247					
0.1926478958677259						0.1926478958677259					
0.7113472764121381						0.7113472764121381					
0.4999732870222589						0.4999732870222589					
0.192658878750772						0.192658878750772					
0.1926469104394501						0.1926469104394501					
0.749973833496978						0.749973833496978					
0.449556878108106						0.449556878108106					
0.7031674983650600						0.7031674983650600					
0.499962498698605						0.499962498698605					
0.4494421414970608						0.4494421414970608					
0.7031579053910942						0.7031579053910942					
0.44996407552639						0.44996407552639					
0.7031175754152639						0.7031175754152639					

0.0161578765672356	0.1249706643808777	0.2405453234465842	T	T	T	0.0154378565647372	0.1255080559890477	0.2412036970185257	T	T	T
0.0161702321538081	0.6249598479266378	0.2405452588548165	T	T	T	0.0154018571754141	0.6244448852207279	0.2412032675468605	T	T	T
0.016093440897680	0.3749691571627125	0.2405433756055835	T	T	T	0.0153629557476315	0.3749696722535688	0.2413200768667254	T	T	T
0.0173639217239284	0.124953787779803	0.4919358875724563	T	T	T	0.015723494856557	0.0864432259593820	0.5043129482900102	T	T	T
0.0173569612089243	0.6249578804850242	0.4919329787066399	T	T	T	0.0156363409880863	0.6635221959388802	0.5043219123210215	T	T	T
0.0174664921599836	0.3749457283449273	0.4919387453444340	T	T	T	0.0150063450014946	0.3749915169927203	0.5199513722175773	T	T	T
0.51506209400000010	0.1249995499999998	0.0198387880000013	F	F	F	0.51506209400000010	0.1249995499999998	0.0198387880000013	F	F	F
0.51506209400000010	0.1249996419999988	0.0198387880000013	F	F	F	0.51506209400000010	0.6249996419999988	0.0198387880000013	F	F	F
0.51506209400000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F	0.51506209400000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F
0.5160453808349308	0.1249709006193395	0.2688731804294101	T	T	T	0.5160916807080769	0.1271720235348920	0.2685150528247853	T	T	T
0.5160744841933835	0.6249600847351000	0.2688718090682037	T	T	T	0.5157718900882399	0.6227554561880041	0.268501719829339	T	T	T
0.5160271732194384	0.3749503367024328	0.2688731929524013	T	T	T	0.5158360591530033	0.3749755479503416	0.2686023036545111	T	T	T
0.20977175200000018	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.20977175200000018	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.20977175200000018	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F	0.20977175200000018	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F
0.20977175200000018	0.2499989859999985	0.0685163959999997	F	F	F	0.20977175200000018	0.2499989859999985	0.0685163959999997	F	F	F
0.2134909829642802	0.7499500416002794	0.3180874719086521	T	T	T	0.2128658307629693	0.7498288857007489	0.3172128461973212	T	T	T
0.2135629343872939	0.4999370979261732	0.3181323821557838	T	T	T	0.2116413323082546	0.4990273412025141	0.3216421613151865	T	T	T
0.2134165196915026	0.2499784821559991	0.3181144516768977	T	T	T	0.2116747311393771	0.2509078077405559	0.3216203209473749	T	T	T
0.8203522559999996	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522559999996	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522559999996	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522559999996	0.4999997910000005	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522559999996	0.2499989859999985	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522559999996	0.2499989859999985	0.0685163959999997	F	F	F
0.8193467280866140	0.7499607068539995	0.3178300037199733	T	T	T	0.8186293883385174	0.7498350220794753	0.3172195196298935	T	T	T
0.819387576039012	0.4999820687142340	0.3178446418204679	T	T	T	0.8197742277959035	0.4989907265035254	0.3216950408928562	T	T	T
0.8192765761981643	0.2499367719062772	0.3178215941751010	T	T	T	0.8197655455951277	0.2508922382311649	0.3216947759445671	T	T	T
0.51506209400000010	0.1249995499999998	0.1171944219999972	F	F	F	0.51506209400000010	0.1249995499999998	0.1171944219999972	F	F	F
0.51506209400000010	0.6249996419999988	0.1171944219999972	F	F	F	0.51506209400000010	0.6249996419999988	0.1171944219999972	F	F	F
0.51506209400000010	0.3749997910000005	0.1171944219999972	F	F	F	0.51506209400000010	0.3749997910000005	0.1171944219999972	F	F	F
0.5173623178943384	0.1249579926100041	0.3663146321627577	T	T	T	0.5155476691015984	0.1235136075231302	0.3653856888589213	T	T	T
0.5173598357941205	0.6249637481382334	0.3663137341320025	T	T	T	0.5158149493584957	0.6264485046770850	0.3653727258484600	T	T	T
