

Supporting Information: The Adsorption of Alcohols on Strained Pt₃Ni(111) Substrates: A Density Functional Investigation within the D3 van der Waals Correction

Rafael Costa-Amaral and Juarez L. F. Da Silva*

São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, PO Box 780, 13560 – 970, São Carlos, SP, Brazil

E-mail: juarez_dasilva@iqsc.usp.br

Phone: +55 (16) 3373 6641. Fax: +55 (16) 3373 9952

*To whom correspondence should be addressed

I Extra results for energetic, geometric and electronic properties

First, we provide information about the PAW potentials employed in the present study, which are summarized in Table 1. We also show the atomic structure configurations and their relative energies for the $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ bilayer adsorbed on $\text{Ni}(111)$, $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ and $\text{Pt}(111)$ in Figures 1, 2 and 3, respectively. The complete data for the alcohols high energy isomers and their relative energies on the $\text{Ni}(111)$, $\text{Pt}_{12}\text{Ni}_4/\text{Pt}_{12}\text{Ni}_4/\text{Ni}(111)$, $\text{Pt}_{16}/\text{Pt}_8\text{Ni}_8/\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$, $\text{Pt}_{16}/\text{Pt}_8\text{Ni}_8/\text{Pt}(111)$, and $\text{Pt}(111)$ substrates are displayed in Figures 4 to 8 for methanol, Figures 9 to 13 for ethanol, and Figures 14 to 18 for glycerol, respectively. The PBE lowest energy configurations are summarized in Figure 19. The calculated electron density difference, $\Delta\rho$, both $\Delta\rho(z)$ and 3D isosurfaces plot, for the PBE results are shown in Figure 20. In Tables 2 and 3 we summarize, respectively, the PBE and PBE+D3 results for the average effective charge, Q_{eff} (in e), for the C, O, H, and TM (Ni or Pt) in the adsorbed systems. Tables 4 to 8 contain the complete set of changes in methanol, ethanol and glycerol internal bond lengths upon adsorption on the aforementioned substrates. Finally, we present the POSCAR files of the clean substrates and the adsorbed systems obtained with both PBE and PBE+D3 functional, for all systems in the lowest energy configurations.

Table 1: The strings provided within each PAW projector for C (TITEL = PAW_PBE C_GW 28Sep2005), O (TITEL = PAW_PBE O_GW 28Sep2005), H (TITEL = PAW_PBE H_GW 21Apr2008), Pt (TITEL = PAW_PBE Pt 04Feb2005) and Ni (TITEL = PAW_PBE Ni 02Aug2007) atoms, which contains parameters to identify the potentials.

Parameter	C	O	H	Pt	Ni
configuration	$2s^2 2p^2$	$2s^2 2p^4$	$1s^1$	$5d^9 6s^1$	$3d^9 4s^1$
VRHFIN	s2p2	s2p4	ultrasoft test	s1d9	-
LEXCH	PE	PE	PE	PE	PE
EATOM	147.1560	432.3788	12.4884	729.1176	1077.6739
LULTRA	F	F	F	F	F
IUNSCR	0	0	0	1	1
RPACOR	0.000	0.000	0.000	2.330	2.000
POMASS	12.011	16.000	1.000	195.080	58.690
ZVAL	4.000	6.000	1.000	10.000	10.000
RCORE	1.500	1.520	1.100	2.600	2.300
RWINGS	1.630	1.550	1.100	2.750	2.430
ENMAX	413.992	414.635	300.000	230.283	269.532
ENMIN	310.494	310.976	250.000	172.712	202.149
ICORE/RCLOC	2	2	0.701	3	1.201
LCOR	T	T	T	T	T
LPAW	T	T	T	T	T
EAUG	644.873	605.392	500.000	358.966	544.565
DEXC	0.000	0.000	-	0.000	0.000
RMAX	1.529	1.553	1.123	2.658	2.357
RAUG	1.300	1.300	1.200	1.300	1.300
RDEP	1.501	1.550	1.112	2.761	2.390
RDEPT	1.300	1.329	1.100	2.203	1.838

Pt₃Ni on Ni(111)

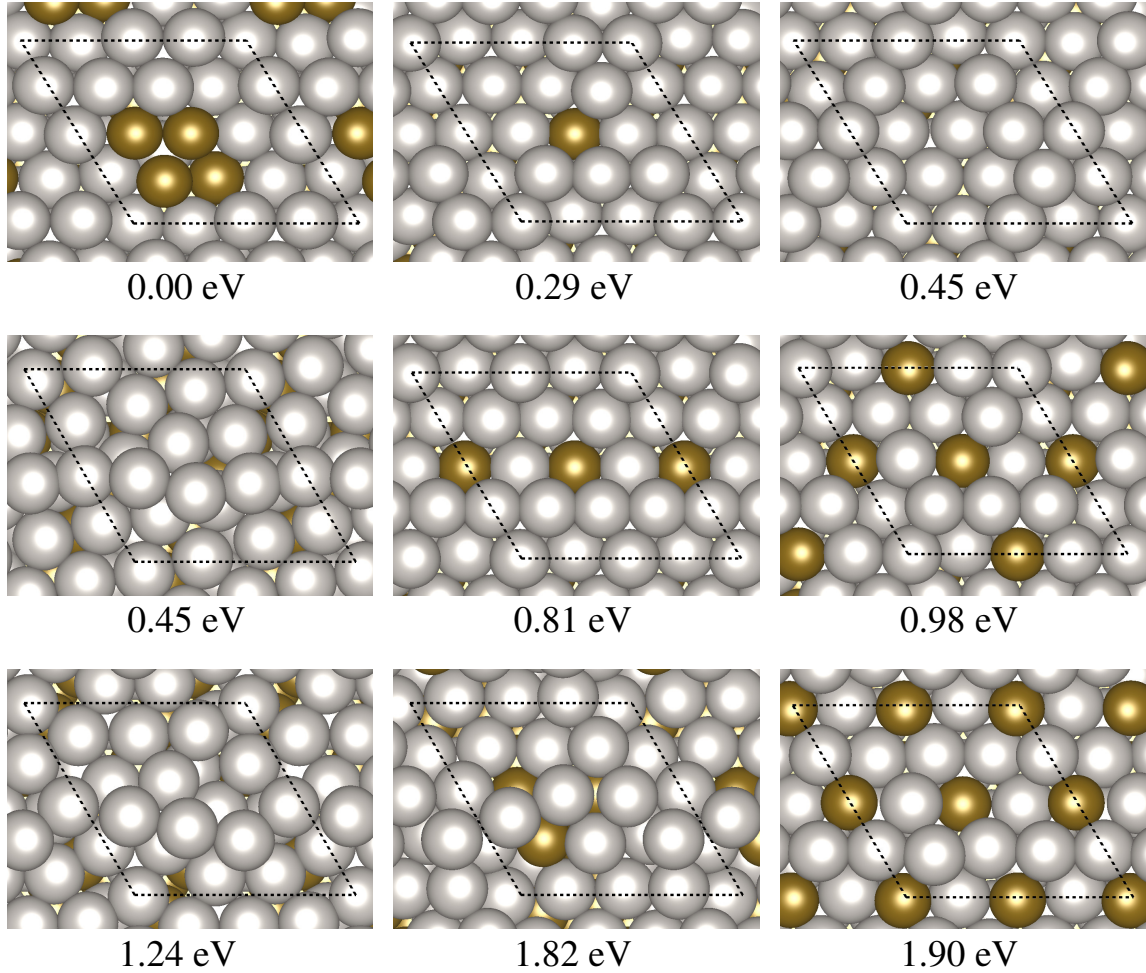


Figure 1: Top view of atomic structure configurations for the Pt₃Ni(111) bilayer adsorbed on Ni(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the Ni and Pt atoms are indicated in yellow and gray, respectively.

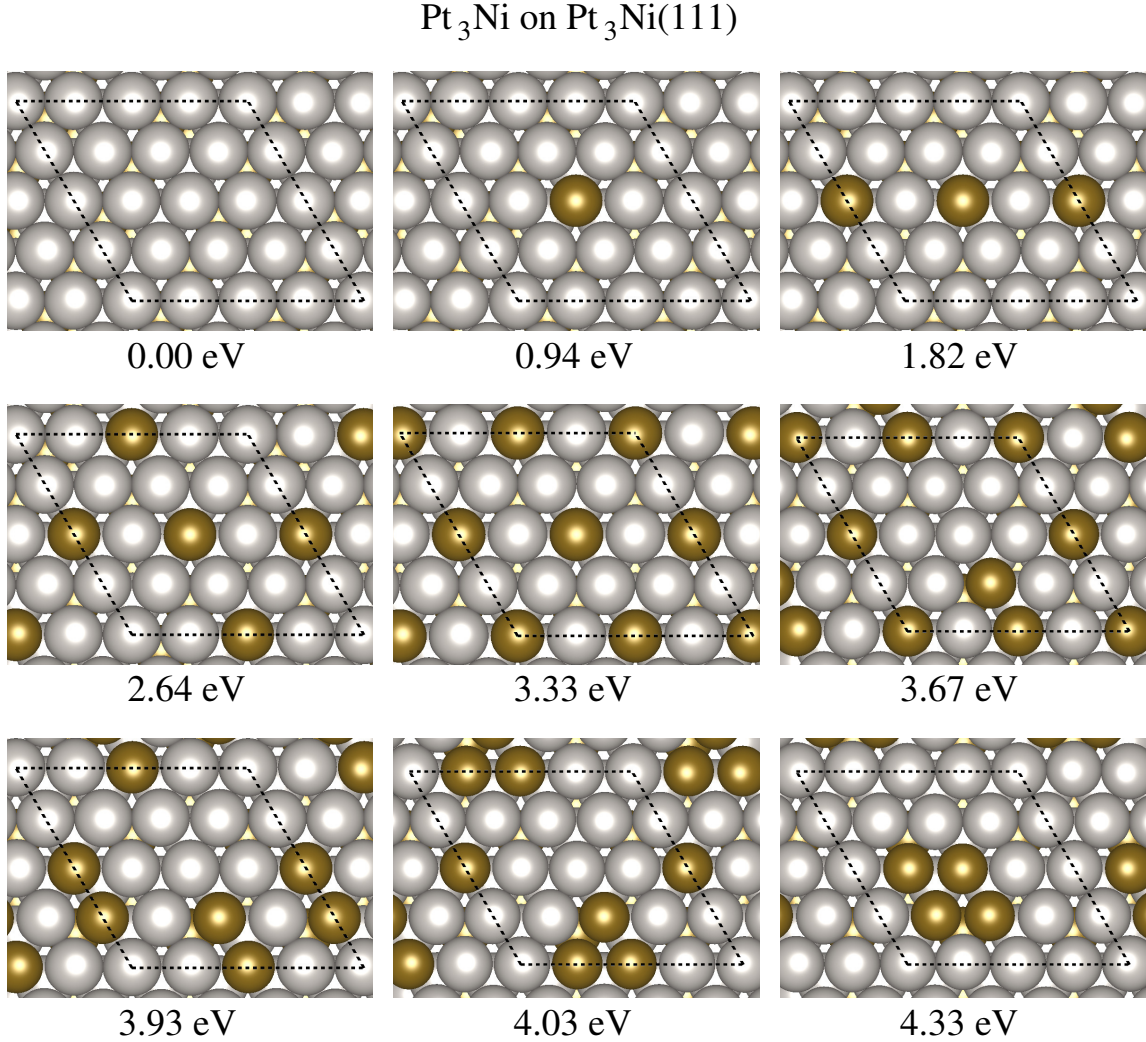


Figure 2: Top view of atomic structure configurations for the $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ bilayer adsorbed on $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the Ni and Pt atoms are indicated in yellow and gray, respectively.

Pt₃Ni on Pt(111)

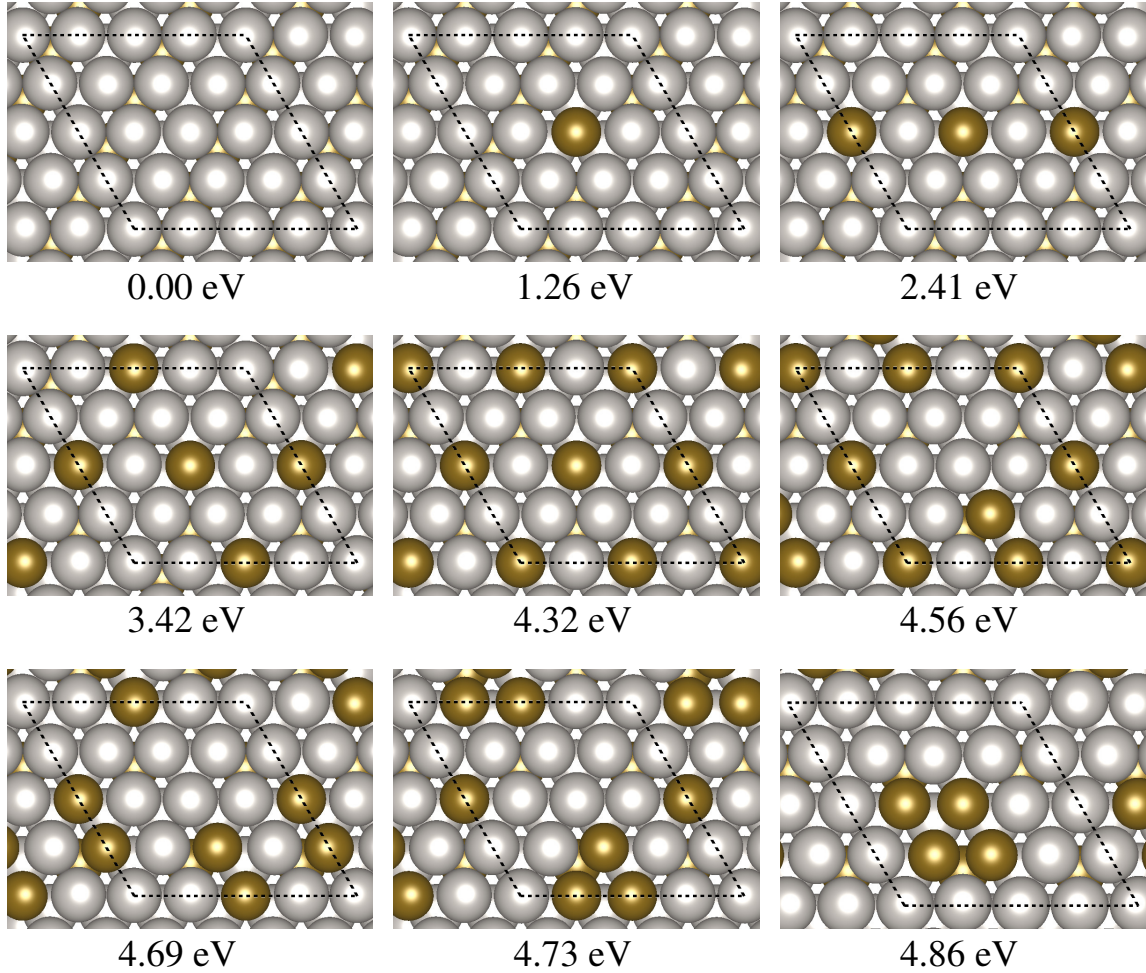


Figure 3: Top view of atomic structure configurations for the Pt₃Ni(111) bilayer adsorbed on Pt(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the Ni and Pt atoms are indicated in yellow and gray, respectively.

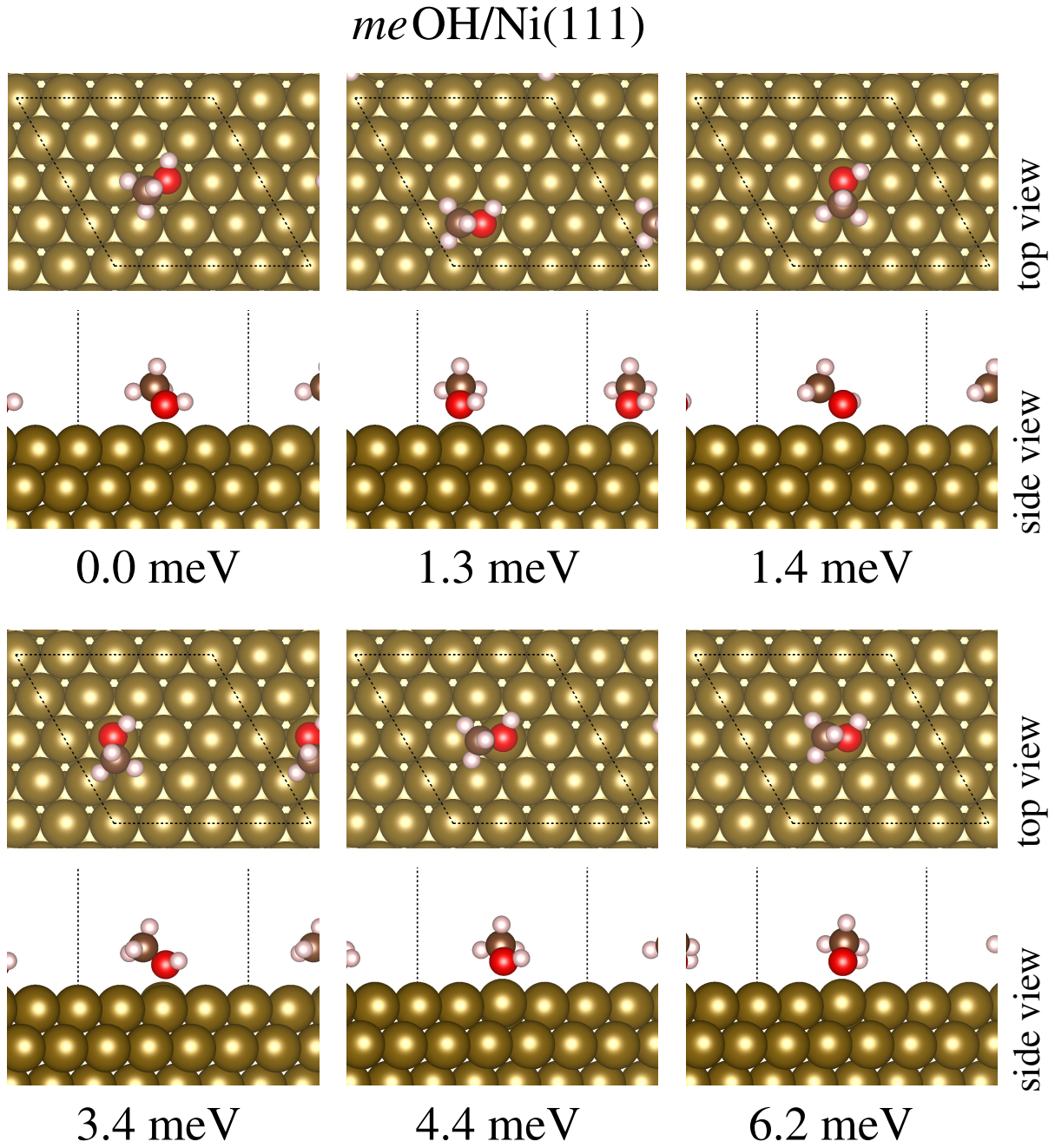


Figure 4: Top and side views of atomic structure configurations for methanol ($meOH$) on Ni(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H and Ni atoms are indicated in brown, red, white and yellow, respectively.

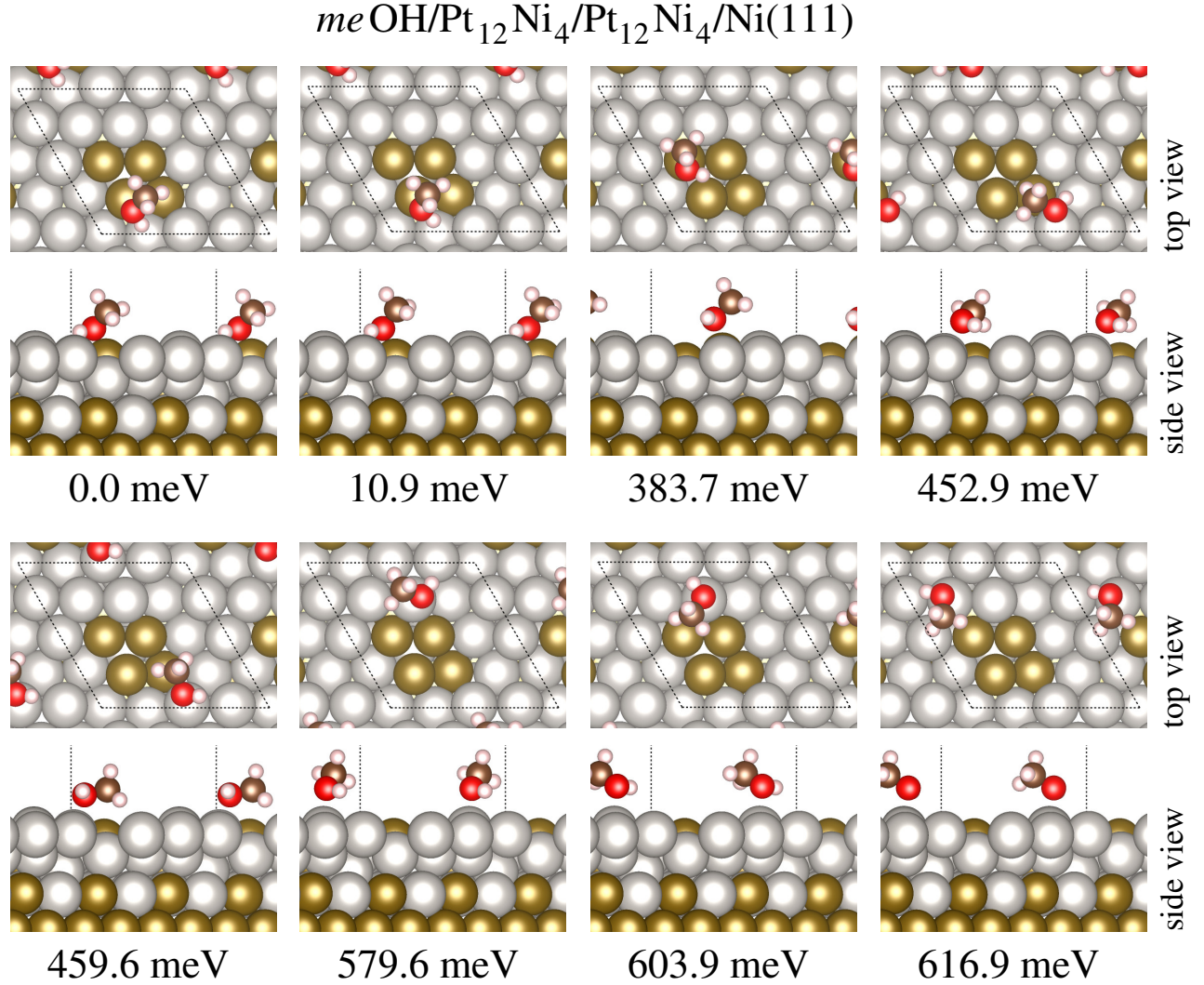


Figure 5: Top and side views of atomic structure configurations for methanol ($meOH$) on $Pt_{12}Ni_4/Pt_{12}Ni_4/Ni(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

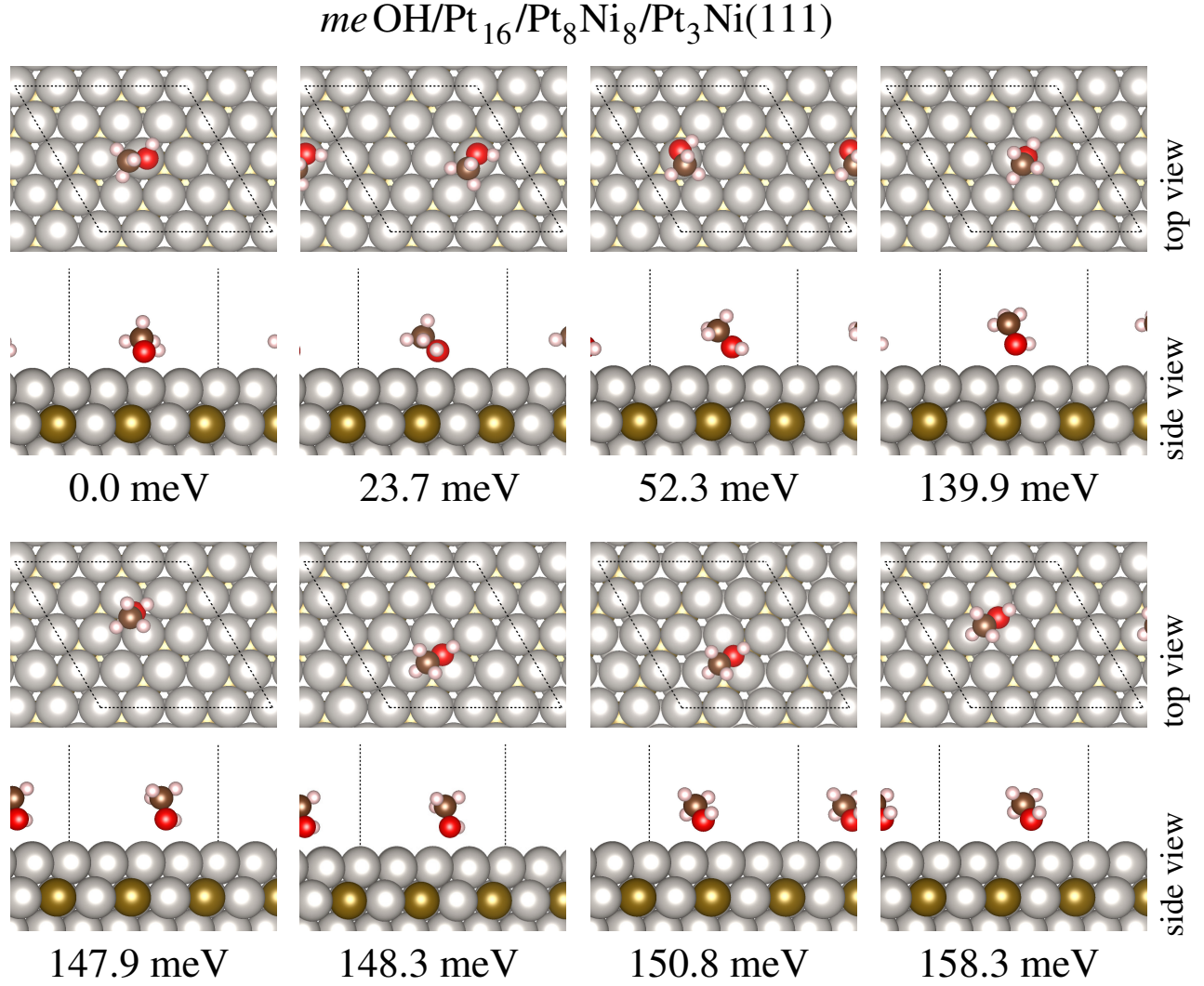


Figure 6: Top and side views of atomic structure configurations for methanol ($meOH$) on $Pt_{16}/Pt_8Ni_8/Pt_3Ni(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

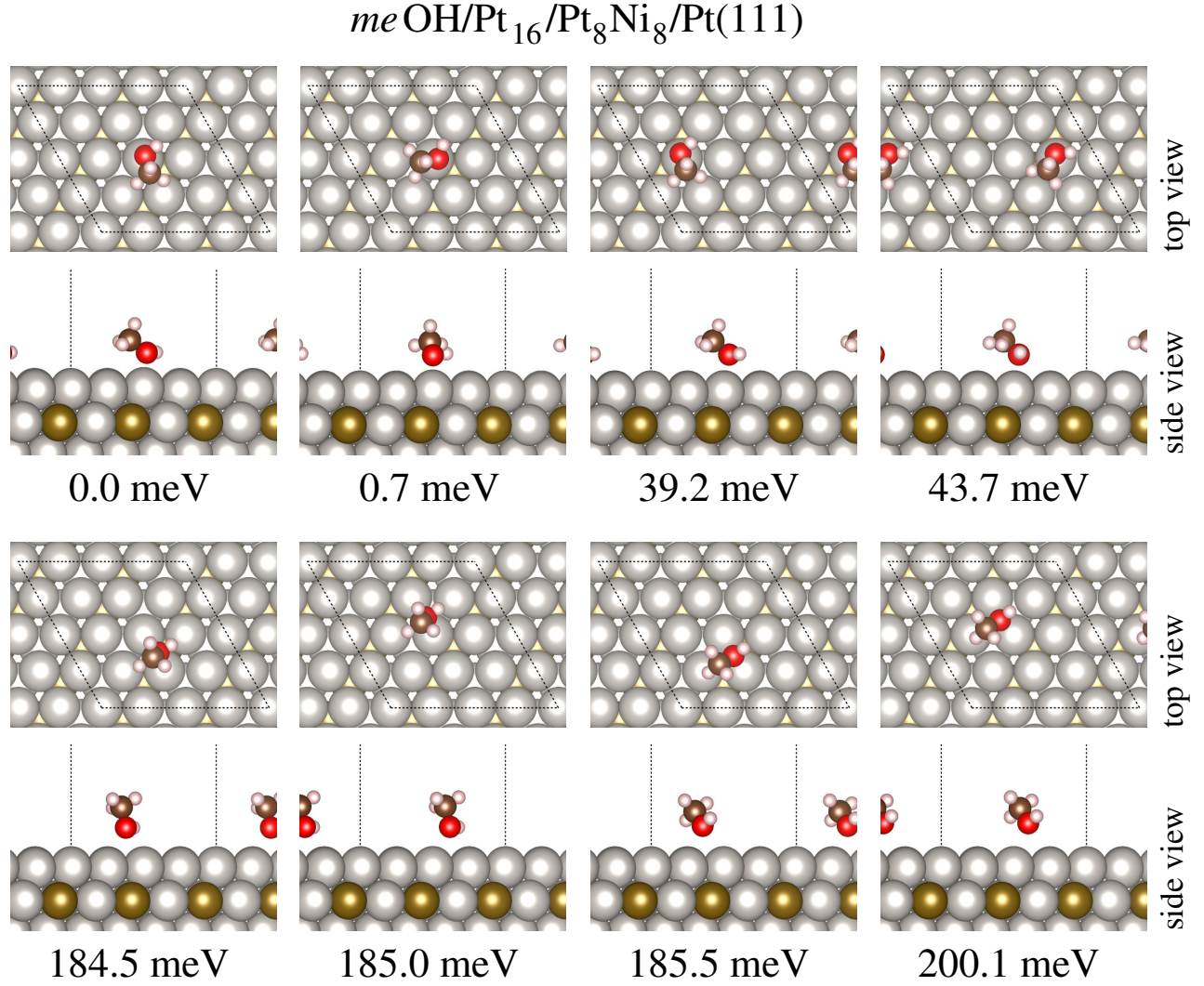


Figure 7: Top and side views of atomic structure configurations for methanol ($meOH$) on $Pt_{16}/Pt_8Ni_8/Pt(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

meOH/Pt(111)

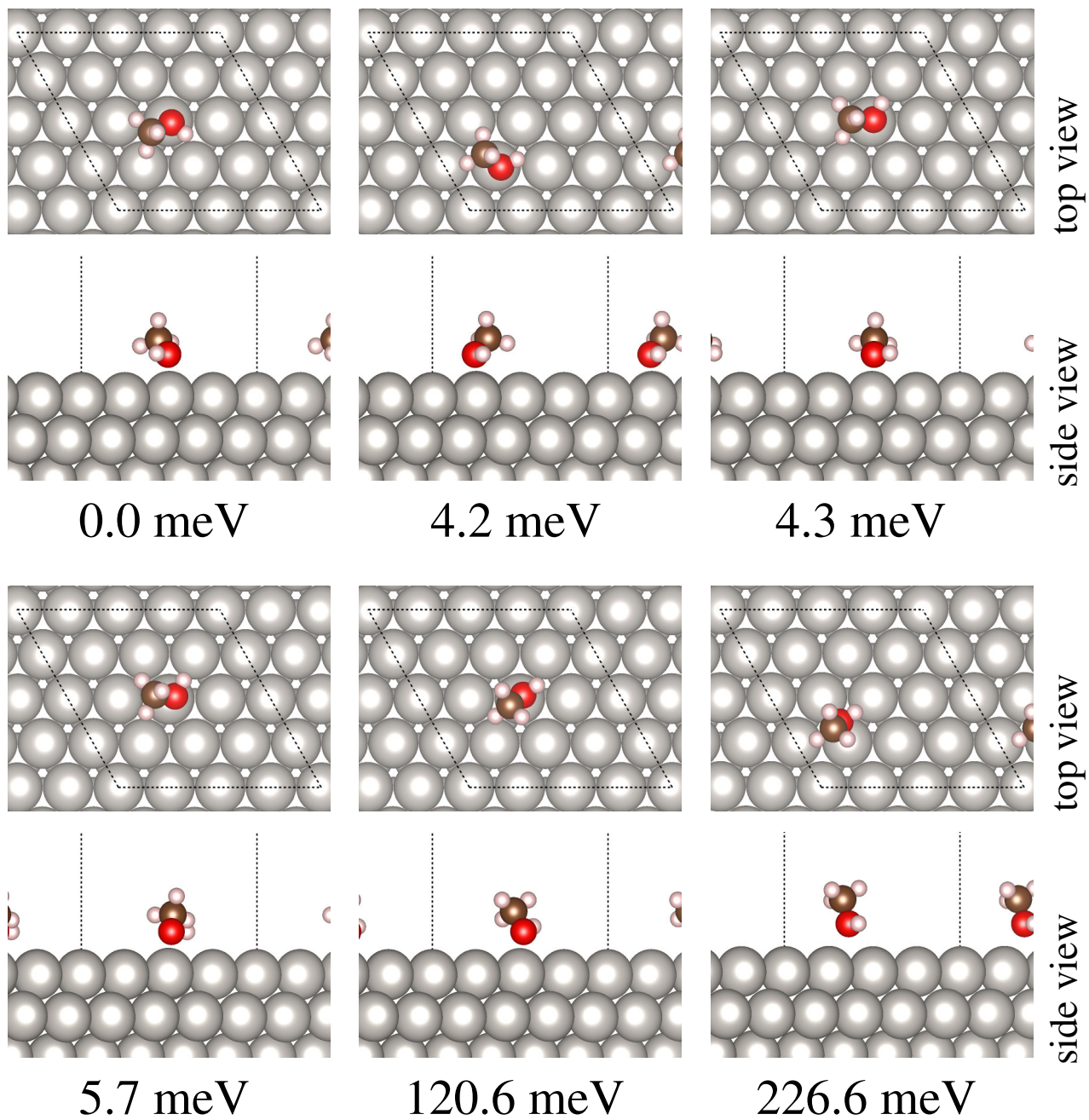


Figure 8: Top and side views of atomic structure configurations for methanol (*meOH*) on Pt(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H and Pt atoms are indicated in brown, red, white and gray, respectively.

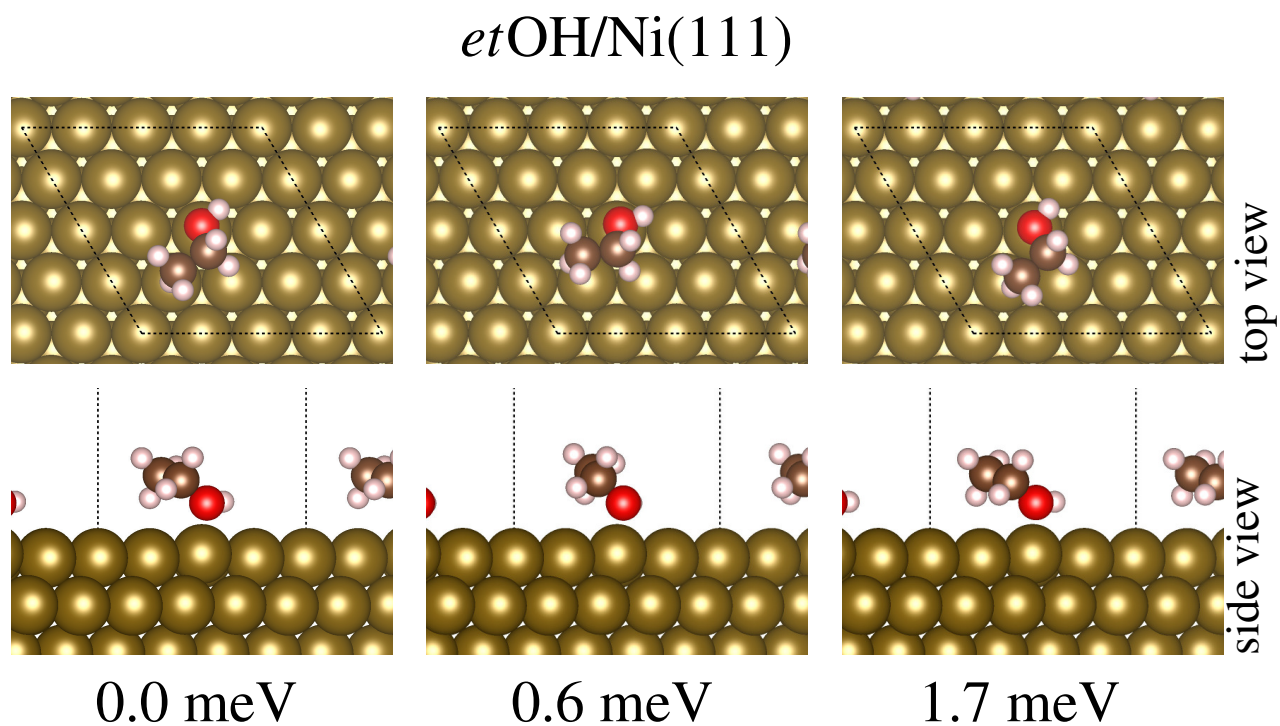


Figure 9: Top and side views of atomic structure configurations for ethanol ($etOH$) on Ni(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given bellow each configuration, where the C, O, H and Ni atoms are indicated in brown, red, white and yellow, respectively.

