

Supplementary Information: Olefin Methylation and Cracking Reactions in H-SSZ-13 investigated with Ab Initio and DFT Calculations

Philipp N. Plessow*^a and Felix Studt^{a,b}

Table of contents

S1 Further analysis and decomposition of free energies

S2 Additional benchmark calculations

S3 Construction scheme of clusters for MP2-corrections

S4 List of computed energy contributions

S5 Cartesian coordinates of optimized structures including frequencies

S1 Further analysis and decomposition of free energies

The data presented in the main text is now further analyzed in terms of Gibbs free energies and its components.

S1.1 Most Stable Olefin Adsorption

Similar to Fig. 2 of the main text (ΔH), Figures S1-S4 show – using the same reference – the Gibbs free energy (ΔG), as well as their contributions from entropy ($-T\Delta S$), from MP2-cluster calculations ($\Delta\Delta E$) and the D3-part of the PBE-D3 DFT calculations.

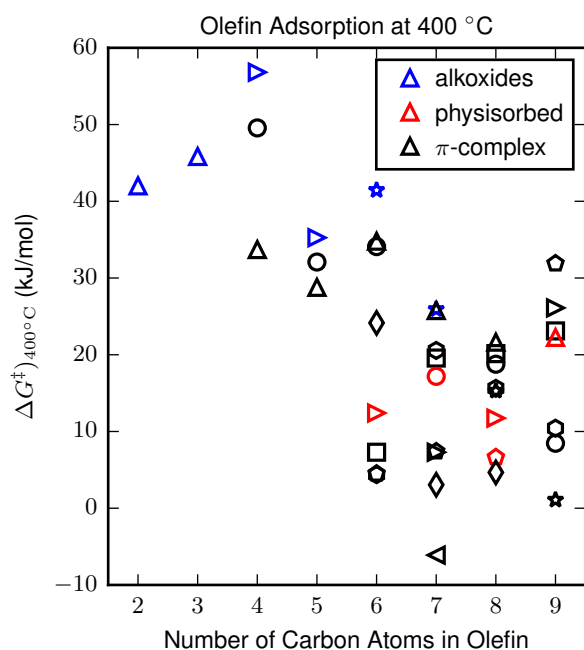


Figure S 1 Gibbs free Energy.

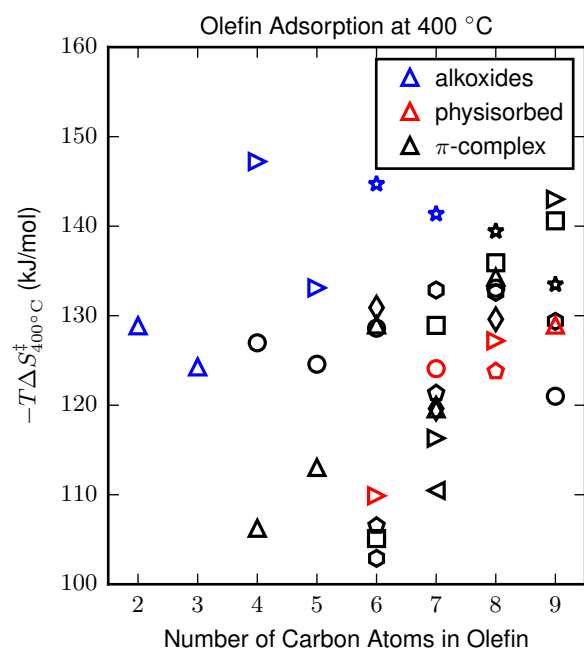


Figure S 2 Entropy contribution.

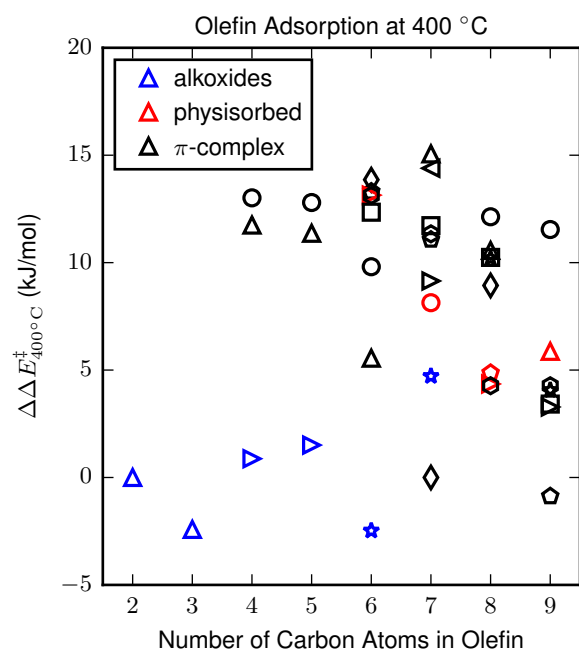


Figure S 3 Difference to MP2.