0.5174193425278679	0.3749519498237981	0.36631409484179320	T	T	T	0.5157649645445700	0.3749774177292051	0.3655402864809282	T	T	T
0.0154444759999990	0.1249548790000006	0.1418015810000028	F	F	F	0.0154444759999990	0.1249548790000006	0.1418015810000028	F	F	F
0.0154768299999972	0.6249957679999980	0.1418021920000001	F	F	F	0.0154768299999972	0.6249957679999980	0.1418021920000001	F	F	F
0.0151764140000026	0.3749757410000001	0.1417940110000018	F	F	F	0.0151764140000026	0.3749757410000001	0.1417940110000018	F	F	F
0.0155976118226910	0.1249469275049956	0.3945888243857993	T	T	T	0.0157574312512972	0.1158258460297415	0.3968768794984160	T	T	T
0.0156396853450144	0.3749759270197466	0.3945846457618321	T	T	T	0.0156593603991212	0.6341899157763143	0.3968733844755650	T	T	T
0.0153191509506333	0.3749563751726435	0.3945902029296875	T	T	T	0.0166961446405461	0.3749757860598321	0.4034817062947650	T	T	T
0.3199910855367439	0.9999748835367182	0.1926801545264305	T	T	T	0.3195613240961810	0.0001964298448778	0.1927411391883453	T	T	T
0.3296659809577213	0.0000146841075447	0.4483711586119034	T	T	T	0.3262451696107284	0.9927214533203469	0.4475402350908586	T	T	T
0.711383466965604	-0.0000146841075447	0.192645305921542	T	T	T	0.71125142320251629	0.0002251751998674	0.1926455247392688	T	T	T
0.7031715766423524	0.9999465747779380	0.4489287874614232	T	T	T	0.7053275228440966	0.9931618529207594	0.4476372715735404	T	T	T
0.0161699361465799	0.874977180929882	0.2405464978974585	T	T	T	0.0154298868707986	0.8749854350917697	0.2405247083140445	T	T	T
0.0173505223336617	0.8749418751848699	0.4919322403449095	T	T	T	0.0154987979694177	0.8750163633982229	0.493199854858629	T	T	T
0.51506209400000010	0.8749996419999988	0.0198387880000013	F	F	F	0.51506209400000010	0.8749996419999988	0.0198387880000013	F	F	F
0.5160936961505935	0.8749568441022558	0.2688727652920304	T	T	T	0.5160262401337843	0.8749889258109848	0.2676496324434389	T	T	T
0.20977175200000018	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F	0.20977175200000018	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.2136009888074742	-0.0000311905347880	0.3181191165651521	T	T	T	0.2129282938605932	0.0001238025434345	0.3172149255015742	T	T	T
0.8203522559999996	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F	0.8203522559999996	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.8194258577249323	0.9999416434438604	0.3178545847180569	T	T	T	0.8187856699799738	0.0001292141570673	0.3172693668591512	T	T	T
0.51506209400000010	0.8749996419999988	0.1171944219999972	F	F	F	0.51506209400000010	0.8749996419999988	0.1171944219999972	F	F	F
0.517340974700960	0.8749491304262731	0.3663136833627734	T	T	T	0.5159345941825376	0.8749749309311336	0.36401912387797874	T	T	T
0.0154444759999990	0.8749545809999972	0.1418015810000028	F	F	F	0.0154444759999990	0.8749545809999972	0.1418015810000028	F	F	F
0.015227881112173	0.8749506071460749	0.394583828571940	T	T	T	0.0158574554663604	0.8749714913227690	0.3929206205620116	T	T	T
0.0163862647543242	0.2499509212064902	0.4497207941411693	T	T	T	0.0144405990333752	0.2373208012385782	0.470459493543945	T	T	T
0.0164199262693158	0.499947675293773	0.4497260386207453	T	T	T	0.0147672772341755	0.512656040524675	0.4704461931939845	T	T	T
0.5165932756187983	0.3749465518007597	0.4373865987867340	T	T	T	0.5134220048658849	0.3750221937417952	0.4466740535574471	T	T	T

POSCAR TiO2_Ce_Ice_bL												CONTCAR TiO2_Ce_Ice_bL											
1.000000000000000												1.000000000000000											
6.639097690599999 0.000000000000000 0.000000000000000												6.639097690599999 0.000000000000000 0.000000000000000											
0.000000000000000 12.157906532300000 0.000000000000000												0.000000000000000 12.157906532300000 0.000000000000000											
0.000000000000000 0.000000000000000 26.556390762300013												0.000000000000000 0.000000000000000 26.556390762300013											
Ti	O	H	Ce									Ti	O	H	Ce								
31	80	32	1									31	80	32	1								
Selective dynamics												Selective dynamics											
Direct												Direct											
0.015289099803754	0.7499560884078879	0.1926165527938769	T	T	T	0.0161218547151589	0.7502839778643663	0.1928099646598793	T	T	T	0.0161892180786105	0.4992042009542359	0.1935281317062448	T	T	T	0.0160883914867925	0.2502988245990532	0.1939585760973350	T	T	T