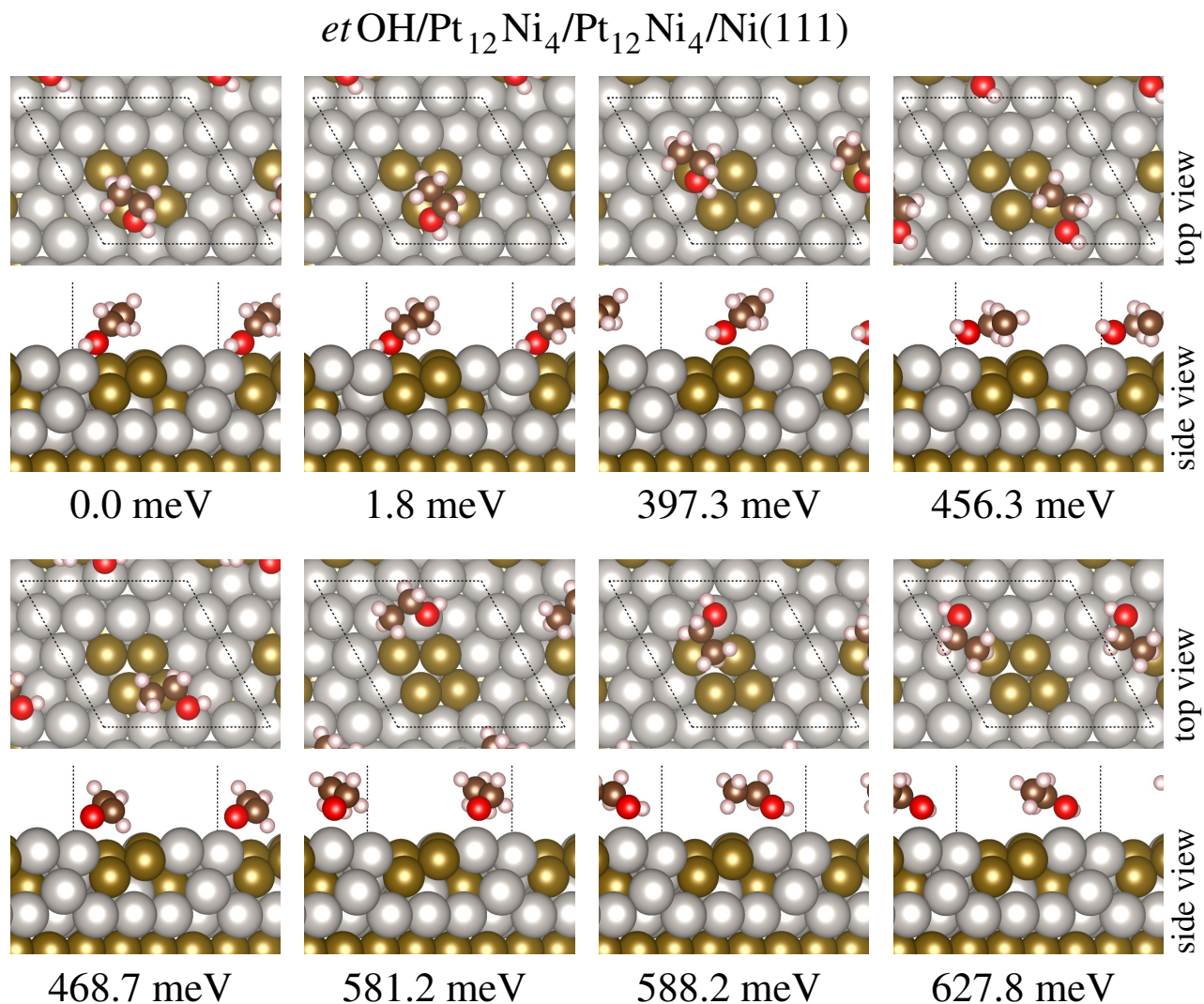


Figure 10: Top and side views of atomic structure configurations for ethanol ($etOH$) on $Pt_{12}Ni_4/Pt_{12}Ni_4/Ni(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

etOH/Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111)

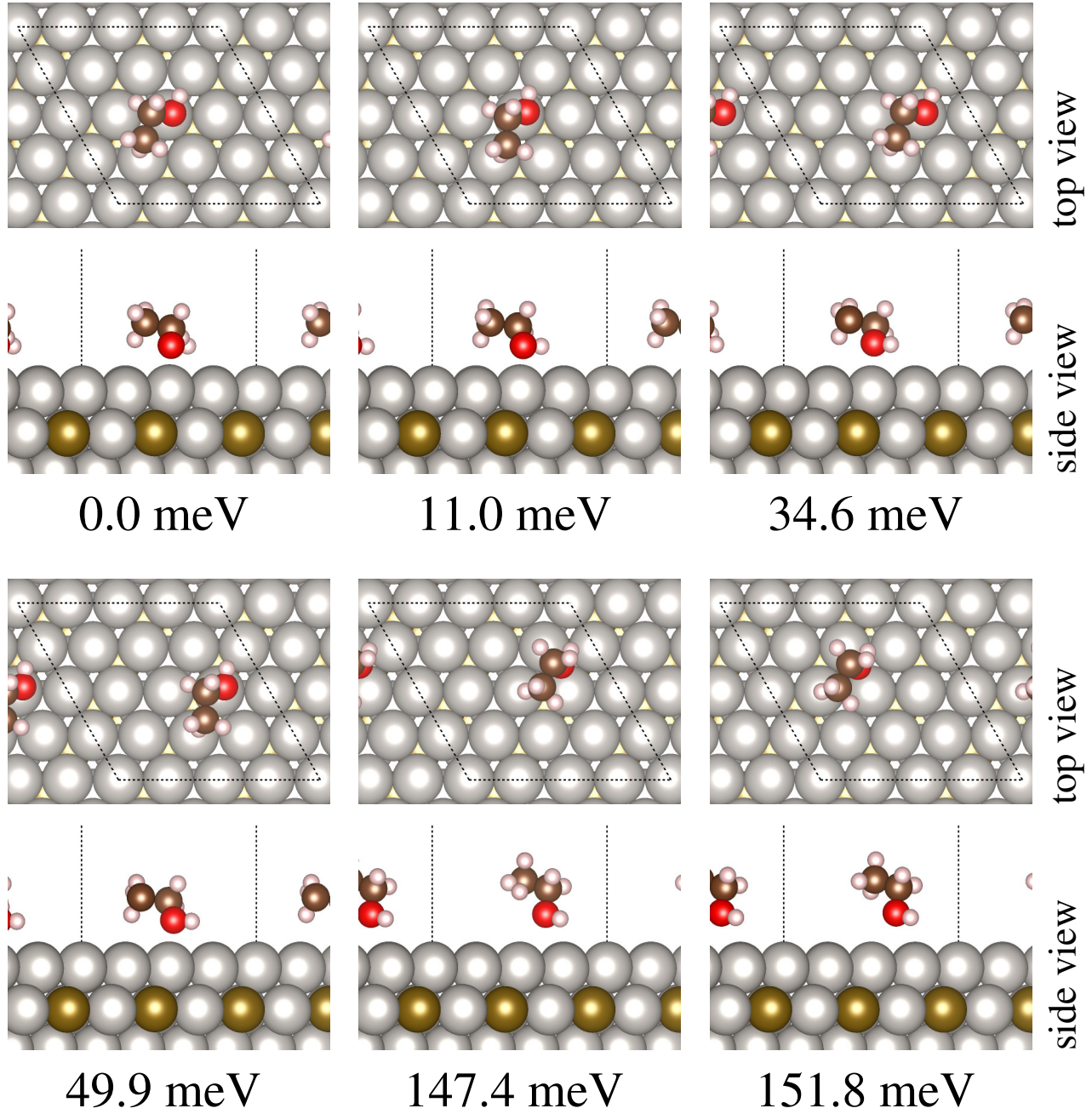


Figure 11: Top and side views of atomic structure configurations for ethanol (*etOH*) on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

*et*OH/Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111)

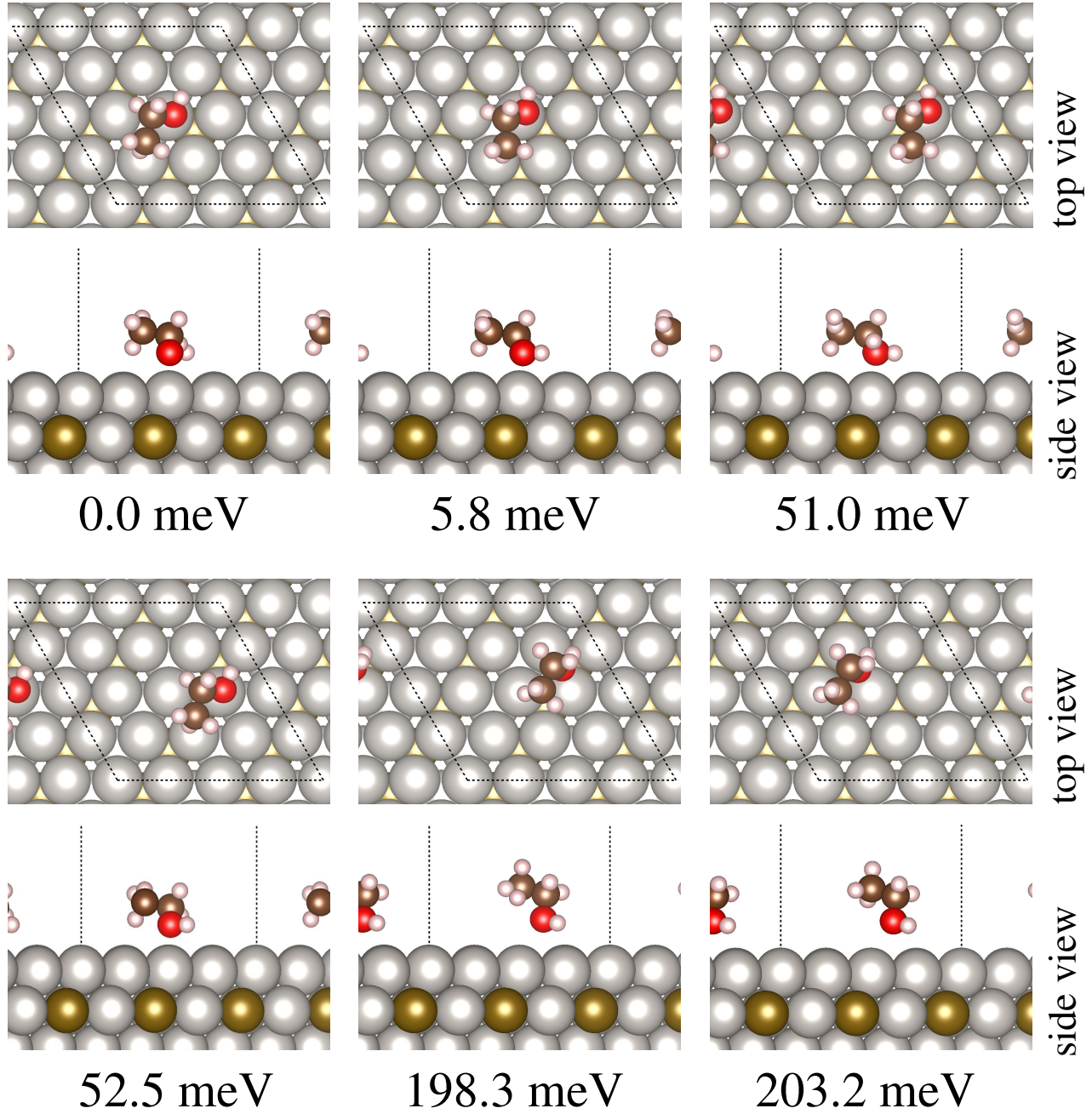


Figure 12: Top and side views of atomic structure configurations for ethanol (*et*OH) on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

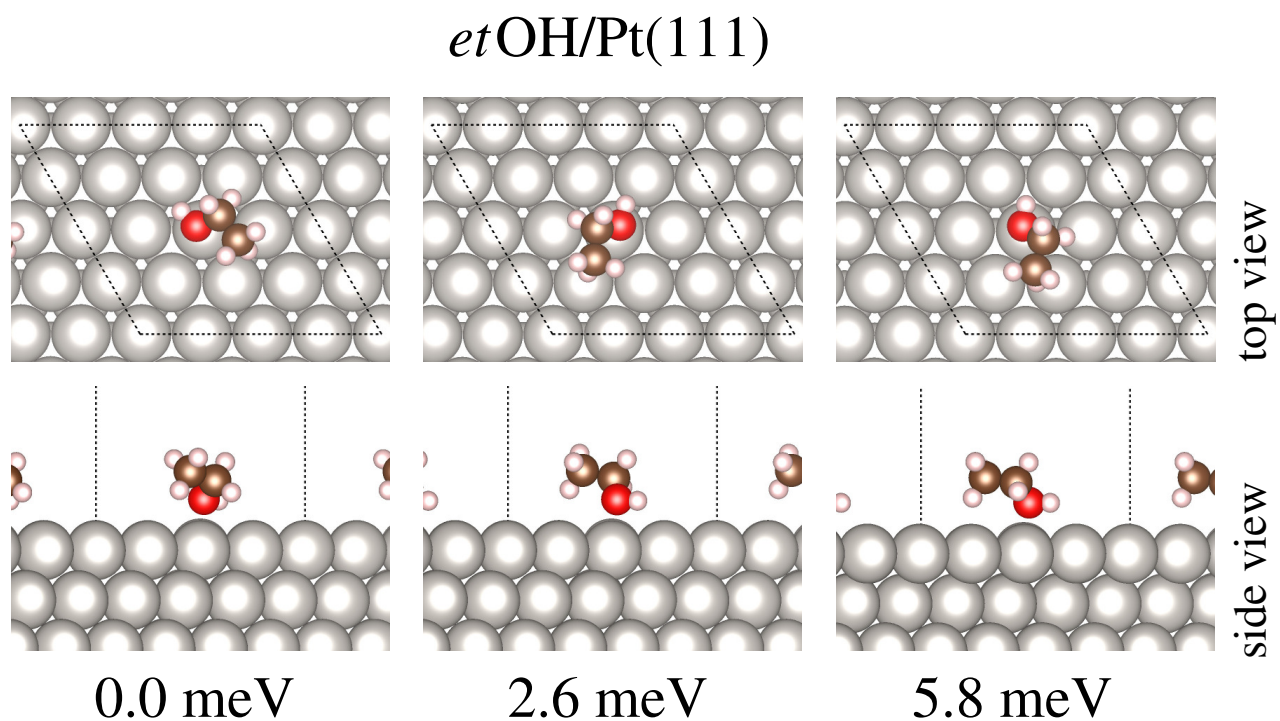


Figure 13: Top and side views of atomic structure configurations for ethanol (*etOH*) on Pt(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H and Pt atoms are indicated in brown, red, white and gray, respectively.

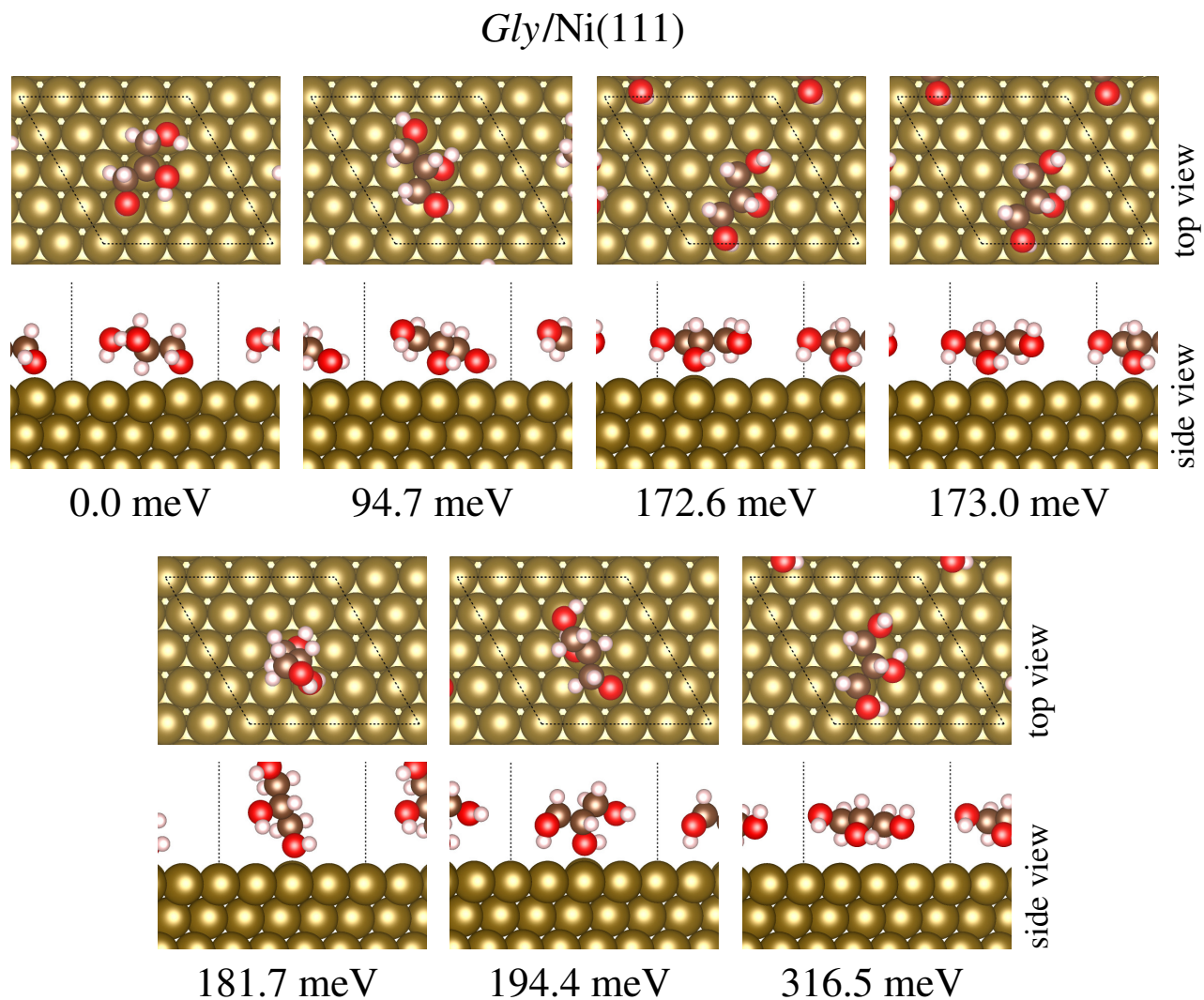


Figure 14: Top and side views of atomic structure configurations for glycerol (*Gly*) on Ni(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H and Ni atoms are indicated in brown, red, white and yellow, respectively.

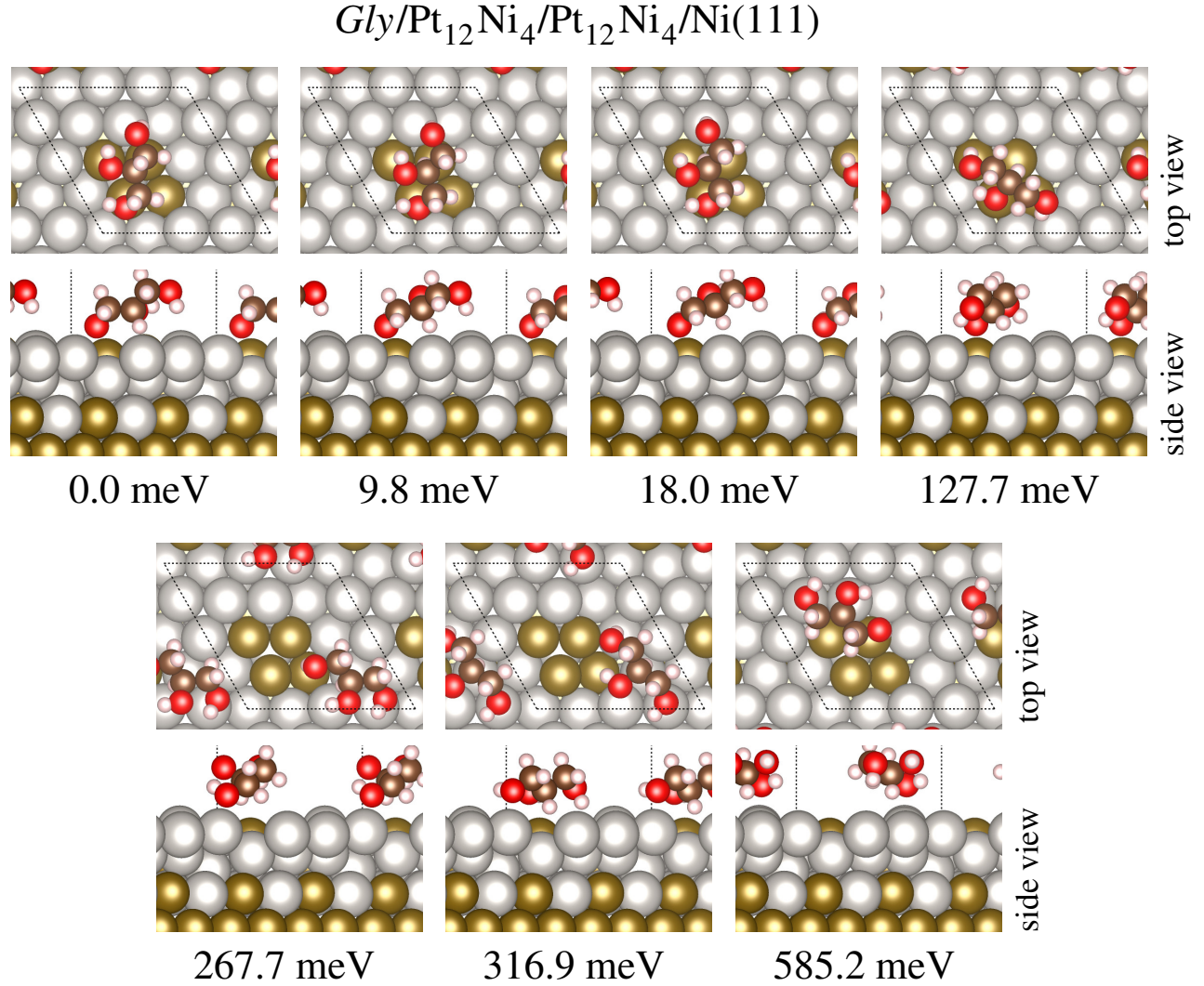


Figure 15: Top and side views of atomic structure configurations for glycerol (*Gly*) on $Pt_{12}Ni_4/Pt_{12}Ni_4/Ni(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

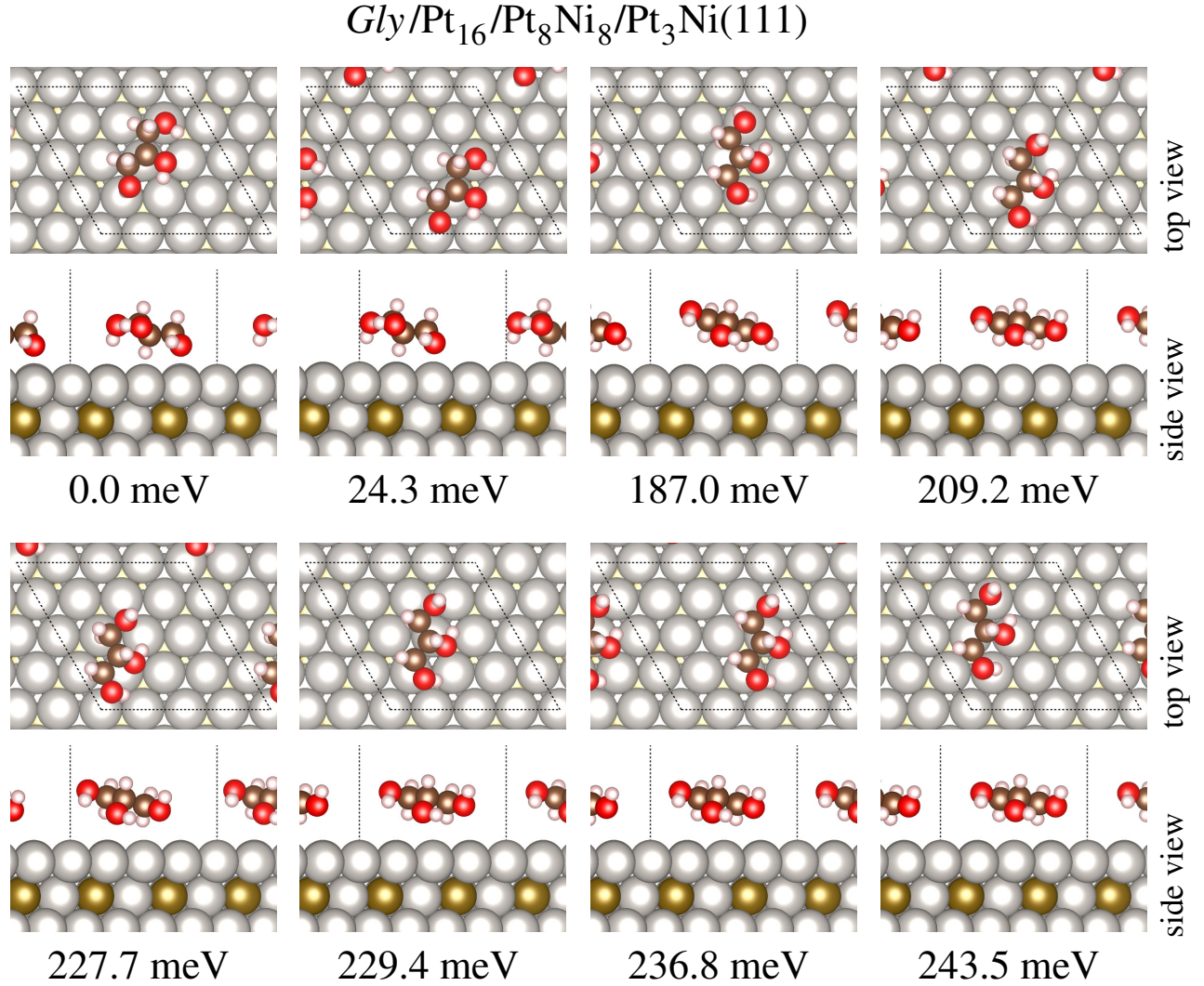


Figure 16: Top and side views of atomic structure configurations for glycerol (*Gly*) on $Pt_{16}/Pt_8Ni_8/Pt_3Ni(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

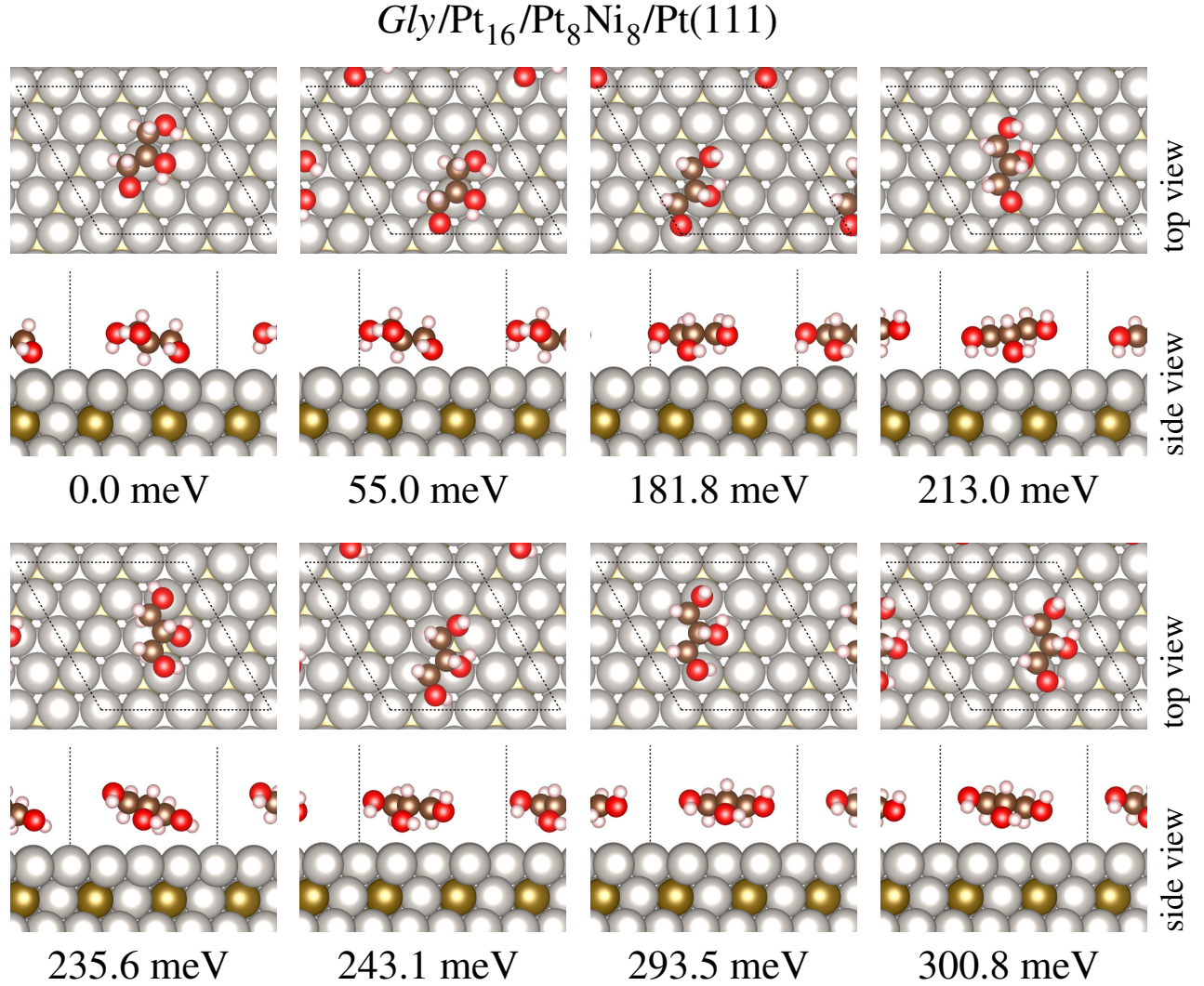


Figure 17: Top and side views of atomic structure configurations for glycerol (*Gly*) on $Pt_{16}/Pt_8Ni_8/Pt(111)$ obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

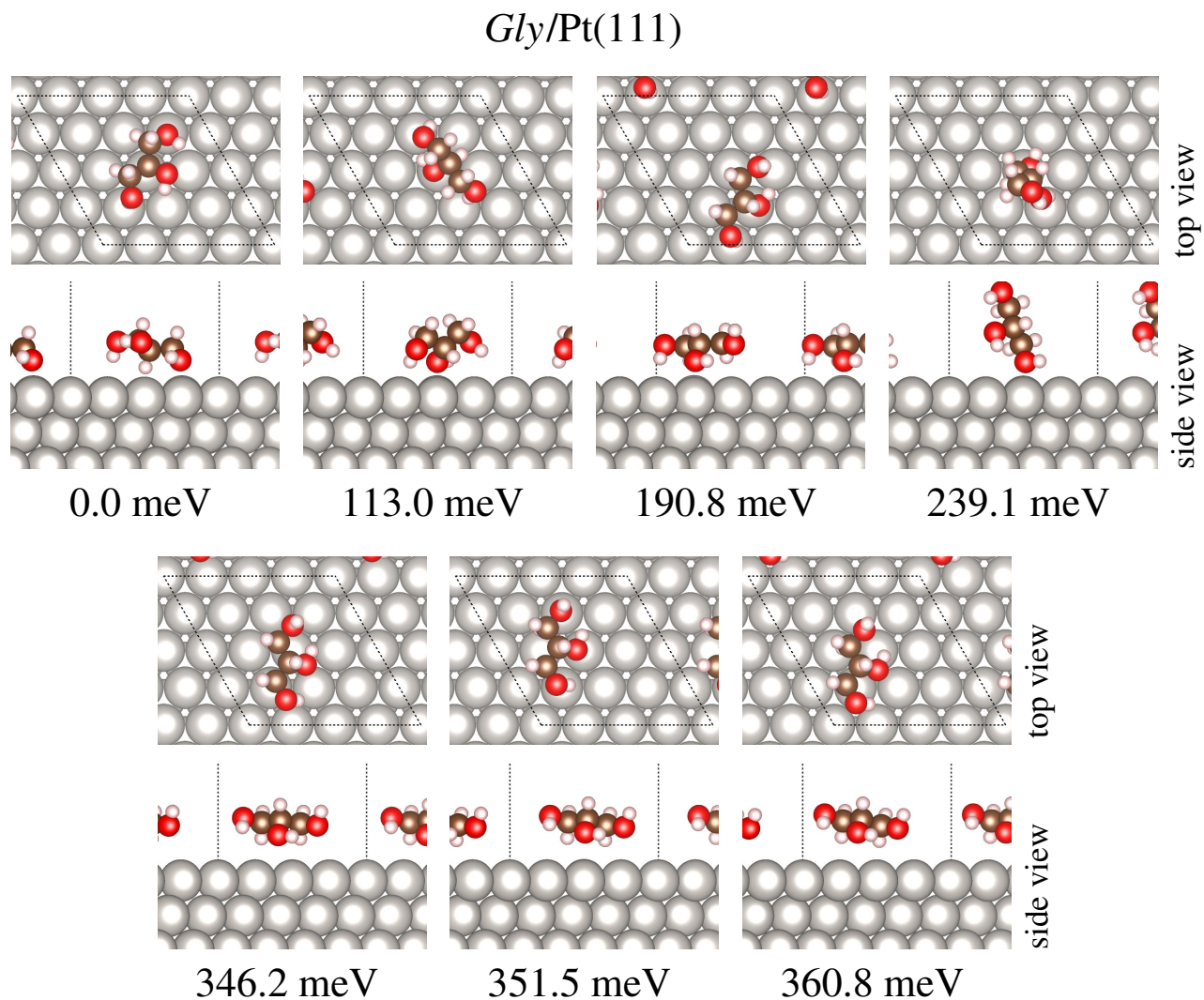


Figure 18: Top and side views of atomic structure configurations for glycerol (*Gly*) on Pt(111) obtained by PBE functional with a (4×4) surface unit cell. The relative total energies with respect to the lowest energy configuration are given below each configuration, where the C, O, H and Pt atoms are indicated in brown, red, white and gray, respectively.

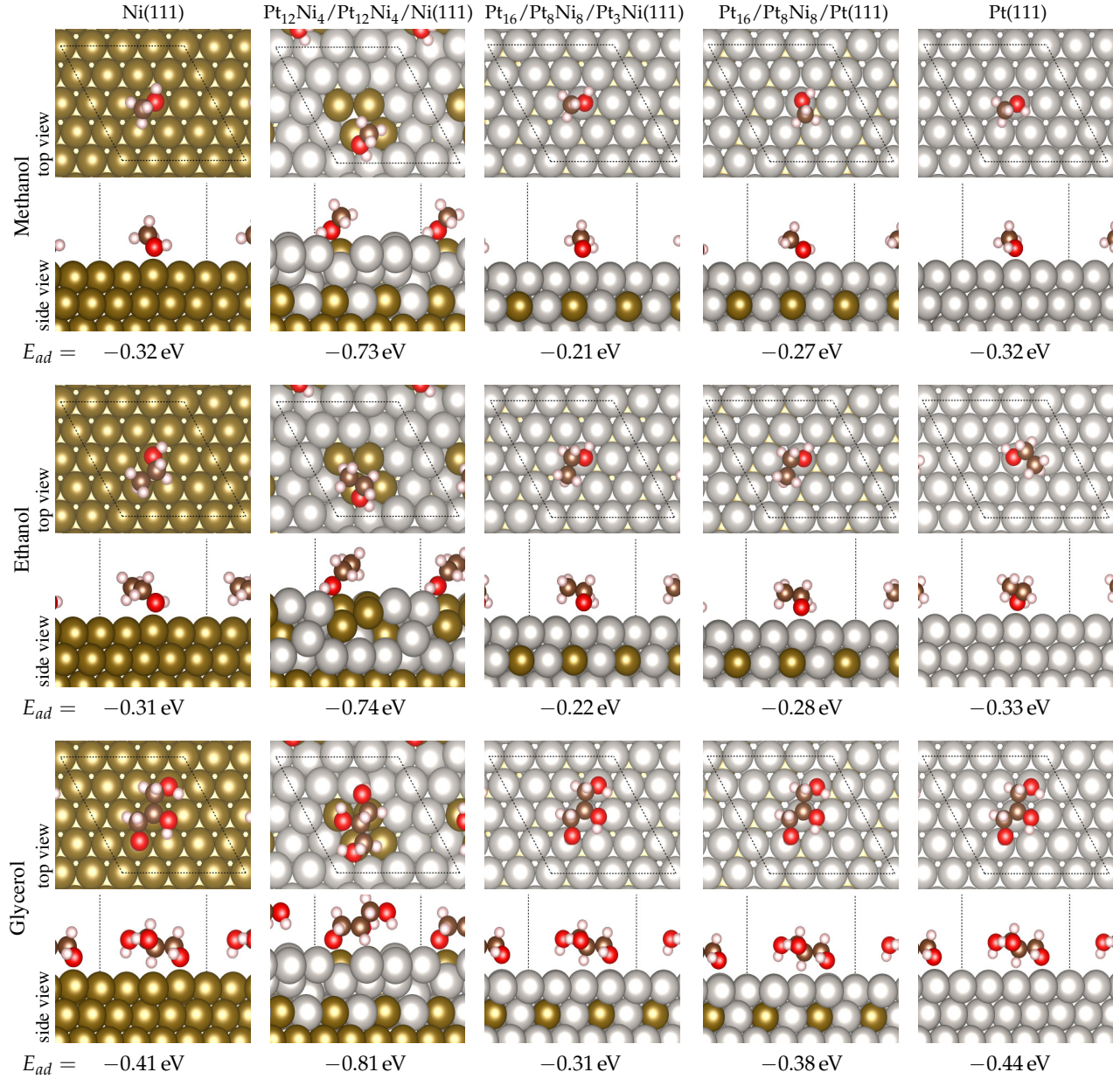


Figure 19: Top and side views of the lowest energy PBE configurations for methanol, ethanol and glycerol adsorption on the Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111), and Pt(111) substrates with a (4×4) surface unit cell. The adsorption energies, E_{ad} , are given below each configuration, where the C, O, H, Ni and Pt atoms are indicated in brown, red, white, yellow and gray, respectively.