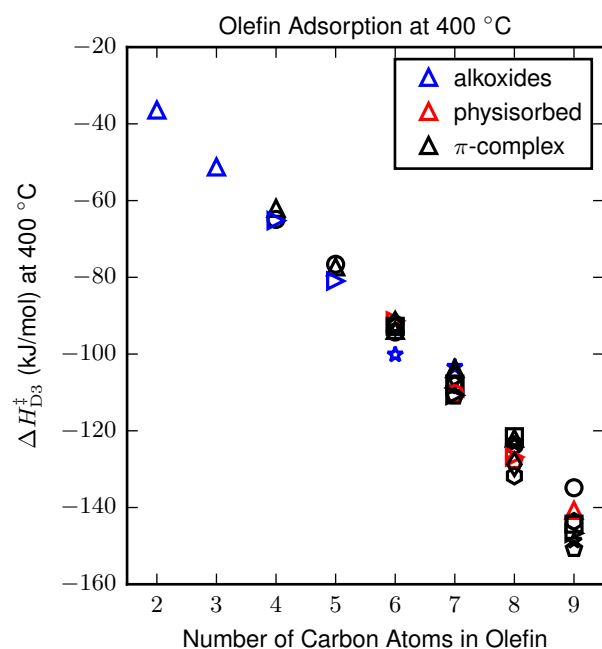


Figure S 4 D3-contribution.

S1.2 Methylation

Similar to Fig. 4a of the main text (ΔH), Figures S5-S8 show – using the same reference – the Gibbs free energy (ΔG), as well as their contributions from entropy ($-T\Delta S$), from MP2-cluster calculations ($\Delta\Delta E$) and the D3-part of the PBE-D3 DFT calculations.

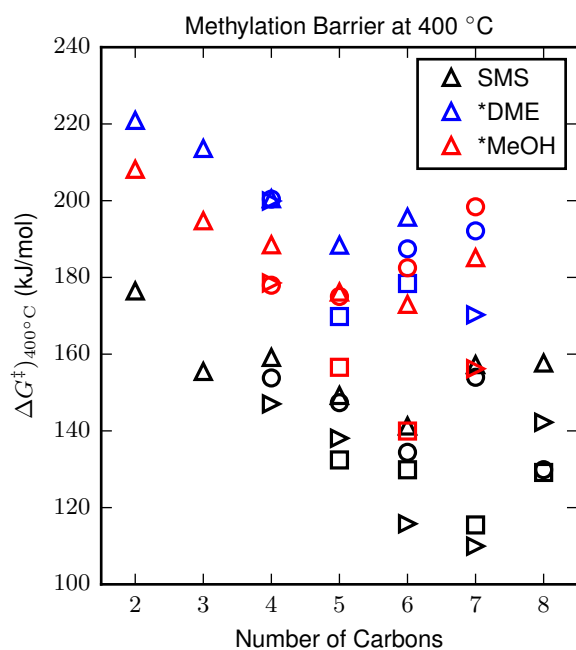


Figure S 5 Gibbs free Energy.

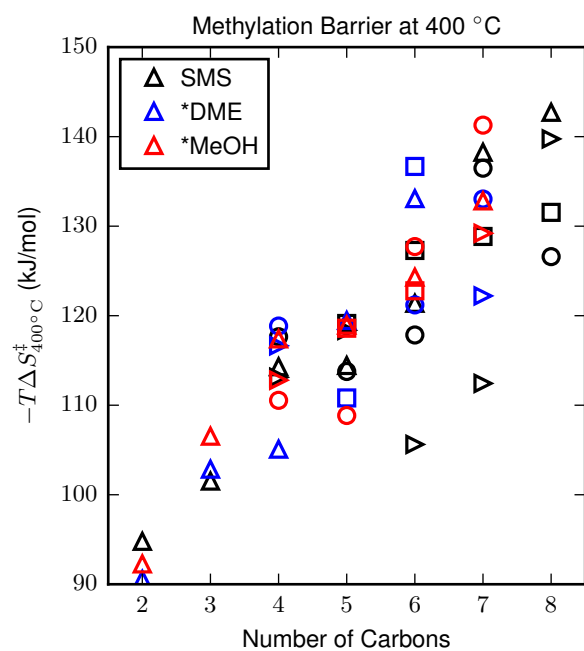


Figure S 6 Entropy contribution.