0.0152938509898671	0.4988077208281346	0.1934181511960949	T	T	T	0.0161892180786105	0.4992042009542359	0.1935281317062448	T	T	T	0.0160883914867925	0.2502988245990532	0.1939585760973350	T	T	T	0.0239312802170417	0.7512282091434327	0.4430429070413190	T	T	T
0.0152500000136756	0.2500349001960397	0.1938610484129527	T	T	T	0.0239312802170417	0.7512282091434327	0.4430429070413190	T	T	T	0.028693121717181	0.5105730537046723	0.4479948984284499	T	T	T	0.5162427778456995	0.1255800067473269	0.1903891786509121	T	T	T
0.0133147436372149	0.5084155994857188	0.4424132706890299	T	T	T	0.5162427778456995	0.1255800067473269	0.1903891786509121	T	T	T	0.51628473408180297	0.625217461796753	0.1902849409898284	T	T	T	0.5162624573340814	0.3751257315927346	0.1904086954350608	T	T	T
0.0157827836066132	0.7480959544044276	0.4474260451965629	T	T	T	0.51628473408180297	0.625217461796753	0.1902849409898284	T	T	T	0.5270851174894724	0.1227982089413752	0.4392624739877408	T	T	T	0.5270851174894724	0.1227982089413752	0.4392624739877408	T	T	T
0.5152480094755783	0.1252283827705445	0.190428542504848	T	T	T	0.5270851174894724	0.1227982089413752	0.4392624739877408	T	T	T	0.5342178794845402	0.6289974231205297	0.4390210185860601	T	T	T	0.5342178794845402	0.6289974231205297	0.4390210185860601	T	T	T
0.5152970489672451	0.6249344114887760	0.190276531892415	T	T	T	0.5342178794845402	0.6289974231205297	0.4390210185860601	T	T	T	0.5185085186172943	0.3815166075593321	0.4399456081427388	T	T	T	0.5185085186172943	0.3815166075593321	0.4399456081427388	T	T	T
0.5151698231824997	0.3747367800516988	0.1903366143110492	T	T	T	0.5185085186172943	0.3815166075593321	0.4399456081427388	T	T	T	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F
0.5244309122783024	0.1224393475064863	0.4396390520664930	T	T	T	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F
0.5229273973834552	0.6272525359645186	0.4385957071801730	T	T	T	0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0179354771424723	0.1249260885813165	0.3222370801583177	T	T	T	0.0179354771424723	0.1249260885813165	0.3222370801583177	T	T	T
0.5063345268346081	0.3803169322609788	0.4401285683042572	T	T	T	0.0179354771424723	0.1249260885813165	0.3222370801583177	T	T	T	0.01960807864998671	0.6260511683303154	0.3187482697320116	T	T	T	0.01960807864998671	0.6260511683303154	0.3187482697320116	T	T	T
0.5166228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.01960807864998671	0.6260511683303154	0.3187482697320116	T	T	T	0.0213614498187374	0.3771531253607167	0.3225298971092783	T	T	T	0.0213614498187374	0.3771531253607167	0.3225298971092783	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0213614498187374	0.3771531253607167	0.3225298971092783	T	T	T	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.519846634882511	0.7511466674774203	0.3154363967123620	T	T	T	0.519846634882511	0.7511466674774203	0.3154363967123620	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.519846634882511	0.7511466674774203	0.3154363967123620	T	T	T	0.5202415001622158	0.5013644517429351	0.3152894544539107	T	T	T	0.5202415001622158	0.5013644517429351	0.3152894544539107	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5202415001622158	0.5013644517429351	0.3152894544539107	T	T	T	0.5196465945590282	0.2512518066440384	0.3166370546239886	T	T	T	0.5196465945590282	0.2512518066440384	0.3166370546239886	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5196465945590282	0.2512518066440384	0.3166370546239886	T	T	T	0.0160918657014042	0.0819544993348569	0.1935516895746491	T	T	T	0.0160918657014042	0.0819544993348569	0.1935516895746491	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0160918657014042	0.0819544993348569	0.1935516895746491	T	T	T	0.0199763399102936	0.9928636287133167	0.4481514403720138	T	T	T	0.0199763399102936	0.9928636287133167	0.4481514403720138	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0199763399102936	0.9928636287133167	0.4481514403720138	T	T	T	0.5161961532400009	0.875368264286100	0.1902357155749404	T	T	T	0.5161961532400009	0.875368264286100	0.1902357155749404	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5161961532400009	0.875368264286100	0.1902357155749404	T	T	T	0.5137730418704692	0.8759080267485329	0.4388516575682919	T	T	T	0.5137730418704692	0.8759080267485329	0.4388516575682919	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5137730418704692	0.8759080267485329	0.4388516575682919	T	T	T	0.0150622869999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0150622869999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0150622869999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0203843190705497	