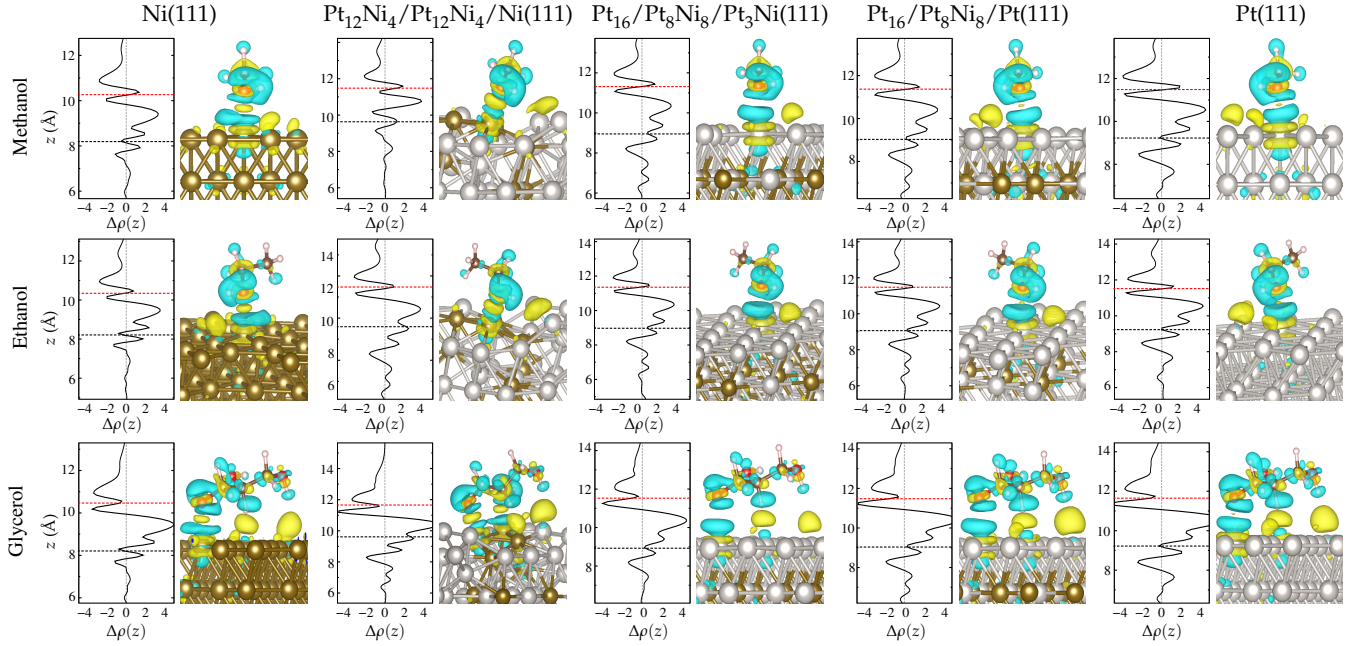


Figure 20: PBE results for electron density difference upon methanol, ethanol and glycerol adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) for the lowest energy configurations. The left panels present the variation of electron density in z axis, $\Delta\rho(z)$, the black and red dotted lines mark the positions of TM (Ni or Pt) and O of the TM–O bond, respectively. The right panels present the isosurfaces ($0.017 e/\text{\AA}^3$) where yellow and blue regions indicate, respectively, accumulation and depletion of electron density.

Table 2: The PBE average effective charge, Q (in e), for the C, O, H, and TM atoms (Ni or Pt) for methanol (*meOH*), ethanol (*etOH*) and glycerol (*Gly*) on adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) substrates. The hydrogens are separated in O-bound, Q^{H^O} , and in C-bound, Q^{H^C} , whereas the TM (Ni or Pt) atoms are separated in adsorption site, Q^{TM^O} , and the first layer remaining atoms, Q^{TM} .

	Q^C	Q^O	Q^{H^C}	Q^{H^O}	Q^{TM}	Q^{TM^O}
<i>meOH</i>	0.49	-1.09	0.01	0.58		
<i>meOH</i> /Ni(111)	0.40	-1.12	0.04	0.61	-0.04	0.15
<i>meOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.41	-1.11	0.04	0.62	-0.06	0.41
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.41	-1.07	0.04	0.62	-0.13	0.04
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.40	-1.06	0.05	0.61	-0.14	0.04
<i>meOH</i> /Pt(111)	0.37	-1.06	0.06	0.62	-0.06	0.10
<i>etOH</i>	0.25	-1.10	0.00	0.59		
<i>etOH</i> /Ni(111)	0.22	-1.11	0.01	0.61	-0.04	0.15
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.22	-1.10	0.02	0.62	-0.06	0.41
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.21	-1.06	0.02	0.61	-0.13	0.04
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.21	-1.06	0.02	0.61	-0.14	0.03
<i>etOH</i> /Pt(111)	0.19	-1.04	0.03	0.61	-0.06	0.10
<i>Gly</i>	0.49	-1.11	0.01	0.60		
<i>Gly</i> /Ni(111)	0.46	-1.11	0.03	0.61	-0.04	0.15
<i>Gly</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.44	-1.10	0.04	0.62	-0.06	0.39
<i>Gly</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.46	-1.10	0.04	0.61	-0.13	0.02
<i>Gly</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.46	-1.09	0.04	0.61	-0.14	0.03
<i>Gly</i> /Pt(111)	0.46	-1.09	0.04	0.61	-0.06	0.09

Table 3: The PBE+D3 average effective charge, Q (in e), for the C, O, H, and TM atoms (Ni or Pt) for methanol (*meOH*), ethanol (*etOH*) and glycerol (*Gly*) on adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) substrates. The hydrogens are separated in O-bound, Q^{H^O} , and in C-bound, Q^{H^C} , whereas the TM (Ni or Pt) atoms are separated in adsorption site, Q^{TM^O} , and the first layer remaining atoms, Q^{TM} .

	Q^C	Q^O	Q^{H^C}	Q^{H^O}	Q^{TM}	Q^{TM^O}
<i>meOH</i>	0.49	-1.09	0.01	0.58		
<i>meOH</i> /Ni(111)	0.39	-1.11	0.04	0.61	-0.04	0.15
<i>meOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.41	-1.11	0.04	0.62	-0.06	0.40
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.40	-1.06	0.05	0.61	-0.13	0.05
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.40	-1.06	0.05	0.61	-0.13	0.05
<i>meOH</i> /Pt(111)	0.37	-1.05	0.06	0.61	-0.06	0.10
<i>etOH</i>	0.25	-1.10	0.00	0.59		
<i>etOH</i> /Ni(111)	0.21	-1.10	0.02	0.60	-0.04	0.15
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.22	-1.10	0.02	0.61	-0.06	0.39
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.22	-1.06	0.02	0.61	-0.13	0.05
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.21	-1.05	0.03	0.61	-0.13	0.04
<i>etOH</i> /Pt(111)	0.20	-1.04	0.03	0.61	-0.06	0.10
<i>Gly</i>	0.49	-1.11	0.01	0.60		
<i>Gly</i> /Ni(111)	0.46	-1.12	0.03	0.61	-0.04	0.16
<i>Gly</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.44	-1.10	0.04	0.62	-0.06	0.39
<i>Gly</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.47	-1.10	0.03	0.61	-0.13	0.02
<i>Gly</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.47	-1.09	0.04	0.61	-0.14	0.04
<i>Gly</i> /Pt(111)	0.46	-1.09	0.05	0.61	-0.07	0.09

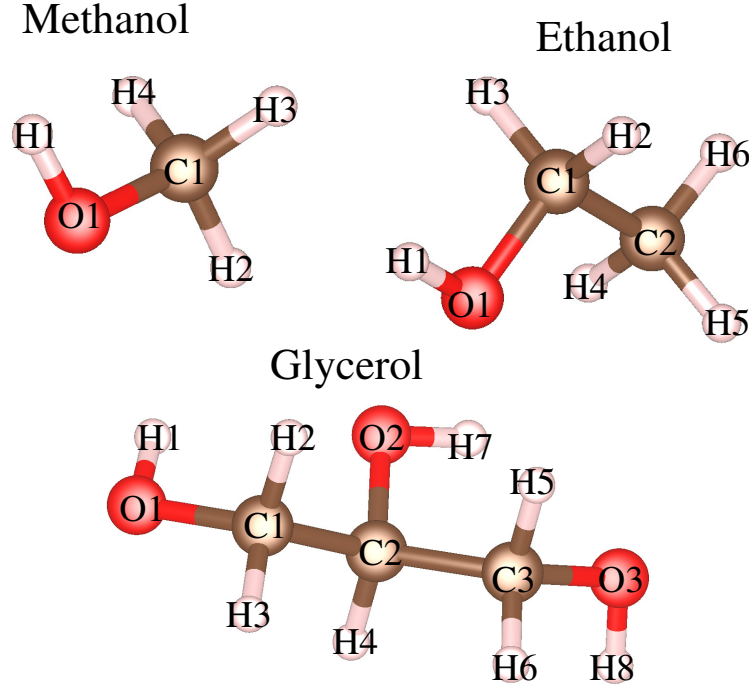


Figure 21: The DFT lowest energy configurations for methanol, ethanol and glycerol in gas phase. The atoms are labeled for the sake of bond identification.

Table 4: PBE and PBE+D3 bond length changes (in %), relative to gas phase, of methanol (*meOH*) upon adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111). In our notation, $\Delta d^{A^n-B^m}$ means the change in the A^n-B^m bond, which is labeled according to the Figure 21.

System	$\Delta d^{O^1-H^1}$	$\Delta d^{C^1-O^1}$	$\Delta d^{C^1-H^2}$	$\Delta d^{C^1-H^3}$	$\Delta d^{C^1-H^4}$
PBE					
<i>meOH</i> /Ni(111)	0.70	1.39	-0.35	-0.39	-0.15
<i>meOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.58	1.58	-0.41	-0.49	-0.19
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.66	1.28	-0.37	-0.40	-0.15
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.76	1.32	-0.82	-0.39	0.25
<i>meOH</i> /Pt(111)	0.90	1.50	-0.79	-0.40	0.26
PBE+D3					
<i>meOH</i> /Ni(111)	0.90	1.36	-0.24	-0.41	-0.02
<i>meOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.62	1.58	-0.28	-0.52	-0.13
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.82	1.22	-0.36	-0.40	-0.20
<i>meOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.91	1.29	-0.85	-0.46	0.24
<i>meOH</i> /Pt(111)	0.89	1.48	-0.83	-0.42	0.28

Table 5: PBE and PBE+D3 bond length changes (in %), relative to gas phase, of ethanol (*etOH*) upon adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) - Part 1. In our notation, $\Delta d^{A^n-B^m}$ means the change in the A^n-B^m bond, which is labeled according to the Figure 21.

System	$\Delta d^{O^1-H^1}$	$\Delta d^{C^1-O^1}$	$\Delta d^{C^1-H^2}$	$\Delta d^{C^1-H^3}$
PBE				
<i>etOH</i> /Ni(111)	0.77	1.78	-0.42	-0.25
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.55	1.84	-0.50	-0.36
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.78	1.57	-0.33	-0.29
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.74	1.77	-0.41	-0.29
<i>etOH</i> /Pt(111)	1.04	2.03	-0.43	-0.15
PBE+D3				
<i>etOH</i> /Ni(111)	0.96	1.64	-0.44	-0.15
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.89	1.72	-0.57	-0.27
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	1.05	1.51	-0.40	-0.22
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	1.07	1.65	-0.42	-0.23
<i>etOH</i> /Pt(111)	1.35	1.91	-0.51	-0.10

Table 6: PBE and PBE+D3 bond length changes (in %), relative to gas phase, of ethanol (*etOH*) upon adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) - Part 2. In our notation, $\Delta d^{A^n-B^m}$ means the change in the A^n-B^m bond, which is labeled according to the Figure 21.

System	$\Delta d^{C^1-C^2}$	$\Delta d^{C^2-H^4}$	$\Delta d^{C^2-H^5}$	$\Delta d^{C^2-H^6}$
PBE				
<i>etOH</i> /Ni(111)	-0.39	0.52	-0.04	0.02
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	-0.39	0.34	0.00	-0.13
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	-0.36	0.25	0.05	-0.11
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	-0.37	0.39	0.06	-0.10
<i>etOH</i> /Pt(111)	-0.44	0.21	-0.05	0.02
PBE+D3				
<i>etOH</i> /Ni(111)	-0.51	0.72	-0.07	-0.04
<i>etOH</i> /Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	-0.40	0.47	-0.02	-0.12
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	-0.47	0.48	-0.05	-0.15
<i>etOH</i> /Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	-0.53	0.63	-0.07	-0.15
<i>etOH</i> /Pt(111)	-0.58	0.35	-0.07	-0.07

Table 7: PBE and PBE+D3 bond length changes (in %), relative to gas phase, of glycerol (*Gly*) upon adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) - Part 1. In our notation, $\Delta d^{A^n-B^m}$ means the change in the A^n-B^m bond, which is labeled according to the Figure 21.

System	$\Delta d^{O^1-H^1}$	$\Delta d^{O^1-C^1}$	$\Delta d^{C^1-H^2}$	$\Delta d^{C^1-H^3}$	$\Delta d^{C^1-C^2}$	$\Delta d^{O^2-H^7}$	$\Delta d^{O^2-C^2}$
PBE							
<i>Gly</i> OH/Ni(111)	0.48	2.15	-0.45	-0.06	-0.76	0.25	-1.05
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.50	2.08	-0.50	-0.25	-0.43	0.55	-0.08
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.39	1.38	-0.27	-0.13	-0.58	0.30	-1.15
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.46	1.81	-0.44	-0.16	-0.67	0.33	-1.40
<i>Gly</i> OH/Pt(111)	0.55	2.04	-0.42	-0.11	-0.73	0.43	-1.72
PBE+D3							
<i>Gly</i> OH/Ni(111)	0.51	2.07	-0.51	-0.02	-0.81	0.23	-1.10
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	0.57	1.89	-0.60	-0.17	-0.59	1.23	0.70
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	0.47	1.37	-0.40	-0.02	-0.78	0.32	-1.71
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	0.55	1.90	-0.51	-0.11	-0.87	0.31	-1.65
<i>Gly</i> OH/Pt(111)	0.70	1.98	-0.51	-0.07	-0.94	0.44	-2.04

Table 8: PBE and PBE+D3 bond length changes (in %), relative to gas phase, of glycerol (*Gly*) upon adsorption on Ni(111), Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111), Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) and Pt(111) - Part 2. In our notation, $\Delta d^{A^n-B^m}$ means the change in the A^n-B^m bond, which is labeled according to the Figure 21.

System	$\Delta d^{C^2-H^4}$	$\Delta d^{C^2-C^3}$	$\Delta d^{O^3-H^8}$	$\Delta d^{O^3-C^3}$	$\Delta d^{C^3-H^5}$	$\Delta d^{C^3-H^6}$
PBE						
<i>Gly</i> OH/Ni(111)	2.25	0.17	0.89	-0.58	0.08	0.07
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.04	0.05	0.75	-0.44	0.05	0.05
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	2.88	0.13	0.66	-0.50	0.12	-0.05
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	3.42	0.20	0.83	-0.60	0.08	-0.05
<i>Gly</i> OH/Pt(111)	4.05	0.28	1.01	-0.72	0.14	0.05
PBE+D3						
<i>Gly</i> OH/Ni(111)	2.40	0.10	0.98	-0.58	0.12	0.13
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₂ Ni ₄ /Pt ₁₂ Ni ₄ /Ni(111)	1.12	0.03	1.70	-0.64	0.12	0.01
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt ₃ Ni(111)	3.82	0.03	1.40	-0.83	0.12	0.08
<i>Gly</i> OH/Pt ₁₆ /Pt ₈ Ni ₈ /Pt(111)	3.83	0.02	1.46	-0.85	0.10	0.07
<i>Gly</i> OH/Pt(111)	4.54	0.12	1.61	-0.97	0.14	0.05

A POSCAR files for the lowest energy configurations

SYSTEM: PBE clean Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

Ni

80

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.2500000000000000 0.0000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.7500000000000000 0.0000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.0000000000000000 0.7500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.2859418500774140 T T T

0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.2150527285572252 T T T

0.1666666666666643 0.0833333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.4166666666666643 0.0833333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.6666666666666643 0.0833333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.9166666666666643 0.0833333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.1666666666666643 0.3333333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.4166666666666643 0.3333333333333357 0.1429408354144641 T T T

0.6666666666666643 0.3333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.9166666666666643 0.3333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.1666666666666643 0.5833333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.4166666666666643 0.5833333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.6666666666666643 0.5833333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.9166666666666643 0.5833333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.1666666666666643 0.8333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.4166666666666643 0.8333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.1429408354144641 T T T
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.2500000000000000 0.0000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.7500000000000000 0.0000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.0000000000000000 0.7500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.0709335755540650 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 clean Ni(111) surface

1.0000000000000000
 9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

Ni

31

0.6666666666666643 0.8333333333333357 0.1430204205305532 T T T
 0.9166666666666643 0.8333333333333357 0.1430204205305532 T T T
 -0.0000000000000000 -0.0000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.2500000000000000 -0.0000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.5000000000000000 -0.0000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.7500000000000000 -0.0000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.0000000000000000 0.7500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.0714757267621017 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE clean Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1885857567195970

Ni Pt

56 24

Selective dynamics

Direct

0.2541094773828345 0.2301321961588327 0.3349657998952583 T T T

0.4905280245206586 0.2501289558381939 0.2997209165199397 T T T

0.2538575473851268 0.4937212215597742 0.3473426491420818 T T T

0.5021799384063029 0.4932541219692121 0.3361897029275572 T T T

0.3312556585055955 0.1548165186924761 0.2224536196613643 T T T

0.8417707636383820 0.1762707788586100 0.2181483847085869 T T T
 0.3354199761513081 0.6649190633652619 0.2772312694010267 T T T
 0.8206385963879523 0.6659683142781273 0.2202943714216557 T T T
 0.1675790781482153 0.0825307872842667 0.1426933842497960 T T T
 0.4150281641516830 0.0792957024908715 0.1437975052701747 T T T
 0.6689640683411023 0.0827826216831145 0.1427115113939899 T T T
 0.9161230636951894 0.0850978531619236 0.1422179794008257 T T T
 0.1683147487200297 0.3374933352187839 0.1417362020406390 T T T
 0.4117049367560423 0.3294412818065061 0.1436901087804173 T T T
 0.6657589717030516 0.3335362928818122 0.1429262012952407 T T T
 0.9203150360741016 0.3376040995898220 0.1433404689131474 T T T
 0.1685336744463447 0.5886083134248852 0.1411620864693845 T T T
 0.4106015713244355 0.5800292308264454 0.1414081805446188 T T T
 0.6618841006233951 0.5830160289046270 0.1439501170051414 T T T
 0.9169856641462644 0.5873099132747219 0.1429862598698829 T T T
 0.1683191714225628 0.8308274654896073 0.1417756127502814 T T T
 0.4192708525235878 0.8311749763329687 0.1413762180276802 T T T
 0.6615588000145634 0.8309873131633992 0.1416307279369853 T T T
 0.9139164367230840 0.8307330671204654 0.1425800138598011 T T T
 -0.0000899567433314 -0.0001976018384543 0.0708916830345982 T T T
 0.2509031941993131 0.0004861873796231 0.0710110463166928 T T T
 0.5010465616170470 0.0004491957214740 0.0710264116277596 T T T
 0.7499898727189571 -0.0003354705748584 0.0709401276081160 T T T
 -0.0006097966387541 0.2506214974552066 0.0709647723012692 T T T
 0.2494288220281532 0.2496003504453123 0.0711375972408436 T T T
 0.4994426898439870 0.2491905185840211 0.0715228845201375 T T T
 0.7503726932922106 0.2507042442800690 0.0712125131650407 T T T
 -0.0004925130438222 0.5010797626328352 0.0709032049511820 T T T
 0.2489951798268732 0.5001240782600628 0.0700768189160979 T T T
 0.4988825528570827 0.4983686164792173 0.0712369180325476 T T T
 0.7492098190527885 0.5002578468240464 0.0714297665618620 T T T
 0.0003277061714708 0.7506211998923439 0.0710486399174292 T T T
 0.2511430867139989 0.7509449974269508 0.0700890009099810 T T T
 0.4995134913059489 0.7486300194265076 0.0702311242233284 T T T
 0.7491664836965370 0.7486030390902138 0.0709598493459418 T T T
 0.0835708562815327 0.1666242925833714 0.0000000000000000 F F F
 0.3336375852795683 0.1665500797327724 0.0000000000000000 F F F
 0.5835327871543967 0.1664554250592332 0.0000000000000000 F F F
 0.8338013115584246 0.1666311309591038 0.0000000000000000 F F F
 0.0834067779205512 0.4160256900755002 0.0000000000000000 F F F
 0.3337565353707177 0.4170112727628137 0.0000000000000000 F F F
 0.5836212373192993 0.4168155715684279 0.0000000000000000 F F F
 0.8339394357829804 0.4166927225627362 0.0000000000000000 F F F
 0.0839592999062901 0.6666354662803116 0.0000000000000000 F F F
 0.3337693740579724 0.6665552625943505 0.0000000000000000 F F F
 0.5844380529420263 0.6670603001449962 0.0000000000000000 F F F
 0.8339840331996911 0.6668678420659901 0.0000000000000000 F F F
 0.0838877527442605 0.9167623233765667 0.0000000000000000 F F F
 0.3334376811574415 0.9169604416730905 0.0000000000000000 F F F

0.5835022132149064 0.9164092612566890 0.0000000000000000 F F F
 0.8338732008987932 0.9166047909920181 0.0000000000000000 F F F
 0.2557592253210337 0.9868448835159038 0.3050714378161467 T T T
 0.7781542578112592 0.0180552510979173 0.3444655693756675 T T T
 0.0332268809284471 0.2745595971074482 0.3051592799291161 T T T
 0.7504816930460707 0.2395677097707959 0.3014065869622638 T T T
 0.0042177231300098 0.0019812746758597 0.3004533960272054 T T T
 0.5045632701497944 0.0164349242146591 0.3441918110820723 T T T
 0.9849866846696471 0.4847413386581267 0.3433220433512872 T T T
 0.7453443963301326 0.5007877979119250 0.3039158215105600 T T T
 0.9803119463282025 0.7553920755045581 0.3431336143438242 T T T
 0.2436579039167976 0.7472456682869084 0.3531776376693840 T T T
 0.5034224191149475 0.7459523208069588 0.3535612644753811 T T T
 0.7260838436292951 0.7494114291529032 0.3041819011397053 T T T
 0.0946170376518281 0.1799290980456113 0.2174229868455136 T T T
 0.5805471068486979 0.1526439635727501 0.2186140560747830 T T T
 0.1299819386550395 0.4642759819972594 0.2193967138980231 T T T
 0.3314157042914576 0.4035119071331485 0.2661848942432066 T T T
 0.5682486262708917 0.4160628213299513 0.2197798327047572 T T T
 0.8465122403539878 0.4297432888971483 0.2186430181671906 T T T
 0.0709963683031513 0.6651588607575980 0.2665125411769472 T T T
 0.5374371728623939 0.6663184520961409 0.2195753643392195 T T T
 0.0835056885368277 0.9013516412109529 0.2178709745262420 T T T
 0.3333569448449383 0.8698784913152183 0.2198094350060739 T T T
 0.5950765938933412 0.9296912258675588 0.2665070327089180 T T T
 0.8177420110127739 0.9157907226941071 0.2174093225644981 T T T

SYSTEM: PBE+D3 clean Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface
 1.0000000000000000
 9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

Ni Pt

56 24

Selective dynamics

Direct

0.2541790280584446 0.2283653480029355 0.3333455898660409 T T T
 0.4901793616951008 0.2491836916573595 0.2973590552922901 T T T
 0.2534225312318953 0.4931237258350637 0.3459947642375710 T T T
 0.5024444042947490 0.4918529948144168 0.3348384159700964 T T T
 0.3320474040315459 0.1552109494739001 0.2205200842551580 T T T
 0.8421375604819648 0.1758102353234448 0.2170331815467736 T T T
 0.3353750158197930 0.6655986109425535 0.2767333053532171 T T T
 0.8222547141692135 0.6664732888177707 0.2191717939843193 T T T
 0.1681870385525121 0.0823410243435442 0.1422903873273453 T T T
 0.4146002252033633 0.0792332911584707 0.1430130247540367 T T T
 0.6691759347385526 0.0821646531779581 0.1423362839162901 T T T
 0.9165715997940859 0.0857625191587282 0.1419139163287031 T T T
 0.1696952470833379 0.3386637722206688 0.1413481636395409 T T T

0.4114343571167732 0.3296080339737034 0.1433776755336644 T T T
 0.6660971877638959 0.3336585677671818 0.1418027338016845 T T T
 0.9204909371339905 0.3370769426265862 0.1428477767681811 T T T
 0.1688868370175324 0.5891893925337753 0.1407808032828662 T T T
 0.4103182877468927 0.5799151078384980 0.1409926508357787 T T T
 0.6627609856193469 0.5837553526335796 0.1434092487908348 T T T
 0.9176450674565169 0.5879007806779143 0.1428526704364419 T T T
 0.1682228665080106 0.8298231925753429 0.1413436965542161 T T T
 0.4195429080105434 0.8308805601709900 0.1409211914365990 T T T
 0.6608157069769829 0.8312902951992635 0.1412610003233190 T T T
 0.9133197040040015 0.8304180458239402 0.1422820930056736 T T T
 -0.0003111997643232 -0.0002455873001167 0.0714284106135381 T T T
 0.2503524654073557 0.0001106077433086 0.0711776113798894 T T T
 0.5010552132484527 0.0006054530793283 0.0713197416859830 T T T
 0.7501733714913896 -0.0002644293844763 0.0712541271028868 T T T
 -0.0005516779759189 0.2505909051552536 0.0712272143754753 T T T
 0.2491408411841824 0.2493905079538811 0.0714471495696258 T T T
 0.4992053880857339 0.2490999774713416 0.0717098152488082 T T T
 0.7504576481095708 0.2507239760565783 0.0714292606380010 T T T
 -0.0008977716637181 0.5010615481356202 0.0712982660737477 T T T
 0.2487084454862366 0.5001665498904670 0.0702048513018491 T T T
 0.4988705423090636 0.4981972495819403 0.0715750301886225 T T T
 0.7492022309276393 0.5004929346658559 0.0716895200533175 T T T
 -0.0000771971414539 0.7507179032002073 0.0713959983719510 T T T
 0.2510458105493124 0.7511227699996242 0.0702106824478190 T T T
 0.4994561049831542 0.7484758782671237 0.0703407436800311 T T T
 0.7490070485955241 0.7488496211984008 0.0712196653245111 T T T
 0.0828889332909810 0.1665043433458848 0.0000000000000000 F F F
 0.3332115560992150 0.1667452158033456 0.0000000000000000 F F F
 0.5833183080606545 0.1663556957179608 0.0000000000000000 F F F
 0.8331489220442307 0.1665368424994185 0.0000000000000000 F F F
 0.0829240578404153 0.4164017259029507 0.0000000000000000 F F F
 0.3330120975278135 0.4167750205552210 0.0000000000000000 F F F
 0.5828364313531083 0.4165458535045090 0.0000000000000000 F F F
 0.8335013052239475 0.4169247120317934 0.0000000000000000 F F F
 0.0835789735299102 0.6669398212605202 0.0000000000000000 F F F
 0.3332219865009804 0.6665833402861523 0.0000000000000000 F F F
 0.5835218886102140 0.6666078395544019 0.0000000000000000 F F F
 0.8334486833724597 0.6667130819478544 0.0000000000000000 F F F
 0.0834580061735366 0.9169868434164314 0.0000000000000000 F F F
 0.3334013642711611 0.9170210941386969 0.0000000000000000 F F F
 0.5832319497643823 0.9162905071868721 0.0000000000000000 F F F
 0.8334352905462836 0.9164441305632280 0.0000000000000000 F F F
 0.2560529099024809 0.9848105891815258 0.3015564986413148 T T T
 0.7807621685084885 0.0200705154084644 0.3425565361862969 T T T
 0.0351553206643552 0.2772340480830229 0.3021622844251384 T T T
 0.7509085749990042 0.2394473355223124 0.2983513081017450 T T T
 0.0044520831595750 0.0023958876367693 0.2974788420999054 T T T
 0.5051470791638130 0.0195364411106333 0.3428703579964205 T T T

0.9824506338502834 0.4832670082316897 0.3423704312679114 T T T
 0.7449464014617385 0.5009494552588766 0.3013256161649845 T T T
 0.9778599458992858 0.7562355076207046 0.3413940452574676 T T T
 0.2429037885225711 0.7480257600047392 0.3519320944601905 T T T
 0.5045409737252917 0.7466149634548380 0.3524769234156011 T T T
 0.7236998776735277 0.7495367397362273 0.3009809891114744 T T T
 0.0957912238491521 0.1812280933429964 0.2157489851242592 T T T
 0.5805942895853241 0.1520521315144687 0.2163473507971726 T T T
 0.1330959787806712 0.4672214231956077 0.2179480446086089 T T T
 0.3331381263482025 0.4031330194362936 0.2642752836917393 T T T
 0.5687851274497330 0.4167436769755847 0.2177441003502535 T T T
 0.8474686568101129 0.4299283307611331 0.2168696086102676 T T T
 0.0703741271879203 0.6645786339541415 0.2649773219955089 T T T
 0.5344257242854823 0.6661566786477023 0.2180698553546229 T T T
 0.0843015107866477 0.9012890305427356 0.2161605474925072 T T T
 0.3334322383108099 0.8674653870755711 0.2181625974206180 T T T
 0.5947539511161094 0.9304942675846748 0.2645754801245132 T T T
 0.8170905474214960 0.9153658846801987 0.2157862510160540 T T T

SYSTEM: PBE clean Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.9596012860582199 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4798006430291100 9.4912931290702147 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

Ni Pt

20 60

Selective dynamics

Direct

0.3328367936693013 0.1671632063306987 0.2267149822671612 T T T
 0.8328367936693013 0.1671632063306987 0.2267149822671612 T T T
 0.3328367936693013 0.6671632063306987 0.2267149822671612 T T T
 0.8328367936693013 0.6671632063306987 0.2267149822671612 T T T
 0.0834639354306148 0.9165360645693781 0.2260843071510124 T T T
 0.5834639354306219 0.9165360645693781 0.2260843071510124 T T T
 0.0834639354306148 0.4165360645693852 0.2260843071510124 T T T
 0.5834639354306219 0.4165360645693852 0.2260843071510124 T T T
 0.1672873534256993 0.3327126465743007 0.1531428609254419 T T T
 0.6672873534256993 0.3327126465743007 0.1531428609254419 T T T
 0.1672873534256993 0.8327126465743007 0.1531428609254419 T T T
 0.6672873534256993 0.8327126465743007 0.1531428609254419 T T T
 0.0000867263372371 0.9999132736627629 0.0765707477625313 T T T
 0.5000867263372371 0.9999132736627629 0.0765707477625313 T T T
 0.0000867263372371 0.4999132736627558 0.0765707477625313 T T T
 0.5000867263372371 0.4999132736627558 0.0765707477625313 T T T
 0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.4989796774452699 0.0010203225547301 0.3029421841568620 T T T

0.9989796774452699 0.0010203225547301 0.3029421841568620 T T T
 0.9989796774452699 0.5010203225547301 0.3029421841568620 T T T
 0.2473653023204960 0.0025382007753123 0.3011956088326002 T T T
 0.7473653023204960 0.0025382007753123 0.3011956088326002 T T T
 0.9974617992246877 0.2526346976795040 0.3011956088326002 T T T
 0.2488161217423013 0.2511838782576987 0.3029343342375341 T T T
 0.4974617992246877 0.2526346976795040 0.3011956088326002 T T T
 0.7488161217423013 0.2511838782576987 0.3029343342375341 T T T
 0.2473653023204960 0.5025382007753123 0.3011956088326002 T T T
 0.4989796774452699 0.5010203225547301 0.3029421841568620 T T T
 0.7473653023204960 0.5025382007753123 0.3011956088326002 T T T
 0.9974617992246877 0.7526346976795040 0.3011956088326002 T T T
 0.2488161217423013 0.7511838782576987 0.3029343342375341 T T T
 0.4974617992246877 0.7526346976795040 0.3011956088326002 T T T
 0.7488161217423013 0.7511838782576987 0.3029343342375341 T T T
 0.0835393371766173 0.1692159972657805 0.2256122574683062 T T T
 0.5835393371766173 0.1692159972657805 0.2256122574683062 T T T
 0.3307840027342195 0.4164606628233827 0.2256122574683062 T T T
 0.8307840027342195 0.4164606628233827 0.2256122574683062 T T T
 0.0835393371766173 0.6692159972657805 0.2256122574683062 T T T
 0.5835393371766173 0.6692159972657805 0.2256122574683062 T T T
 0.3307840027342195 0.9164606628233827 0.2256122574683062 T T T
 0.8307840027342195 0.9164606628233827 0.2256122574683062 T T T
 0.1675855500868551 0.0802631190067657 0.1533374066247930 T T T
 0.4182519639212998 0.0817480360787002 0.1515618369933094 T T T
 0.6675855500868551 0.0802631190067657 0.1533374066247930 T T T
 0.9182519639212998 0.0817480360787002 0.1515618369933094 T T T
 0.4197368809932343 0.3324144499131449 0.1533374066247930 T T T
 0.9197368809932343 0.3324144499131449 0.1533374066247930 T T T
 0.1675855500868551 0.5802631190067657 0.1533374066247930 T T T
 0.4182519639212998 0.5817480360787002 0.1515618369933094 T T T
 0.6675855500868551 0.5802631190067657 0.1533374066247930 T T T
 0.9182519639212998 0.5817480360787002 0.1515618369933094 T T T
 0.4197368809932343 0.8324144499131449 0.1533374066247930 T T T
 0.9197368809932343 0.8324144499131449 0.1533374066247930 T T T
 0.2501848852877728 0.9992058799457979 0.0776509678230184 T T T
 0.7501848852877728 0.9992058799457979 0.0776509678230184 T T T
 0.0007941200542021 0.2498151147122272 0.0776509678230184 T T T
 0.2506703025822787 0.2493296974177213 0.0764506976817927 T T T
 0.5007941200542021 0.2498151147122272 0.0776509678230184 T T T
 0.7506703025822787 0.2493296974177213 0.0764506976817927 T T T
 0.2501848852877728 0.4992058799457979 0.0776509678230184 T T T
 0.7501848852877728 0.4992058799457979 0.0776509678230184 T T T
 0.0007941200542021 0.7498151147122272 0.0776509678230184 T T T
 0.2506703025822787 0.7493296974177213 0.0764506976817927 T T T
 0.5007941200542021 0.7498151147122272 0.0776509678230184 T T T
 0.7506703025822787 0.7493296974177213 0.0764506976817927 T T T
 0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F

0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 clean Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface
1.0000000000000000
10.8275453603289158 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-5.4137726801644579 9.3769293426684222 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

Ni Pt

20 60

Selective dynamics

Direct

0.3327429363621698 0.1672570636378302 0.2251441695627676 T T T
0.8327429363621699 0.1672570636378302 0.2251441695627676 T T T
0.3327429363621698 0.6672570636378301 0.2251441695627676 T T T
0.8327429363621699 0.6672570636378301 0.2251441695627676 T T T
0.0837484931509216 0.9162515068490713 0.2240617606721239 T T T
0.5837484931509287 0.9162515068490713 0.2240617606721239 T T T
0.0837484931509216 0.4162515068490784 0.2240617606721239 T T T
0.5837484931509287 0.4162515068490784 0.2240617606721239 T T T
0.1664741521485920 0.3335258478514080 0.1522724110609258 T T T
0.6664741521485922 0.3335258478514080 0.1522724110609258 T T T
0.1664741521485920 0.8335258478514078 0.1522724110609258 T T T
0.6664741521485922 0.8335258478514078 0.1522724110609258 T T T
-0.0003442656641153 0.0003442656641151 0.0767502112109423 T T T
0.4996557343358848 0.0003442656641151 0.0767502112109423 T T T
-0.0003442656641153 0.5003442656641082 0.0767502112109423 T T T
0.4996557343358848 0.5003442656641082 0.0767502112109423 T T T
0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.4991289282636827 0.0008710717363173 0.3007899908898690 T T T
0.9991289282636827 0.0008710717363173 0.3007899908898690 T T T
0.9991289282636827 0.5008710717363173 0.3007899908898690 T T T
0.2475494297171313 0.0022937945108614 0.2992432300091453 T T T
0.7475494297171317 0.0022937945108614 0.2992432300091453 T T T
0.9977062054891388 0.2524505702828686 0.2992432300091453 T T T
0.2489780101030927 0.2510219898969074 0.3007132736394899 T T T
0.4977062054891384 0.2524505702828686 0.2992432300091453 T T T
0.7489780101030930 0.2510219898969074 0.3007132736394899 T T T