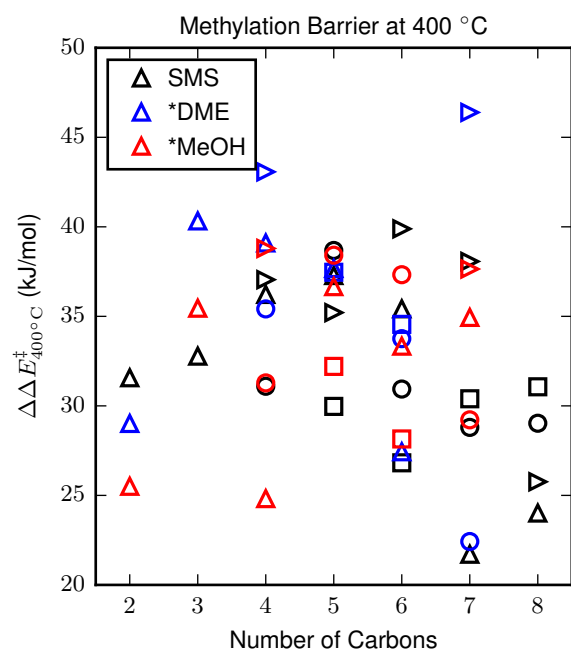


Figure S 7 Difference to MP2.

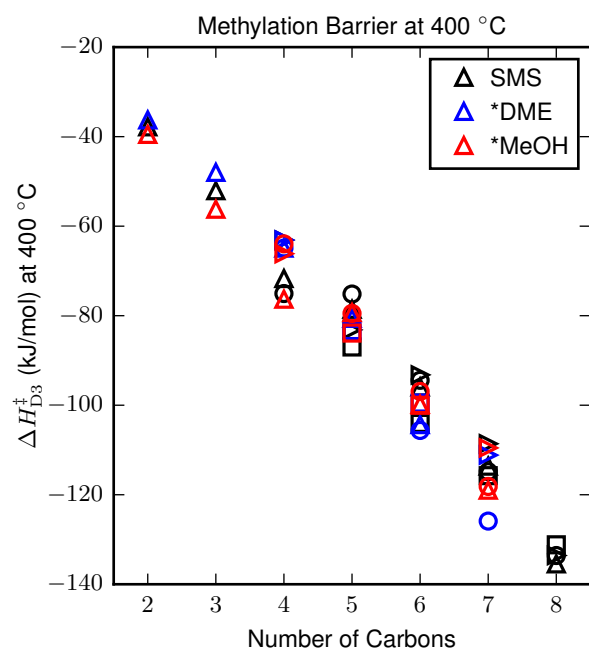


Figure S 8 D3-contribution.

S1.3 Cracking

Similar to Fig. 6 of the main text (ΔH), Figures S9-S12 show – using the same reference – the Gibbs free energy (ΔG), as well as their contributions from entropy ($-T\Delta S$), from MP2-cluster calculations ($\Delta\Delta E$) and the D3-part of the PBE-D3 DFT calculations.

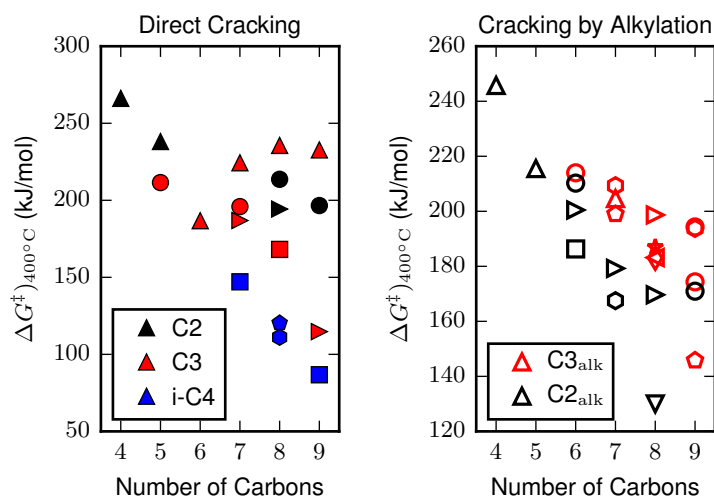


Figure S 9 Gibbs free Energy.

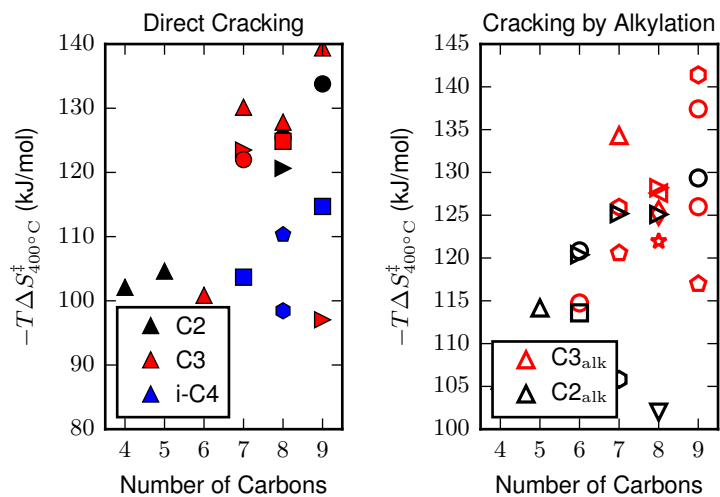


Figure S 10 Entropy contribution.