0.8759535987212956	0.3190312414254410	T	T	T	0.0203843190705497	0.8759535987212956	0.3190312414254410	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.0203843190705497	0.8759535987212956	0.3190312414254410	T	T	T	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F	0.5188306523169628	0.0009234350000018	0.3150401800509434	T	T	T	0.5188306523169628	0.0009234350000018	0.3150401800509434	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.5188306523169628	0.0009234350000018	0.3150401800509434	T	T	T	0.3198732878006785	0.7502247469666308	0.1924919661554838	T	T	T	0.3198732878006785	0.7502247469666308	0.1924919661554838	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3198732878006785	0.7502247469666308	0.1924919661554838	T	T	T	0.3200803005849512	0.5001107461649165	0.1927554606515066	T	T	T	0.3200803005849512	0.5001107461649165	0.1927554606515066	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3200803005849512	0.5001107461649165	0.1927554606515066	T	T	T	0.3199491182748013	0.2503152220954295	0.1926273577441153	T	T	T	0.3199491182748013	0.2503152220954295	0.1926273577441153	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3199491182748013	0.2503152220954295	0.1926273577441153	T	T	T	0.3321755461493368	0.7555597208035907	0.4423895948552445	T	T	T	0.3321755461493368	0.7555597208035907	0.4423895948552445	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3321755461493368	0.7555597208035907	0.4423895948552445	T	T	T	0.3362599818910869	0.5108704166460497	0.4457912346623604	T	T	T	0.3362599818910869	0.5108704166460497	0.4457912346623604	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3362599818910869	0.5108704166460497	0.4457912346623604	T	T	T	0.3453748410037669	0.5803190226647319	0.4456519875938568	T	T	T	0.3453748410037669	0.5803190226647319	0.4456519875938568	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.3453748410037669	0.5803190226647319	0.4456519875938568	T	T	T	0.7124979149609135	0.74048129249387371	0.1921286156418804	T	T	T	0.7124979149609135	0.74048129249387371	0.1921286156418804	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.0685163959999997	F	F	F	0.7124979149609135	0.74048129249387371	0.1921286156418804	T	T	T	0.7124907370111699	0.5000100689868000	0.1924550303437616	T	T	T	0.7124907370111699	0.5000100689868000	0.1924550303437616	T	T	T
0.0156228699999992	0.1249995490099988	0.06851639																					

0.5150620940000010	0.1249999550000005	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.1249999549999998	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.6249996420000452	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996420000485	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150846203294639	0.1267218040046704	0.2693017058677507	T	T	T	0.5194210935992718	0.1277979568864669	0.2690547708496606	T	T	T
0.5154827142598577	0.6252458432200019	0.2684226740936015	T	T	T	0.5197695433197197	0.6260841247506698	0.2684856981279493	T	T	T
0.5150125787511707	0.3732402738207214	0.26912447350180359	T	T	T	0.5196155160559736	0.3745359847277536	0.2692195612937890	T	T	T
0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.2097717520000018	0.4999997910000242	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.4999997910000218	0.0685163959999997	F	F	F
0.2097717520000018	0.2499998960000210	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.2499998960000198	0.0685163959999997	F	F	F
0.2109833585864088	0.7488789368357336	0.3164785679480120	T	T	T	0.2154250630524877	0.7503259317106024	0.3162756447051140	T	T	T
0.2110299564615410	0.5018382874699008	0.3165053825490490	T	T	T	0.2159222674875238	0.5021180773918930	0.3162379143345365	T	T	T
0.2099006112567202	0.7487181744544885	0.3203009423749919	T	T	T	0.2143081676343206	0.2502239607817615	0.3199761908522109	T	T	T
0.8203522559999999	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.0000000000000000	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522559999999	0.4999997910000242	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.4999997910000218	0.0685163959999997	F	F	F
0.8203522559999999	0.2499998960000210	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.2499998960000198	0.0685163959999997	F	F	F
0.8197678481212680	0.7506753455600406	0.3161699643068161	T	T	T	0.8243279233169600	0.7516274523299801	0.3169141777907609	T	T	T