0.2475494297171313 0.5022937945108612 0.2992432300091453 T T T
0.4991289282636827 0.5008710717363173 0.3007899908898690 T T T
0.7475494297171317 0.5022937945108612 0.2992432300091453 T T T
0.9977062054891388 0.7524505702828683 0.2992432300091453 T T T
0.2489780101030927 0.7510219898969070 0.3007132736394899 T T T
0.4977062054891384 0.7524505702828683 0.2992432300091453 T T T
0.7489780101030930 0.7510219898969070 0.3007132736394899 T T T
0.0833585786781397 0.1692125379758480 0.2239584463738054 T T T
0.5833585786781398 0.1692125379758480 0.2239584463738054 T T T
0.3307874620241520 0.4166414213218602 0.2239584463738054 T T T
0.8307874620241519 0.4166414213218602 0.2239584463738054 T T T
0.0833585786781397 0.6692125379758481 0.2239584463738054 T T T
0.5833585786781398 0.6692125379758481 0.2239584463738054 T T T
0.3307874620241520 0.9166414213218602 0.2239584463738054 T T T
0.8307874620241519 0.9166414213218602 0.2239584463738054 T T T
0.1671916352107443 0.0808147200230036 0.1524020365478904 T T T
0.4177193694838406 0.0822806305161593 0.1508056379819051 T T T
0.6671916352107442 0.0808147200230036 0.1524020365478904 T T T
0.9177193694838407 0.0822806305161593 0.1508056379819051 T T T
0.4191852799769964 0.3328083647892557 0.1524020365478904 T T T
0.9191852799769962 0.3328083647892557 0.1524020365478904 T T T
0.1671916352107443 0.5808147200230038 0.1524020365478904 T T T
0.4177193694838406 0.5822806305161593 0.1508056379819051 T T T
0.6671916352107442 0.5808147200230038 0.1524020365478904 T T T
0.9177193694838407 0.5822806305161593 0.1508056379819051 T T T
0.4191852799769964 0.8328083647892558 0.1524020365478904 T T T
0.9191852799769962 0.8328083647892558 0.1524020365478904 T T T
0.2497081740457846 0.9997576271919583 0.0774114033900508 T T T
0.7497081740457848 0.9997576271919583 0.0774114033900508 T T T
0.0002423728080417 0.2502918259542153 0.0774114033900508 T T T
0.2499144581649454 0.2500855418350544 0.0765324726927859 T T T
0.5002423728080417 0.2502918259542153 0.0774114033900508 T T T
0.7499144581649457 0.2500855418350544 0.0765324726927859 T T T
0.2497081740457846 0.4997576271919583 0.0774114033900508 T T T
0.7497081740457848 0.4997576271919583 0.0774114033900508 T T T
0.0002423728080417 0.7502918259542152 0.0774114033900508 T T T
0.2499144581649454 0.7500855418350543 0.0765324726927859 T T T
0.5002423728080417 0.7502918259542152 0.0774114033900508 T T T
0.7499144581649457 0.7500855418350543 0.0765324726927859 T T T
0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE clean Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

Ni Pt

8 72

Selective dynamics

Direct

0.3333817027034343 0.1666182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.8333817027034343 0.1666182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.3333817027034343 0.6666182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.8333817027034343 0.6666182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.0833817027034343 0.9166182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.5833817027034343 0.9166182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.0833817027034343 0.4166182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.5833817027034343 0.4166182972965657 0.2276736255059220 T T T
0.5008892324057541 0.9991107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.0008892324057541 0.9991107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.0008892324057541 0.4991107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.2479653398417980 0.0020346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.7479653398417980 0.0020346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.9979653398417980 0.2520346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.2508892324057541 0.2491107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.4979653398417980 0.2520346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.7508892324057541 0.2491107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.2479653398417980 0.5020346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.5008892324057541 0.4991107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.7479653398417980 0.5020346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.9979653398417980 0.7520346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.2508892324057541 0.7491107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.4979653398417980 0.7520346601582020 0.3000866189939941 T T T
0.7508892324057541 0.7491107675942459 0.3022082340469936 T T T
0.0836243299884032 0.1663756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.5836243299884032 0.1663756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.3336243299884032 0.4163756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.8336243299884032 0.4163756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.0836243299884032 0.6663756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.5836243299884032 0.6663756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.3336243299884032 0.9163756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.8336243299884032 0.9163756700115968 0.2280247726658260 T T T
0.1681058023487836 0.0818941976512164 0.1565543203769266 T T T
0.4163747618963001 0.0836252381036999 0.1551756088527299 T T T
0.6681058023487836 0.0818941976512164 0.1565543203769266 T T T
0.9163747618963001 0.0836252381036999 0.1551756088527299 T T T
0.1663747618963001 0.3336252381036999 0.1551756088527299 T T T

0.4181058023487836 0.3318941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.6663747618963001 0.3336252381036999 0.1551756088527299 T T T
 0.9181058023487836 0.3318941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.1681058023487836 0.5818941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.4163747618963001 0.5836252381036999 0.1551756088527299 T T T
 0.6681058023487836 0.5818941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.9163747618963001 0.5836252381036999 0.1551756088527299 T T T
 0.1663747618963001 0.8336252381036999 0.1551756088527299 T T T
 0.4181058023487836 0.8318941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.6663747618963001 0.8336252381036999 0.1551756088527299 T T T
 0.9181058023487836 0.8318941976512164 0.1565543203769266 T T T
 0.9998257902858754 0.0001742097141246 0.0784221333018138 T T T
 0.2500004476104678 0.9999995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.4998257902858825 0.0001742097141246 0.0784221333018138 T T T
 0.7500004476104749 0.9999995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.0000004476104678 0.2499995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.2498257902858754 0.2501742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.5000004476104749 0.2499995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.7498257902858825 0.2501742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.9998257902858754 0.5001742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.2500004476104678 0.4999995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.4998257902858825 0.5001742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.7500004476104749 0.4999995523895322 0.0795400860015860 T T T
 0.0000004476104678 0.7499995523895251 0.0795400860015860 T T T
 0.2498257902858754 0.7501742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.5000004476104749 0.7499995523895251 0.0795400860015860 T T T
 0.7498257902858825 0.7501742097141175 0.0784221333018138 T T T
 0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 clean Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface
 1.0000000000000000
 11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

Ni Pt

8 72

Selective dynamics

Direct

0.3331952801094932 0.1668047198905069 0.2257251706936272 T T T
0.8331952801094933 0.1668047198905069 0.2257251706936272 T T T
0.3331952801094932 0.6668047198905067 0.2257251706936272 T T T
0.8331952801094933 0.6668047198905067 0.2257251706936272 T T T
0.0831952801094931 0.9168047198905067 0.2257251706936272 T T T
0.5831952801094933 0.9168047198905067 0.2257251706936272 T T T
0.0831952801094931 0.4168047198905068 0.2257251706936272 T T T
0.5831952801094933 0.4168047198905068 0.2257251706936272 T T T
0.5006242853097296 0.9993757146902704 0.3001944625390603 T T T
0.0006242853097295 0.9993757146902704 0.3001944625390603 T T T
0.0006242853097295 0.4993757146902705 0.3001944625390603 T T T
0.2481335014824451 0.0018664985175549 0.2983104076824523 T T T
0.7481335014824452 0.0018664985175549 0.2983104076824523 T T T
0.9981335014824452 0.2518664985175549 0.2983104076824523 T T T
0.2506242853097295 0.2493757146902705 0.3001944625390603 T T T
0.4981335014824451 0.2518664985175549 0.2983104076824523 T T T
0.7506242853097296 0.2493757146902705 0.3001944625390603 T T T
0.2481335014824451 0.5018664985175548 0.2983104076824523 T T T
0.5006242853097296 0.4993757146902705 0.3001944625390603 T T T
0.7481335014824452 0.5018664985175548 0.2983104076824523 T T T
0.9981335014824452 0.7518664985175548 0.2983104076824523 T T T
0.2506242853097295 0.7493757146902704 0.3001944625390603 T T T
0.4981335014824451 0.7518664985175548 0.2983104076824523 T T T
0.7506242853097296 0.7493757146902704 0.3001944625390603 T T T
0.0832960618256982 0.1667039381743018 0.2261965666161670 T T T
0.5832960618256984 0.1667039381743018 0.2261965666161670 T T T
0.3332960618256981 0.4167039381743019 0.2261965666161670 T T T
0.8332960618256984 0.4167039381743019 0.2261965666161670 T T T
0.0832960618256982 0.6667039381743016 0.2261965666161670 T T T
0.5832960618256984 0.6667039381743016 0.2261965666161670 T T T
0.3332960618256981 0.9167039381743016 0.2261965666161670 T T T
0.8332960618256984 0.9167039381743016 0.2261965666161670 T T T
0.1675746028413616 0.0824253971586384 0.1554243821969186 T T T
0.4159302909021464 0.0840697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.6675746028413616 0.0824253971586384 0.1554243821969186 T T T
0.9159302909021464 0.0840697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.1659302909021465 0.3340697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.4175746028413617 0.3324253971586383 0.1554243821969186 T T T
0.6659302909021464 0.3340697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.9175746028413616 0.3324253971586383 0.1554243821969186 T T T
0.1675746028413616 0.5824253971586384 0.1554243821969186 T T T
0.4159302909021464 0.5840697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.6675746028413616 0.5824253971586384 0.1554243821969186 T T T
0.9159302909021464 0.5840697090978536 0.1540530126175541 T T T
0.1659302909021465 0.8340697090978536 0.1540530126175541 T T T

0.4175746028413617 0.8324253971586384 0.1554243821969186 T T T
 0.6659302909021464 0.8340697090978536 0.1540530126175541 T T T
 0.9175746028413616 0.8324253971586384 0.1554243821969186 T T T
 0.9994920874528269 0.0005079125471732 0.0781692097088414 T T T
 0.2496508585519328 0.0003491414480673 0.0791914757156894 T T T
 0.4994920874528340 0.0005079125471732 0.0781692097088414 T T T
 0.7496508585519398 0.0003491414480673 0.0791914757156894 T T T
 -0.0003491414480672 0.2503491414480671 0.0791914757156894 T T T
 0.2494920874528268 0.2505079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.4996508585519400 0.2503491414480671 0.0791914757156894 T T T
 0.7494920874528340 0.2505079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.9994920874528269 0.5005079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.2496508585519328 0.5003491414480673 0.0791914757156894 T T T
 0.4994920874528340 0.5005079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.7496508585519398 0.5003491414480673 0.0791914757156894 T T T
 -0.0003491414480672 0.7503491414480602 0.0791914757156894 T T T
 0.2494920874528268 0.7505079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.4996508585519400 0.7503491414480602 0.0791914757156894 T T T
 0.7494920874528340 0.7505079125471660 0.0781692097088414 T T T
 0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE clean Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

Pt

80

Selective dynamics

Direct

-0.0000000000000000 -0.0000000000000000 0.3068442508562624 T T T

0.2500000000000000 -0.0000000000000000 0.3068442508562624 T T T

0.5000000000000000 -0.0000000000000000 0.3068442508562624 T T T

0.7500000000000000 0.0000000000000000 0.3068442508562624 T T T

[illegible]

0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.0775555651894948 T T T
 -0.0000000000000000 0.7500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.0775555651894948 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 clean Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

Pt

80

Selective dynamics

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.2500000000000000 0.0000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.7500000000000000 0.0000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.3064832555726352 T T T
 -0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.3064832555726352 T T T
 0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.3064832555726352 T T T

[illegible]

0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.0778356279221625 T T T
 0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.0778356279221625 T T T
 0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.0778356279221625 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Methanol on Ni(111) surface

1.0000000000000000
 9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni

1 1 4 80

Selective dynamics

Direct

0.3912988051264147 0.4488130424844328 0.3985405046086070 T T T
 0.5231202024313683 0.5117488118237549 0.3666127410165455 T T T
 0.3211943934107537 0.3250217901155664 0.3900670529181350 T T T
 0.5870161518356565 0.6236442803564083 0.3716489052348697 T T T
 0.3209557545616419 0.5046291923810307 0.3930721804865036 T T T
 0.4322331026148501 0.4633897002896850 0.4354397345397487 T T T
 0.0001739979794321 0.9995154971195862 0.2859602459205987 T T T
 0.2500191862031999 0.9989537948985588 0.2859960470101954 T T T
 0.5003966740133806 0.9993287388675891 0.2860073247689636 T T T
 0.7503670759294601 0.9994618921957988 0.2858656920478106 T T T
 0.0002576522871499 0.2494554512981388 0.2858112060532848 T T T
 0.2484721782962385 0.2472532666238223 0.2855356205208135 T T T
 0.4997555514416140 0.2471749516920461 0.2856563238200159 T T T
 0.7504212974334997 0.2493589533238435 0.2858484802923957 T T T
 0.0004085423986647 0.4994701495265335 0.2859886508528787 T T T
 0.2486818294985414 0.4999466292547096 0.2855693935290223 T T T
 0.5000099912519138 0.4989868039101045 0.2913496170542809 T T T
 0.7525732332328500 0.5000532515758855 0.2856455465892928 T T T
 0.0007453948418667 0.7497409629236830 0.2859692983217283 T T T
 0.2501769562107207 0.7496201639677487 0.2860029963809899 T T T

0.5000725396671695 0.7510755960820561 0.2855995605247413 T T T
 0.7527217636718759 0.7517336818049225 0.2852468758092789 T T T
 0.0837839352641198 0.1665963546804197 0.2147961690562623 T T T
 0.3335333869733821 0.1660413840722758 0.2149140962755224 T T T
 0.5837007364505280 0.1664743559167843 0.2148941494002883 T T T
 0.8335615878107782 0.1661839950601524 0.2148656464138817 T T T
 0.0837636776935539 0.4161573112277936 0.2148174549222183 T T T
 0.3354484898242412 0.4172175004094590 0.2161956204975253 T T T
 0.5828025968126403 0.4170552823647591 0.2161649850150516 T T T
 0.8333024445389100 0.4161041972720846 0.2148868997125884 T T T
 0.0835340792350500 0.6661346342784435 0.2150055932825587 T T T
 0.3335445067410695 0.6663879480179118 0.2148778133090081 T T T
 0.5828877076358893 0.6648275007304234 0.2160063759168621 T T T
 0.8338393127906588 0.6662655378697073 0.2148237123016590 T T T
 0.0834895135734802 0.9163703462855445 0.2149818533198705 T T T
 0.3337342734142864 0.9163216926051502 0.2150029457090453 T T T
 0.5837729037896308 0.9161562376683005 0.2148011414853864 T T T
 0.8334510801856909 0.9164125610051255 0.2146439913815896 T T T
 0.1669197415724810 0.0831133184358855 0.1429181413902250 T T T
 0.4168131099345525 0.0831047271548038 0.1429273857506927 T T T
 0.6667188748978184 0.0830976382960497 0.1429550603854702 T T T
 0.9169826039941676 0.0831856278238159 0.1428730646852568 T T T
 0.1672927145073696 0.3333325990191233 0.1430465533223778 T T T
 0.4170403202791379 0.3334287873618400 0.1433474112146171 T T T
 0.6665707282777457 0.3332492918473782 0.1430776835885725 T T T
 0.9169169847788465 0.3332292092086341 0.1429541234133181 T T T
 0.1668430110583537 0.5830668909345940 0.1428935450013845 T T T
 0.4169526931648478 0.5829174201221689 0.1432962614516916 T T T
 0.6665129597834851 0.5828419618309479 0.1432868071360639 T T T
 0.9168108733453932 0.5829858182593738 0.1428845500688563 T T T
 0.1668505285684253 0.8330372636300168 0.1429506049074824 T T T
 0.4167818254157146 0.8330448104780673 0.1429060125541600 T T T
 0.6666434259741852 0.8326628788735262 0.1430157464351377 T T T
 0.9168247829665022 0.8329776391919920 0.1428739478882729 T T T
 0.0001029097572849 0.9998554511648190 0.0708952629583360 T T T
 0.2501186067395004 -0.0001380685870695 0.0709237894269112 T T T
 0.5001052485274889 0.9998698771615326 0.0709083818147459 T T T
 0.7499639914732038 0.9996363764947935 0.0710033114391919 T T T
 0.0003293599997468 0.2499856961982793 0.0709885535644902 T T T
 0.2502862624237626 0.2499452402766886 0.0710164859326466 T T T
 0.5000163154015138 0.2499975612081252 0.0710294480506978 T T T
 0.7499744459702401 0.2499327667562150 0.0710066539896477 T T T
 0.0001216841992176 0.4998318868681358 0.0708811765681879 T T T
 0.2502939060628692 0.4999083648504108 0.0710109527687826 T T T
 0.5001012330870862 0.4998673679634456 0.0711005035248577 T T T
 0.7499171876066959 0.4999024455292105 0.0710081173463775 T T T
 0.0000793831688381 0.7498412066373040 0.0709170829222456 T T T
 0.2501455540756606 0.7498628590260010 0.0709217938107632 T T T
 0.5000398841407226 0.7496670019023099 0.0710097986067326 T T T

0.7499838104639595 0.7496275466616935 0.0709998595468266 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Methanol on Ni(111) surface

1.0000000000000000
 9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni

1 1 4 80

Selective dynamics

Direct

0.3811661100036466 0.4500009461687356 0.3927168392679824 T T T
 0.5234689781902508 0.5162079384047402 0.3645472399629828 T T T
 0.3160139436589047 0.3241951571813150 0.3842799857542030 T T T
 0.5824771943990701 0.6304668817541367 0.3684911673901198 T T T
 0.3088807712399576 0.5024535048406282 0.3829108466062689 T T T
 0.4116349655874156 0.4674713972121622 0.4306358524691020 T T T
 0.0009296891615291 0.0004092634487786 0.2850172094453454 T T T
 0.2507057583152406 -0.0001657472130782 0.2850027679826337 T T T
 0.5009055553330607 -0.0000148914271189 0.2850616605588478 T T T
 0.7509526575592635 0.0001993482808251 0.2849188553004393 T T T
 0.0009845164370687 0.2503148076367093 0.2848910864695320 T T T
 0.2494688353462185 0.2483461003693682 0.2845175548091502 T T T
 0.5004659430141501 0.2481514857557169 0.2846441685891465 T T T
 0.7509943874689677 0.2501160800281777 0.2848483086608257 T T T
 0.0011084055986806 0.5001613594465431 0.2850532672995835 T T T
 0.2496843343134569 0.5006854904456404 0.2845247734613618 T T T
 0.5015464273066745 0.4999574260456685 0.2897186955732133 T T T
 0.7531898404910484 0.5007126488443852 0.2845736953580173 T T T
 0.0013956141016031 0.7505059075444445 0.2849760385886982 T T T
 0.2509433512221292 0.7502391702796882 0.2850281332310267 T T T
 0.5008003672081323 0.7516851845801520 0.2845334366803977 T T T
 0.7535320842719448 0.7526147872927532 0.2841227927362762 T T T

0.0843217754977480 0.1672306901306262 0.2135824011153160 T T T
 0.3341142891632541 0.1667206425811134 0.2137041002546776 T T T
 0.5842611448360965 0.1670628492625465 0.2136887397114761 T T T
 0.8341754857796971 0.1669142458290690 0.2136540068382012 T T T
 0.0843050044321443 0.4167581297140398 0.2136070633760375 T T T
 0.3357636300677840 0.4176741050225341 0.2148544418494436 T T T
 0.5835051696335437 0.4174772924312693 0.2148224224590311 T T T
 0.8339522873344369 0.4167933218366656 0.2136586792023753 T T T
 0.0842322338452837 0.6668812531113538 0.2137609947699065 T T T
 0.3342310160822625 0.6670370215670860 0.2136503985332858 T T T
 0.5836155712717208 0.6657649682364317 0.2146357933795914 T T T
 0.8342898896536952 0.6669215619329176 0.2135968498378650 T T T
 0.0840936783525221 0.9168803444818697 0.2137139279761647 T T T
 0.3341744788912504 0.9168857512863882 0.2137590860788278 T T T
 0.5842981252442152 0.9168669228991798 0.2135903487169189 T T T
 0.8340825392555873 0.9171341649151403 0.2134074563372904 T T T
 0.1672999857946063 0.0835358486584251 0.1424328714426027 T T T
 0.4171530863502070 0.0835508320137652 0.1424348644334997 T T T
 0.6670641340130737 0.0834766310282870 0.1424386068295046 T T T
 0.9173197029666663 0.0836129887322951 0.1423695715799089 T T T
 0.1675808744907393 0.3337170019446209 0.1425699121451089 T T T
 0.4173416703927731 0.3337573141951332 0.1428227337410770 T T T
 0.6670428121388216 0.3336767570086603 0.1425682439270400 T T T
 0.9172701834903721 0.3336437053941054 0.1424275719510634 T T T
 0.1671851201588277 0.5834518743473226 0.1423847284804675 T T T
 0.4172654101450837 0.5832676338183328 0.1427707641486665 T T T
 0.6669438553409532 0.5832981796611905 0.1427658294917530 T T T
 0.9171560998029389 0.5834683526923284 0.1423807054958973 T T T
 0.1671746982704299 0.8334533300198853 0.1424583038533644 T T T
 0.4170945761317286 0.8333837372160552 0.1424132010284061 T T T
 0.6669660441244832 0.8331686559438101 0.1425235634778164 T T T
 0.9171532962949535 0.8334109131277648 0.1423568668272257 T T T
 0.0003171592986709 0.0001394832264265 0.0711005547594439 T T T
 0.2502676689495356 0.0001027168259044 0.0711346097927106 T T T
 0.5002848050211088 0.0000767299251366 0.0711250770696628 T T T
 0.7501524031757552 -0.0001084570055880 0.0711821753577171 T T T
 0.0004885236911389 0.2501993519178309 0.0711793977358016 T T T
 0.2504607276266989 0.2501983371063911 0.0712497616007140 T T T
 0.5002203096338326 0.2501999944883694 0.0712343768792227 T T T
 0.7501671414659052 0.2501355699589957 0.0711973683133764 T T T
 0.0003029348599631 0.5000547688011836 0.0710940117607933 T T T
 0.2504776429112532 0.5001199512573152 0.0712221725206924 T T T
 0.5002210031012574 0.5000152854037057 0.0713278207198209 T T T
 0.7500924580120402 0.5001239044505890 0.0712334392772491 T T T
 0.0002460269493232 0.7500646660158493 0.0711137378260241 T T T
 0.2503043573323130 0.7500817807408834 0.0711213078337396 T T T
 0.5002203542968018 0.7498662958299476 0.0712193008558553 T T T
 0.7501214563701871 0.7498765727765904 0.0712266355965414 T T T
 0.08333333333333357 0.16666666666666643 0.00000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Methanol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1885857567195970

C O H Ni Pt

1 1 4 56 24

Selective dynamics

Direct

0.3859265239113867 0.2503822496231081 0.4409365188090462 T T T
 0.2655984693542095 0.1574056045808874 0.4067933696056585 T T T
 0.2698912690585402 0.0627094949155094 0.3995104505373703 T T T
 0.3764620311273248 0.3536863613674939 0.4478067689021543 T T T
 0.5016182611405213 0.2850472717665866 0.4266804856181849 T T T
 0.3653178044520473 0.1836134776312974 0.4738280254644209 T T T
 0.2666748648872499 0.2410960585045032 0.3417863480101673 T T T
 0.4952886982541997 0.2548124556858440 0.2995418396062988 T T T
 0.2613369323267705 0.5000652970489909 0.3476905956792535 T T T
 0.5116761351497416 0.5032995543972305 0.3351270238572042 T T T
 0.3349065726433338 0.1573373241927740 0.2214414586347004 T T T
 0.8442054187061743 0.1765250673996448 0.2181805834954389 T T T
 0.3398407107159684 0.6643073745323846 0.2770654693878498 T T T
 0.8248370811266312 0.6670058092980611 0.2200327949712744 T T T
 0.1696883978060058 0.0833117514366819 0.1424480596771716 T T T
 0.4171275253951592 0.0799448433248031 0.1438114576959464 T T T
 0.6703499101229440 0.0828083574581342 0.1428855513260601 T T T
 0.9177286618332445 0.0852238167963364 0.1421888616897249 T T T
 0.1705412487824631 0.3381335620442485 0.1415966597538514 T T T
 0.4141587163640139 0.3307735607543876 0.1439023799375860 T T T
 0.6680835260940299 0.3341894422917022 0.1432447314771537 T T T
 0.9224447977217167 0.3377986290092778 0.1434323923447920 T T T
 0.1704493129252711 0.5889696886094953 0.1410954660722012 T T T
 0.4125261899903450 0.5809241662822657 0.1416716361480965 T T T

0.6640845831112259 0.5839064604647533 0.1442112288928357 T T T
 0.9193556539632723 0.5878345667928002 0.1430079013230170 T T T
 0.1706596254812212 0.8312173166679955 0.1414694544769333 T T T
 0.4208912483449723 0.8314911004014789 0.1405147012411447 T T T
 0.6633166549644542 0.8313790100945582 0.1418269103958494 T T T
 0.9161903012986912 0.8313153374995039 0.1425928048855170 T T T
 0.0011771821190365 0.0000929093691866 0.0706244315800930 T T T
 0.2519254829140607 0.0011279277333500 0.0709396379110245 T T T
 0.5016547352532328 0.0010022755041845 0.0708185171806761 T T T
 0.7508695172239612 0.9999804094351958 0.0710452561961858 T T T
 0.0002652202396405 0.2501615376645248 0.0710619874935077 T T T
 0.2512389408482960 0.2502586309299346 0.0711143737318665 T T T
 0.5009352841956414 0.2504945475124671 0.0719889199260706 T T T
 0.7507682833088083 0.2502992810719675 0.0716342763713129 T T T
 0.0004803429257763 0.5002638783353675 0.0708828944751048 T T T
 0.2505673182381187 0.5001821118150076 0.0698401446062817 T T T
 0.5011770586309865 0.4996733735410004 0.0713139368857938 T T T
 0.7510133708956062 0.5004063707016329 0.0718629248191078 T T T
 0.0012706766598569 0.7504966840224867 0.0709977985050187 T T T
 0.2515480171612126 0.7505156734195211 0.0695889105279051 T T T
 0.5011648134198055 0.7491317180574839 0.0698736369070403 T T T
 0.7511295465782339 0.7492780680123374 0.0709902337308250 T T T
 0.0860405064960048 0.1690155026670723 0.0000000000000000 F F F
 0.3380976769348365 0.1681035213843813 0.0000000000000000 F F F
 0.5810429149583669 0.1686149941624606 0.0000000000000000 F F F
 0.8325938808599176 0.1692887796830576 0.0000000000000000 F F F
 0.0826649462717981 0.4124901540435104 0.0000000000000000 F F F
 0.3374513552488096 0.4167319720122862 0.0000000000000000 F F F
 0.5889134531614886 0.4196213956686989 0.0000000000000000 F F F
 0.8317204695676210 0.4114849615819693 0.0000000000000000 F F F
 0.0803841141123343 0.6630088948289270 0.0000000000000000 F F F
 0.3343210153996807 0.6662129463739390 0.0000000000000000 F F F
 0.5882535415480774 0.6699679086798369 0.0000000000000000 F F F
 0.8312880772275406 0.6626699091967012 0.0000000000000000 F F F
 0.0841713491191953 0.9148842552199596 0.0000000000000000 F F F
 0.3317086006182279 0.9177383469686688 0.0000000000000000 F F F
 0.5850149205656550 0.9200016485302669 0.0000000000000000 F F F
 0.8324583856894989 0.9171468161841787 0.0000000000000000 F F F
 0.2647141287338144 0.9890271763765170 0.3018594516446456 T T T
 0.7860088681541129 0.0235481837782956 0.3434671964159932 T T T
 0.0405051467184308 0.2795484513609736 0.3053687679916521 T T T
 0.7565883684062840 0.2441195461587000 0.3013813712522833 T T T
 0.0158611756477001 0.0093066468382474 0.3010848212082351 T T T
 0.5111092970538564 0.0226154942687558 0.3448675531789362 T T T
 0.9917066479940004 0.4894164233162570 0.3439384647235926 T T T
 0.7522846988877205 0.5052105836809773 0.3039730734129478 T T T
 0.9890380972675885 0.7607398448022877 0.3427607381975193 T T T
 0.2509537188443147 0.7523021097606133 0.3534531293236185 T T T
 0.5115749029348962 0.7530779625820898 0.3528546721016639 T T T

0.7364874137968513 0.7559840293815796 0.3043297061437826 T T T
 0.0967706691686843 0.1802178692133651 0.2171544496947675 T T T
 0.5830871853782966 0.1532447607508658 0.2188870958169389 T T T
 0.1354509338038312 0.4651647661035483 0.2194231849162094 T T T
 0.3322112401894941 0.3962377128425274 0.2676415873628599 T T T
 0.5722608471905914 0.4176204177310936 0.2200669522360172 T T T
 0.8509154074911081 0.4308720451162387 0.2187656462030532 T T T
 0.0763970014801245 0.6662860508284396 0.2664782581289558 T T T
 0.5403628632342716 0.6664190897087821 0.2199763040710252 T T T
 0.0878328766315803 0.9022144830084784 0.2176536506102735 T T T
 0.3374247489114879 0.8685929945697239 0.2191801228143078 T T T
 0.5991788608549555 0.9311347903222114 0.2663375768728713 T T T
 0.8217570813632520 0.9162678971726805 0.2175175389797204 T T T

SYSTEM: PBE+D3 Methanol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface
 1.0000000000000000

9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni Pt

1 1 4 56 24

Selective dynamics

Direct

0.3874078297997363 0.2397838695497977 0.4329279314631251 T T T
 0.2501232153061754 0.1519173017596277 0.4030734244195932 T T T
 0.2370091368771060 0.0475379944481368 0.3963955090193773 T T T
 0.3988492089615477 0.3554657739150041 0.4383685392931826 T T T
 0.4935542673240839 0.2535359769295941 0.4153120096276801 T T T
 0.3684485585271126 0.1787987435667664 0.4670457937509717 T T T
 0.2584660855049964 0.2364543815531570 0.3379336206735493 T T T
 0.4888693729464120 0.2504410906261026 0.2967507643602902 T T T
 0.2538920313709910 0.4965464437926148 0.3456912629521167 T T T
 0.5052901516046356 0.4981957712109278 0.3340055341397865 T T T
 0.3321992304250996 0.1556193243179128 0.2195081802022718 T T T
 0.8416523601580496 0.1749733325969909 0.2170224977574234 T T T
 0.3357581347935768 0.6644873860309413 0.2762938023646216 T T T
 0.8226787134821006 0.6660856310393609 0.2189563737981831 T T T
 0.1683131025239565 0.0822665886786041 0.1420380857391095 T T T
 0.4149513809013217 0.0793037431588868 0.1427487041564940 T T T
 0.6694014031019703 0.0821864568784994 0.1422647511675997 T T T
 0.9166293818122574 0.0855735961872173 0.1417774896503900 T T T
 0.1699242927453474 0.3384251196678203 0.1412870947977825 T T T
 0.4118732475784675 0.3297652782672769 0.1431976195399641 T T T
 0.6665910183869699 0.3337175592673183 0.1417517101191535 T T T
 0.9208490423930732 0.3369242617104629 0.1428427078692951 T T T
 0.1691456687729875 0.5891642612775027 0.1409187319193340 T T T
 0.4104264242596101 0.5798661160181142 0.1411421546149448 T T T
 0.6628462279711252 0.5836248480162337 0.1434229992683241 T T T
 0.9178974729396798 0.5877252153556034 0.1428271330415700 T T T

0.1685625171942480 0.8297495869866000 0.1410652992306061 T T T
 0.4198846656611582 0.8308537955384734 0.1406246493432644 T T T
 0.6610263382390665 0.8311656003279327 0.1413085232307247 T T T
 0.9133154503755447 0.8301874040214233 0.1420867658292179 T T T
 0.9997991965561436 0.9997180118567905 0.0713591424965731 T T T
 0.2506190651444235 0.0001216123018297 0.0710519867893169 T T T
 0.5013961362814788 0.0006548422213551 0.0712197440715453 T T T
 0.7502990913484170 0.9996458316531680 0.0712256026027716 T T T
 0.9997748915002717 0.2507182743335938 0.0712129980325698 T T T
 0.2494046932356448 0.2494425656130030 0.0713845727203018 T T T
 0.4995462448350829 0.2492918217614911 0.0716558838161980 T T T
 0.7507739109336818 0.2507639492965609 0.0713936411392071 T T T
 0.9993910126041894 0.5010692862317486 0.0713442975562090 T T T
 0.2489555929325225 0.5001793333980374 0.0702213673388970 T T T
 0.4990955346080760 0.4983545232478420 0.0715767189449760 T T T
 0.7494261781742970 0.5005542747408557 0.0716606775987028 T T T
 0.9999480140697475 0.7505691254711034 0.0713414657258717 T T T
 0.2512079028014261 0.7509214047993149 0.0701393661424175 T T T
 0.4996538364983947 0.7483543761082959 0.0702939615956712 T T T
 0.7489969113815287 0.7487303131623783 0.0711205848860592 T T T
 0.0828889332909810 0.1665043433458848 0.0000000000000000 F F F
 0.3332115560992150 0.1667452158033456 0.0000000000000000 F F F
 0.5833183080606545 0.1663556957179608 0.0000000000000000 F F F
 0.8331489220442307 0.1665368424994185 0.0000000000000000 F F F
 0.0829240578404153 0.4164017259029507 0.0000000000000000 F F F
 0.3330120975278135 0.4167750205552210 0.0000000000000000 F F F
 0.5828364313531083 0.4165458535045090 0.0000000000000000 F F F
 0.8335013052239475 0.4169247120317934 0.0000000000000000 F F F
 0.0835789735299102 0.6669398212605202 0.0000000000000000 F F F
 0.3332219865009804 0.6665833402861523 0.0000000000000000 F F F
 0.5835218886102140 0.6666078395544019 0.0000000000000000 F F F
 0.8334486833724597 0.6667130819478544 0.0000000000000000 F F F
 0.0834580061735366 0.9169868434164314 0.0000000000000000 F F F
 0.3334013642711611 0.9170210941386969 0.0000000000000000 F F F
 0.5832319497643823 0.9162905071868721 0.0000000000000000 F F F
 0.8334352905462836 0.9164441305632280 0.0000000000000000 F F F
 0.2581421443581170 0.9844067133661263 0.2990769956546721 T T T
 0.7823554410143374 0.0221674934019016 0.3418619202580234 T T T
 0.0357615551091900 0.2785754208832441 0.3016311330918485 T T T
 0.7505460786273296 0.2404842867713712 0.2983165905052437 T T T
 0.0081384340595745 0.0050560472820863 0.2979095294823776 T T T
 0.5052821665872492 0.0218845759276191 0.3431036234492889 T T T
 0.9829979223887400 0.4844567981831197 0.3423786736241630 T T T
 0.7451464049186418 0.5016114472739639 0.3015319108585507 T T T
 0.9794108666774561 0.7579119965624118 0.3412027225405914 T T T
 0.2434871854186346 0.7503027921069702 0.3522650674144989 T T T
 0.5057891732974382 0.7501875003394689 0.3519257006941225 T T T
 0.7266818961557280 0.7519057581251413 0.3010597087214358 T T T
 0.0951629159488333 0.1801264207422635 0.2155688065064932 T T T

0.5803819205018801 0.1515098189376202 0.2162439115607918 T T T
0.1338367621678095 0.4663379018732527 0.2180042088427231 T T T
0.3309276616677057 0.3970991897935722 0.2648965054108821 T T T
0.5691039252214267 0.4167741612029841 0.2176754772757057 T T T
0.8476988159900194 0.4294880177668052 0.2168823712279515 T T T
0.0709546510014843 0.6641627513196066 0.2648106823115297 T T T
0.5347536689605062 0.6653968396212750 0.2182364216722324 T T T
0.0845124518724208 0.9005756406689354 0.2158049436665873 T T T
0.3337983681394277 0.8662012292917213 0.2178181831633448 T T T
0.5951713722187602 0.9301993543212780 0.2642720152623594 T T T
0.8178668106381417 0.9149142804824808 0.2157466213487133 T T T

SYSTEM: PBE Methanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.9596012860582199 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4798006430291100 9.4912931290702147 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

C O H Ni Pt

1 1 4 20 60

Selective dynamics

Direct

0.4074189874893719 0.4862885528519669 0.4149246429040048 T T T
0.5214207886743054 0.5034951571564861 0.3857918010337400 T T T
0.3185761046875371 0.3806737571845105 0.4081117097793268 T T T
0.6006857827921976 0.5994547001917923 0.3887870501799497 T T T
0.3759890768323473 0.5650533388216061 0.4074283345032228 T T T
0.4399624611921027 0.4938097959798142 0.4506453191718620 T T T
0.3315775056167354 0.1667808781856905 0.2265688358744740 T T T
0.8318829421925713 0.1678031680092360 0.2264119081117784 T T T
0.3321309215162103 0.6676199671128273 0.2266977842201854 T T T
0.8327889749004314 0.6683035007207039 0.2265248339466623 T T T
0.0824990152518197 0.9170887494064388 0.2258585664771360 T T T
0.5828229005352270 0.9169039067134008 0.2256565045004706 T T T
0.0828658197116070 0.4168839986364290 0.2256458245702575 T T T
0.5827509808615403 0.4171235653136094 0.2264549814913508 T T T
0.1682376184571837 0.3341976839394576 0.1531202046132805 T T T
0.6666159783328709 0.3329864656272363 0.1527577516161074 T T T
0.1666032537577635 0.8330531891042341 0.1528545851721432 T T T
0.6658949760022139 0.8318749605274789 0.1529977505535598 T T T
0.9996709087299038 0.0001688677280924 0.0764740392107726 T T T
0.4995955905185951 0.0000368814519192 0.0764659538303860 T T T
0.9997737098618842 0.5002915211152441 0.0764603315132604 T T T
0.4995896342159369 0.5001586234949968 0.0767391622023581 T T T
0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.4980229421728666 0.0021619486470570 0.3027235982681304 T T T
0.9976873423580344 0.0018768723396860 0.3026380594870659 T T T