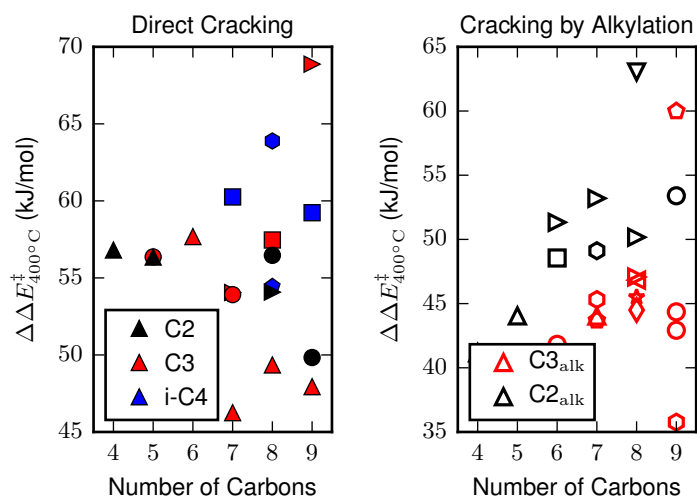


Figure S 11 Difference to MP2.

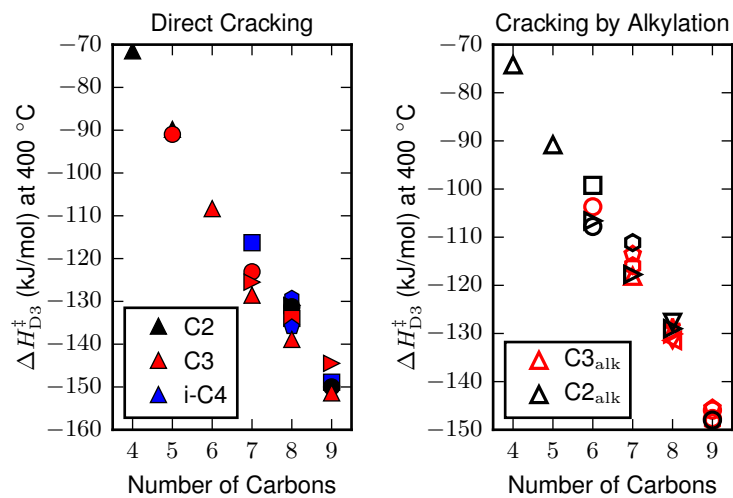


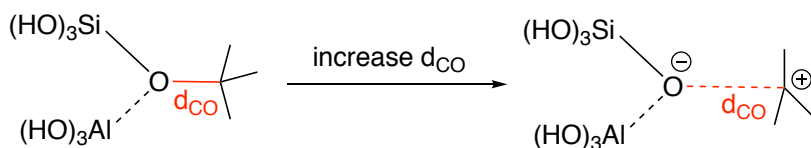
Figure S 12 D3-contribution.

S2 Additional benchmark calculations

S2.1 Comparison to coupled cluster calculations for T2 models and formation of cations

These calculations employ a 2T OH-saturated model of the active site: $\text{Si}(\text{OH}_3)\text{-OH-Al}(\text{OH}_3)$. The adsorption of iso-butene was investigated in the form of a tert-butoxy alkoxide complex. Since the tert-butyl cation is (in this system, i.e. with the counter ion $\text{Si}(\text{OH}_3)\text{-O-Al}(\text{OH}_3)$) not a minimum but is spontaneously deprotonated, the C-H bond distances were constrained to the value of the free tert-butyl cation. A constrained optimization was now performed, where the distance from active-site oxygen to the central carbon of the t-butyl cation was kept fixed. Structures were optimized at the PBE-D3/dhf-SV(P) level of theory and energies were computed as single points on these structures.

The reaction energies relative to iso-butene and the acid site model are shown in Figure S13. It can be seen that the depth of the minimum is well described by all methods compared to CCSD(T). When the the C-O distance is increased, i.e. when a zwitterionic complex with a free t-butyl cation is formed, the DFT-calculations begin to deviate notably from the CCSD(T) results. The error of PBE-D3 becomes as large as 40 kJ/mol and is somewhat smaller (25 kJ/mol) when the hybrid functionals PBE0-D3 or B3LYP-D3 (not shown), see Fig. S14. The deviation between MP2 and CCSD(T) is typically on the order of 5 kJ/mol. MP2 slightly overestimates the energy required to form cations.



Scheme S1 Illustration of the formation of the zwitterion in the T2 system.