0.8198296829620882	0.4990548347930529	0.3163751349748673	T	T	T	0.8246088422745224	0.5005856965926679	0.3171447763522244	T	T	T
0.8203942144076373	0.2507015748082559	0.3199662676769539	T	T	T	0.8247653529525822	0.2520617146577401	0.3204060657351958	T	T	T
0.5150620940000010	0.1249999550000005	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.1249999549999998	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.6249996420000452	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996420000485	0.0198387880000013	F	F	F
0.5150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.3749997910000005	0.0198387880000013	F	F	F
0.5223990717222680	0.1228904498928853	0.3668045168111256	T	T	T	0.5240114952952053	0.1244658106248145	0.3662727148773042	T	T	T
0.5234027383895375	0.6246686669263448	0.3654384809741638	T	T	T	0.5270743116224018	0.6257491034081912	0.3656415221621621	T	T	T
0.5093374687585305	0.3776824951758203	0.3665537429135888	T	T	T	0.5142288582264436	0.3787308720798894	0.3668556044538721	T	T	T
0.8154444759999990	0.1249548790000012	0.1418015810000038	F	F	F	0.8154444759999990	0.1249548790000006	0.1418015810000028	F	F	F
0.8154768299999972	0.6249957680000444	0.1418021920000008	F	F	F	0.8154768299999972	0.6249957680000477	0.1418021920000001	F	F	F
0.8151764140000026	0.3749757410000008	0.1417940110000027	F	F	F	0.8151764140000026	0.3749757410000001	0.1417940110000018	F	F	F
0.0075485415512603	0.1119490414473242	0.3951977968428603	T	T	T	0.0166238750230430	0.1143037004290815	0.3954370452811060	T	T	T
0.0092387018692775	0.6247274049330281	0.3922977943468425	T	T	T	0.0221340196123188	0.6270319222784113	0.3928676997292444	T	T	T
0.0189932226647800	0.3858469990020284	0.3954141284585817	T	T	T	0.0286181903307469	0.3883324301382592	0.3956426173634971	T	T	T
0.3189595719928375	0.0003543258970855	0.1926070176920372	T	T	T	0.3199557817868710	0.0006348095987247	0.1927780063828420	T	T	T
0.3247707750276953	0.0038014580723343	0.4449075880574553	T	T	T	0.3287039258075686	0.0047869635816241	0.4444592803327690	T	T	T
0.7115551705065778	0.0002141941844647	0.1926082199026289	T	T	T	0.7124381127588902	0.0005475460114793	0.1924452953054026	T	T	T
0.7054180619659641	0.9923966400071128	0.4469684091195085	T	T	T	0.7107822661773411	0.9941874255661088	0.4457733307363148	T	T	T
0.0163285936169553	0.8748931678201606	0.2398028130978219	T	T	T	0.0170619135311173	0.8753028537642865	0.2399724248592880	T	T	T
0.034396765427276	0.8641609281820815	0.4913362367586513	T	T	T	0.0441821134739101	0.8675351813908799	0.4924345653146238	T	T	T
0.5150620940000010	0.6249996420000452	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996420000485	0.0198387880000013	F	F	F
0.5147876007757932	0.8749979441016865	0.2684400273733103	T	T	T	0.5194442696418260	0.8757088755913026	0.2683471871162327	T	T	T
0.2097717520000018	0.7499996419999997	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.2106038054930552	0.0005349085134331	0.3166317384526193	T	T	T	0.2146462905524255	0.0016091051069889	0.316268204630821	T	T	T
0.8203522559999999	0.7499996419999997	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.7499996419999988	0.0685163959999997	F	F	F
0.8193195603302320	0.9985547744714693	0.3162150629122237	T	T	T	0.8233013893505773	0.9998532567186655	0.3169283155364762	T	T	T
0.5150620940000010	0.6249996420000452	0.0198387880000013	F	F	F	0.5150620940000010	0.6249996420000485	0.0198387880000013	F	F	F
0.5094418874102823	0.8758368621761899	0.3656882952565192	T	T	T	0.5127619132265026	0.8770175875054916	0.3653454025760928	T	T	T
0.8154444759999990	0.8749554810000449	0.1418015810000038	F	F	F	0.8154444759999990	0.8749554810000470	0.1418015810000028	F	F	F
0.8183207628429124	0.8713235459971628	0.3923345774526290	T	T	T	0.8259198308577363	0.8754053610023791	0.392953015629986	T	T	T
0.4285630880000000	0.3668470080000000	0.6719730140000000	T	T	T	0.1368111777423831	0.3059275436729159	0.6776215314964648	T	T	T
0.4285630880000000	0.8685781360000000	0.6719730140000000	T	T	T	0.2236278718461659	0.8272308395600911	0.6742692528189806	T	T	T
0.5490246420000000	0.1282892330000000	0.6719730140000000	T	T	T	0.4290529148570215	0.1461646629795600	0.67115536125480039	T	T	T
0.5490246420000000	0.6219523700000000	0.6719730140000000	T	T	T	0.4900853456287316	0.6475622756730680	0.6772283672834706	T	T	T
0.3230908220000000	0.5395425840000000	0.7472834830000000	T	T	T	0.33693948672081204	0.4722584037195976	0.7288390962451330	T	T	T