0.9974733725605631 0.5017588531269581 0.3027456064553604 T T T
 0.2459309396235767 0.0029272487534726 0.3010496581986004 T T T
 0.7462722730953928 0.0036647859713455 0.3008705959434579 T T T
 0.9959484487934844 0.2534052264342606 0.3008821785995366 T T T
 0.2460279564690424 0.2501635026583102 0.3027643471258585 T T T
 0.4958934234365131 0.2524675847347879 0.3005295296122554 T T T
 0.7475297576094704 0.2521648590496284 0.3025749784075558 T T T
 0.2444812629137800 0.5035042873118130 0.3009382841268646 T T T
 0.4962499185800198 0.5023921576071686 0.3045512142287947 T T T
 0.7472251410028647 0.5037964967086950 0.3005018816680050 T T T
 0.9965857509805147 0.7537261091636438 0.3010794401568901 T T T
 0.2474461408236550 0.7522384659210033 0.3028104752284335 T T T
 0.4961406393346621 0.7550366421811603 0.3010194077610180 T T T
 0.7493409664769004 0.7534310317684927 0.3028652491114912 T T T
 0.0827973710945997 0.1702504061281331 0.2251431236148989 T T T
 0.5829814863460001 0.1696573779178792 0.2251257135879072 T T T
 0.3319360522126829 0.4167835334093510 0.2265012155619743 T T T
 0.8300443883523272 0.4168115180432537 0.2251306370785784 T T T
 0.0827437622245171 0.6697857246615300 0.2254132149095867 T T T
 0.5833435040797639 0.6686698433292690 0.2263374487617043 T T T
 0.3299459031995653 0.9168942970871967 0.2253948204438245 T T T
 0.8296465004385993 0.9173495606500737 0.2250712152153582 T T T
 0.1673192753827095 0.0806708700631944 0.1532547701649065 T T T
 0.4174782209949157 0.0816153685126721 0.1512862504226575 T T T
 0.6669981279106523 0.0803304188645697 0.1530417255720593 T T T
 0.9180761459753057 0.0825140462492939 0.1511781918944806 T T T
 0.4194214981186590 0.3325191710525814 0.1535964724260097 T T T
 0.9193810743092143 0.3327891433801895 0.1530600697322413 T T T
 0.1674447810136286 0.5808838895547979 0.1533013696240388 T T T
 0.4179394577741959 0.5815905210642995 0.1520331466862643 T T T
 0.6671798570050882 0.5803401774972841 0.1535579564210181 T T T
 0.9180216933560104 0.5822419423065170 0.1513095455988491 T T T
 0.4189080594422379 0.8322442137002497 0.1532927293351278 T T T
 0.9190747251991169 0.8325895672522208 0.1531972204887779 T T T
 0.2495025514039781 0.9997317877067147 0.0774888673644725 T T T
 0.7498180058344346 0.9996227857846165 0.0775100405360547 T T T
 0.0002158009262985 0.2501460064988663 0.0774503738789747 T T T
 0.2500913303255459 0.2499656143380733 0.0765137691144560 T T T
 0.4999784702633292 0.2501983725691233 0.0775854765833586 T T T
 0.7500047909737759 0.2497087920251744 0.0763492491098887 T T T
 0.2499896089774083 0.4996631684522299 0.0777537743798007 T T T
 0.7494853824736012 0.4996307188887172 0.0776113136992223 T T T
 0.9999918578137326 0.7501591190998766 0.0774701549648285 T T T
 0.2500351068298983 0.7497410550843995 0.0764071332309797 T T T
 0.5000920979773653 0.7497989436057111 0.0777427397168182 T T T
 0.7499915929322398 0.7497341969602047 0.0764577608405617 T T T
 0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F

0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Methanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.8275453603289158 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4137726801644579 9.3769293426684222 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

C O H Ni Pt

1 1 4 20 60

Selective dynamics

Direct

0.4009958823076122 0.4958682031748387 0.4073848174880229 T T T
0.5210245843632084 0.5087612942916951 0.3817678123796185 T T T
0.3124945230930692 0.3877792753187168 0.4011320968187561 T T T
0.6005075927346467 0.6068568351871417 0.3837555397467009 T T T
0.3705232089737077 0.5735902454850337 0.3957888617954087 T T T
0.4280263943125326 0.5102657997099153 0.4437649437625624 T T T
0.3323429351575380 0.1667260741239479 0.2252631113282757 T T T
0.8326363705267106 0.1676830699379108 0.2251605205396545 T T T
0.3328797270997741 0.6676118137081933 0.2253081823339255 T T T
0.8333629588745243 0.6680653215830435 0.2252135553778805 T T T
0.0836580486370939 0.9165034320339184 0.2239911658398457 T T T
0.5841346271484095 0.9166194965182534 0.2237701341257932 T T T
0.0839115775093429 0.4161564746555311 0.2237280800922010 T T T
0.5840310308895754 0.4164371131734745 0.2244328350396485 T T T
0.1680171225479796 0.3346662574296103 0.1524241204603060 T T T
0.6666222652657104 0.3336929061871018 0.1522212864690438 T T T
0.1665412433337169 0.8337438499121884 0.1522902015547436 T T T
0.6659746899947757 0.8328511905895853 0.1523105423953590 T T T
0.9997654960388208 0.0005950296156877 0.0766237065835561 T T T
0.4996065236377180 0.0004373021655127 0.0766350987998305 T T T
-0.0001987948585572 0.5007501123306456 0.0766158835263280 T T T
0.4997419447150572 0.5005330068887404 0.0768403234463632 T T T
0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.4991635015725480 0.0012278930711787 0.3009160965371416 T T T
0.9988153339095024 0.0009509357972022 0.3007670221588588 T T T
0.9985990874571321 0.5007565908565925 0.3009051518032004 T T T
0.2471578946936323 0.0020263159995427 0.2994431084042722 T T T

0.7474707911612416 0.0026052037412873 0.2993407036249042 T T T
0.9973035294878366 0.2524702653371541 0.2993369785929073 T T T
0.2474938552312738 0.2496045362474953 0.3008347234526322 T T T
0.4972050850670023 0.2515953082924599 0.2990140156265311 T T T
0.7486958889737234 0.2512722897234018 0.3007677377740260 T T T
0.2458214327019037 0.5024660099974610 0.2990808136391240 T T T
0.4976364537393650 0.5013638970556914 0.3016390442507590 T T T
0.7482662662288114 0.5026723312328895 0.2989013531481381 T T T
0.9977843437088468 0.7526795895899587 0.2994531414512268 T T T
0.2486219458379236 0.7513348532631104 0.3009450243443878 T T T
0.4974724835972207 0.7539193769484042 0.2993310284849859 T T T
0.7502956103614999 0.7523988051793991 0.3008644295846387 T T T
0.0832912602101066 0.1700018927836975 0.2237466329895741 T T T
0.5836090327759718 0.1692545639840523 0.2238005263417610 T T T
0.3322725530154457 0.4165809324887630 0.2247706061555991 T T T
0.8309298726354877 0.4165245457582618 0.2237469287574597 T T T
0.0833776158002084 0.6694189988193793 0.2240140301152608 T T T
0.5840087292166108 0.6690707314255384 0.2245815819372101 T T T
0.3307591246347429 0.9167519548470761 0.2240173651116596 T T T
0.8303857607817033 0.9173474732537243 0.2236751966911261 T T T
0.1675188189729309 0.0812248966298965 0.1524182296197076 T T T
0.4176328247997902 0.0822035672421005 0.1507919298833515 T T T
0.6672942944273437 0.0810383338958363 0.1521985410220527 T T T
0.9180949474361112 0.0829123338295405 0.1506208373681898 T T T
0.4196357356870124 0.3329783061556982 0.1527244228228515 T T T
0.9195118730297772 0.3332137608096573 0.1521694313551543 T T T
0.1676285453278062 0.5813349082388870 0.1524590963235903 T T T
0.4179887549940858 0.5822060680178334 0.1512821578662073 T T T
0.6674719769208910 0.5809523533112515 0.1526725022940024 T T T
0.9181213748320906 0.5827293234308963 0.1507698061289601 T T T
0.4190776163275993 0.8327438812745932 0.1524527112557572 T T T
0.9192310902788255 0.8330895504672374 0.1523777868406621 T T T
0.2497668214454233 0.0000266135511715 0.0774250141866947 T T T
0.7499183186274279 -0.0000961786564920 0.0774067193379442 T T T
0.0004617936208393 0.2504720565107373 0.0773676845151224 T T T
0.2501820661981157 0.2504571580667775 0.0765988690749024 T T T
0.5003833707638625 0.2505717066426895 0.0775493692983698 T T T
0.7500425787253738 0.2502473616630284 0.0764253457568761 T T T
0.2500734236699425 0.4999793749654053 0.0775920064466463 T T T
0.7497061507695973 0.4999412842559571 0.0775291686421427 T T T
0.0003081969617025 0.7506231944785060 0.0774305236642025 T T T
0.2499966050859932 0.7502481217518252 0.0765078470265973 T T T
0.5003391118109152 0.7502155154542368 0.0776073852535702 T T T
0.7498572908605338 0.7501441693632508 0.0765637298277089 T T T
0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F

0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Methanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

1 1 4 8 72

Selective dynamics

Direct

0.4878920529268068 0.4047413037974344 0.4111030530809800 T T T
0.5201196702005662 0.5218331852585885 0.3826680833967755 T T T
0.3775057498864806 0.3331694286921599 0.4070709578476389 T T T
0.6191553292077157 0.5867664160034465 0.3835196438037248 T T T
0.5103626599667134 0.4391866234476641 0.4462638300285857 T T T
0.5457892615286051 0.3537960545361149 0.4009981279405861 T T T
0.3323881529363590 0.1662670178551943 0.2275500836692138 T T T
0.8327158432117654 0.1674393663615501 0.2275755132450373 T T T
0.3327577300342247 0.6673757193160323 0.2277075566753519 T T T
0.8335075739371077 0.6676243163733363 0.2275012167369492 T T T
0.0826651772892641 0.9171519911272575 0.2275821361426322 T T T
0.5831385331752207 0.9175872898521841 0.2274029868308245 T T T
0.0827476874236542 0.4170572889010951 0.2275035059945173 T T T
0.5825254535225182 0.4179045809233384 0.2282617925632980 T T T
0.5000268005252395 0.0005187597990091 0.3020671369762378 T T T
0.9997439461652574 -0.0002927784323515 0.3021300805368715 T T T
0.9990143457656143 0.4996237331498507 0.3021067540590387 T T T
0.2469827536064899 0.0020404188756626 0.3001736515553642 T T T
0.7472056749695678 0.0028563032010769 0.3000487310503347 T T T
0.9965142494023121 0.2523639109183897 0.3000614961465313 T T T
0.2476360317629483 0.2472707716807352 0.3019554332879445 T T T
0.4965886632203154 0.2515644490273632 0.2996961535210487 T T T
0.7495004852477454 0.2501730386236153 0.3021994475336066 T T T
0.2447277401764408 0.5029173557596577 0.2997746870217074 T T T
0.4963463173632469 0.5006769214852151 0.3041008198222489 T T T
0.7479468050162874 0.5031817185202873 0.2997597828248688 T T T
0.9974847067946809 0.7526448317708445 0.3002302480896439 T T T
0.2492442892872823 0.7504902566265946 0.3022174851479199 T T T
0.4967256237373141 0.7547428159846138 0.2997219020795632 T T T
0.7523549515541221 0.7515535526516740 0.3018837082325343 T T T
0.0823708616381997 0.1670203744475021 0.2276922533955845 T T T
0.5833269534336325 0.1669557633253043 0.2276475857449401 T T T

0.3357656228999709 0.4173962312885239 0.2288629084618137 T T T
 0.8328336375123260 0.4166176524494682 0.2276420857075738 T T T
 0.0827689173513534 0.6670294653819620 0.2277879352415288 T T T
 0.5833786013094515 0.6660933085409773 0.2285452087029972 T T T
 0.3328224967205040 0.9169746045319883 0.2277754224109669 T T T
 0.8328901535364467 0.9179640952544682 0.2275724541663501 T T T
 0.1675422984659507 0.0828237045398755 0.1564067700933147 T T T
 0.4157038956554842 0.0841579485046823 0.1549213346898390 T T T
 0.6676852949937199 0.0824515674361690 0.1563101109998005 T T T
 0.9162601125315352 0.0849900949126775 0.1547034826417411 T T T
 0.1681951402245399 0.3357058722530596 0.1554590898444966 T T T
 0.4180557069515352 0.3326317886473617 0.1567082380374103 T T T
 0.6657252637471481 0.3343370862125932 0.1548879017448709 T T T
 0.9183188393234412 0.3328046153036188 0.1563330280503172 T T T
 0.1678596786254127 0.5828380218625673 0.1564896503758743 T T T
 0.4162798725064192 0.5842170631416126 0.1554295804220425 T T T
 0.6675391775507781 0.5824521144955233 0.1566147450136915 T T T
 0.9157502949393557 0.5842821593576376 0.1549230696528385 T T T
 0.1655057645767864 0.8343937269387832 0.1549102798511826 T T T
 0.4173381427108560 0.8323978850736160 0.1564518602132769 T T T
 0.6650159145987938 0.8331601592865016 0.1550805321332845 T T T
 0.9172892419497279 0.8328061751729255 0.1563647397036937 T T T
 0.9994033629055490 0.0008907337534228 0.0781764486319811 T T T
 0.2495333321419466 0.0007442660602955 0.0793965566015813 T T T
 0.4995003161792689 0.0009268217318869 0.0782347608364056 T T T
 0.7496829186704018 0.0008332546146290 0.0794202487184904 T T T
 0.9998444174606200 0.2509156479388129 0.0794335368685902 T T T
 0.2492942659035678 0.2509280232486155 0.0783798007062576 T T T
 0.4994423084092388 0.2505852838993472 0.0794496428544365 T T T
 0.7495791164281681 0.2509963413257229 0.0782036565612731 T T T
 0.9994209633764871 0.5009804158041942 0.0782536440832517 T T T
 0.2495818335920740 0.5007682941757701 0.0795648097128816 T T T
 0.4992597290536891 0.5007943223368622 0.0784034324636838 T T T
 0.7493847611693847 0.5006419024845392 0.0794450522398504 T T T
 0.9993927723318382 0.7506524387497995 0.0793889489690214 T T T
 0.2492684444584350 0.7509441357105575 0.0782652399116016 T T T
 0.4994117539938394 0.7506444669290083 0.0794765862359226 T T T
 0.7492297139453952 0.7509580257211634 0.0782980202358362 T T T
 0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F

0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Methanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

1 1 4 8 72

Selective dynamics

Direct

0.4902080702097146 0.4038735928342570 0.4059489890160433 T T T
0.5204105695507556 0.5254676411942900 0.3794415361481919 T T T
0.3788229155145411 0.3303345771765562 0.4015196812293330 T T T
0.6205510169630667 0.5924229366354283 0.3804254010406802 T T T
0.5130898836486640 0.4342100032043651 0.4414734487688028 T T T
0.5504461308804924 0.3557830750208619 0.3940484394493835 T T T
0.3318161951194553 0.1672425754195911 0.2255915077508919 T T T
0.8323144664769426 0.1685568066907033 0.2255891707081979 T T T
0.3323337269501660 0.6684609949168302 0.2257598568695948 T T T
0.8332608415203384 0.6688059996153158 0.2255113096150568 T T T
0.0821076154227288 0.9182226929873941 0.2256372816706684 T T T
0.5828407864649415 0.9186911408784758 0.2254141479979828 T T T
0.0821334297248801 0.4180123160169482 0.2255381588876062 T T T
0.5822883403500864 0.4188536199842897 0.2262011300331903 T T T
0.4990251100265870 0.0018095580126059 0.3001218947428281 T T T
-0.0011940290804155 0.0013680832307509 0.3002217336020938 T T T
-0.0015856323685500 0.5012145667398588 0.3001398121609615 T T T
0.2464315835103171 0.0034442908210342 0.2983570895431170 T T T
0.7466629125623409 0.0040482712889948 0.2981287788409976 T T T
0.9960741164535318 0.2536240604943523 0.2981814765631917 T T T
0.2473656873467451 0.2493235550787521 0.3001670178988229 T T T
0.4962616087521067 0.2529992972095629 0.2978236213230718 T T T
0.7486709974824223 0.2515725210547897 0.3002046069640482 T T T
0.2444530543492257 0.5038529379793807 0.2979461769393003 T T T
0.4957421978037043 0.5025776169292637 0.3016972789624088 T T T
0.7471765965435028 0.5042395104759489 0.2979010604563071 T T T
0.9968332012417818 0.7537680582291064 0.2984046587081663 T T T
0.2485936510711146 0.7516658963599097 0.3002448814769515 T T T
0.4964766507390281 0.7557930981359854 0.2977918660283353 T T T
0.7512960242745258 0.7528173279914613 0.2999312900147836 T T T
0.0820743753427579 0.1682133767877367 0.2260248282390926 T T T
0.5828513565692430 0.1680045399550575 0.2259223160444116 T T T
0.3351565644475808 0.4183119313294150 0.2270768744331278 T T T
0.8323977981299300 0.4177537627633418 0.2259415225348121 T T T

0.0821883406987679 0.6682941375379112 0.2261168357831938 T T T
0.5832259582463990 0.6673389494511072 0.2266671483129968 T T T
0.3322176709995943 0.9182338895514980 0.2261035709482137 T T T
0.8325446309324984 0.9190860578083591 0.2258468185128308 T T T
0.1672884394945307 0.0838156387913627 0.1553769204570064 T T T
0.4155366903101773 0.0850431714102146 0.1539617039966873 T T T
0.6674378094532721 0.0833413623602663 0.1552796722997062 T T T
0.9159947731622214 0.0858475818173138 0.1538007653201057 T T T
0.1678548782107794 0.3366984517875728 0.1545219737384996 T T T
0.4176671583981096 0.3335448747694309 0.1555985291600505 T T T
0.6654633507727878 0.3352762614155599 0.1539131525804430 T T T
0.9179133189527006 0.3337359751738731 0.1552867718560535 T T T
0.1676192227831814 0.5838380276821792 0.1555035921064324 T T T
0.4159610787639812 0.5851088600307770 0.1544473607483977 T T T
0.6673507436813594 0.5833812912708842 0.1555020003789512 T T T
0.9156255324230729 0.5851603313585746 0.1539665334071336 T T T
0.1653275908768718 0.8353281259704494 0.1539810441707488 T T T
0.4170586827254190 0.8333496759914032 0.1554619869750989 T T T
0.6648101495366608 0.8339195513831921 0.1540849487474742 T T T
0.9171011405425843 0.8337615812197189 0.1552974871496277 T T T
0.9994345283687212 0.0014334747282155 0.0780708427205701 T T T
0.2494951958201729 0.0011489381786073 0.0791810255238502 T T T
0.4994220067477762 0.0013687000054471 0.0781605074509838 T T T
0.7496745406342380 0.0013386100543385 0.0792224133019701 T T T
-0.0003734894656528 0.2512651180982876 0.0792669930233988 T T T
0.2492199671926577 0.2514346982468169 0.0782595278364355 T T T
0.4994250240093952 0.2510892481756978 0.0792110644711882 T T T
0.7494640618733722 0.2514098995276626 0.0781055906843542 T T T
0.9993988971389833 0.5013264580631082 0.0781592683387903 T T T
0.2495307330947072 0.5012006577025293 0.0793482105114719 T T T
0.4993156982855481 0.5013927464069774 0.0782537668702405 T T T
0.7495027149816588 0.5011205507941562 0.0792139422273833 T T T
-0.0005133709232051 0.7510988290583337 0.0791863478426052 T T T
0.2493738315325335 0.7513077253913208 0.0781910336585571 T T T
0.4994116873233985 0.7511351683617070 0.0792728142806537 T T T
0.7493940217792346 0.7514557178637699 0.0781322479016541 T T T
0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F

0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Methanol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

1 1 4 80

Selective dynamics

Direct

0.3835924249381154 0.4398502606969615 0.4134722268272790 T T T
0.5081862070308137 0.4935121067517902 0.3867969776542188 T T T
0.3440942382387103 0.5105964936037095 0.4085859138568780 T T T
0.5440973198061175 0.4300536963500035 0.3886378857502772 T T T
0.4099765319091299 0.4387277313619299 0.4490129051882368 T T T
0.3059997400727494 0.3361480901157805 0.4022220251358333 T T T
0.9960208814674010 0.0000699091831386 0.3072784044914983 T T T
0.2458414760510912 0.9992800265482447 0.3076752428363283 T T T
0.4963950865097965 0.0003927283158447 0.3073688655120102 T T T
0.7462760028019007 0.0004090765953973 0.3072131044598560 T T T
0.9958820744092730 0.2499414842034661 0.3071412207139533 T T T
0.2436133864007426 0.2471054807471815 0.3072291057545536 T T T
0.4958622259175033 0.2476959032853438 0.3074759276555167 T T T
0.7462172588616419 0.2499362354140803 0.3072424548010693 T T T
0.9957720151505374 0.4997628019778588 0.3072680302656284 T T T
0.2436402166661899 0.5004827579060133 0.3071469524446643 T T T
0.4954286968031685 0.5006811568164473 0.3097462920831633 T T T
0.7482772008271130 0.5001467081779115 0.3072522198152888 T T T
0.9967665105658200 0.7502564063238786 0.3075788444485245 T T T
0.2456708633865873 0.7505194853926418 0.3075923467809064 T T T
0.4958046833719202 0.7525274123001928 0.3073396064389274 T T T
0.7487328306055006 0.7524204455789973 0.3072560475641981 T T T
0.0804892690184306 0.1666533143450036 0.2292140066564911 T T T
0.3303652406471080 0.1659337186167206 0.2298077319349513 T T T
0.5808228090797731 0.1665500806792665 0.2292939275252662 T T T
0.8304912550626765 0.1664818719927540 0.2294593903177322 T T T
0.0804687511414487 0.4162584779699075 0.2292204698760984 T T T
0.3315568834865764 0.4167939063211491 0.2311459216674558 T T T
0.5803256605666576 0.4163437671803055 0.2308861185124028 T T T
0.8304518365998595 0.4161744639118802 0.2292248390787378 T T T
0.0804550337858642 0.6663641683196291 0.2295583669146337 T T T
0.3302553473267720 0.6668035359255978 0.2297409810020786 T T T
0.5798141361039473 0.6651301667980095 0.2312826202099184 T T T
0.8309247981668406 0.6665690870390192 0.2297976869933455 T T T
0.0804772180998400 0.9166150765484039 0.2295904725419453 T T T
0.3306807603477382 0.9166328261446774 0.2296120347884636 T T T

0.5807177535683797 0.9165127135752278 0.2293632047386629 T T T
0.8303046135864437 0.9164190711483566 0.2293109314582327 T T T
0.1648971682074571 0.0830146733808992 0.1535154841261371 T T T
0.4148013788646707 0.0830674209525539 0.1535820253772900 T T T
0.6649560640564318 0.0827919451988897 0.1534268697751654 T T T
0.9147186945244550 0.0829026390272288 0.1534401851792829 T T T
0.1667216231427103 0.3339074541464396 0.1536311175261219 T T T
0.4150476080406884 0.3332539911448542 0.1542849295642282 T T T
0.6642435207772445 0.3336056650105740 0.1535391542600185 T T T
0.9149811711829302 0.3329109313266277 0.1533922562512281 T T T
0.1649641708598493 0.5832460145284565 0.1535492910805449 T T T
0.4150325446665667 0.5828156713396286 0.1543769394303638 T T T
0.6644347110461035 0.5827692921324584 0.1543104810259703 T T T
0.9147708691375991 0.5832056443010115 0.1535661049627393 T T T
0.1648215960800976 0.8331618769738608 0.1535803817264736 T T T
0.4147366072758454 0.8329991663095976 0.1535898112805296 T T T
0.6637885476577833 0.8309867005569153 0.1537791004679968 T T T
0.9148275544733885 0.8329828362409155 0.1535600157121683 T T T
0.9991256124179706 0.9997870556495643 0.0775531571555901 T T T
0.2492167312241537 0.9998190232823350 0.0776056308041646 T T T
0.4992556495934455 0.9997893367556937 0.0776043936978412 T T T
0.7491730455844778 0.9997744964140530 0.0775857432350323 T T T
0.9990939081251284 0.2497167399917658 0.0775740710935254 T T T
0.2493944885662952 0.2499405125312992 0.0776892049944283 T T T
0.4992100658955130 0.2498850453476299 0.0776845093500187 T T T
0.7492539434443246 0.2496961578790736 0.0775672263152522 T T T
0.9991560729441082 0.4997440006941183 0.0776017841407759 T T T
0.2493054400392866 0.4998211174546063 0.0777028588318369 T T T
0.4991026515279232 0.4997383155864307 0.0780173090199716 T T T
0.7490299966613345 0.4997957679856462 0.0776868486144560 T T T
0.9991178692648652 0.7497874537451754 0.0775921532505251 T T T
0.2491883380647735 0.7498168847936767 0.0776130181871401 T T T
0.4991578703813241 0.7496574349477882 0.0777268467554728 T T T
0.7489275363417052 0.7496083958811322 0.0777334240794987 T T T
0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Methanol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

1 1 4 80

Selective dynamics

Direct

0.3890294881589756 0.4447527022828764 0.4104390844590565 T T T

0.5156080403247076 0.4979989381910483 0.3840159229140683 T T T

0.3495239457266670 0.5165403159965340 0.4049397500737418 T T T

0.5514200790899533 0.4333266211575675 0.3860306075048032 T T T

0.4150474732343613 0.4444627384074829 0.4461051597986320 T T T

0.3104045751769892 0.3395672412892687 0.3993058976659756 T T T

-0.0003393023242454 0.0006300442306237 0.3058763198253368 T T T

0.2494892899948936 0.0000642870099731 0.3062432523857339 T T T

0.4998947436166146 0.0007603484511969 0.3059224109496435 T T T

0.7498716974646895 0.0008055055401610 0.3057864736679198 T T T

-0.0004443994637453 0.2503914592969092 0.3058259277601675 T T T

0.2478269804541608 0.2482323225268077 0.3057672325678234 T T T

0.4996344404490483 0.2485783244854361 0.3059620812936240 T T T

0.7498714106287180 0.2503334169641075 0.3057931731474606 T T T

-0.0004813512393694 0.5002514690551960 0.3058722264489563 T T T

0.2476788445547159 0.5006553029516152 0.3057984621458696 T T T

0.4995154265782578 0.5012627810028080 0.3072110329910323 T T T

0.7516663357579703 0.5004503886861420 0.3056839838235483 T T T

0.0002976936387521 0.7507842608363382 0.3061552079781971 T T T

0.2494677207716562 0.7507781836470894 0.3062388012678572 T T T

0.4995191761419784 0.7524016372944129 0.3058830512360926 T T T

0.7518639165043289 0.7523832689335647 0.3057146860820875 T T T

0.0832007291323772 0.1667528050883342 0.2279856891015634 T T T

0.3332836069255724 0.1665861415546824 0.2284644574340526 T T T

0.5834643536202432 0.1667394602468218 0.2279606515694608 T T T

0.8332402851934595 0.1667833680791661 0.2281883792217546 T T T

0.0831034735610081 0.4165580224762240 0.2280010011765586 T T T

0.3338875445508862 0.4170168658936436 0.2293894722663309 T T T

0.5832715292265195 0.4166608402423325 0.2290381995296239 T T T

0.8333214925389382 0.4165329189673766 0.2278763030867160 T T T

0.0832890730912535 0.6666711592446075 0.2283553594729550 T T T

0.3331633759667075 0.6668778190891624 0.2284550987607124 T T T

0.5829856694473476 0.6661474525647080 0.2293473308739522 T T T

0.8334753267127885 0.6667425093612495 0.2283951529493108 T T T

0.0833195845088831 0.9168185706073235 0.2283266691609511 T T T

0.3333294262224333 0.9167500657863056 0.2283857973780294 T T T

0.5833950010172095 0.9169032303080118 0.2280667303636327 T T T

0.8332873575024302 0.9168379185917711 0.2279925539065275 T T T

0.1667099907190869 0.0832494491716913 0.1528533973144136 T T T
 0.4165745993275000 0.0832330204569412 0.1528783719303551 T T T
 0.6667263388219050 0.0831470409052948 0.1527505054341233 T T T
 0.9166541049558854 0.0832886108592732 0.1527894545200731 T T T
 0.1680466519508639 0.3340122329569826 0.1529735052155815 T T T
 0.4166859230508345 0.3333579214918135 0.1534166307564639 T T T
 0.6662455585778921 0.3336845434914716 0.1527823028450274 T T T
 0.9168062415641367 0.3332046692752704 0.1527378178169145 T T T
 0.1667118725196463 0.5834717725433103 0.1528852486784560 T T T
 0.4167045447675052 0.5832893843016091 0.1534716471225492 T T T
 0.6665600985139181 0.5832515445886659 0.1533940119115492 T T T
 0.9167252044119100 0.5834097455080766 0.1528425949212205 T T T
 0.1667016658010505 0.8333358432682719 0.1528968795258823 T T T
 0.4165418983168614 0.8332929713050958 0.1528970286037147 T T T
 0.6659878311740164 0.8319846861066483 0.1529658834063820 T T T
 0.9167670409173160 0.8333213096678825 0.1528392208066262 T T T
 0.0000064518841037 -0.0000239277623030 0.0775079516302317 T T T
 0.2500407727863939 0.0000177448923287 0.0775033928431423 T T T
 0.5000270935368379 -0.0000277307847741 0.0775017941205051 T T T
 0.7501317839937512 0.0001113566960667 0.0774857294471136 T T T
 -0.0001403259533905 0.2498431265172381 0.0774861643937868 T T T
 0.2500615574584497 0.2501022378349526 0.0776221511466221 T T T
 0.5000124355455908 0.2500181788107415 0.0775755054362167 T T T
 0.7501241923862243 0.2498215844293373 0.0774769962236591 T T T
 -0.0000050135560604 0.4999162055911083 0.0775029637633983 T T T
 0.2500382808326074 0.4999470623615762 0.0776295578036863 T T T
 0.4999824652304259 0.4999480376660220 0.0778683277572519 T T T
 0.7499169243192656 0.4999339916576558 0.0775802214629005 T T T
 -0.0000251418535312 0.7499805006799938 0.0775077773443273 T T T
 0.2499933314116342 0.7499106713626825 0.0775158979513099 T T T
 0.5000239970458281 0.7499066340533376 0.0776147017318237 T T T
 0.7498757603566161 0.7498930531476329 0.0776194549305801 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Ethanol on Ni(111) surface
 1.0000000000000000
 9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni

2 1 6 80

Selective dynamics

Direct

0.3033996462563393 0.3043744732842278 0.4083792765521380 T T T
 0.4768890001992132 0.3994527982760779 0.4013738020121528 T T T
 0.5106471994925947 0.5234100583389828 0.3673582019818673 T T T
 0.6207597332512852 0.6019842812971414 0.3694314581843666 T T T
 0.2757060124133278 0.2105329307689253 0.4339390189586937 T T T
 0.2560333920185858 0.3762387759791505 0.4215214404128270 T T T
 0.2444211277000881 0.2499233961327104 0.3747115930835144 T T T
 0.5362544918267351 0.4549220060001126 0.4347820802066603 T T T
 0.5246112476941095 0.3277692501229983 0.3878547544668624 T T T
 0.9985445786947923 0.9993589317027836 0.2858764058812517 T T T
 0.2485672839441486 0.9989389094429449 0.2858866729448964 T T T
 0.4990144082383829 0.9996897361245047 0.2859498062856399 T T T
 0.7489993409976086 0.9995903884742722 0.2857715907906194 T T T
 0.9984513641119751 0.2495020655121288 0.2857365449524773 T T T
 0.2469391929042597 0.2472026168538344 0.2855984369293406 T T T
 0.4986154787718911 0.2475411966727396 0.2855599640639433 T T T
 0.7488736347040067 0.2496697704751128 0.2858096628731259 T T T
 0.9985603234093908 0.4996320870565283 0.2859535523904062 T T T
 0.2468830743968410 0.5000242356842265 0.2856040741230682 T T T
 0.4976693152268498 0.4986399108868991 0.2917466342773296 T T T
 0.7508012469257168 0.5003248800305420 0.2856230728214644 T T T
 0.9990349485439139 0.7497099018448198 0.2859943385894017 T T T
 0.2485457839749704 0.7499470024583511 0.2858926059462156 T T T
 0.4986238223853705 0.7513943912464858 0.2856166270826451 T T T
 0.7513598585727600 0.7514989237497585 0.2852428663687667 T T T
 0.0825670815813720 0.1666694760903821 0.2148205835351279 T T T
 0.3322693168399929 0.1661893091958400 0.2148623372487681 T T T
 0.5825554125014816 0.1666664135144485 0.2147999589035622 T T T
 0.8323095150643790 0.1663962703301544 0.2148175001243665 T T T
 0.0825687242778417 0.4163591830091984 0.2148658936265706 T T T
 0.3340913137539259 0.4172813648154213 0.2162265958164213 T T T
 0.5814178848968472 0.4173475333834814 0.2162314263165845 T T T
 0.8320375764408995 0.4162947452847213 0.2147972971629364 T T T
 0.0823299287527337 0.6662973208745483 0.2149540076860285 T T T
 0.3323885864418082 0.6665371135056027 0.2149051187390179 T T T
 0.5815669256202762 0.6647280853418155 0.2161047455149258 T T T
 0.8326157862820619 0.6664507696746516 0.2147550042529610 T T T
 0.0823284428003921 0.9164544348453946 0.2149360968034195 T T T
 0.3326705421646726 0.9165275667150496 0.2149372629782944 T T T
 0.5825548428457028 0.9161835133666375 0.2148262049367141 T T T

0.8322485040245303 0.9165302639740471 0.2145939887129636 T T T
 0.1661473778445628 0.0832753388572977 0.1428817034937261 T T T
 0.4160465528174861 0.0832470880558628 0.1429084961175829 T T T
 0.6659513422106244 0.0831228081342035 0.1429618129960029 T T T
 0.9162303058999730 0.0833165051950271 0.1428800232739716 T T T
 0.1665178001005801 0.3334404639809251 0.1430564104050796 T T T
 0.4162452609990391 0.3335413517781002 0.1433508728989666 T T T
 0.6657920715482041 0.3334179554954949 0.1430870707580194 T T T
 0.9162409529676641 0.3333662803370057 0.1429510490956048 T T T
 0.1661649532651764 0.5832176985389756 0.1428972121188379 T T T
 0.4161668169067417 0.5829728718898736 0.1433309948701165 T T T
 0.6657205256416139 0.5829815604281163 0.1433100906644111 T T T
 0.9160918487790497 0.5831805630426392 0.1428675476530737 T T T
 0.1660528382627884 0.8331916481954390 0.1429319217559943 T T T
 0.4160391509135359 0.8330722988434690 0.1429090120365504 T T T
 0.6657838220578683 0.8326944021934077 0.1430318714709459 T T T
 0.9160838749727079 0.8331535910082981 0.1428479714062704 T T T
 0.9996766417239615 0.9999287866181368 0.0708806274801063 T T T
 0.2497434857851456 0.9999722043814016 0.0709183973150681 T T T
 0.4997252803066273 0.9999336707840237 0.0709055899553338 T T T
 0.7495334097994546 0.9996583537607061 0.0710041428919918 T T T
 0.9998544853057985 0.2500422516008595 0.0709894967857720 T T T
 0.2499168598381969 0.2500766575856571 0.0710164786610309 T T T
 0.4996012275713467 0.2500280993650967 0.0710260950064043 T T T
 0.7495495536659579 0.2500473842946519 0.0710212592318266 T T T
 0.9996878640469806 0.4999098646206214 0.0708837093336146 T T T
 0.2499015677947206 0.5000044150991227 0.0710060808363457 T T T
 0.4996971683756357 0.4999053225872950 0.0711098079061542 T T T
 0.7495620995944252 0.4999632587029760 0.0710168733462358 T T T
 0.9996290788581658 0.7498782439280017 0.0709006131516762 T T T
 0.2497286540966086 0.7499247087005667 0.0709138404277022 T T T
 0.4995771256325540 0.7496791684904409 0.0710189971967768 T T T
 0.7495522502160408 0.7496969962706235 0.0710024319323084 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Ethanol on Ni(111) surface
1.000000000000000
9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092
C O H Ni
2 1 6 80
Selective dynamics
Direct
0.3082051547265122 0.3056582443837905 0.4032048983338324 T T T
0.4836843026647601 0.3968989215441023 0.3960351379077759 T T T
0.5204941593312399 0.5291709935235952 0.3646549349731860 T T T
0.6339631820566746 0.6028473591658488 0.3652063091500747 T T T
0.2766799812707983 0.2087614141182847 0.4282851052912504 T T T
0.2650571843166453 0.3819307436830719 0.4167521415791609 T T T
0.2471960249994893 0.2535558631649880 0.3693538435440373 T T T
0.5463125225150308 0.4452262704761461 0.4297277681644439 T T T
0.5268385572017165 0.3234695646763714 0.3796516687522016 T T T
-0.0002951180670893 0.0006043770345248 0.2850670564752620 T T T
0.2496330525831960 0.0002605808594542 0.2850969611596287 T T T
0.4999329375206321 0.0008138286252897 0.2851143853395144 T T T
0.7500587843884716 0.0007577985759555 0.2849023742365509 T T T
-0.0004543196997624 0.2505590413235571 0.2849461702073632 T T T
0.2481508274813837 0.2487137269171645 0.2844912478767129 T T T
0.4995951344882369 0.2488855427865699 0.2845510915776869 T T T
0.7496611372401721 0.2507967522707822 0.2849852381959767 T T T
-0.0005115193013431 0.5005137511893740 0.2851412135869280 T T T
0.2479622469269848 0.5009890830818314 0.2846778453818056 T T T
0.4989309737939844 0.5005736161771193 0.2899487514834332 T T T
0.7517610469970980 0.5013686673236135 0.2845804139921964 T T T
-0.0000476970965658 0.7507188738488657 0.2851551314205719 T T T
0.2494378726761751 0.7508730895403884 0.2850569222227229 T T T
0.4996425174996811 0.7525232093716491 0.2846082207918284 T T T
0.7527226821973179 0.7530744913009128 0.2839888327572186 T T T
0.0832618332017046 0.1675112030259066 0.2136857379655746 T T T
0.3330194506588501 0.1670808376501236 0.2137464869340980 T T T
0.5832547851527193 0.1674550042972336 0.2136668803409227 T T T
0.8331524703689148 0.1673288466744077 0.2137762075823959 T T T
0.0832865658155516 0.4171939818710206 0.2137693185929243 T T T
0.3346854386434776 0.4181313266096909 0.2149291532153459 T T T
0.5823030646175371 0.4180190626946032 0.2149017949745010 T T T
0.8328192098915702 0.4170906725208233 0.2136426488224419 T T T
0.0830212698739278 0.6670957987941617 0.2138708307066123 T T T
0.3331494311128625 0.6674137514731825 0.2138034122033246 T T T
0.5826416516670517 0.6661973195027177 0.2146915796621150 T T T
0.8333415877251177 0.6672539131019150 0.2135923442274628 T T T
0.0830189788886968 0.9172659122752490 0.2138407686279681 T T T
0.3332926883700786 0.9173354136309462 0.2138604928315055 T T T