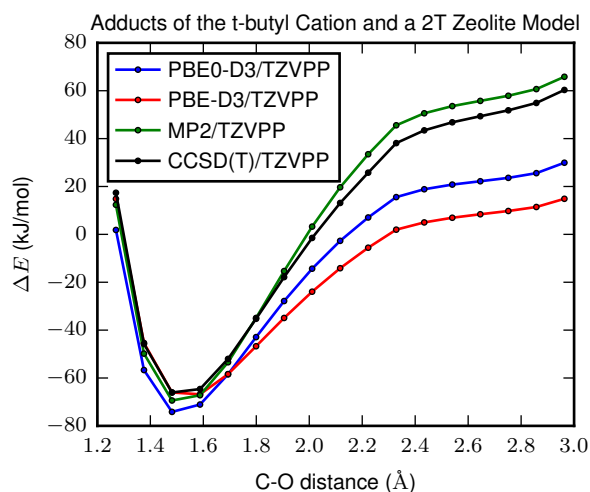


Figure S13 Energy relative to iso-butene and acid site.

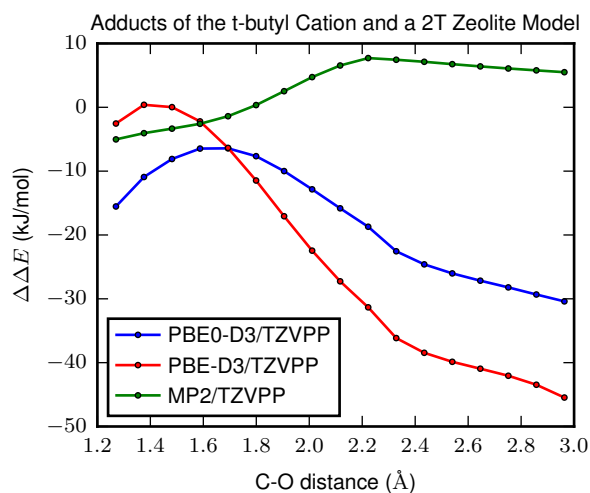
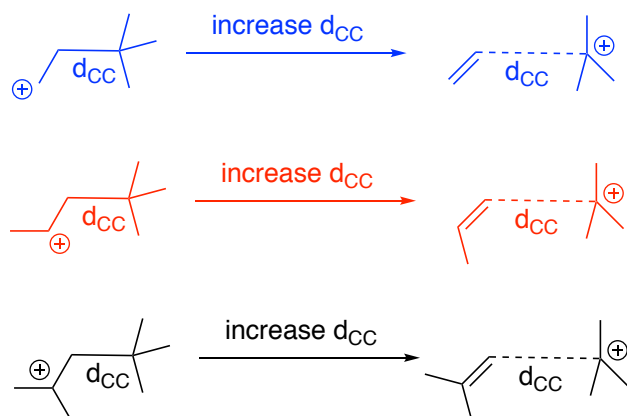


Figure S14 Error relative to CCSD(T) shown in Figure S13.

S2.2 Comparison to coupled cluster calculations for T2 models and formation of cations

We now study the energy required to break the C-C bond of a protonated olefin as an idealized cracking reaction. This is shown in Scheme S2. As in S2.1, optimizations were carried out at the PBE-D3/dhf-SV(P) level of theory and energies were evaluated as single points on these geometries. The obtained energy curves are shown in Figures S15-S17 for different levels of theory. The curves were shifted so that the reference energy (0) is the minimum, typically the adduct of olefin and t-butyl cation. On all levels of theory, there is no barrier for bond formation or bond breaking. Addition formation between the t-butyl cation and propylene or iso-butene is downhill in energy. For ethylene, a primary cation is formed and only MP2 predicts a shallow minimum with weak binding of < 10 kJ/mol. When comparing to CCSD(T), MP2 seems to slightly (≈ 5 kJ/mol) overestimate the energy required to crack the cation to olefin and fragment cation, whereas PBE-D3 strongly (≈ 20 kJ/mol) underestimates this energy.



Scheme S2 Illustration of cracking of isolated cations.

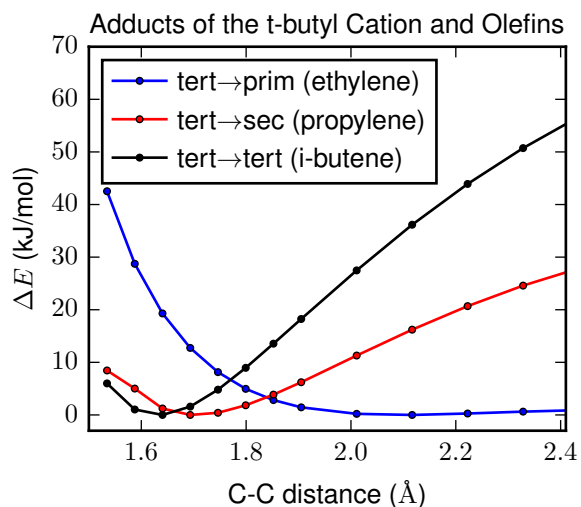


Figure S15 Cracking of isolated cations (in vacuum). CCSD(T)/def2-TZVPP.