0.3230908220000000	0.0460368320000000	0.7472834830000000	T	T	T	0.3980093555177783	0.7496777801532086	0.7361702211830675	T	T	T
0.6996489170000000	0.2927093830000000	0.7472834830000000	T	T	T	0.7582710654152557	0.2444304518425504	0.7150848614077703	T	T	T
0.6996489170000000	0.7862964270000000	0.7472834830000000	T	T	T	0.8329361708007537	0.7680575126567962	0.7062495639216831	T	T	T
0.4272486618883534	0.3722746973289147	0.5207078352089754	T	T	T	0.4569250424438299	0.3671633990877978	0.5254468338506421	T	T	T
0.4265169824866016	0.8521298681595297	0.5209076608000357	T	T	T	0.4401301156932522	0.8580853308638359	0.5207904620000131	T	T	T
0.6060405391991064	0.1335408115130784	0.5249021888898724	T	T	T	0.5775982878017066	0.1298873978594614	0.5218892998088543	T	T	T
0.6006151809734915	0.6454575786350704	0.5238292783080152	T	T	T	0.6172630339873673	0.6472158215266790	0.5212567515137679	T	T	T
0.5612320407344357	0.49532525729156637	0.5983962355036319	T	T	T	0.58723517120723620	0.5048720670515323	0.5982564628465845	T	T	T
0.3059200776900626	0.0192733086583053	0.5754846998560047	T	T	T	0.3057828986608210	0.9914201769688322	0.6004951148446968	T	T	T
0.8050036586820599	0.3039396252997311	0.5728081529086712	T	T	T	0.92423364651207493	0.3667997117282301	0.5965656849110298	T	T	T
0.8124143263663081	0.8425586204464578	0.5797565467257029	T	T	T	0.7933272232314929	0.8508170203955028	0.5773059081093112	T	T	T
0.48175437103350004	0.4193085314113837	0.5483948983774830	T	T	T	0.5048626843032286	0.4159023124414875	0.5537182986248845	T	T	T
0.2778205889812774	0.3888586050962041	0.5191190658480552	T	T	T	0.3085997719820944	0.3823239818425838	0.5232609140013922	T	T	T
0.4134156027450709	0.9174610876564347	0.5449702432223014	T	T	T	0.4688052460518649	0.9121608622676531	0.5477498345998869	T	T	T
0.2798139469940994	0.8380363536881133	0.514429760152760	T	T	T	0.2892427765957529	0.8566281766473772	0.5174532007434549	T	T	T
0.7401456984265677	0.0953841515132431	0.5247633397443181	T	T	T	0.7233246840271236	0.1134440407239858	0.5263794969805156	T	T	T
0.6404084718226826	0.266363029385692	0.5394583439065622	T	T	T	0.5529147837202252	0.2052938025583149	0.5341729548605523	T	T	T
0.7516131720930721	0.646072067430938	0.5193735171946214	T	T	T	0.7696155575253170	0.6469186765704560	0.5163285941137813	T	T	T
0.5624560383388149	0.722458546552622	0.5328305938972708	T	T	T	0.5818860836238730	0.7232135611775274	0.5320044716441495	T	T	T
0.5763570001226468	0.5621581611520312	0.5769315791542042	T	T	T	0.6033503757620002	0.5636797550626712	0.5725572044948746	T	T	T
0.4642996130784223	0.5132597611306265	0.6245660259457223									

0.0143457613057858	0.1241984023988942	0.3209225603582568	T	T	T	0.0174534750523095	0.1247217774479404	0.3240686872587788	T	T	T
0.0144586367486854	0.6256513570248359	0.3208638203342679	T	T	T	0.0187407031597427	0.6261158028665296	0.3200063075095545	T	T	T
0.0298691216214477	0.3750234255192478	0.3249599074127254	T	T	T	0.0324074633552572	0.3744536806896657	0.3253164945214538	T	T	T
0.0150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F	0.0150620940000010	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F
0.0150620940000010	0.4999997910000383	0.0685163959999998	F	F	F	0.0150620940000010	0.4999997910000880	0.0685163959999998	F	F	F
0.0150620940000010	0.2499998960000352	0.0685163959999998	F	F	F	0.0150620940000010	0.2499998960000600	0.0685163959999998	F	F	F
0.5134028357703462	0.750038457169679	0.3145892981468053	T	T	T	0.5181527985173209	0.7502370424732895	0.3149828280531215	T	T	T
0.5208540978059242	0.49923780784693609	0.3151229429084372	T	T	T	0.5236768164369071	0.5001204734954071	0.3153545622903233	T	T	T
0.5213246705527095	0.2506313079140625	0.3161991125050071	T	T	T	0.5241552084352122	0.2517337607798520	0.3154354129128634	T	T	T
0.0147731404542704	0.001391566248974	0.1927257081315889	T	T	T	0.0156572281351325	0.0019633259524479	0.1932799235967794	T	T	T
0.0179068430059223	0.9905268467451978	0.4435673067533613	T	T	T	0.0323065209005520	0.9898711078291099	0.4450148360635594	T	T	T
0.5145701180060262	0.8759030016953153	0.1901941090055733	T	T	T	0.5155502482341893	0.8752571894008788	0.1901418873625134	T	T	T
0.5066914455152509	0.8773756047445931	0.4370134079713710	T	T	T	0.5213305173916047	0.8786595066641625	0.4371376375557451	T	T	T
0.0150622869999992	0.8749996420000744	0.0685163959999998	F	F	F	0.0150622869999992	0.8749996420001810	0.0685163959999998	F	F	F