0.5833049508876835 0.9171886244364498 0.2136864167738903 T T T
0.8331606482961355 0.9176680544259258 0.2133952509902072 T T T
0.1665279943596977 0.0837096563593287 0.1424109948832313 T T T
0.4164607022850547 0.0837115045664450 0.1424501617522251 T T T
0.6664630230590690 0.0836375294796612 0.1424814523665950 T T T
0.9167456736376037 0.0839203383284385 0.1423702322099286 T T T
0.1669060420991877 0.3339381095659649 0.1425733118749600 T T T
0.4165897649206486 0.3340378459194011 0.1428328371605131 T T T
0.6663120270645545 0.3338910438354266 0.1425873735522114 T T T
0.9166422203861552 0.3338317140950330 0.1424561017855305 T T T
0.1665152313689517 0.5836952489108800 0.1424473143684939 T T T
0.4165674203399011 0.5835518456854287 0.1427909884370354 T T T
0.6661399390713216 0.5834807009585040 0.1427549471323080 T T T
0.9165682015505864 0.5836032332920289 0.1423811919770774 T T T
0.1664630753839641 0.8337132532669426 0.1425228022856437 T T T
0.4164594575256531 0.8336315790513521 0.1424557468603708 T T T
0.6662762604879475 0.8334077675093859 0.1424918556753200 T T T
0.9165636496161388 0.8337139512767163 0.1423445550956054 T T T
-0.0000851870808113 0.0001991132823331 0.0711240437417184 T T T
0.2499109607184868 0.0001497501212783 0.0711864924962715 T T T
0.4999489564737138 0.0001864428685137 0.0711466508656350 T T T
0.7497565726487916 -0.0000408343553887 0.0712344685319851 T T T
0.0001321174062537 0.2503448109842208 0.0712136611857051 T T T
0.2501104810630018 0.2503235419925114 0.0712511965779513 T T T
0.4998865498258926 0.2503127255677405 0.0712684578788114 T T T
0.7497583295333028 0.2502638093064862 0.0712591034577932 T T T
-0.0001518222090565 0.5000738135815418 0.0711217428262564 T T T
0.2500710604900240 0.5002149730488128 0.0712346665505872 T T T
0.4999048522366134 0.5001479705460093 0.0713213126190122 T T T
0.7498027870153470 0.5001773784065516 0.0712484696689605 T T T
-0.0000580459374515 0.7501947835114015 0.0711605469819262 T T T
0.2498873506299948 0.7501543605608377 0.0711818294572134 T T T
0.4998203728759658 0.7499598405861508 0.0712425965700848 T T T
0.7497720200113617 0.7499839409426181 0.0712313725489055 T T T
0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Ethanol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1885857567195970

C O H Ni Pt

2 1 6 56 24

Selective dynamics

Direct

0.2674857493263312 0.3428866392612394 0.4644045811469418 T T T

0.3548120611671208 0.2653158746169306 0.4463992001505435 T T T

0.2678982491707494 0.1630254579255717 0.4069425478811309 T T T

0.3057374213253327 0.0902928503168179 0.4003366400302984 T T T

0.3311954135253609 0.4206828668917768 0.4940324989435667 T T T

0.2562278616105410 0.4139317936970337 0.4363784305310827 T T T

0.1508061321101634 0.2569601172403835 0.4766361413305929 T T T

0.4721097329577329 0.3507971815922927 0.4340268639339939 T T T

0.3648344579740243 0.1923778310669787 0.4739406405227475 T T T

0.2654839449578174 0.2432927154656176 0.3417984699124006 T T T

0.4947449241291694 0.2560896135124622 0.2996235771316442 T T T

0.2607303799028438 0.5012378870950821 0.3473885763732557 T T T

0.5112082124825829 0.5046430980750866 0.3348445784950067 T T T

0.3347162240818237 0.1580718092219291 0.2214002105563201 T T T

0.8440934905573093 0.1774098052923562 0.2183446615996944 T T T

0.3395282099738964 0.6652894121342879 0.2768012871437446 T T T

0.8245440073539436 0.6678225585702182 0.2199745813599578 T T T

0.1694504935591430 0.0836479253931067 0.1424018473574704 T T T

0.4169379133426174 0.0803344323825251 0.1437978126854079 T T T

0.6700950827253839 0.0830684981034829 0.1429336485009505 T T T

0.9174249738190331 0.0855417685980127 0.1421512621295662 T T T

0.1703309522371751 0.3384956978385479 0.1414931763124504 T T T

0.4139501972060382 0.3311122047513559 0.1438599259090932 T T T

0.6679031770095242 0.3345785030502990 0.1432132172923028 T T T

0.9221583134229596 0.3380995988292917 0.1434400417600389 T T T

0.1701246046720661 0.5892800868666775 0.1409592666147491 T T T

0.4122496541198932 0.5811827494527229 0.1416801849150088 T T T

0.6638400387156003 0.5842311452503144 0.1441306049369116 T T T

0.9190866123461827 0.5881369185474642 0.1429484838143262 T T T

0.1703635856620826 0.8315807752083080 0.1415115773396539 T T T

0.4205299666875603 0.8316863202195839 0.1406324944384896 T T T

0.6630365910363704 0.8316909431491141 0.1418134522887946 T T T

0.9159517554142718 0.8317033544972069 0.1425935015530294 T T T

0.0009999395563310 0.0002329461180070 0.0706109112202692 T T T

0.2517859703758652 0.0012593584386821 0.0709395635230756 T T T

0.5014909464977603 0.0010712078604457 0.0708445188662839 T T T

0.7506571106678742 0.0000779835986594 0.0710592212885755 T T T

0.0000518801085595 0.2502762122102739 0.0710336901820884 T T T

0.2511203486554127 0.2503952837853491 0.0710755011624893 T T T
 0.5008445104140054 0.2506507827126537 0.0719711289698525 T T T
 0.7506229772914297 0.2503816528993858 0.0716409128826432 T T T
 0.0002531850646059 0.5003510697538575 0.0708417262830244 T T T
 0.2504854591336454 0.5003715127010389 0.0697955766139653 T T T
 0.5010074029195324 0.4998046027701313 0.0713054923185258 T T T
 0.7508308829941298 0.5005297408888912 0.0718224140399533 T T T
 0.0011515653769518 0.7506696323525379 0.0709974909348661 T T T
 0.2514497299677994 0.7507815864980927 0.0695784437829516 T T T
 0.5009634382025838 0.7492860720228040 0.0699072730143318 T T T
 0.7509444637358478 0.7494199857502335 0.0709760083683922 T T T
 0.0860405064960048 0.1690155026670723 0.0000000000000000 F F F
 0.3380976769348365 0.1681035213843813 0.0000000000000000 F F F
 0.5810429149583669 0.1686149941624606 0.0000000000000000 F F F
 0.8325938808599176 0.1692887796830576 0.0000000000000000 F F F
 0.0826649462717981 0.4124901540435104 0.0000000000000000 F F F
 0.3374513552488096 0.4167319720122862 0.0000000000000000 F F F
 0.5889134531614886 0.4196213956686989 0.0000000000000000 F F F
 0.8317204695676210 0.4114849615819693 0.0000000000000000 F F F
 0.0803841141123343 0.6630088948289270 0.0000000000000000 F F F
 0.3343210153996807 0.6662129463739390 0.0000000000000000 F F F
 0.5882535415480774 0.6699679086798369 0.0000000000000000 F F F
 0.8312880772275406 0.6626699091967012 0.0000000000000000 F F F
 0.0841713491191953 0.9148842552199596 0.0000000000000000 F F F
 0.3317086006182279 0.9177383469686688 0.0000000000000000 F F F
 0.5850149205656550 0.9200016485302669 0.0000000000000000 F F F
 0.8324583856894989 0.9171468161841787 0.0000000000000000 F F F
 0.2640099056184715 0.9906945859069791 0.3020328001553370 T T T
 0.7851763496913275 0.0248022473857321 0.3434417954261269 T T T
 0.0396189290415632 0.2808245543301450 0.3049586177200352 T T T
 0.7555656338778071 0.2452132960246207 0.3014854763387987 T T T
 0.0151854394657626 0.0105574007488631 0.3011336822604654 T T T
 0.5101428574284441 0.0241703894272397 0.3451591657618814 T T T
 0.9910227752686505 0.4903024771013197 0.3439789211743126 T T T
 0.7519424912305550 0.5065089324752978 0.3039316619840294 T T T
 0.9886779021081253 0.7618368204698061 0.3425943009817313 T T T
 0.2504539678215614 0.7532931931417860 0.3530890700939365 T T T
 0.5110753225889375 0.7544704240302736 0.3527096078904616 T T T
 0.7361844345264387 0.7573223483065615 0.3043413000797802 T T T
 0.0964983492985159 0.1808500453980530 0.2170244533346912 T T T
 0.5831015909285537 0.1543028434301817 0.2188549239703651 T T T
 0.1350139720569040 0.4658496372762116 0.2192730054881713 T T T
 0.3317345328042250 0.3970810309190768 0.2673406978579351 T T T
 0.5720670540350412 0.4184541195694862 0.2200364792940971 T T T
 0.8506164888738842 0.4316972035010323 0.2187583879742706 T T T
 0.0760633379288067 0.6670492830285245 0.2663500236090359 T T T
 0.5403728698967061 0.6673393988605132 0.2199653809741954 T T T
 0.0873434940204226 0.9031084709422511 0.2176883440978444 T T T
 0.3371163315496289 0.8701184012210507 0.2192469674977153 T T T

0.5986642265298917 0.9320844843298191 0.2662248390457421 T T T
0.8214680528044669 0.9171561039256144 0.2175117910970647 T T T

SYSTEM: PBE+D3 Ethanol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni Pt

2 1 6 56 24

Selective dynamics

Direct

0.2732093317350404 0.3444087262063898 0.4584467318852691 T T T

0.3574879479029840 0.2614620605852345 0.4406247820701923 T T T

0.2610899182572457 0.1508860763135577 0.4036233745326433 T T T

0.3000831891848013 0.0778828281237129 0.3963529307653540 T T T

0.3409263281906124 0.4258852121253985 0.4871871262332853 T T T

0.2609868627848752 0.4142725527398053 0.4298311756411242 T T T

0.1554164531880814 0.2599682731332132 0.4715826106850029 T T T

0.4735233248427381 0.3447790483076615 0.4255783717087638 T T T

0.3728937207442790 0.1930285422159180 0.4688648912004870 T T T

0.2541790280584446 0.2283653480029355 0.3333455898660409 T T T

0.4901793616951008 0.2491836916573595 0.2973590552922901 T T T

0.2534225312318953 0.4931237258350637 0.3459947642375710 T T T

0.5024444042947490 0.4918529948144168 0.3348384159700964 T T T

0.3320474040315459 0.1552109494739001 0.2205200842551580 T T T

0.8421375604819648 0.1758102353234448 0.2170331815467736 T T T

0.3353750158197930 0.6655986109425535 0.2767333053532171 T T T

0.8222547141692135 0.6664732888177707 0.2191717939843193 T T T

0.1681870385525121 0.0823410243435442 0.1422903873273453 T T T

0.4146002252033633 0.0792332911584707 0.1430130247540367 T T T

0.6691759347385526 0.0821646531779581 0.1423362839162901 T T T

0.9165715997940859 0.0857625191587282 0.1419139163287031 T T T

0.1696952470833379 0.3386637722206688 0.1413481636395409 T T T

0.4114343571167732 0.3296080339737034 0.1433776755336644 T T T

0.6660971877638959 0.3336585677671818 0.1418027338016845 T T T

0.9204909371339905 0.3370769426265862 0.1428477767681811 T T T

0.1688868370175324 0.5891893925337753 0.1407808032828662 T T T

0.4103182877468927 0.5799151078384980 0.1409926508357787 T T T

0.6627609856193469 0.5837553526335796 0.1434092487908348 T T T

0.9176450674565169 0.5879007806779143 0.1428526704364419 T T T

0.1682228665080106 0.8298231925753429 0.1413436965542161 T T T

0.4195429080105434 0.8308805601709900 0.1409211914365990 T T T

0.6608157069769829 0.8312902951992635 0.1412610003233190 T T T

0.9133197040040015 0.8304180458239402 0.1422820930056736 T T T

-0.0003111997643232 -0.0002455873001167 0.0714284106135381 T T T

0.2503524654073557 0.0001106077433086 0.0711776113798894 T T T

0.5010552132484527 0.0006054530793283 0.0713197416859830 T T T

0.7501733714913896 -0.0002644293844763 0.0712541271028868 T T T

-0.0005516779759189 0.2505909051552536 0.0712272143754753 T T T
 0.2491408411841824 0.2493905079538811 0.0714471495696258 T T T
 0.4992053880857339 0.2490999774713416 0.0717098152488082 T T T
 0.7504576481095708 0.2507239760565783 0.0714292606380010 T T T
 -0.0008977716637181 0.5010615481356202 0.0712982660737477 T T T
 0.2487084454862366 0.5001665498904670 0.0702048513018491 T T T
 0.4988705423090636 0.4981972495819403 0.0715750301886225 T T T
 0.7492022309276393 0.5004929346658559 0.0716895200533175 T T T
 -0.0000771971414539 0.7507179032002073 0.0713959983719510 T T T
 0.2510458105493124 0.7511227699996242 0.0702106824478190 T T T
 0.4994561049831542 0.7484758782671237 0.0703407436800311 T T T
 0.7490070485955241 0.7488496211984008 0.0712196653245111 T T T
 0.0828889332909810 0.1665043433458848 0.0000000000000000 F F F
 0.3332115560992150 0.1667452158033456 0.0000000000000000 F F F
 0.5833183080606545 0.1663556957179608 0.0000000000000000 F F F
 0.8331489220442307 0.1665368424994185 0.0000000000000000 F F F
 0.0829240578404153 0.4164017259029507 0.0000000000000000 F F F
 0.3330120975278135 0.4167750205552210 0.0000000000000000 F F F
 0.5828364313531083 0.4165458535045090 0.0000000000000000 F F F
 0.8335013052239475 0.4169247120317934 0.0000000000000000 F F F
 0.0835789735299102 0.6669398212605202 0.0000000000000000 F F F
 0.3332219865009804 0.6665833402861523 0.0000000000000000 F F F
 0.5835218886102140 0.6666078395544019 0.0000000000000000 F F F
 0.8334486833724597 0.6667130819478544 0.0000000000000000 F F F
 0.0834580061735366 0.9169868434164314 0.0000000000000000 F F F
 0.3334013642711611 0.9170210941386969 0.0000000000000000 F F F
 0.5832319497643823 0.9162905071868721 0.0000000000000000 F F F
 0.8334352905462836 0.9164441305632280 0.0000000000000000 F F F
 0.2560529099024809 0.9848105891815258 0.3015564986413148 T T T
 0.7807621685084885 0.0200705154084644 0.3425565361862969 T T T
 0.0351553206643552 0.2772340480830229 0.3021622844251384 T T T
 0.7509085749990042 0.2394473355223124 0.2983513081017450 T T T
 0.0044520831595750 0.0023958876367693 0.2974788420999054 T T T
 0.5051470791638130 0.0195364411106333 0.3428703579964205 T T T
 0.9824506338502834 0.4832670082316897 0.3423704312679114 T T T
 0.7449464014617385 0.5009494552588766 0.3013256161649845 T T T
 0.9778599458992858 0.7562355076207046 0.3413940452574676 T T T
 0.2429037885225711 0.7480257600047392 0.3519320944601905 T T T
 0.5045409737252917 0.7466149634548380 0.3524769234156011 T T T
 0.7236998776735277 0.7495367397362273 0.3009809891114744 T T T
 0.0957912238491521 0.1812280933429964 0.2157489851242592 T T T
 0.5805942895853241 0.1520521315144687 0.2163473507971726 T T T
 0.1330959787806712 0.4672214231956077 0.2179480446086089 T T T
 0.3331381263482025 0.4031330194362936 0.2642752836917393 T T T
 0.5687851274497330 0.4167436769755847 0.2177441003502535 T T T
 0.8474686568101129 0.4299283307611331 0.2168696086102676 T T T
 0.0703741271879203 0.6645786339541415 0.2649773219955089 T T T
 0.5344257242854823 0.6661566786477023 0.2180698553546229 T T T
 0.0843015107866477 0.9012890305427356 0.2161605474925072 T T T

0.3334322383108099 0.8674653870755711 0.2181625974206180 T T T
0.5947539511161094 0.9304942675846748 0.2645754801245132 T T T
0.8170905474214960 0.9153658846801987 0.2157862510160540 T T T

SYSTEM: PBE Ethanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.9596012860582199 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4798006430291100 9.4912931290702147 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

C O H Ni Pt

2 1 6 20 60

Selective dynamics

Direct

0.3111849278077163 0.3639758182918822 0.4282531625176685 T T T
0.4208396571802118 0.5140584652240252 0.4170747263940735 T T T
0.5254705606684205 0.5126856873932309 0.3867276353183998 T T T
0.6075336111139100 0.6076922791320984 0.3853163785532532 T T T
0.2302720722175526 0.3634647058611645 0.4504812797080179 T T T
0.2584622481296774 0.3052584233706416 0.3971489179251662 T T T
0.3583158186072189 0.3087995842628646 0.4456212303861727 T T T
0.3733794724594718 0.5706529114836932 0.4004661382614436 T T T
0.4765934193293643 0.5724521205887707 0.4479289686214079 T T T
0.3301371370436306 0.1673414139310083 0.2265082508306413 T T T
0.8304596498877062 0.1683007527697487 0.2264338706515309 T T T
0.3307851245179229 0.6682422213684208 0.2266144070764757 T T T
0.8312470025563052 0.6687665391463220 0.2265121795328399 T T T
0.0809089212658536 0.9176817494604284 0.2258296400100097 T T T
0.5813439120228110 0.9174030173291488 0.2256658315203252 T T T
0.0815809956177608 0.4174347975305707 0.2256045737958678 T T T
0.5811875857527077 0.4176423630134347 0.2264781421492649 T T T
0.1671831238547791 0.3347189101607404 0.1530975557512547 T T T
0.6656145452931929 0.3335740307825720 0.1527328699948560 T T T
0.1654821572203368 0.8336657711744475 0.1528086200229939 T T T
0.6646316742803227 0.8323077102566993 0.1530009364850567 T T T
0.9989802553217375 0.0005955318876283 0.0764776994324287 T T T
0.4990446164312232 0.0004617586802016 0.0764538029303538 T T T
0.9990899782531789 0.5006920955309175 0.0764484291763861 T T T
0.4989699079900404 0.5005750777942091 0.0767235378442850 T T T
0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
0.4960868659860750 0.0025159735852060 0.3027037791933474 T T T
0.9955568235802386 0.0021469084861486 0.3026641560337097 T T T
0.9956161652595243 0.5021165935440515 0.3027018628806873 T T T
0.2438971225313149 0.0031857278656339 0.3009485053409063 T T T
0.7443414308567130 0.0039811948840798 0.3009182518041174 T T T
0.9940364197821289 0.2537848490333109 0.3008535680000355 T T T
0.2441515374935651 0.2505005407689324 0.3028318376466312 T T T

0.4939077809613711 0.2526929795279745 0.3005361546136238 T T T
0.7456882320842062 0.2525840111653755 0.3025700748336980 T T T
0.2426899754833350 0.5039598690201336 0.3008447055159457 T T T
0.4940815814098243 0.5023625593435924 0.3046972997138870 T T T
0.7451889206963428 0.5040590638149364 0.3004976041628786 T T T
0.9945775326720266 0.7540304027214316 0.3009899841050296 T T T
0.2455789110278952 0.7526894540548903 0.3027662505461164 T T T
0.4942789813455079 0.7552838299760426 0.3010029467419308 T T T
0.7473153044857327 0.7536803149893230 0.3029096918227543 T T T
0.0815634765945691 0.1707768342802932 0.2251700557975684 T T T
0.5815580077729214 0.1701310721139268 0.2251367495217799 T T T
0.3306221552661791 0.4173278444643116 0.2264730933915861 T T T
0.8287228430240926 0.4172602717078200 0.2250934315874037 T T T
0.0813659430883383 0.6702087119210580 0.2253611601420631 T T T
0.5818108680818258 0.6689441000592488 0.2263542524963442 T T T
0.3285780349729219 0.9173855408387190 0.2253324448219989 T T T
0.8278978079685018 0.9177022865296210 0.2250695373808202 T T T
0.1661416814946687 0.0812579456431167 0.1531831236926037 T T T
0.4164637014228817 0.0822510139004668 0.1512739921738273 T T T
0.6659737852148407 0.0810161457559925 0.1530675903917061 T T T
0.9169595039331817 0.0830510830023330 0.1512542782486210 T T T
0.4183205961566592 0.3331280366681657 0.1535522621086672 T T T
0.9183782618657296 0.3334220302046663 0.1530245177544094 T T T
0.1663082650456202 0.5814753622815277 0.1532285697984494 T T T
0.4168808266931819 0.5822164633106801 0.1519835815231116 T T T
0.6660201343709458 0.5808837191539472 0.1535228744944746 T T T
0.9168700857146659 0.5827814393799216 0.1512887672369979 T T T
0.4178385870148628 0.8328747735595355 0.1532282035247146 T T T
0.9179468408386586 0.8331916306678585 0.1531887846572521 T T T
0.2489632572541791 0.0001174716455789 0.0774629455679248 T T T
0.7491253623663051 0.9998829649087109 0.0775600314357652 T T T
0.9995948488161231 0.2504312728671490 0.0774682212504026 T T T
0.2496197410601223 0.2502836647300052 0.0764727761563295 T T T
0.4995378022770179 0.2505888332598459 0.0775926792412370 T T T
0.7495540093825975 0.2500515612103433 0.0763407182023635 T T T
0.2493579952504739 0.5000145532317314 0.0777280243159701 T T T
0.7488478256963846 0.4999863950909010 0.0775927944647033 T T T
0.9994203419805585 0.7505768339993140 0.0774905342192718 T T T
0.2495210590615185 0.7501254513283433 0.0763592134509111 T T T
0.4995100187449058 0.7501186290020102 0.0777103617956304 T T T
0.7493381487849453 0.7499850857836189 0.0764465913887508 T T T
0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F

0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Ethanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.8275453603289158 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4137726801644579 9.3769293426684222 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

C O H Ni Pt

2 1 6 20 60

Selective dynamics

Direct

0.3087189080178757 0.3701601088117959 0.4188408312533208 T T T

0.4199048797770144 0.5230637919599863 0.4092533911175900 T T T

0.5323487214003670 0.5232979175939926 0.3818647590187118 T T T

0.6124502201996341 0.6213181897169889 0.3793912741212701 T T T

0.2234662379293467 0.3664906287559043 0.4400700961030160 T T T

0.2596813068530382 0.3131936972213828 0.3868747316418345 T T T

0.3556383782597350 0.3137855028736559 0.4363334756834806 T T T

0.3743881622649303 0.5795782310763337 0.3906203929525239 T T T

0.4695101405444803 0.5820221122427234 0.4408128441396021 T T T

0.3323464405851282 0.1667246960512247 0.2252583098095949 T T T

0.8326250053524320 0.1677016509552974 0.2251516259036645 T T T

0.3328432022881672 0.6676443517403836 0.2251893005558309 T T T

0.8333367435092495 0.6680485828764192 0.2251395768575557 T T T

0.0835746784857940 0.9164731736362530 0.2239557593444084 T T T

0.5840975564036623 0.9167024277181950 0.2237208239270344 T T T

0.0838576876015190 0.4160751219861738 0.2236778039284671 T T T

0.5838849837454206 0.4164931677265969 0.2244617111974129 T T T

0.1680118346229257 0.3347053644620095 0.1524379961119373 T T T

0.6664910089528796 0.3336655429761206 0.1521990457181283 T T T

0.1663931311087689 0.8337239278454268 0.1522382255779499 T T T

0.6659610867411201 0.8329901399547081 0.1522584766073301 T T T

0.9995908113069422 0.0005931182607919 0.0766172208635665 T T T

0.4995753043277844 0.0004463255657899 0.0766122461544728 T T T

0.9996673035913837 0.5007162623660850 0.0765792696511869 T T T

0.4996319189924004 0.5004899847582150 0.0768144565898573 T T T

0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F

0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F

0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F

0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F

0.4992194468940708 0.0012082241870869 0.3008699196792661 T T T

0.9988320597802326 0.0008930639431606 0.3007755391371780 T T T

0.9986883573828258 0.5007599222900670 0.3008344572355112 T T T

0.2472226813579788 0.0019536284295020 0.2994417750178021 T T T

0.7475677914963638 0.0025916403541146 0.2993174565324668 T T T

0.9973641745733149 0.2525063494726504 0.2993261503979791 T T T

0.2475111955974081 0.2495765336024252 0.3008250820385839 T T T
0.4972818988022475 0.2515675389889721 0.2990683705337964 T T T
0.7487601957618554 0.2512378865002174 0.3007288816477393 T T T
0.2459436946037117 0.5025975425333289 0.2990089677438661 T T T
0.4976161430147514 0.5011073689720679 0.3017350916384970 T T T
0.7483075624170716 0.5026248009577322 0.2988560810447977 T T T
0.9978936246816377 0.7526343567807607 0.2994205006987976 T T T
0.2487188316624409 0.7513308064163832 0.3008900010792774 T T T
0.4975818189294664 0.7538802766821335 0.2991621037964808 T T T
0.7505639505017029 0.7524801335540646 0.3006693076259089 T T T
0.0835457111050053 0.1700533921549869 0.2237701282968391 T T T
0.5835075592386377 0.1692944142000217 0.2237837169873440 T T T
0.3324518314713009 0.4167572192764705 0.2247840208539703 T T T
0.8308423703091710 0.4165163917502483 0.2237052394158701 T T T
0.0833352916678681 0.6694338551897210 0.2239632450833250 T T T
0.5840163611811301 0.6691888330642868 0.2244526518704901 T T T
0.3307053940932849 0.9167565265306193 0.2239678266454570 T T T
0.8304281534529775 0.9175445053744912 0.2236023743197673 T T T
0.1674713831305796 0.0812003694282422 0.1523835088913363 T T T
0.4175017434850692 0.0821694104466714 0.1507536854780759 T T T
0.6672549847467798 0.0810920713548720 0.1521962622732709 T T T
0.9182717270444004 0.0831576579961836 0.1506209821432661 T T T
0.4195239936892513 0.3329646867370112 0.1527131772816855 T T T
0.9194580067961062 0.3332358372635119 0.1521504926627615 T T T
0.1675060679516811 0.5813382059984094 0.1523969623021085 T T T
0.4178756612319297 0.5822024715293868 0.1512165173751609 T T T
0.6673755178827990 0.5809050344279842 0.1526182727114222 T T T
0.9179745900221629 0.5826683512270138 0.1507268020505422 T T T
0.4190082001795455 0.8327988358919118 0.1523931274065282 T T T
0.9191523722863463 0.8331265084785421 0.1523362791554688 T T T
0.2495951898462143 -0.0000121941283183 0.0773890083035591 T T T
0.7498295884408005 -0.0001375010631343 0.0774291909366233 T T T
0.0003754315616810 0.2504610866659992 0.0773279790437759 T T T
0.2500312713902782 0.2504571741596326 0.0765955029742344 T T T
0.5002600082112240 0.2505303928099473 0.0775309981860329 T T T
0.7499282860399722 0.2502050380003371 0.0764086173833524 T T T
0.2499682529211682 0.4999318744911322 0.0775712120245958 T T T
0.7495486102710208 0.4998600545682445 0.0775037063197288 T T T
0.0001457813573872 0.7505944058308243 0.0773922798227891 T T T
0.2498783209406968 0.7502654022116537 0.0764826488293236 T T T
0.5002288022227473 0.7502172051569642 0.0775665445073162 T T T
0.7497306176650976 0.7501808741474194 0.0765439130589270 T T T
0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F

0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Ethanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

2 1 6 8 72

Selective dynamics

Direct

0.3162789964546209 0.3541315188779740 0.4239652710588996 T T T
0.4225082158984094 0.5020207429603269 0.4142403691595345 T T T
0.5254999723842094 0.5045522936735651 0.3835304520349230 T T T
0.6068358522609405 0.5966071598228114 0.3837294730018690 T T T
0.2383897436707486 0.3507920795931742 0.4471831669824048 T T T
0.2629574242865008 0.3000853047862118 0.3928941906785107 T T T
0.3634741574853049 0.2985490022272709 0.4392386505050712 T T T
0.3756335435944290 0.5583196564875598 0.3988917672791091 T T T
0.4770168762651304 0.5560415670611181 0.4451142351603610 T T T
0.3310157567200614 0.1640640763688377 0.2274822131800770 T T T
0.8312348411151418 0.1649650816468290 0.2274414555556767 T T T
0.3316398972105286 0.6654033652971089 0.2276480971924005 T T T
0.8321843343349004 0.6654747805969273 0.2275103984549543 T T T
0.0813073013684333 0.9149970206976534 0.2275081364224088 T T T
0.5818136867733598 0.9152325987579243 0.2273861750280452 T T T
0.0811270138159797 0.4146466238220498 0.2273355972923397 T T T
0.5811747954442628 0.4154478655864657 0.2281686466918925 T T T
0.4985446959267281 0.9979925111506777 0.3019873154907706 T T T
0.9980447009969160 0.9972296684093778 0.3021196179901751 T T T
0.9977492948398724 0.4974304009616070 0.3019596926929548 T T T
0.2454171437947005 0.9996462128818562 0.3001313776658759 T T T
0.7457991314171805 0.0006962392268369 0.3000267592101138 T T T
0.9950997614862878 0.2502548424074512 0.2999138345774489 T T T
0.2461594136705975 0.2448923016470000 0.3019343990402286 T T T
0.4952236781912526 0.2491706957193606 0.2996195772453584 T T T
0.7480865927583121 0.2477984542750126 0.3019784309225937 T T T
0.2434359890993147 0.5007210348650355 0.2996944181979244 T T T
0.4951486376338072 0.4979248637872619 0.3042917351244873 T T T
0.7465637357408608 0.5008657359730303 0.2996305969277903 T T T
0.9959645339742651 0.7504219678070085 0.3001859385994032 T T T
0.2479348049382603 0.7480429577566191 0.3021935262082305 T T T
0.4955029724867401 0.7523022731248429 0.2999048589231619 T T T
0.7504850334424853 0.7490331054586681 0.3021282201118172 T T T
0.0812817787936182 0.1648599849896844 0.2276646668913632 T T T

0.5817610760247326 0.1648636938939615 0.2275408947781708 T T T
0.3344446179597739 0.4151628971510754 0.2287985345764640 T T T
0.8313719429427605 0.4145597610366223 0.2275346691412486 T T T
0.0814533079931057 0.6649943093003339 0.2277796161971268 T T T
0.5819110806442855 0.6631922010386914 0.2287386136107372 T T T
0.3314039020230989 0.9148323673270389 0.2277534795756642 T T T
0.8315297734494398 0.9154617697482533 0.2276216603661154 T T T
0.1664697251712091 0.0806367377403582 0.1563869112960957 T T T
0.4145574428967780 0.0821112826749712 0.1548301896847643 T T T
0.6663828793483330 0.0800712306245378 0.1563238154213345 T T T
0.9150085993423243 0.0827174060370705 0.1547675323286846 T T T
0.1669192346654650 0.3336199118192129 0.1554314363000506 T T T
0.4169098085676694 0.3305907457489689 0.1566503465027503 T T T
0.6645150586770900 0.3321780800438716 0.1547090765204509 T T T
0.9169443591578714 0.3305472519739004 0.1563106012791852 T T T
0.1667112673923786 0.5806840001370024 0.1564842794372153 T T T
0.4151349298352005 0.5821857535360718 0.1554544488266623 T T T
0.6663594946037424 0.5801480136975927 0.1566487288842588 T T T
0.9146403712293550 0.5821211932567881 0.1548361098077186 T T T
0.1644304846805920 0.8322580930052401 0.1548803955561040 T T T
0.4162500804367001 0.8302779419641326 0.1564672471021640 T T T
0.6637581595189143 0.8306665494879608 0.1552405625010875 T T T
0.9162486551188546 0.8305025778551718 0.1564067597503392 T T T
0.9985929918006434 0.9994336371400090 0.0781991040165253 T T T
0.2486568127954166 0.9991435059140947 0.0793594933571524 T T T
0.4986984750338229 0.9993820238209907 0.0782405964491912 T T T
0.7488133506403639 0.9991277764765202 0.0795041567718194 T T T
0.9990065818102439 0.2492562668681458 0.0794678203408645 T T T
0.2484652468341975 0.2495048711864978 0.0783716505674448 T T T
0.4985780644827117 0.2491000205309893 0.0793812297786215 T T T
0.7487665006004520 0.2493490014700445 0.0781747943916268 T T T
0.9987110372859204 0.4994093379807668 0.0782297286710280 T T T
0.2488761681910405 0.4993119669230305 0.0795587283346392 T T T
0.4985316778443392 0.4995034664392556 0.0783968299292334 T T T
0.7486507421858095 0.4992057102626206 0.0793926080910134 T T T
0.9986350012681156 0.7491821082653052 0.0793833770516939 T T T
0.2486033008186153 0.7494062016943369 0.0782824578278128 T T T
0.4986728744324426 0.7491701347753205 0.0795127857189261 T T T
0.7485320057182493 0.7495169202895501 0.0783270808037326 T T T
0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F

0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Ethanol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

2 1 6 8 72

Selective dynamics

Direct

0.3125114593713766 0.3633710088394946 0.4141376346249107 T T T
0.4187167901088110 0.5148974311035177 0.4069673502789726 T T T
0.5314795013794419 0.5227131198192351 0.3793756914356151 T T T
0.6072793638902215 0.6199210868662313 0.3776731265950698 T T T
0.2264802636977176 0.3542540063880379 0.4349620123625374 T T T
0.2676922806405903 0.3119415472628123 0.3816351180485833 T T T
0.3592161409384282 0.3077047304981471 0.4305279003211162 T T T
0.3729891271367236 0.5710135244839810 0.3898065268054390 T T T
0.4652266787589736 0.5679111040071657 0.4389798154152856 T T T
0.3316602256080492 0.1671929774993822 0.2256330402861167 T T T
0.8319424391408298 0.1681736922101075 0.2256145733928551 T T T
0.3322815922805835 0.6685396487705106 0.2257071162305921 T T T
0.8328387466803087 0.6686169096862961 0.2256037372770188 T T T
0.0818287650170063 0.9182110749932539 0.2256785898658663 T T T
0.5825864176081191 0.9186038430743099 0.2254538067499773 T T T
0.0817240650557703 0.4176599455046804 0.2254562329469311 T T T
0.5819598027115185 0.4184225170495632 0.2261473140745211 T T T
0.4989081050143094 0.0013717637164583 0.3001742060071599 T T T
-0.0015133382841041 0.0008449104945017 0.3002287057436236 T T T
-0.0016041690411926 0.5009474674355817 0.3001711571011889 T T T
0.2461171957525237 0.0027614343769202 0.2984073418590156 T T T
0.7463730161763451 0.0036283301696943 0.2983079867475839 T T T
0.9959326994371392 0.2534304622544300 0.2982192979505129 T T T
0.2469705014812491 0.2486690299042326 0.3000448700275829 T T T
0.4960527552566423 0.2522800008763403 0.2979480581138927 T T T
0.7486063331731114 0.2511974950685946 0.3001835650416642 T T T
0.2444173458218334 0.5037326590280516 0.2977835396541140 T T T
0.4962389764264802 0.5010726287711851 0.3015708426082050 T T T
0.7473140123014094 0.5038335254555780 0.2978120402699844 T T T
0.9966773792747652 0.7535146398893494 0.2984108965026678 T T T
0.2485983108450037 0.7513098350360817 0.3003317116120218 T T T
0.4962684863567167 0.7551627537570386 0.2980402279718419 T T T
0.7510574779416108 0.7526440585363905 0.3000128514153270 T T T

0.0819929712811189 0.1681982136735692 0.2260214324565106 T T T
 0.5825359625557900 0.1678432551918925 0.2259612769071382 T T T
 0.3350178867625910 0.4183132159060725 0.2269979481329286 T T T
 0.8323185695495277 0.4176224849247726 0.2259353972017727 T T T
 0.0821225815101368 0.6681616430751791 0.2261474940088337 T T T
 0.5829208768913550 0.6673113643448733 0.2267631368692875 T T T
 0.3320633766309376 0.9180390906124108 0.2261388831538902 T T T
 0.8322273805617956 0.9191193133450727 0.2258969154707762 T T T
 0.1670748296152072 0.0836672910517195 0.1553878808092086 T T T
 0.4152182539367555 0.0851179898904361 0.1540031904497182 T T T
 0.6671391381370273 0.0833800085118355 0.1552862151742176 T T T
 0.9159360568876381 0.0859238032245653 0.1538516113704324 T T T
 0.1676678778400440 0.3366940621155534 0.1544641019072617 T T T
 0.4174861234826453 0.3336257490592082 0.1555691654789428 T T T
 0.6652020007113360 0.3351747454875280 0.1539360634569628 T T T
 0.9176364732045826 0.3337394234153009 0.1552598282041922 T T T
 0.1673804383657588 0.5838199725522838 0.1554856297196963 T T T
 0.4158545363762401 0.5852250753666259 0.1544298409012342 T T T
 0.6671298945557351 0.5833609626383773 0.1555515472414049 T T T
 0.9153314010312386 0.5850563401099291 0.1539824775307374 T T T
 0.1650803806944967 0.8352327458545213 0.1540362822218411 T T T
 0.4168518596050696 0.8334110104425035 0.1554582393759096 T T T
 0.6646602081335488 0.8340704228718874 0.1541560640509014 T T T
 0.9167825425466336 0.8335291911688096 0.1553952348946423 T T T
 0.9991869278302907 0.0013525191231051 0.0781091480878341 T T T
 0.2492633830736080 0.0010438489355497 0.0792157173328676 T T T
 0.4992670584278538 0.0013476013689477 0.0781699953703128 T T T
 0.7494942359896281 0.0012878068022517 0.0792835639726528 T T T
 -0.0004643077179489 0.2512492689897641 0.0792625278734268 T T T
 0.2490434607588302 0.2513344129575945 0.0782467654637122 T T T
 0.4992408494322920 0.2510450938902200 0.0792042956966303 T T T
 0.7493361298379196 0.2513781156775161 0.0780823327704384 T T T
 0.9993166512195708 0.5014474021922274 0.0781361790348806 T T T
 0.2494613749370237 0.5012283853924692 0.0793219543035689 T T T
 0.4991769789009929 0.5013364380881020 0.0782386841018591 T T T
 0.7493200883811008 0.5011433025630582 0.0792157772107788 T T T
 0.9993509587718737 0.7511620293359379 0.0792308874870154 T T T
 0.2492082973980761 0.7513307425530156 0.0781839788169567 T T T
 0.4993222826715876 0.7511799797333555 0.0792856011744212 T T T
 0.7491531388749907 0.7514333645412417 0.0781764351835007 T T T
 0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F