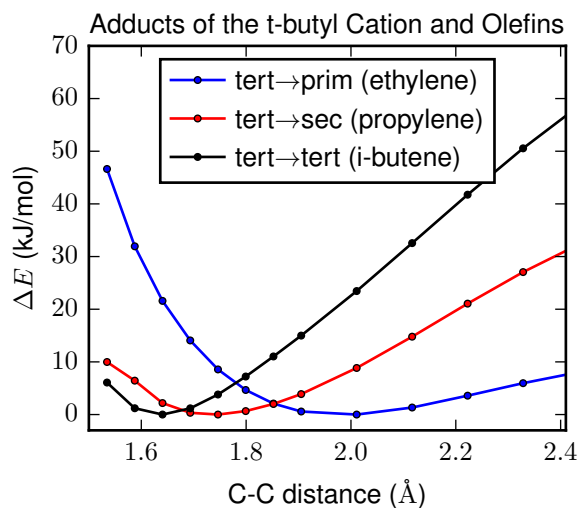


Figure S16 Cracking of isolated cations (in vacuum). MP2/def2-TZVPP.

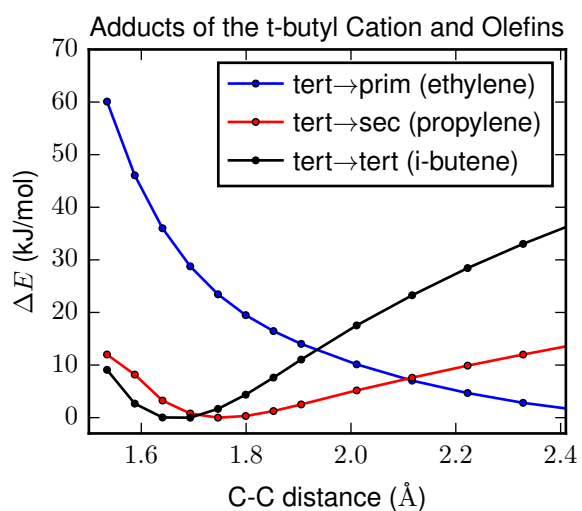


Figure S17 Cracking of isolated cations (in vacuum). PBE-D3/def2-TZVPP.

S3 Construction scheme of clusters for MP2-corrections

Figure S18 shows a model of the periodic structure as well as of the cluster model.

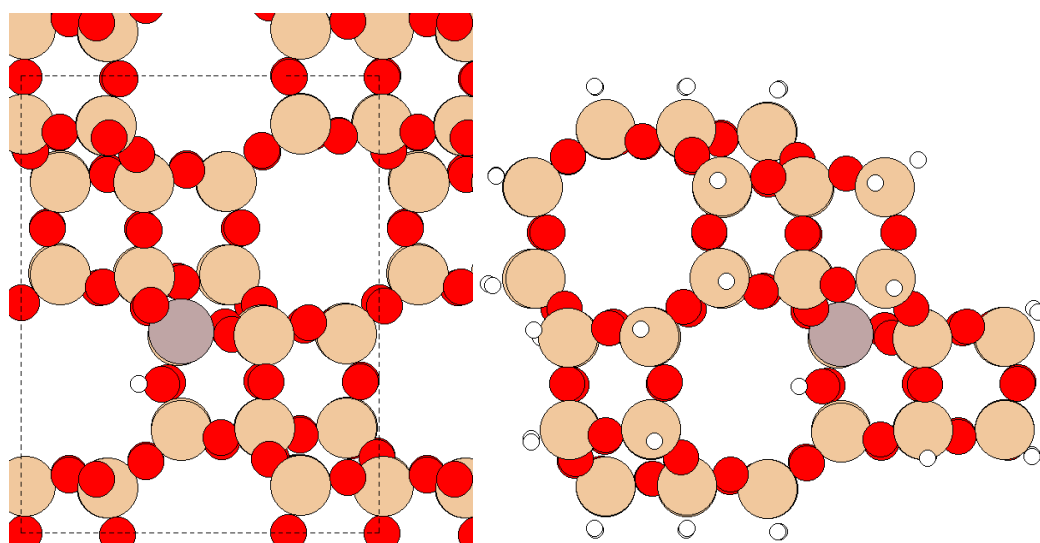


Figure 18 Atomic structure of both the periodic structure (left) and the cluster model (right).

The general structure of the cluster is the same as in our previous work (Ref. 41 of the main text). Here, however we have chosen not to reoptimize the cluster structure, but to instead saturate the cluster that is cut from the fully optimized periodic structure directly without reoptimization as, for example, in Ref. 67 of the main text. Dangling Si-O bonds were replaced with Si-H bonds where the H-atom was placed on the previous Si-O vector with a bond distance of 148.9 pm. Below, the Cartesian coordinates (Å) of the clean acid site are given as an example.