0.0131413210752585	0.8750693050651336	0.3164375986122558	T	T	T	0.0175774367309626	0.8756479701291053	0.3173030893872600	T	T	T
0.0150620940000010	0.7499996419999997	0.0685163959999998	F	F	F	0.0150620940000010	0.7499996419999997	0.0685163959999998	F	F	F
0.5136284773892722	0.0015962440996287	0.3149051880244948	T	T	T	0.5174416084830102	0.0012687362575662	0.3143308118417010	T	T	T
0.3183180352800018	0.7490562786351081	0.1925278497881756	T	T	T	0.3192664702447094	0.7497427479438453	0.1926388637425246	T	T	T
0.3191504854574052	0.5005572677251613	0.1926527591694589	T	T	T	0.3201117656745474	0.5003064155099834	0.1927528879361315	T	T	T
0.3190182762719187	0.2499978911356198	0.1925408055127172	T	T	T	0.3201329278633238	0.2501883280398213	0.1926869545640192	T	T	T
0.3148942255660442	0.7557372074383012	0.4406296201077551	T	T	T	0.3247173804052110	0.7584824636280009	0.4419924908898800	T	T	T
0.3117036736002839	0.5409596556965380	0.4634861597474270	T	T	T	0.3113740547409112	0.5420097171656988	0.4610230309812614	T	T	T
0.3160040254930192	0.2146202087626061	0.4609829046630360	T	T	T	0.3164555930568279	0.2124475556322779	0.4593774460003854	T	T	T
0.7115211251380403	0.7501905745602774	0.1921147769992628	T	T	T	0.7125479059870912	0.7503605895521968	0.1920746181444513	T	T	T
0.7122783721134207	0.49989681712348867	0.1921913627970074	T	T	T	0.7131711899169744	0.5001475081150176	0.1920745931466711	T	T	T
0.7122545042636627	0.2501593596622205	0.1920912308838648	T	T	T	0.7129384683992667	0.2502936200197330	0.1920201560831212	T	T	T
0.7041536999733260	0.2515552164961310	0.4404587499021343	T	T	T	0.7133182050978771	0.7610276328546417	0.4402304083817204	T	T	T
0.6714267962939664	0.5054537942907818	0.4452167740866411	T	T	T	0.6692084668990562	0.5033184427462841	0.4446920867218254	T	T	T
0.6754452882910136	0.251555216496109	0.4403138934994290	T	T	T	0.683104446622076	0.2559835585762091	0.4369516424747210	T	T	T
0.0129385935641190	0.1257122325794340	0.2406274422119162	T	T	T	0.0143096108210587	0.1255637566593428	0.2409256456823548	T	T	T
0.0126700600977730	0.6244459815818798	0.2406234334759349	T	T	T	0.0140598307370160	0.6246673058497866	0.240952502747556	T	T	T
0.0170844436150063	0.3748959775780715	0.2416354567134067	T	T	T	0.0179824338234265	0.3751030636995472	0.241592515892346	T	T	T
0.0157452442435122	0.0871507823316656	0.4999780351942066	T	T	T	0.0442978692820919	0.0817805063614225	0.5045569438681463	T	T	T
0.9694901412206309	0.6610285938793222	0.5001101661611156	T	T	T	0.9726693263702374	0.6549906252102817	0.4986550218245869	T	T	T
0.0501537237500618	0.372351319540056	0.5139670483286856	T	T	T	0.0865272846343615	0.3746749923461385	0.5108354963733139	T	T	T
0.0150620940000010	0.1249995500000004	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.1249995500000235	0.0198387880000013	F	F	F
0.0150620940000010	0.6249996420000734	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.6249996420001551	0.0198387880000013	F	F	F
0.0150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F
0.01596154805913215	0.1270082291438686	0.2685781028494351	T	T	T	0.5225891187645765	0.1269721509476553	0.2682743852598147	T	T	T
0.5199279283346380	0.6243733664821237	0.2683264938476970	T	T	T	0.5231905061877723	0.6250707908526351	0.2684413434413294	T	T	T
0.5208515674439976	0.37461219761734984	0.2679165539549768	T	T	T	0.5249171279712343	0.3754068393946738	0.2677331922525226	T	T	T
0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F
0.2097717520000018	0.4999997910000383	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.4999997910000880	0.0685163959999998	F	F	F
0.2097717520000018	0.2499998960000352	0.0685163959999998	F	F	F	0.2097717520000018	0.2499998960000600	0.0685163959999998	F	F	F
0.2094769282215263	0.7498575385585208	0.3159178510126093	T	T	T	0.2140666125748975	0.7508485196964871	0.3159423591039812	T	T	T
0.2130839840551627	0.5019058158842223	0.3157078842604570	T	T	T	0.2161691317953919	0.5022419739671072	0.317890497694145	T	T	T
0.213483563827550	0.248024465736161	0.3182185750741131	T	T	T	0.2166350961200006	0.247285850577568	0.3180728961149770	T	T	T
0.8203522559999999	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.0000000000000000	0.0685163959999998	F	F	F
0.8203522559999999	0.4999997910000383	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.4999997910000880	0.0685163959999998	F	F	F
0.8203522559999999	0.2499998960000352	0.0685163959999998	F	F	F	0.8203522559999999	0.2499998960000600	0.0685163959999998	F	F	F