0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Ethanol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

2 1 6 80

Selective dynamics

Direct

0.6312705880728989 0.4502472227456071 0.4305603516661480 T T T
0.6126656961087905 0.5689379778217295 0.4162202398627898 T T T
0.4911096963704193 0.5164312649222873 0.3872113416671399 T T T
0.4635178440416757 0.5865422927250932 0.3849188624345398 T T T
0.7231182628204005 0.4886971501695866 0.4519642956753178 T T T
0.5417004177514718 0.3733841978888762 0.4495693604047609 T T T
0.6464611857498601 0.3996283508123943 0.4011707811306153 T T T
0.5938017917170462 0.6182678889068192 0.4452401350404192 T T T
0.7029912166391388 0.6476527807944742 0.3975743809853534 T T T
0.0052892388859859 0.9997974313177624 0.3072942747703736 T T T
0.2550413546059721 0.9989116028310292 0.3076053148532158 T T T
0.5056067383369157 0.9994680702430614 0.3073771935657868 T T T
0.7553630460634498 0.9997663664933349 0.3072425581143511 T T T
0.0052953847658547 0.2496772056045675 0.3072043042102622 T T T
0.2534470609317390 0.2474115109217047 0.3072621489613675 T T T
0.5050207237214118 0.2465424927918384 0.3075930034330099 T T T
0.7556192183735658 0.2493194079076820 0.3073088143615625 T T T
0.0055049934281811 0.4994306176066625 0.3073130554416907 T T T
0.2533343837164352 0.5000775051411537 0.3072567469888707 T T T
0.5067529512579589 0.4985791859586704 0.3102086290659709 T T T
0.7586752499304296 0.4997805364257917 0.3073896209698861 T T T
0.0062638322637355 0.7501438009033490 0.3076235113201660 T T T
0.2550587613785991 0.7500564268238684 0.3077671516438385 T T T
0.5048215125727817 0.7515833365141142 0.3075039440549203 T T T
0.7578101615361482 0.7518212229571856 0.3072801159410336 T T T
0.0870002520222127 0.1668253646627683 0.2293122667277779 T T T
0.3367941877720891 0.1661437469896261 0.2298578531783914 T T T
0.5872079763255666 0.1669019888405633 0.2294449113284410 T T T
0.8369882305688054 0.1666195500026854 0.2294503414504581 T T T
0.0868915764974353 0.4163282408423121 0.2292082982120278 T T T
0.3375953384592742 0.4171283978130731 0.2310513873260364 T T T
0.5861495475485901 0.4175541896930800 0.2317130151892118 T T T

0.8367979693092977 0.4163840490458434 0.2293065699092373 T T T
 0.0870268362471686 0.6664219872313620 0.2296196592517126 T T T
 0.3368569685043699 0.6669388303868924 0.2298513237364364 T T T
 0.5868384653531772 0.6663273610597958 0.2310641838600022 T T T
 0.8376016313164542 0.6669011422895090 0.2298018197313418 T T T
 0.0869959697284078 0.9166692839623015 0.2295935120344943 T T T
 0.3372439994863298 0.9166227874265857 0.2296635632038019 T T T
 0.5873703108280696 0.9167720207286633 0.2292959297118466 T T T
 0.8369896813200263 0.9168680866831822 0.2292808086229455 T T T
 0.1691930655931387 0.0833921135695454 0.1535719638756055 T T T
 0.4189303632850832 0.0833990805879963 0.1536462159228454 T T T
 0.6690813189032013 0.0838926086741082 0.1534037970075695 T T T
 0.9190982966944665 0.0835885164412232 0.1534275019129629 T T T
 0.1706080428048801 0.3340823663146684 0.1535709060303004 T T T
 0.4193441588919776 0.3338105726173660 0.1545047946889071 T T T
 0.6679336810542537 0.3346258982681937 0.1539236739810516 T T T
 0.9187776532768279 0.3333634829766762 0.1533541480324685 T T T
 0.1691270023815305 0.5833720540192544 0.1535345006846243 T T T
 0.4193659695034721 0.5832815473361618 0.1543524343264473 T T T
 0.6688077637802580 0.5832428098598934 0.1544478851693116 T T T
 0.9191250757092801 0.5835357961461278 0.1535555283467263 T T T
 0.1690974219903046 0.8333272584631144 0.1536192043014906 T T T
 0.4190557168935966 0.8333550966209593 0.1536316837081476 T T T
 0.6684379139488190 0.8321038779774914 0.1536044367481907 T T T
 0.9190786025894524 0.8333117556610857 0.1535657818503582 T T T
 0.0013220615095408 0.0001193150182822 0.0775861077053023 T T T
 0.2513714223433148 0.0000434821602503 0.0776131628176474 T T T
 0.5013559577585374 0.0000449271087229 0.0775976277814052 T T T
 0.7513306906321150 0.0001573720522180 0.0775700834248438 T T T
 0.0013045799609980 0.2500640956701906 0.0775340984008530 T T T
 0.2516299189452433 0.2501472063339480 0.0777079287185291 T T T
 0.5014316410229389 0.2502040204455440 0.0778023155174543 T T T
 0.7513149825315742 0.2500912504171023 0.0775443662733662 T T T
 0.0014211324976471 0.5000796070340852 0.0775288030352052 T T T
 0.2516797658648363 0.5000432112146974 0.0777018516358306 T T T
 0.5015386547029584 0.5000464456516257 0.0780993747268752 T T T
 0.7512294731596739 0.5000453443099638 0.0777553059543540 T T T
 0.0013654070735792 0.7500750546904310 0.0775865594129227 T T T
 0.2514446778313574 0.7500439561596164 0.0776273970178510 T T T
 0.5013985105118041 0.7498609311478514 0.0777287238760173 T T T
 0.7512725901435968 0.7499014959749490 0.0777069440674505 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Ethanol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

2 1 6 80

Selective dynamics

Direct

0.6403443478564808 0.4562996830959519 0.4210156270479892 T T T
0.6146483571691629 0.5745356600711055 0.4103493122488354 T T T
0.4869861905983991 0.5197993466431872 0.3835776385675629 T T T
0.4616328260528660 0.5928201912695270 0.3806102384865501 T T T
0.7361090165283644 0.4952576396463786 0.4409867957780944 T T T
0.5530399379856679 0.3736480245442792 0.4399632145061255 T T T
0.6543201170718581 0.4106187350084340 0.3898781293415174 T T T
0.5978806757859912 0.6203461639127957 0.4409065751336569 T T T
0.7015795951107022 0.6577462533324072 0.3909717889453050 T T T
-0.0001080554382990 -0.0009244767263912 0.3058948032764943 T T T
0.2498058755970991 -0.0013693703735083 0.3062148490166512 T T T
0.5001633665841012 -0.0010825125362219 0.3059395729859648 T T T
0.7499790989013916 -0.0008550467761570 0.3057826528001868 T T T
-0.0001843883926144 0.2489570149332106 0.3057233890843040 T T T
0.2484582547053025 0.2472997016145213 0.3057591329923189 T T T
0.4997572936583008 0.2465859682437362 0.3059439754482786 T T T
0.7502644192383335 0.2487675657871533 0.3058645664124212 T T T
0.0001129503919335 0.4989096428363213 0.3058812479202526 T T T
0.2481081440243237 0.4994313873930191 0.3055899209298160 T T T
0.5003583209562211 0.4979389617177537 0.3073590399509173 T T T
0.7526806066544148 0.4991715753901556 0.3055366714681099 T T T
0.0006692659498459 0.7494217058909549 0.3062382361684185 T T T
0.2496563567763990 0.7493362059324735 0.3063436780905603 T T T
0.4996215177678747 0.7510479430130812 0.3058295616847062 T T T
0.7520060703357967 0.7509809364599751 0.3055694058991244 T T T
0.0831600894017617 0.1665087916173955 0.2280188855153258 T T T
0.3330936949399262 0.1661829552416156 0.2284336226429901 T T T
0.5834950366494840 0.1666183260131780 0.2281402369243438 T T T
0.8332530885714311 0.1664493965840079 0.2281005604405599 T T T
0.0831557466518575 0.4163665294234125 0.2278669460047075 T T T
0.3334426505521511 0.4166768774535497 0.2291590870957054 T T T

0.5824984432762900 0.4170348130955444 0.2296825667685113 T T T
0.8332974332184653 0.4163400723907447 0.2279581976665464 T T T
0.0833506198275020 0.6665241363024151 0.2283294972072781 T T T
0.3332224650259134 0.6667136766134384 0.2284358357210784 T T T
0.5831419825310533 0.6665110808201203 0.2290844414364330 T T T
0.8336661876710575 0.6667717153713230 0.2283726181675000 T T T
0.0833398468759831 0.9165259076483957 0.2283141206171634 T T T
0.3333847369172900 0.9165830068578280 0.2283955656552429 T T T
0.5834984779672772 0.9167279873429214 0.2279162429973910 T T T
0.8333568159371676 0.9167776632753484 0.2278919088888985 T T T
0.1666754233539617 0.0833220282868951 0.1528384747425280 T T T
0.4165242552387029 0.0833333651676159 0.1529252822330792 T T T
0.6666925058720247 0.0837746558941097 0.1526982616565334 T T T
0.9166673005323784 0.0834463828311693 0.1527516410238578 T T T
0.1676563810539232 0.3338759323470159 0.1528023658570231 T T T
0.4167084653035198 0.3335761029635975 0.1534775762662571 T T T
0.6657055953860127 0.3342991720792162 0.1531638245396093 T T T
0.9164251727895927 0.3333607277835515 0.1527139141847537 T T T
0.1666544686542117 0.5833859847466024 0.1528192163150459 T T T
0.4167181024479242 0.5833110237494892 0.1533646579454956 T T T
0.6664343927638445 0.5832499597803780 0.1534111180424032 T T T
0.9167540256229679 0.5835158748940911 0.1528507755153427 T T T
0.1666971258935940 0.8333856130202042 0.1529050712449414 T T T
0.4166154904809657 0.8333731953527176 0.1528998343659775 T T T
0.6661621464322962 0.8325275260853559 0.1527871823009377 T T T
0.9167058314483888 0.8333301094742406 0.1528279369507040 T T T
-0.0000471486653023 0.0000807239059139 0.0775206800374442 T T T
0.2499861473127485 0.0000294958624279 0.0775081504980426 T T T
0.5000237277805543 0.0000880331733166 0.0775265295884886 T T T
0.7500425439691876 0.0002481152608774 0.0774902519631869 T T T
-0.0002416875815826 0.2499753805970324 0.0774553378614791 T T T
0.2500434933163651 0.2500469103644362 0.0775663176430795 T T T
0.5000281058716535 0.2501063788818795 0.0776905024042187 T T T
0.7500234913154037 0.2500563619589564 0.0774982386661170 T T T
0.0000191247299890 0.5000791079001605 0.0774749583415948 T T T
0.2500949438602466 0.5000516262768915 0.0775596318605054 T T T
0.4999937546395622 0.4999993769811197 0.0778106467449193 T T T
0.7499280059682154 0.5000264507755300 0.0776417193481073 T T T
0.0000124229451819 0.7500537556495754 0.0775101327208396 T T T
0.2500356861023464 0.7500597038897560 0.0775253421102858 T T T
0.5000021606907153 0.7500219291926067 0.0775792779326891 T T T
0.7499506936406466 0.7499553435824566 0.0775652366252791 T T T
0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Glycerol on Ni(111) surface

1.0000000000000000
9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.3486706007667852 0.4387666466933868 0.4169657265375470 T T T
0.5103203998738001 0.5113131330155879 0.3948940134816664 T T T
0.6056554519596583 0.6863421581738554 0.3968220694084094 T T T
0.2762065653009713 0.2733467611534457 0.4149351543110222 T T T
0.6005793988533112 0.4520251402652977 0.4151781983981775 T T T
0.7469388874651605 0.7436445672528160 0.3688961220237907 T T T
0.2387741373966514 0.2401923834032893 0.3824355191775347 T T T
0.2793056941176978 0.4812296794087677 0.3983625301049801 T T T
0.4901711241981339 0.4777738882558445 0.3559261996784674 T T T
0.3561024533480954 0.4689040110048736 0.4548327493434769 T T T
0.5324471856833014 0.3394879476530320 0.4173324118484784 T T T
0.5418300255947774 0.7394250153074310 0.3812707480530392 T T T
0.6384428652856692 0.7266515812949761 0.4336811380296114 T T T
0.7961134584119069 0.6835121883696436 0.3782693226739690 T T T
0.0002909061474660 0.0002326853480932 0.2860970041238222 T T T
0.2489695274416209 0.9992007603758420 0.2860381072724045 T T T
0.4983288499184022 0.9992179460295081 0.2859033013006871 T T T
0.7478767362025045 0.0004627595185829 0.2858118849426800 T T T
0.9987442053749445 0.2488680401710214 0.2858986942307093 T T T
0.2479265795554317 0.2480665752442860 0.2853788640270063 T T T
0.4980796282715891 0.2475119261513980 0.2855152359826152 T T T
0.7486862747230412 0.2488960478344922 0.2858902653820358 T T T
0.9986664791119031 0.4988401510741770 0.2858511315066387 T T T
0.2477807745269365 0.4988084411580353 0.2853831498849926 T T T
0.4962054131155691 0.4961791067342071 0.2855646973795299 T T T
0.7487141657504135 0.4967686053705350 0.2854199870391911 T T T
0.0005056742377230 0.7492809397756038 0.2856850508154293 T T T
0.2483192918849886 0.7488912642244916 0.2859133049445868 T T T
0.4963872650204194 0.7498057295332755 0.2850793427472988 T T T
0.7477438886873338 0.7484098582032487 0.2924657197598308 T T T

0.0814802250043043 0.1651654768359912 0.2147858677560265 T T T
 0.3321439429933553 0.1657213249464544 0.2146531668921295 T T T
 0.5825836132163350 0.1659203578836514 0.2147837686558461 T T T
 0.8322846101232624 0.1653801057652692 0.2148475747799073 T T T
 0.0818481193105797 0.4154324001864983 0.2147511546886268 T T T
 0.3323725376345941 0.4160489341774240 0.2145240292364752 T T T
 0.5820051756319233 0.4156262550218955 0.2147206246398236 T T T
 0.8322937443430352 0.4160200881705489 0.2147414488599422 T T T
 0.0818075733245357 0.6656482601787944 0.2148195837609977 T T T
 0.3320558226432731 0.6655522195138018 0.2145489636429789 T T T
 0.5836391013929018 0.6665069490425007 0.2160469972345508 T T T
 0.8311345641723150 0.6666936128292582 0.2163344075479749 T T T
 0.0823137497470852 0.9159890596228274 0.2150414346945027 T T T
 0.3321614743030124 0.9157165416839530 0.2149451524965749 T T T
 0.5822816806168856 0.9161114232135565 0.2147883755196856 T T T
 0.8309755265373948 0.9135048767425991 0.2166686317742301 T T T
 0.1657397135196538 0.0825780134177604 0.1428601815269289 T T T
 0.4159554945481364 0.0826787190868878 0.1427685395909913 T T T
 0.6658841561928674 0.0826522259458865 0.1428418698126723 T T T
 0.9155819854392058 0.0820735744158151 0.1431387508413293 T T T
 0.1657567774701037 0.3325013937009454 0.1429007850020697 T T T
 0.4159974397123700 0.3328054286225173 0.1427356559265883 T T T
 0.6658806138748659 0.3328180239547265 0.1428235721825775 T T T
 0.9157032427608987 0.3325877957727860 0.1429506351243714 T T T
 0.1657649344612502 0.5827763440988106 0.1428725497482307 T T T
 0.4163979598974852 0.5830599430522174 0.1428881683846523 T T T
 0.6661820346470548 0.5831504219524942 0.1432916695793343 T T T
 0.9156775799689216 0.5830612109055456 0.1430644423503712 T T T
 0.1657648121328143 0.8327906723399803 0.1429759938405906 T T T
 0.4160384299804249 0.8328362616679487 0.1428251626951534 T T T
 0.6661726105203333 0.8325427707633560 0.1433529918794194 T T T
 0.9155549727082907 0.8325962202335943 0.1434662592022246 T T T
 0.9993933001064306 0.9994389067676133 0.0710180781045214 T T T
 0.2494460071640802 0.9996034392260192 0.0708991949278610 T T T
 0.4996909695509975 0.9996798248113136 0.0708328918150505 T T T
 0.7496061777526639 0.9994639646295089 0.0710340728196130 T T T
 0.9993922916689080 0.2494142668290488 0.0709955104787538 T T T
 0.2495004718937700 0.2496545758758115 0.0708731958853326 T T T
 0.4996424766495212 0.2497667718197416 0.0708556723487223 T T T
 0.7496472833670641 0.2497468896082861 0.0708870417880322 T T T
 0.9993750180498632 0.4997486068220104 0.0709852699283833 T T T
 0.2497089475351491 0.4997356284142609 0.0709921199138694 T T T
 0.4998843863205258 0.4998938718287819 0.0709688449179715 T T T
 0.7495815381970637 0.4998832661173591 0.0710029059366977 T T T
 0.9994048718295850 0.7497567116503521 0.0710410266504536 T T T
 0.2495490600734426 0.7497299068920622 0.0709174930110833 T T T
 0.4999121951626241 0.7498830646185525 0.0709706170672049 T T T
 0.7497153907165486 0.7497844083817563 0.0711183855619007 T T T
 0.08333333333333357 0.16666666666666643 0.00000000000000000 F F F

0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Glycerol on Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.3531698428766718 0.4439500704793186 0.4150011024871557 T T T
 0.5170015392981413 0.5173253946148764 0.3932145627213849 T T T
 0.6130195971917187 0.6943358293582309 0.3950868490427404 T T T
 0.2797636933008043 0.2765504796867201 0.4129489217482666 T T T
 0.6082352235177008 0.4577671703937565 0.4137695715409908 T T T
 0.7558671526163101 0.7521770167993628 0.3671779231402391 T T T
 0.2428126513619380 0.2431304204618957 0.3803416984329072 T T T
 0.2835782564704130 0.4873845895194261 0.3962365195466013 T T T
 0.4975150197982363 0.4834110001842070 0.3541671558033668 T T T
 0.3607165089138137 0.4745121261256024 0.4528867092913500 T T T
 0.5396417258627441 0.3438913029202826 0.4159200205572939 T T T
 0.5483585372196177 0.7477308855189331 0.3793503287898453 T T T
 0.6463600612556316 0.7354860407103770 0.4319056837321000 T T T
 0.8059161097459961 0.6914313867193852 0.3763737358824645 T T T
 0.0018030164387338 0.0015397877262337 0.2854236545649076 T T T
 0.2502850657108708 0.0003269709657660 0.2855370871046691 T T T
 0.4996445526656979 0.0001895312284452 0.2854377101834430 T T T
 0.7493110227371120 0.0015090237294846 0.2851087210892701 T T T
 0.0002315364911553 0.2501098724628919 0.2854177481512651 T T T
 0.2495558349623637 0.2496106877343497 0.2849358544644726 T T T
 0.4993142019578464 0.2489620623007304 0.2851629345793521 T T T
 0.7498814739337250 0.2500636331189131 0.2853534095848972 T T T
 -0.0000022454374062 0.4999607469093720 0.2853693974606140 T T T
 0.2494121642641317 0.4999035623560411 0.2851091565453471 T T T

0.4979590932860486 0.4978243771710657 0.2848739931412972 T T T
 0.7499321625029183 0.4981824721561933 0.2849140346506288 T T T
 0.0018439837769660 0.7502797531444411 0.2849395890140050 T T T
 0.2497691086177385 0.7498772423878898 0.2854085908916082 T T T
 0.4979141206171084 0.7506710813316401 0.2844882713306640 T T T
 0.7497511372539595 0.7501331649806963 0.2914423558522687 T T T
 0.0826964888603527 0.1662753726490123 0.2139247748675225 T T T
 0.3331911223732943 0.1666633616212980 0.2139461137167582 T T T
 0.5834416516447427 0.1667824419864651 0.2140219729327059 T T T
 0.8333809192838010 0.1664687548686967 0.2140125270756066 T T T
 0.0830168509503402 0.4164063263713509 0.2139728553175861 T T T
 0.3334357422789651 0.4169859476854242 0.2137646472730511 T T T
 0.5830583441603125 0.4165320411035711 0.2139343773386617 T T T
 0.8333038831755639 0.4168879039439050 0.2139185945744977 T T T
 0.0829313789777300 0.6664260970560779 0.2139119748704230 T T T
 0.3331087216439527 0.6663544764645293 0.2138056159078399 T T T
 0.5846570833329883 0.6674171929406661 0.2151409894302108 T T T
 0.8323338811954230 0.6674023286053758 0.2153163753545297 T T T
 0.0833462523106782 0.9168417982336027 0.2141423036727282 T T T
 0.3331176148871597 0.9165353730458323 0.2141319951591823 T T T
 0.5832774282806318 0.9169808592005558 0.2139522031853642 T T T
 0.8323361188760509 0.9148309255807059 0.2155859462007570 T T T
 0.1665069952563858 0.0831954716252663 0.1426254599037696 T T T
 0.4166017398397474 0.0832511532262883 0.1425933413911517 T T T
 0.6665854259984222 0.0832842722457949 0.1426300767500220 T T T
 0.9163049355445961 0.0827461429748280 0.1428592042528493 T T T
 0.1665549310957646 0.3331856513831276 0.1426746324338673 T T T
 0.4166784508500910 0.3333728798140421 0.1425590243631835 T T T
 0.6665631134318950 0.3333893575211401 0.1426220367335860 T T T
 0.9164481906831267 0.3332289707574241 0.1427088784644980 T T T
 0.1665680397015918 0.5833570638545619 0.1426320945739256 T T T
 0.4170618904277023 0.5836119717700610 0.1426716684681810 T T T
 0.6668119370273636 0.5837001931351220 0.1430404507190464 T T T
 0.9163691138514924 0.5835839323781107 0.1427828004056505 T T T
 0.1665200676684663 0.8333738554338184 0.1427081169163907 T T T
 0.4166961268045672 0.8333881982293462 0.1426112607597827 T T T
 0.6668801524196132 0.8331881529272671 0.1431105754598841 T T T
 0.9162402822341379 0.8331736940319595 0.1431543625102588 T T T
 -0.0001820480547486 -0.0001820569095207 0.0713834411377751 T T T
 0.2498784409506077 -0.0000561015093310 0.0712555930992418 T T T
 0.5000246603917561 -0.0000028454169850 0.0712519193401528 T T T
 0.7499323213207775 -0.0002105480247620 0.0713897921617720 T T T
 -0.0001910005981043 0.2497308894702142 0.0713481070654571 T T T
 0.2499068064947183 0.2499844702767479 0.0712405455807953 T T T
 0.5000194049693389 0.2500409675862521 0.0712380688926055 T T T
 0.7500239256581659 0.2500470610148906 0.0712494080742344 T T T
 -0.0001864302242994 0.5000438037551659 0.0713560732360482 T T T
 0.2501282199353360 0.5000544522531373 0.0713314804286258 T T T
 0.5001980706541511 0.5001451052190473 0.0713544816477462 T T T

0.7499289984404910 0.5001772147641729 0.0713574603730544 T T T
 -0.0001789858755704 0.7500946410864369 0.0713772958405421 T T T
 0.2499269008460800 0.7499937858568024 0.0712547244371620 T T T
 0.5002680699720961 0.7501596629640095 0.0713392774958595 T T T
 0.7500420931095676 0.7500603610226978 0.0714599135736111 T T T
 0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Glycerol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.9477074186360852 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9738537093180426 8.6149673339494068 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1885857567195970

C O H Ni Pt

3 3 8 56 24

Selective dynamics

Direct

0.5164982752565747 0.5238976072606625 0.4865873246711292 T T T
 0.4044763101073847 0.4278086394128333 0.4471488942658340 T T T
 0.3436469173738223 0.2545776251314377 0.4489597078177857 T T T
 0.5433224902344405 0.6792285144249639 0.4849461449759933 T T T
 0.2717430947466976 0.4479355761309349 0.4464188223998908 T T T
 0.2237203346135291 0.1753608732138225 0.4133032854588674 T T T
 0.5949686303507764 0.7269577580108326 0.4549445698705538 T T T
 0.6254559576725320 0.5206871044405571 0.4832992076394176 T T T
 0.4676802687167333 0.4716651123001554 0.4125958600459957 T T T
 0.4658671594538689 0.4789491955997723 0.5217592470857322 T T T
 0.3094566081682693 0.5564787669966830 0.4552002749873595 T T T
 0.4351009251418276 0.2272154608289957 0.4406930460720023 T T T
 0.2925299463581584 0.2055165062218353 0.4838208649175916 T T T
 0.1394990597495101 0.1956508903131342 0.4210105540924396 T T T
 0.2641978929230847 0.2392777545398973 0.3432391692663468 T T T
 0.4941812732622285 0.2556307994745255 0.3012179952508229 T T T
 0.2594779196843104 0.4999270780231623 0.3521391212491339 T T T
 0.5101213049951879 0.5042736460746267 0.3364697441531469 T T T

0.3333938596389865 0.1565678698789952 0.2233771973947624 T T T
 0.8435503195205362 0.1775303757866238 0.2200340690129968 T T T
 0.3364805974759912 0.6612104692022476 0.2796185427965847 T T T
 0.8223501378408906 0.6670790192722259 0.2217318019045029 T T T
 0.1685549286899131 0.0831811137202517 0.1445371776316148 T T T
 0.4160265446173009 0.0800685763197233 0.1455576100141520 T T T
 0.6690888462330971 0.0829191180392695 0.1445950382166442 T T T
 0.9164266898331233 0.0851080883572348 0.1442159922905804 T T T
 0.1692632931664724 0.3374533795207815 0.1438846540280413 T T T
 0.4132384939780276 0.3303958122652394 0.1452988952127595 T T T
 0.6667132976911455 0.3338502101856263 0.1446346643299601 T T T
 0.9209548067109076 0.3373896991044982 0.1451823970078368 T T T
 0.1689085129575723 0.5884039966588457 0.1437627608593173 T T T
 0.4117409064722242 0.5805808818945271 0.1441175800538841 T T T
 0.6629534092900708 0.5835842161835707 0.1457077693172999 T T T
 0.9176098443108264 0.5872649591643689 0.1445934016559570 T T T
 0.1689100989612170 0.8310661544015269 0.1439685394952144 T T T
 0.4196267564978180 0.8315373919061370 0.1435018342449262 T T T
 0.6623883424958821 0.8314822160775487 0.1440513071767840 T T T
 0.9150355412856255 0.8311841536886910 0.1447069007356064 T T T
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.2500000000000000 0.0000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.7500000000000000 0.0000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.0000000000000000 0.2500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.5000000000000000 0.2500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.2500000000000000 0.5000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.7500000000000000 0.5000000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.0000000000000000 0.7500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.5000000000000000 0.7500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.0729053142384473 F F F
 0.0830622377630890 0.1665320625880831 0.0018694337098163 T T T
 0.3332359144304228 0.1666991428043713 0.0021024680611613 T T T
 0.5833815685041527 0.1664643190590032 0.0021664569764697 T T T
 0.8332124829658206 0.1664926975778986 0.0020987901577166 T T T
 0.0828854491069505 0.4163977112792615 0.0018267517370988 T T T
 0.3329885259386650 0.4166972533416700 0.0021272740290491 T T T
 0.5829297628126744 0.4165734166380913 0.0022298006803332 T T T
 0.8335028934136463 0.4168531397294496 0.0021761137834699 T T T
 0.0836203712144963 0.6670014020077150 0.0020557860355923 T T T
 0.3331885659373015 0.6665673965514222 0.0018941005599706 T T T
 0.5835064782051811 0.6666071036497174 0.0018551213473973 T T T
 0.8335318948942435 0.6668722189927679 0.0021470840084469 T T T
 0.0835066533575187 0.9169784192501635 0.0018598970870576 T T T

0.3334695277955088 0.9170820372601163 0.0018163685602589 T T T
 0.5832668654930535 0.9163382522988174 0.0020897598420477 T T T
 0.8334983782535859 0.9165448323927523 0.0018751347266608 T T T
 0.2612750396659543 0.9915411072395841 0.3050328755756928 T T T
 0.7844828587775373 0.0257029804481759 0.3464787749962691 T T T
 0.0396319250206900 0.2812549071595600 0.3081241627217718 T T T
 0.7556725346521576 0.2452372280530680 0.3031078776789605 T T T
 0.0119190083221794 0.0096479606970645 0.3029985504888277 T T T
 0.5090378198326403 0.0238013042236478 0.3459832900768417 T T T
 0.9889778067509871 0.4902770756988669 0.3462932353718939 T T T
 0.7508791411391019 0.5065489786757337 0.3052615763816628 T T T
 0.9871196648262455 0.7613748719119992 0.3446941755350524 T T T
 0.2496069525309754 0.7534500926211608 0.3545852758340290 T T T
 0.5108121280026471 0.7552856317897476 0.3554673999709506 T T T
 0.7343827819798597 0.7573098945256183 0.3068455419966645 T T T
 0.0950135206584076 0.1794713542542658 0.2193414279290142 T T T
 0.5822817352036769 0.1533020179588385 0.2206291743256269 T T T
 0.1322645366125518 0.4633765213962409 0.2218337573982476 T T T
 0.3303713074087445 0.3959187590603457 0.2693485296225288 T T T
 0.5700136259935007 0.4171533129940159 0.2215202176407972 T T T
 0.8490459095895431 0.4313807693906100 0.2203373955789080 T T T
 0.0742242749226455 0.6658458246538961 0.2683662605529858 T T T
 0.5391657728157778 0.6665111833157981 0.2223993628076322 T T T
 0.0854476796477747 0.9020901760787298 0.2200429488953969 T T T
 0.3353381752241943 0.8699499404811172 0.2219920946947128 T T T
 0.5971789152832679 0.9310026688630731 0.2684200193509375 T T T
 0.8197764592607988 0.9167036309176922 0.2196370142975710 T T T

SYSTEM: PBE+D3 Glycerol on Pt₁₂Ni₄/Pt₁₂Ni₄/Ni(111) surface

1.0000000000000000

9.8328171050916691 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-4.9164085525458345 8.5154694037712328 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 28.1834036430786092

C O H Ni Pt

3 3 8 56 24

Selective dynamics

Direct

0.5026221586571461 0.5184106052001328 0.4742476479919250 T T T
 0.3914687989163711 0.4144368563839904 0.4352956057966682 T T T
 0.3139987846812058 0.2387206422248933 0.4425024626800909 T T T
 0.5362650259130655 0.6765072369097144 0.4679604825293416 T T T
 0.2691051125075048 0.4523292959013381 0.4275291296496766 T T T
 0.2042185153678269 0.1549533958052368 0.4043844286829850 T T T
 0.5830291442200523 0.7142232273441848 0.4362143611542827 T T T
 0.6100540373665683 0.5092215519932695 0.4737915690501975 T T T
 0.4621136250975755 0.4423887829570780 0.4017195314279391 T T T
 0.4477385050532466 0.4827828604282911 0.5095248983966473 T T T
 0.3146074600161832 0.5630668293132103 0.4374178172126721 T T T
 0.4018415245363611 0.2009334687507419 0.4410317558559384 T T T

0.2500513744105252 0.2019290677837399 0.4764312417534796 T T T
 0.1095878315330552 0.1631199800249330 0.4086251584383848 T T T
 0.2628223292945543 0.2321915028758195 0.3359147653166767 T T T
 0.4944249166013776 0.2517006100246078 0.2963023966488880 T T T
 0.2579498269568185 0.4945848617458682 0.3499908877167870 T T T
 0.5101677639753840 0.5008525918025915 0.3317727869538314 T T T
 0.3336159199172641 0.1562225269160918 0.2197831863887512 T T T
 0.8432087036282142 0.1758379200961547 0.2167197278009277 T T T
 0.3354407192190982 0.6607702013521686 0.2772105059804270 T T T
 0.8241350032389461 0.6669677894967275 0.2186289038094729 T T T
 0.1689445235695931 0.0825220175799457 0.1420539024247716 T T T
 0.4156339642248129 0.0793906186865578 0.1428443356411063 T T T
 0.6695960131747921 0.0822305750751114 0.1422163276056546 T T T
 0.9171001953596056 0.0858533203128016 0.1417314950119400 T T T
 0.1702592547529858 0.3384852095665610 0.1412434812380060 T T T
 0.4123021411054145 0.3298815509718908 0.1432867098458450 T T T
 0.6668653475537296 0.3337505689617250 0.1417737359128600 T T T
 0.9211978159771322 0.3371598206360824 0.1427358649111997 T T T
 0.1694832901423102 0.5892011920111464 0.1408838604704128 T T T
 0.4108369234295000 0.5799337781759195 0.1412445906885295 T T T
 0.6634028219967839 0.5839798032136363 0.1433385276072393 T T T
 0.9183261747825243 0.5878918999032903 0.1427051217188940 T T T
 0.1691965312528641 0.8298215012216071 0.1410743725083911 T T T
 0.4203327157804906 0.8308907966329292 0.1405052018617036 T T T
 0.6614969604539607 0.8313748924279653 0.1413222427766406 T T T
 0.9141875773239455 0.8306023742631120 0.1421407609830595 T T T
 0.0000023672017747 0.9998242252284990 0.0713599212229893 T T T
 0.2507668007873494 0.0001976480263105 0.0710837572296550 T T T
 0.5015462661099384 0.0007124993904517 0.0711746650001383 T T T
 0.7505082827188483 -0.0002923204432867 0.0712252607585352 T T T
 0.9999621810948855 0.2507524745791679 0.0711760738926937 T T T
 0.2496083060430785 0.2495105748336281 0.0713840289297385 T T T
 0.4996570169513347 0.2493264224829483 0.0716885582098073 T T T
 0.7508888163123395 0.2507869643909187 0.0713643978792207 T T T
 0.9995924427309789 0.5011160899967962 0.0712935432990356 T T T
 0.2492662694693649 0.5002801318058081 0.0702340101533742 T T T
 0.4992294022093603 0.4983807502899280 0.0716190401384737 T T T
 0.7495733515310318 0.5005824908815462 0.0716453436360180 T T T
 0.0002458208875146 0.7507462398491808 0.0713290429199391 T T T
 0.2514052515532665 0.7509070561993471 0.0700854139497670 T T T
 0.4999744568485434 0.7483605573881084 0.0702925802518885 T T T
 0.7493281261736793 0.7489447069463097 0.0711189134612897 T T T
 0.0828889332909810 0.1665043433458848 0.0000000000000000 F F F
 0.3332115560992150 0.1667452158033456 0.0000000000000000 F F F
 0.5833183080606545 0.1663556957179608 0.0000000000000000 F F F
 0.8331489220442307 0.1665368424994185 0.0000000000000000 F F F
 0.0829240578404153 0.4164017259029507 0.0000000000000000 F F F
 0.3330120975278135 0.4167750205552210 0.0000000000000000 F F F
 0.5828364313531083 0.4165458535045090 0.0000000000000000 F F F

0.8335013052239475 0.4169247120317934 0.0000000000000000 F F F
 0.0835789735299102 0.6669398212605202 0.0000000000000000 F F F
 0.3332219865009804 0.6665833402861523 0.0000000000000000 F F F
 0.5835218886102140 0.6666078395544019 0.0000000000000000 F F F
 0.8334486833724597 0.6667130819478544 0.0000000000000000 F F F
 0.0834580061735366 0.9169868434164314 0.0000000000000000 F F F
 0.3334013642711611 0.9170210941386969 0.0000000000000000 F F F
 0.5832319497643823 0.9162905071868721 0.0000000000000000 F F F
 0.8334352905462836 0.9164441305632280 0.0000000000000000 F F F
 0.2609720935203560 0.9861000204925258 0.2994528538126096 T T T
 0.7874683274242710 0.0252327003203313 0.3427742142001307 T T T
 0.0404699070541973 0.2808986645133076 0.3029624169340978 T T T
 0.7552834641725509 0.2418462167235172 0.2981441626136029 T T T
 0.0102874842011698 0.0060773341078001 0.2973435019326707 T T T
 0.5089077210195514 0.0241510583694990 0.3428617334173975 T T T
 0.9858457289070367 0.4863152748650890 0.3428842391379018 T T T
 0.7503487262504369 0.5040769444555359 0.3009796691087533 T T T
 0.9836958738663873 0.7600208413250781 0.3413378051212722 T T T
 0.2479833678560092 0.7518996614429232 0.3516753976039198 T T T
 0.5118949738121135 0.7542077511299622 0.3519185731446121 T T T
 0.7308452947376595 0.7545461975441364 0.3009517028897018 T T T
 0.0959857345258312 0.1802955321908018 0.2155921150358148 T T T
 0.5817385038547283 0.1519357669172799 0.2163884946334337 T T T
 0.1342866631869252 0.4663478688978018 0.2179621747489723 T T T
 0.3318369787297354 0.3984477186554262 0.2642486834894797 T T T
 0.5704455116920993 0.4177892060449699 0.2175948352323138 T T T
 0.8489033918728253 0.4301421864316016 0.2167675790205898 T T T
 0.0729362023539985 0.6647230090436284 0.2648178363329226 T T T
 0.5356224352822943 0.6666219222408610 0.2182955769256082 T T T
 0.0862663528199259 0.9010577291286976 0.2158477412125223 T T T
 0.3350827590305477 0.8661746706523710 0.2177749552645779 T T T
 0.5962723997667581 0.9305646129084419 0.2644271712998406 T T T
 0.8188325286352550 0.9156187826750429 0.2156539781395315 T T T