H	8.6579707	8.8579555	15.2238359
Si	5.3184153	9.2307916	16.6377201
Si	5.3144083	9.1977685	28.5790088
Si	5.2784479	6.7409379	21.6092153
Si	5.3293136	6.7596372	18.5258004
Si	3.2115090	7.9690105	26.6445618
Si	3.2794854	8.0409380	23.5739085
Si	8.4318651	9.1640049	28.5867792
Si	8.4448479	9.2355988	16.6482954
Si	8.4848950	6.7738559	18.5524858
Si	8.4476229	6.7147063	21.6429400
Si	1.6220207	10.6957946	23.5702598
Si	1.6162460	10.6948827	26.6441470
O	6.8827873	9.6207948	16.8956617
O	4.8910615	10.7446680	28.2870521
H	4.7849561	5.3564275	21.8473695
H	8.9265989	5.3266830	21.8901118
O	6.9110199	6.4207180	18.3492409
O	2.1034843	9.1495195	26.8007926
H	2.2240390	7.0153219	23.3474906
H	0.2400270	10.1701720	23.3943773
O	4.8845777	7.9756598	17.5572237
O	4.4422681	8.1831925	27.6740134
O	4.5441497	7.8023164	22.5892408
O	2.4589206	11.6596201	27.6341157
O	8.9120314	8.0244565	17.6128382
O	1.9297514	11.9262077	22.5720637
O	4.4030225	10.4990986	17.0514938
O	6.8728068	9.0008368	28.1943631
O	6.8616783	6.7764643	21.9212447
H	9.2955799	5.5963353	18.1361253
H	4.5659834	5.5500378	18.1118960
H	0.1859129	10.7729011	27.0505715
H	2.5663758	6.6739546	26.9963486
O	2.6750286	9.5057441	23.2453678
H	5.0964211	8.8674481	15.2108982
O	4.9989102	7.1805454	20.0609545
O	3.7942011	7.9543111	25.1222151
H	8.6561168	8.8530717	30.0255815
O	8.7848220	7.1590998	20.1063314
O	1.8190861	11.2071503	25.1117618
H	5.0963896	8.8651446	30.0139129
H	3.3606321	11.8964803	15.1749606
Si	3.2568491	15.8232705	21.6214636
Si	3.2221170	15.8754442	18.5101733
Si	3.7697919	11.8994375	28.5464436
Si	3.7638780	11.9183044	16.6081519
Si	1.6794832	13.1528981	18.5307748
Si	1.6400328	13.1703107	21.5716074
O	4.8730107	13.0822708	16.8808231
H	0.2311900	13.6508423	21.6086458
H	2.2555950	16.8927206	21.8877102
O	2.1128128	14.7015022	18.2814584
O	4.5088606	15.6431978	17.5539133
O	4.5709547	16.0233136	22.5453966
O	2.4301385	12.1671471	17.4913551
O	4.3983474	13.3333732	28.1434109
O	2.6470458	14.3760086	21.9887243

H	2.6079589	17.1783787	18.1329571
H	0.2231280	13.0515769	18.2377150
O	3.7159400	15.8892806	20.0572352
H	3.3618668	11.8949153	29.9784692
O	2.0081093	12.6732086	20.0437172
Si	10.0011403	11.9195242	16.5339859
Si	9.9693212	11.8839612	28.4851506
Si	12.1293800	10.6286487	26.6651642
Si	12.1631473	10.5661671	23.5467174
Si	15.2470195	10.6957946	23.5702598
Si	10.4356866	7.9778354	23.6165866
Si	10.5174959	7.9687243	26.6697717
Si	15.2412448	10.6948827	26.6441470
O	8.8805563	10.6959917	28.2559448
O	11.6508494	9.0997101	26.9739276
H	15.6869072	9.2813847	26.7874261
H	11.3509602	6.8090073	23.5015402
O	13.7333372	10.1200861	23.3776177
O	11.2768581	11.6783656	27.5623641
O	9.2879953	8.1052271	27.7159696
H	16.0163005	11.5822065	27.5546775
O	9.1539485	7.7739046	22.6462448
O	15.5547501	11.9262077	22.5720637
O	9.3680599	10.5177683	17.0325643
O	13.6852737	10.7797541	27.0862711
H	11.1277565	6.6241790	26.8618669
H	16.2137353	9.6032665	23.2719921
O	11.2382478	9.2932619	23.1416038
H	10.4071088	11.8853671	15.1018045
O	11.9000494	10.9880460	25.1031283
O	15.4440848	11.2071503	25.1117618
O	9.9277861	8.1338615	25.1590038
H	10.4006098	11.8825803	29.9103203
H	8.6813034	14.9943629	15.1159880
Si	5.3297072	14.6226040	16.6045314
Si	5.2889800	14.6174766	28.5566192
Si	12.0909473	18.5405330	21.6092153
Al	12.1094887	13.1935056	21.7130376
Si	16.8818478	15.8232705	21.6214636
Si	16.8471157	15.8754442	18.5101733
Si	12.1307078	13.1382070	18.4270518
Si	12.1418130	18.5592323	18.5258004
Si	5.2989917	17.0222026	26.6209124
Si	5.2759812	17.0376683	23.5859928
Si	8.4280647	14.6091168	28.4989107
Si	8.4609940	14.6408449	16.5455366
Si	15.3044820	13.1528981	18.5307748
Si	15.2973944	18.5734509	18.5524858
Si	10.5341899	15.8958749	18.5126301
Si	10.4148001	15.8973527	21.5765262
Si	15.2601223	18.5143013	21.6429400
Si	15.2650316	13.1703107	21.5716074
Si	8.4015976	17.1955226	23.5265000
Si	8.4238389	17.0800643	26.6174441
O	8.9267429	13.1008263	16.8233567
O	6.8541935	14.2553496	28.2931263
O	11.5539047	17.0338393	21.8683867
O	13.7470196	13.6880779	21.6115158
O	15.7841442	16.9957394	21.9133574
O	15.7378116	14.7015022	18.2814584
O	11.6139116	14.6565410	18.4392245
O	13.7235193	18.2203130	18.3492409
O	6.8545537	17.4347374	26.8848952
H	8.8925000	18.5893137	23.3435204
H	4.6679559	18.3940886	23.4991026