0.8183026405428134	0.7498836348186049	0.3161759278104053	T	T	T	0.8227182101624737	0.7508692739221146	0.3163669552966415	T	T	T
0.8256530831297079	0.4964472819849798	0.3217166787905330	T	T	T	0.8289315595390058	0.4968966417570724	0.3223996235923891	T	T	T
0.8261008608399358	0.2538609717350056	0.3219134024609404	T	T	T	0.8286512278219669	0.2534150719500926	0.3219891919433917	T	T	T
0.0150620940000010	0.1249995500000004	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.1249995500000235	0.0198387880000013	F	F	F
0.0150620940000010	0.6249996420000734	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.6249996420001551	0.0198387880000013	F	F	F
0.0150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F	0.0150620940000010	0.3749997910000013	0.0198387880000013	F	F	F
0.5149401742687724	0.1240762674701627	0.3665958174180159	T	T	T	0.5187225770439308	0.1243789585300248	0.3656005778107810	T	T	T
0.5108106168641849	0.6252926906016568	0.3660752164063281	T	T	T	0.5160997092546964	0.6259974623984363	0.366225831920283	T	T	T
0.5065305815971364	0.3763469280292666	0.3632303584906713	T	T	T	0.5064391072887505	0.3769535870499866	0.3628084304408569	T	T	T
0.0154444759999992	0.1249548799000012	0.1418015810000037	F	F	F	0.0154444759999992	0.1249548799000242	0.1418015810000038	F	F	F
0.0154768299999992	0.6249957680000726	0.1418021920000008	F	F	F	0.0154768299999992	0.6249957680001543	0.1418021920000008	F	F	F
0.0151764140000026	0.3749757410000008	0.1417940110000027	F	F	F	0.0151764140000026	0.3749757410000008	0.1417940110000028	F	F	F
0.0085276380153833	0.1152677809579266	0.3945583744969491	T	T	T	0.0115046519807340	0.1176131567182248	0.3978233407455175	T	T	T
0.010629276960459	0.6323743019122460	0.3945958476252609	T	T	T	0.0179189350003275	0.6350129423440162	0.3937718453923194	T	T	T
0.0793665226640230	0.3753491385855410	0.4015716583724415	T	T	T	0.0805649654702023	0.3716572869760691	0.4005236595327903	T	T	T
0.3183859031816302	0.0006229971311885	0.1925976199075723	T	T	T	0.3195497566418015	0.0006010389262219	0.1926871195818116	T	T	T
0.3211629731813595	0.9982257576618166	0.4410139576715335	T	T	T	0.3328504302379175	0.9981072944132798	0.4409251706142104	T	T	T
0.7115432307767464	0.0004563123300919	0.1922061132760360	T	T	T	0.712858028366776	0.1000045306944816	0.1921539207148112	T	T	T
0.7084689684490710	0.9916492834354156	0.4451061382721608	T	T	T	0.7192088862503618	0.9960755461414490	0.447518115808585	T	T	T
0.0146479580739316	0.874942188886140	0.2395118371720554	T	T	T	0.0163775205388994	0.8753239391390827	0.239958222068740	T	T	T
0.0296442072749341	0.8727401497398835	0.4913980059078710	T	T	T	0.0375306142298224	0.8720192702830420	0.4932816370459389	T	T	T
0.0150620940000010	0.8749996420000744	0.0198387880000013	F	F	F						

0.6877534390000000	0.5965461730000000	0.6749412660000000	T	T	T	0.6193337026709809	0.6886492219826300	0.6900613155575478	T	T	T
0.5503764150000000	0.7050836680000000	0.6687692050000000	T	T	T	0.3890283364504809	0.6994460742829618	0.6759353327624542	T	T	T
0.4324982170000000	0.5716514590000000	0.7277621270000000	T	T	T	0.4407231603150280	0.5277260702101941	0.7171898397452174	T	T	T
0.1916782410000000	0.5546268220000000	0.7289178010000000	T	T	T	0.4015142472460337	0.4684784658566283	0.7688269595517250	T	T	T
0.4324982170000000	0.0781454290000000	0.7277621270000000	T	T	T	0.4214230987574568	0.0365221482062015	0.7093178613507942	T	T	T
0.1916782410000000	0.0611208120000000	0.7289178010000000	T	T	T	0.4201874849971520	-0.0212348246799373	0.7625336604398563	T	T	T
0.8322638870000000	0.3136637510000000	0.7348419070000000	T	T	T	0.8307507613094336	0.2856175393928771	0.7102965050551517	T	T	T
0.6864699130000000	0.3199898300000000	0.7833171130000000	T	T	T	0.6197679683895275	0.3423057836195861	0.7217205655701652	T	T	T
0.8322638870000000	0.8071697950000000	0.7348419070000000	T	T	T	0.9449273333194744	0.7964441948777826	0.6949312963284379	T	T	T
0.6864699130000000	0.8134958740000000	0.7833171130000000	T	T	T	0.7455441226171028	0.8523379873701334	0.7155199262032287	T	T	T
0.9879091379952019	0.2364109095260814	0.4616237716359255	T	T	T	0.9805831532036076	0.2304733898912199	0.4709244905429625	T	T	T
0.9884524696667972	0.5099656623420918	0.4621532693309154	T	T	T	0.9893274969664991	0.5065151592090315	0.4563330532924003	T	T	T
0.4378308151531669	0.3772870669994253	0.4453236680509672	T	T	T	0.4322317902133452	0.3756007268285647	0.4447051112455376	T	T	T