SYSTEM: PBE Glycerol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface

1.0000000000000000

10.9596012860582199 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.4798006430291100 9.4912931290702147 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684

C O H Ni Pt

3 3 8 20 60

Selective dynamics

Direct

0.3933746858377533 0.4717866270961948 0.4365519329970601 T T T

0.5375527592957331 0.5390786893193955 0.4136034875032343 T T T

0.6243030333307475 0.6980357517473104 0.4166201484356647 T T T

0.3287720434442817 0.3216166784433676 0.4345972164229745 T T T

0.6206921055003224 0.4840574223672650 0.4310356974948987 T T T

0.7537571328957637 0.7523649276136505 0.3911062921723935 T T T

0.2919442810243576 0.2909874060304672 0.4038401930825814 T T T
 0.3270547749356269 0.5093350857151641 0.4205633608017219 T T T
 0.5168915800120301 0.5118508034191379 0.3758489624016439 T T T
 0.4052481574047758 0.4989836161465591 0.4729366421914484 T T T
 0.5571334881576521 0.3826184474806037 0.4347395375618127 T T T
 0.5669391201151256 0.7472134313898685 0.4020726401324713 T T T
 0.6506611729982694 0.7310000911257808 0.4524336562971898 T T T
 0.7949404869533980 0.6936423756927502 0.3986502503005463 T T T
 0.3316933669614481 0.1675161355040519 0.2265182415240344 T T T
 0.8322823581720784 0.1674908596211321 0.2264258393004168 T T T
 0.3318108185796138 0.6671350607321276 0.2263369193440067 T T T
 0.8318055062918512 0.6678575451428939 0.2272437989690793 T T T
 0.0830436472332491 0.9172803263382947 0.2259781974808846 T T T
 0.5828680304558853 0.9171343845086906 0.2258454986120240 T T T
 0.0824724351640266 0.4168579257942818 0.2258277447791067 T T T
 0.5824865497448632 0.4166826861289054 0.2260212282870919 T T T
 0.1669682537714582 0.3330899386240904 0.1530808442996921 T T T
 0.6666123595533764 0.3328871714337960 0.1528078277776957 T T T
 0.1667795676624662 0.8330516999695412 0.1528575919325358 T T T
 0.6667763728417651 0.8326610250974933 0.1531732110082967 T T T
 0.9996415614802585 0.0001514857048808 0.0766116572892770 T T T
 0.4996613453861220 0.0000880092878317 0.0765151974508917 T T T
 0.9997625699983603 0.4999737739395829 0.0764654238434736 T T T
 0.4995862676858129 0.5001156300089007 0.0766226169095363 T T T
 0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.4976957490509664 0.0020586871126832 0.3028558314585218 T T T
 0.9988851538934878 0.0027695694305076 0.3028620704217869 T T T
 0.9976648305296313 0.5017909093434790 0.3027363735390987 T T T
 0.2462755883359653 0.0032789767994512 0.3011293529173792 T T T
 0.7460082397342622 0.0043874549979807 0.3008461234134119 T T T
 0.9962485733436163 0.2534963300562124 0.3009984490750439 T T T
 0.2470751821462237 0.2512619471021081 0.3031245271983650 T T T
 0.4959467247620915 0.2527039443866033 0.3009286810208307 T T T
 0.7476708290040087 0.2521985145895097 0.3025505388371192 T T T
 0.2453705146297984 0.5033282931789284 0.3009669203788198 T T T
 0.4962244094262089 0.5007562467601769 0.3031913906037079 T T T
 0.7463501310233374 0.5027781738710133 0.3006653823473531 T T T
 0.9970355883768355 0.7537515994915697 0.3008615472257538 T T T
 0.2473165424345440 0.7519982506392496 0.3026442159934843 T T T
 0.4952000894112556 0.7541868724549168 0.3006527395602606 T T T
 0.7474359236263840 0.7531537471080250 0.3045974967580411 T T T
 0.0826951742905784 0.1698428672889840 0.2253287402856280 T T T
 0.5826707123440990 0.1696654176531887 0.2253156303939993 T T T
 0.3303705627376830 0.4168341001222235 0.2255962060952831 T T T
 0.8301133134718686 0.4167802484194307 0.2251676385230360 T T T
 0.0827654422082458 0.6695027729785982 0.2252477725806324 T T T

0.5838439650650704 0.6693630403536758 0.2260823300755098 T T T
 0.3299906063370399 0.9169869716035650 0.2254028684265217 T T T
 0.8298864241070228 0.9153197350138653 0.2261265112337308 T T T
 0.1668794991524662 0.0803427856786333 0.1532441122973675 T T T
 0.4176385794811407 0.0818282246926739 0.1513065858288103 T T T
 0.6669525853350329 0.0803674566187276 0.1532054426685316 T T T
 0.9167133967537632 0.0805722185107734 0.1516466429136031 T T T
 0.4193034632101120 0.3326783244723239 0.1532766141775490 T T T
 0.9191599659549687 0.3321811511078702 0.1531880859333840 T T T
 0.1672549213836790 0.5803698107109108 0.1531824739276869 T T T
 0.4186925341780469 0.5825259973050251 0.1516378353703605 T T T
 0.6674987315150078 0.5806158597979312 0.1535032372333854 T T T
 0.9177879195939564 0.5819187051342952 0.1512776783550558 T T T
 0.4191703152758592 0.8324920625415632 0.1532466500033790 T T T
 0.9189151362251584 0.8319435481545758 0.1535274060766568 T T T
 0.2495946747819356 0.9996230690907073 0.0775275042870869 T T T
 0.7498033522624182 0.9996733101338088 0.0775596791958965 T T T
 0.0002583883644929 0.2497548910803251 0.0776754508171065 T T T
 0.2500414307619221 0.2497079761728822 0.0764429525807627 T T T
 0.5001790661612562 0.2501521808519423 0.0775294961225474 T T T
 0.7502208884440197 0.2497965238518477 0.0763856165193881 T T T
 0.2497710231568323 0.4993610531496461 0.0776468932506677 T T T
 0.7495681430037331 0.4996429555083308 0.0775647246103163 T T T
 0.0000942229967138 0.7502192257592055 0.0775394599833789 T T T
 0.2499946402986519 0.7496203566991798 0.0763838858132674 T T T
 0.5000981314670879 0.7499324667623367 0.0775603910292444 T T T
 0.7500096690449910 0.7498297225480662 0.0765369616070548 T T T
 0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Glycerol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt₃Ni(111) surface
 1.0000000000000000
 10.8275453603289158 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 -5.4137726801644579 9.3769293426684222 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.4227154675964684
 C O H Ni Pt
 3 3 8 20 60
 Selective dynamics
 Direct

0.3869651152589529 0.4721863590577899 0.4231870541841334 T T T
 0.5388974229107901 0.5437028401929748 0.4048004749567982 T T T
 0.6262652637376083 0.7040331870560402 0.4090651907807724 T T T
 0.3219513454114705 0.3213429010656421 0.4181764384995674 T T T
 0.6191122659769649 0.4854819282509060 0.4229435383124418 T T T
 0.7605569621413115 0.7596703614330805 0.3853765995557317 T T T
 0.2929564812082606 0.2969763744163346 0.3861516645737318 T T T
 0.3266006895217593 0.5151233405760288 0.4053906573179016 T T T
 0.5255329912193801 0.5205012039833918 0.3662942519638550 T T T
 0.3878609111183071 0.4926195877175991 0.4598969047781056 T T T
 0.5563240215708012 0.3818202840622348 0.4230022624492631 T T T
 0.5705717032938825 0.7547649445584036 0.3933454363239195 T T T
 0.6481535388575591 0.7357908519149342 0.4451138632120931 T T T
 0.8001570190056477 0.6982863762627284 0.3928702952396281 T T T
 0.3329083522745946 0.1680156088549776 0.2252210004637861 T T T
 0.8333805498121755 0.1682646557360989 0.2251475200155096 T T T
 0.3323961418450061 0.6673759153965197 0.2249907726231056 T T T
 0.8327014114816367 0.6681946276437417 0.2257782779896576 T T T
 0.0845086054873953 0.9172291799327092 0.2241172933105656 T T T
 0.5843186923712683 0.9174294318019450 0.2238818439336508 T T T
 0.0838401599386869 0.4169382289687055 0.2239886716214664 T T T
 0.5841913015192345 0.4164196400178284 0.2239555724132236 T T T
 0.1670732057834493 0.3342383641161847 0.1523310495139467 T T T
 0.6666390023455074 0.3339242864441199 0.1523144564071560 T T T
 0.1668637676247027 0.8340917569175975 0.1523638018084615 T T T
 0.6669880037124226 0.8340189125081723 0.1522557923107682 T T T
 0.9999457499879240 0.0009207217839217 0.0766979337549406 T T T
 0.4997671708236235 0.0008003174474590 0.0766464532181543 T T T
 0.9999457835051324 0.5006510714977808 0.0766108225186994 T T T
 0.4996586581894697 0.5007243668961392 0.0766957238348031 T T T
 0.3325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.1674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.3325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.8325139395694166 0.6674860604305834 0.0008436373536185 F F F
 0.4994501907711437 0.0019588894006612 0.3011462998220394 T T T
 0.0008197577772693 0.0028886899105446 0.3007463807294010 T T T
 0.9994502764696563 0.5017389714006403 0.3010465561549578 T T T
 0.2482539250264891 0.0033109804187954 0.2996048714000344 T T T
 0.7479009867019693 0.0042824137410338 0.2991431574249075 T T T
 0.9982907620085942 0.2534894111051460 0.2994959404296905 T T T
 0.2489455605620520 0.2512504602520814 0.3011755476155368 T T T
 0.4979589698991576 0.2526179509453629 0.2994699649146829 T T T
 0.7494421470245927 0.2522036670329839 0.3008799941367261 T T T
 0.2472757851956805 0.5032070224304914 0.2994554378343088 T T T
 0.4984033933126601 0.5009748939599177 0.2999919176467832 T T T
 0.7484559055520144 0.5027342295546572 0.2990887859875626 T T T
 0.9991565043912448 0.7537817096937640 0.2992861811598651 T T T
 0.2491094839146068 0.7518396868640834 0.3009218151433940 T T T
 0.4971169203955760 0.7542175678899411 0.2987242701745892 T T T

0.7500295880822657 0.7536931284381132 0.3016068771938205 T T T
 0.0835001577453618 0.1705321759549708 0.2237945773091341 T T T
 0.5836485545976198 0.1696877085912920 0.2239915438061859 T T T
 0.3309785878404454 0.4171505302942882 0.2239580914121509 T T T
 0.8313397416062539 0.4169547505624759 0.2238369988366029 T T T
 0.0836718281732873 0.6695360124048406 0.2239201483563313 T T T
 0.5847164872528360 0.6705526351273856 0.2240910250104368 T T T
 0.3309844792102176 0.9173062369838972 0.2240783308651841 T T T
 0.8310602611160682 0.9165850032859214 0.2243197462878749 T T T
 0.1673965265973754 0.0813086658314445 0.1524389257226053 T T T
 0.4179948305269232 0.0827495915388438 0.1508090904312363 T T T
 0.6674408751804184 0.0814233667718771 0.1523227251644067 T T T
 0.9172909953479725 0.0818285002462713 0.1509040498937751 T T T
 0.4195943700094317 0.3334924051085316 0.1523886474888415 T T T
 0.9194697959649923 0.3331070841862391 0.1523196045344648 T T T
 0.1675634217716424 0.5813776771388953 0.1523142591258513 T T T
 0.4186353284247928 0.5832868690659101 0.1509076153424837 T T T
 0.6678334791743598 0.5815470942853015 0.1525413791661727 T T T
 0.9179400774071945 0.5828150368446631 0.1508392294309138 T T T
 0.4194268758412838 0.8333837328867416 0.1523912644085186 T T T
 0.9194208448757203 0.8329483614650228 0.1526100525423357 T T T
 0.2498194588841369 0.0001286239647389 0.0774852943641807 T T T
 0.7501669777317647 0.0003924995774157 0.0774051864135873 T T T
 0.0005649933900711 0.2506088678168933 0.0775059529244695 T T T
 0.2500745985739414 0.2503955658115193 0.0765236489948863 T T T
 0.5005498904646433 0.2507509273433965 0.0774822598935587 T T T
 0.7502805459541857 0.2506420303732610 0.0764894209090144 T T T
 0.2498933256669389 0.4999734947353944 0.0774861734939161 T T T
 0.7499130262303608 0.5000986937091504 0.0775030361212695 T T T
 0.0005312974107768 0.7507555749951477 0.0774906751405962 T T T
 0.2500635278260308 0.7504310413924955 0.0764698563521056 T T T
 0.5004395866257969 0.7506845790410848 0.0774594107178123 T T T
 0.7501636641177984 0.7505318708374810 0.0765584344302190 T T T
 0.0798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.1681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.0815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.3318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.5815546053659020 0.4184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.8318715802593886 0.4201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.0798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.5798809452793563 0.6681284197406114 0.0000000000000000 F F F
 0.0815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.3318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F
 0.5815546053659020 0.9184453946340980 0.0022119039967947 F F F
 0.8318715802593886 0.9201190547206437 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Glycerol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface
 1.0000000000000000
 11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

3 3 8 8 72

Selective dynamics

Direct

0.3910298501274085 0.4645438014154541 0.4298556226627088 T T T
0.5335554710611549 0.5303470346203926 0.4082669370654055 T T T
0.6183536533486781 0.6855413547079977 0.4107019458956683 T T T
0.3284452474794995 0.3180770426256099 0.4278411683119069 T T T
0.6135358855291092 0.4765535354804273 0.4262066451917842 T T T
0.7458526780407353 0.7376566266584069 0.3857281059830414 T T T
0.2941228940559226 0.2881753699915369 0.3971981830211281 T T T
0.3275239887048322 0.5012213285588513 0.4131369928546986 T T T
0.5144074557582355 0.5027394608164645 0.3707560855928619 T T T
0.3999466450174330 0.4908665830503348 0.4658222150713644 T T T
0.5511521604422090 0.3774424885406144 0.4296796272228264 T T T
0.5630524197052452 0.7334540522619711 0.3957034532876691 T T T
0.6447096438579228 0.7193436206669183 0.4459078677541186 T T T
0.7841449820170739 0.6783248210610279 0.3928538004826579 T T T
0.3319219003873257 0.1657668603420653 0.2274590082212447 T T T
0.8325268665895660 0.1659688590726009 0.2274925856512718 T T T
0.3313746446328656 0.6653425890144903 0.2272917101964677 T T T
0.8317515305386253 0.6663567655651140 0.2282151901058166 T T T
0.0830351493712244 0.9164702417758922 0.2275892253910664 T T T
0.5824770506947253 0.9165778053136042 0.2275170452971119 T T T
0.0816277231431439 0.4155995988423744 0.2274041944374567 T T T
0.5815861858569557 0.4153181080937738 0.2274370157041180 T T T
0.4984782726364858 0.9993611623427067 0.3021384838347356 T T T
0.0011071271290306 0.0005747812244258 0.3021471905459405 T T T
0.9985204372067846 0.4989535648583938 0.3020088816233031 T T T
0.2465142425289159 0.0013916276217409 0.3002558281811115 T T T
0.7460588185447723 0.0036450724987972 0.2998290215943811 T T T
0.9962917599246932 0.2518503629109922 0.3000673132687072 T T T
0.2482230345346069 0.2477516797361498 0.3024653044798852 T T T
0.4958268785631064 0.2502759649244537 0.2999340083158588 T T T
0.7490670109973603 0.2494222991690228 0.3019419025968784 T T T
0.2449328042764831 0.5014590710930305 0.2998309447601830 T T T
0.4958654648943541 0.4962540721693424 0.3020159204846317 T T T
0.7463518235819364 0.5008663762120683 0.2994646494514079 T T T
0.9970487854702920 0.7521253150115197 0.2998289388611005 T T T
0.2482215122128126 0.7487808327762354 0.3020033159169732 T T T
0.4941685462332113 0.7525319773309490 0.2993531893336144 T T T
0.7477777965412765 0.7514769150187872 0.3045113462932820 T T T
0.0821118714891451 0.1657947785061701 0.2277497103913913 T T T
0.5824114294536992 0.1660085007161446 0.2276344007788417 T T T
0.3323733399564535 0.4155491387740590 0.2277596447235729 T T T
0.8325776967902241 0.4157402841966960 0.2274553775550208 T T T
0.0820371061659355 0.6656133106717831 0.2276088970333386 T T T

0.5837189392728865 0.6652231851206220 0.2284628215237944 T T T
0.3321926746015974 0.9160847595993901 0.2277467244525934 T T T
0.8318637076261742 0.9126298254400953 0.2289555594704983 T T T
0.1668629975949160 0.0810755063413491 0.1564280127052571 T T T
0.4153479985672676 0.0829794070146697 0.1547882969595500 T T T
0.6669665326375301 0.0809071347730119 0.1564421156201167 T T T
0.9139337994133546 0.0805148099474074 0.1554553427207774 T T T
0.1654637461801836 0.3327789365166713 0.1550650538783548 T T T
0.4170139955148736 0.3312716593921802 0.1563322051378907 T T T
0.6652117497265990 0.3330372293644437 0.1547685366077445 T T T
0.9169472432583560 0.3303839689011766 0.1563428905245484 T T T
0.1671096899292633 0.5809711130324223 0.1563459642629930 T T T
0.4165663815586477 0.5837958585353132 0.1551602491822921 T T T
0.6673834263877502 0.5812552877517384 0.1565718199188321 T T T
0.9152489181644184 0.5830383831026498 0.1547459952078931 T T T
0.1653829247375347 0.8329972820410008 0.1548585062463154 T T T
0.4172738887033157 0.8312595155406167 0.1564903256865574 T T T
0.6655128384374533 0.8325025365386702 0.1554289055549197 T T T
0.9169725275843446 0.8307593694854745 0.1567046225440796 T T T
0.9989439724067711 0.9999348645332713 0.0783783111828891 T T T
0.2490668955167844 0.9996666517656478 0.0793528024768444 T T T
0.4989959223492286 0.9997489101741776 0.0782432486060009 T T T
0.7492378314978463 0.9996605382261984 0.0795272174087228 T T T
0.9989492696512313 0.2493396778498818 0.0796383769277183 T T T
0.2487114398458148 0.2497686950741739 0.0782345910213908 T T T
0.4990496888189044 0.2496218895225674 0.0793304676603323 T T T
0.7490494167330035 0.2497544098516422 0.0782395767233740 T T T
0.9989733815591825 0.4996291840771621 0.0781970541693882 T T T
0.2490503498255770 0.4994084881424254 0.0795251593316524 T T T
0.4988296363304072 0.4998606548890758 0.0783027612148211 T T T
0.7491088896363022 0.4997007765036210 0.0793802338587607 T T T
0.9992107445868486 0.7497374220345450 0.0793947859837641 T T T
0.2490125476628345 0.7496726699617936 0.0782773884929704 T T T
0.4991666679653228 0.7497069836162722 0.0794692360515853 T T T
0.7490111354400186 0.7500052041689863 0.0783966404087848 T T T
0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Glycerol on Pt₁₆/Pt₈Ni₈/Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Ni Pt

3 3 8 8 72

Selective dynamics

Direct

0.3912185738108427 0.4710456614653384 0.4209735308955503 T T T
0.5395354263617675 0.5403394057178803 0.4026288341597856 T T T
0.6248646376799738 0.6970765025164493 0.4058291868667238 T T T
0.3281459315057355 0.3235654573349279 0.4166296691271315 T T T
0.6183672165371769 0.4847164551936805 0.4211835307623911 T T T
0.7553489021747211 0.7502160588465761 0.3815224819647745 T T T
0.3001391112932265 0.2985677408237675 0.3849607053006300 T T T
0.3318551132425435 0.5120390128253597 0.4030832313241579 T T T
0.5258478797435501 0.5153605370566896 0.3646835715817391 T T T
0.3924010941888520 0.4923420415758346 0.4571871760227622 T T T
0.5572670561605065 0.3834306270356174 0.4216121784771803 T T T
0.5698814827232854 0.7460569391203747 0.3903706011795588 T T T
0.6495263514034024 0.7304620060075243 0.4411635141744244 T T T
0.7936948419835789 0.6897040287679467 0.3886976893620883 T T T
0.3317541384359317 0.1679876327011865 0.2256794350086114 T T T
0.8325513829792679 0.1684237032291097 0.2256122894322970 T T T
0.3311422920016409 0.6672096443544189 0.2254369699610148 T T T
0.8316884793589004 0.6683326228830171 0.2262188281732505 T T T
0.0829520213362784 0.9186225651805587 0.2257145141434030 T T T
0.5822136717617671 0.9187785085833797 0.2256185960802840 T T T
0.0816250611049206 0.4177200605188292 0.2255911375871611 T T T
0.5815927985286454 0.4172589780596537 0.2255411335730476 T T T
0.4985617661842752 0.0015380428261270 0.3003699416488065 T T T
0.0011367492983193 0.0029390061260082 0.3001437603717002 T T T
-0.0013604871498269 0.5012711723133514 0.3002513952533919 T T T
0.2469678910724057 0.0036033978202267 0.2985941154025029 T T T
0.7463422339184876 0.0055716425470689 0.2980317132826097 T T T
0.9967120742061929 0.2539044012810185 0.2984151537944313 T T T
0.2484631769077568 0.2504219241382438 0.3006234402932875 T T T
0.4962596398930256 0.2526211780089310 0.2984067698042858 T T T
0.7489436277165517 0.2517346557900763 0.3001914300659990 T T T
0.2455039311804668 0.5034514770195340 0.2982665766441097 T T T
0.4965807604824270 0.4992643019407325 0.2995158093243581 T T T
0.7468264042164935 0.5031120030170627 0.2977786100913543 T T T
0.9974798640290655 0.7540463240877910 0.2980401055894561 T T T
0.2484302562116187 0.7510931597432963 0.3002469963669201 T T T
0.4946104222643702 0.7544235742446339 0.2975612407948384 T T T

0.7486621015132918 0.7543297496638426 0.3018274792206098 T T T
 0.0821270066711612 0.1683230839697083 0.2260666061455721 T T T
 0.5820406439591240 0.1680893940191460 0.2261036237190309 T T T
 0.3320974870825467 0.4177172101330611 0.2260526248416200 T T T
 0.8326156897378453 0.4176484714011047 0.2258751498325750 T T T
 0.0822074173726009 0.6674841967710506 0.2259894763218543 T T T
 0.5838051367913335 0.6681308228495998 0.2265310969914084 T T T
 0.3318545192053148 0.9181686896141931 0.2261589836457602 T T T
 0.8322788672622053 0.9161109381128817 0.2269578595801229 T T T
 0.1666356749641681 0.0832216165372893 0.1554253168827220 T T T
 0.4150556197500354 0.0848433639700502 0.1539788902272196 T T T
 0.6666705465139439 0.0831679239133921 0.1554671592387966 T T T
 0.9140546113762410 0.0830965473854612 0.1543520534751113 T T T
 0.1655396379517541 0.3349120864138510 0.1540687413410321 T T T
 0.4168467967982981 0.3332632936282354 0.1553578939106282 T T T
 0.6650055570837684 0.3349409088607231 0.1539878866354340 T T T
 0.9168531207252630 0.3326183055274914 0.1552909922085067 T T T
 0.1670469332979711 0.5830481127896304 0.1552943609176570 T T T
 0.4165106399370016 0.5858075138782349 0.1542037666000506 T T T
 0.6671754348278951 0.5833237915177624 0.1555092777664831 T T T
 0.9151035148953076 0.5849533301917004 0.1539602250747780 T T T
 0.1650802326995861 0.8348895307186425 0.1540228208507438 T T T
 0.4168995235950623 0.8333614752479709 0.1555101006829926 T T T
 0.6654703589772428 0.8348185627701417 0.1543689811115337 T T T
 0.9167974108371537 0.8329508389468345 0.1556101854534048 T T T
 0.9989878980543726 0.0011652006796913 0.0782297970900552 T T T
 0.2490922782649019 0.0008331693320319 0.0792208359237651 T T T
 0.4989588307134808 0.0010032649213331 0.0781577364455069 T T T
 0.7492927711837516 0.0010834328832160 0.0793005410941319 T T T
 0.9990334494512576 0.2507893622817875 0.0793595662662755 T T T
 0.2487528983917365 0.2509154978383166 0.0781240027775319 T T T
 0.4991616009630808 0.2507878635792060 0.0791944218954143 T T T
 0.7490411625252162 0.2510437823989636 0.0781661555969174 T T T
 0.9989723490872031 0.5009136418875320 0.0781101765602032 T T T
 0.2490644235420429 0.5006906928773611 0.0792871410590564 T T T
 0.4988244984862701 0.5009898018844725 0.0782031709168013 T T T
 0.7491770259741618 0.5008573520039356 0.0792187474611496 T T T
 0.9991958251528310 0.7508456814949036 0.0792375182977882 T T T
 0.2489467859795760 0.7509329092271088 0.0781767318288832 T T T
 0.4991213000686671 0.7509314547288151 0.0792648233834223 T T T
 0.7490235425289941 0.7511904762755583 0.0782418467894042 T T T
 0.0813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.3330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.5813943265851620 0.1686056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.8330809006307334 0.1669190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.0830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.3313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F
 0.5830809006307334 0.4169190993692666 0.0019231004552225 F F F
 0.8313943265851620 0.4186056734148380 0.0000000000000000 F F F

0.0813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.3330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.5813943265851620 0.6686056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.8330809006307334 0.6669190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.0830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.3313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F
0.5830809006307334 0.9169190993692666 0.0019231004552225 F F F
0.8313943265851620 0.9186056734148380 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE Glycerol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.2217852042346156 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.6108926021173078 9.7183510626745999 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.3866548267880365 0.4618063760650431 0.4330285751669710 T T T
0.5305463276393537 0.5293608385603201 0.4122945812465422 T T T
0.6151422258014104 0.6843649165677549 0.4153248982397140 T T T
0.3254782296653303 0.3157241884090770 0.4304290490980007 T T T
0.6094825964498097 0.4745682083141127 0.4299583576154518 T T T
0.7427274598555204 0.7381133099381088 0.3900912456429479 T T T
0.2927848260084606 0.2868600037977541 0.3995247313603822 T T T
0.3236698075061375 0.4986452130937127 0.4159663381954602 T T T
0.5127979079050197 0.5035372748226251 0.3743986098429785 T T T
0.3933383654950842 0.4867657431961577 0.4690913783238283 T T T
0.5474632821665124 0.3748592520471383 0.4319923190338632 T T T
0.5595391695025450 0.7328335487471974 0.4009181331093569 T T T
0.6421771260154348 0.7169049273068667 0.4506135062918230 T T T
0.7816333906231193 0.6788665693799203 0.3966413526776968 T T T
-0.0007777637920874 -0.0002130034728870 0.3074901594941784 T T T
0.2476282270574846 0.9980451459515650 0.3077156949369290 T T T
0.4970988536629579 0.9985127600679425 0.3074015354890311 T T T
0.7470985309354634 -0.0000314146245595 0.3072392353679511 T T T
0.9975327987048092 0.2482074196591549 0.3072452076668008 T T T
0.2460828184557688 0.2468688234847009 0.3078096731036784 T T T
0.4966626483441757 0.2460138720108518 0.3071962943672679 T T T
0.7476500010909775 0.2480578012339981 0.3070294024366010 T T T
0.9975744288339931 0.4978881102639814 0.3070244033439249 T T T
0.2461453646744666 0.4981255450045308 0.3070377499812807 T T T
0.4945278534387106 0.4946778684352202 0.3071731501918122 T T T
0.7482406067779491 0.4957175849064160 0.3067848025290117 T T T
-0.0006270168601187 0.7483493322585059 0.3074038575034851 T T T
0.2469630393891645 0.7481599358465669 0.3071606503393574 T T T
0.4951914043718330 0.7492136398870453 0.3066403713243460 T T T
0.7471794178077300 0.7480793359699243 0.3101343591379816 T T T
0.0814506732160091 0.1650835313034916 0.2294022084107321 T T T

0.3314146795347462 0.1654761972998915 0.2295817593852741 T T T
0.5821702202424555 0.1657441654466645 0.2292882750447502 T T T
0.8322190360227669 0.1652564288620051 0.2293117148101682 T T T
0.0816893084589268 0.4150413101614992 0.2292668518129187 T T T
0.3318648651937118 0.4155064231334379 0.2295049939933048 T T T
0.5815373068312470 0.4150022098031189 0.2296255140622512 T T T
0.8322439392724026 0.4154386328143763 0.2289083940726540 T T T
0.0815116879368868 0.6652533274755071 0.2291975865433515 T T T
0.3313186267610519 0.6651242516531075 0.2290798383514912 T T T
0.5824246858260642 0.6658053613599745 0.2307068572085898 T T T
0.8316080176801874 0.6658961513771690 0.2309076480785444 T T T
0.0821969116983349 0.9157979846308988 0.2298657557269192 T T T
0.3317976355318351 0.9156702417208791 0.2294877913825409 T T T
0.5817077152796615 0.9160318485432047 0.2294328494205178 T T T
0.8307995543126664 0.9138032808171149 0.2312112975506940 T T T
0.1661003357829195 0.0826997654597637 0.1535966472857538 T T T
0.4161774129587463 0.0828684608333419 0.1534871301315417 T T T
0.6662090328197263 0.0830335709697231 0.1534854392134422 T T T
0.9149747387285474 0.0807636975373320 0.1537403422518783 T T T
0.1663777641526576 0.3327797886175512 0.1535703654179292 T T T
0.4160342045435050 0.3328360217030871 0.1535611060350891 T T T
0.6656973264968497 0.3331081932232727 0.1533602480251917 T T T
0.9160470211797905 0.3324924629589019 0.1533091060503415 T T T
0.1657360853675105 0.5826559699438605 0.1533674926167044 T T T
0.4171814307805276 0.5836143201300131 0.1535317042978060 T T T
0.6661143191664854 0.5832628106993070 0.1542107365883743 T T T
0.9152546649323497 0.5836525115206231 0.1535210846680171 T T T
0.1661191996903834 0.8330229896102247 0.1535624040316998 T T T
0.4161458548888489 0.8331142308121919 0.1534757660250453 T T T
0.6659461221745617 0.8324352686353890 0.1540614414185451 T T T
0.9157045483583298 0.8326964633075365 0.1543076549567935 T T T
0.9997322823135959 0.9997331707951675 0.0777172624236428 T T T
0.2496822860501209 0.9997281044150966 0.0776033433711020 T T T
0.4997643513128638 0.9998493309172498 0.0775340196083456 T T T
0.7499401358911614 0.9999168175888109 0.0776750919774728 T T T
0.9996998894135165 0.2496978945882719 0.0776362503333620 T T T
0.2495626978830959 0.2497561151329970 0.0776015147483978 T T T
0.4997265327690313 0.2497332152636121 0.0775457376773486 T T T
0.7499591983079976 0.2497130265135220 0.0775100754540063 T T T
0.9997857698319536 0.4997112163771634 0.0775343012928110 T T T
0.2495262328080876 0.4996457654071043 0.0775961518468039 T T T
0.4998983207353591 0.4999923220891956 0.0777066446113397 T T T
0.7497884085634041 0.5000103020162447 0.0776557186712855 T T T
0.9997475657004555 0.7499207299359142 0.0776816646842146 T T T
0.2496861242463486 0.7497570782188323 0.0775599946141969 T T T
0.4997314246800212 0.7498358406146256 0.0775999833737473 T T T
0.7497601238995276 0.7500584847627609 0.0778987279543594 T T T
0.08333333333333357 0.16666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.33333333333333357 0.16666666666666643 0.0000000000000000 F F F

0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
 0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F

SYSTEM: PBE+D3 Glycerol on Pt(111) surface

1.0000000000000000

11.0824408039746078 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-5.5412204019873039 9.5976752721743850 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 29.7438238767443615

C O H Pt

3 3 8 80

Selective dynamics

Direct

0.3908039565534816 0.4665985814471301 0.4250571715982212 T T T
 0.5393309497666412 0.5373929596961837 0.4067083994292437 T T T
 0.6244776873857487 0.6939429888137920 0.4102675611141216 T T T
 0.3294065287987109 0.3194894788075192 0.4205678552858610 T T T
 0.6183920689501478 0.4810269462882588 0.4240434647193504 T T T
 0.7545305068037546 0.7480680469671176 0.3855700795973162 T T T
 0.2999787703233850 0.2940647778345881 0.3889666106936644 T T T
 0.3308703897947080 0.5068599122210965 0.4071312376096971 T T T
 0.5242533016700824 0.5137484084563416 0.3684188304525121 T T T
 0.3917437397522961 0.4877398616355536 0.4612896330841665 T T T
 0.5572208178880863 0.3795874942872731 0.4240270528418968 T T T
 0.5690307439411504 0.7432134207641923 0.3953115506820892 T T T
 0.6506318127829764 0.7266909078616646 0.4456047692771710 T T T
 0.7935154314170682 0.6875930690804030 0.3921367315625918 T T T
 0.0018672332350256 0.0017446619658107 0.3060268582966935 T T T
 0.2499186989653459 -0.0003460985319774 0.3064424238885099 T T T
 0.4990819166258831 -0.0002710794838095 0.3062940345365186 T T T
 0.7493765976807480 0.0015670007603358 0.3058497769180738 T T T
 -0.0001727044120796 0.2498749118580703 0.3059923241255190 T T T
 0.2486992923336409 0.2487593045315226 0.3064682133929337 T T T
 0.4990728755898556 0.2478993022394493 0.3061333509390929 T T T
 0.7496490132628303 0.2495953354729567 0.3058705245005063 T T T
 -0.0003045807156668 0.4992214853989527 0.3059068713369091 T T T
 0.2485552686201488 0.4996534723605583 0.3060088984795878 T T T
 0.4975757021365484 0.4972551753707513 0.3046784086710186 T T T

0.7505208276884717 0.4977260119971239 0.3055731259742132 T T T
 0.0017729469646796 0.7498524231578070 0.3060113316239939 T T T
 0.2492237715169167 0.7493361792935669 0.3060528675234938 T T T
 0.4977716830085973 0.7507255173644658 0.3052463050751948 T T T
 0.7510736941178511 0.7509497924713366 0.3073212769137145 T T T
 0.0831083500299285 0.1665551068998515 0.2281709243105083 T T T
 0.3331000876260591 0.1665429469359602 0.2284259072590782 T T T
 0.5833258886801133 0.1664840943664489 0.2282113748917469 T T T
 0.8335053390565567 0.1666219312913079 0.2280997567014834 T T T
 0.0831149830269318 0.4164080921898757 0.2281848773650756 T T T
 0.3329875923757975 0.4164491033728400 0.2281502993482813 T T T
 0.5832786498426705 0.4160161998505398 0.2282309765994153 T T T
 0.8335394914128303 0.4164607484136373 0.2278408721613775 T T T
 0.0831802503960783 0.6663857872825251 0.2280657107078202 T T T
 0.3327934292463407 0.6662304027706849 0.2279682347634779 T T T
 0.5836898890794116 0.6670491315174075 0.2287767725014770 T T T
 0.8331228896033611 0.6666489789487294 0.2291858516088382 T T T
 0.0835180637068945 0.9167643207840306 0.2285309650843876 T T T
 0.3331900670542423 0.9165826971004200 0.2283851611780775 T T T
 0.5831746819820850 0.9169657852549769 0.2282031261664444 T T T
 0.8328191421448128 0.9158318496848696 0.2294080193003908 T T T
 0.1667186156187586 0.0832591765605310 0.1529619869760967 T T T
 0.4166193998185886 0.0832021474183701 0.1528315226235737 T T T
 0.6666551262701180 0.0833678791876624 0.1528078948763085 T T T
 0.9158356171101422 0.0817753229556791 0.1529885520902824 T T T
 0.1668825568340006 0.3333227189362445 0.1528969063984008 T T T
 0.4165733369140057 0.3331392047990974 0.1528653421387934 T T T
 0.6664404828370588 0.3333733864258459 0.1527634194459473 T T T
 0.9166974415717151 0.3331556631409655 0.1527355023399526 T T T
 0.1665465995065867 0.5832453057546594 0.1527686832673714 T T T
 0.4175500044428187 0.5838640433848479 0.1527801817899370 T T T
 0.6668138985778036 0.5834991264961397 0.1532628058165920 T T T
 0.9162241530460561 0.5839829385546355 0.1528550392927596 T T T
 0.1667328827376544 0.8334549171798286 0.1528760756260770 T T T
 0.4166337257476528 0.8334175142916990 0.1528072995151239 T T T
 0.6666677691670813 0.8331140608523399 0.1532066019917428 T T T
 0.9166124382837946 0.8333210920170099 0.1534641971333741 T T T
 -0.0000444447648559 -0.0000517484459416 0.0776597044780606 T T T
 0.2499257689221402 -0.0000457544520053 0.0774966327410827 T T T
 0.4999327785281869 -0.0000264643709636 0.0774654272328581 T T T
 0.7501210883320341 0.0000794749232250 0.0775463139413990 T T T
 -0.0001301374996449 0.2499521081857391 0.0775400771398554 T T T
 0.2498286338387350 0.2499018804784428 0.0775192800927219 T T T
 0.4999763195579117 0.2498656865705363 0.0774659623563432 T T T
 0.7501701950399323 0.2498655339678577 0.0774707546060257 T T T
 0.0000792726660488 0.4998772683234856 0.0774826906572583 T T T
 0.2497008253226579 0.4997467791865368 0.0775134861860415 T T T
 0.5000413350724444 0.5000362952321628 0.0775717921324477 T T T
 0.7500560356545617 0.4999878819990788 0.0775319874161002 T T T

0.0000166498083733 0.7500340539354472 0.0775539258973565 T T T
0.2499079273015795 0.7499327226976489 0.0775010121395062 T T T
0.4999685144403531 0.7500141403691315 0.0774836006223096 T T T
0.7500919131834076 0.7500901705654340 0.07777771298180539 T T T
0.0833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.1666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.4166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.6666666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.0833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.3333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.5833333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F
0.8333333333333357 0.9166666666666643 0.0000000000000000 F F F