H 18.0298797 15.6619652 17.6311871
H 11.7322782 19.6790058 17.6338872
O 11.3596095 12.1641389 17.4055218
O 4.8220736 15.8700992 27.6511939
H 11.4162548 19.5157554 22.5096884
O 11.7706604 11.7700481 22.5815109
H 18.0905778 16.0072725 22.4713081
O 8.8850039 15.8293747 27.5416169
H 15.9955981 12.2453331 17.5737979
O 9.3330705 15.6495252 17.4591218
H 15.6896184 19.7218324 17.6896412
O 9.1174026 16.1801746 22.5030038
O 6.9039018 14.7750225 16.9573457
O 9.2975505 13.3030738 28.1034727
O 13.6741777 18.5760593 21.9212447
O 10.9805349 14.4460007 21.8873628
O 16.2720446 14.3760086 21.9887243
O 16.1788978 17.2930664 18.0997536
O 13.7089442 13.0418938 18.2097076
O 11.3111612 17.2429528 18.0753919
H 4.4374596 18.2132611 26.8581096
H 9.2513552 18.2591220 26.9944858
O 6.8275566 17.1791160 23.1827246
H 5.0770332 14.9802775 15.1813849
O 11.8114096 18.9801404 20.0609545
O 11.7629129 12.4968273 19.9648209
O 17.3409388 15.8892806 20.0572352
O 5.1172523 16.4586029 25.1025872
H 8.6776608 14.9903590 29.9164709
O 15.6331080 12.6732086 20.0437172
O 15.5973213 18.9586948 20.1063314
O 9.9332787 16.0170528 20.0081941
O 8.6654636 16.6934090 25.0562662
H 11.4021368 11.5905597 19.9833839
H 5.0738937 14.9793730 29.9848662
H 15.9089584 19.4872891 22.5645836

S4 List of computed energy contributions

The energy contributions are listed in Table S1. The olefin that is labeled both by a trivial name and, where appropriate by the symbol that is used in Figures 2, 4 and 6 in the main text. Furthermore the number of carbon atoms is given. The free energy G is broken down into H and $-\Delta ST$. The components of H arising from MP2 correction ($\Delta\Delta E$) and D3 correction (D3) are furthermore given separately.

△ ○ ▷ □ ◊ ☆ ✦ ◀ ▼
^ o > s h p * d < v

Figure S19 Translation of the symbols used in the figures of the main text to ASCII text used in Table S1.

Table S1 Computed energy contributions for the given barriers and formation energies. Everything is given in kJ/mol.

reactant	symbol	CN	H	G	$\Delta\Delta E$	$-\Delta ST$	D3
Methylation (SMS)							
ethene	^	2	81.67	176.46	31.57	94.79	-37.81
propene	^	3	53.96	155.48	32.78	101.52	-52.08
1-butene	^	4	44.84	159.14	36.22	114.30	-71.70
n-butene	o	4	36.15	153.79	31.10	117.65	-75.05
iso-butene	>	4	33.91	147.03	37.05	113.12	-63.11

2-pentene	^	5	34.78	149.22	37.28	114.43	-78.57
1-pentene	o	5	33.59	147.35	38.68	113.77	-75.16
2-methyl-1,2-butene	>	5	19.72	138.08	35.21	118.36	-83.17
trimethyl_ethylene	s	5	13.30	132.43	29.97	119.13	-86.99
2-hexene	^	6	19.88	141.27	35.42	121.38	-95.93
1-hexene	o	6	16.57	134.42	30.94	117.85	-94.44
11-methyl-isopropyl-ethylene	>	6	10.17	115.79	39.89	105.62	-93.22
tetra-methyl-ethylene	s	6	2.58	129.86	26.82	127.29	-104.06
1-heptene	^	7	19.01	157.26	21.71	138.25	-113.62
2-heptene	o	7	17.49	153.97	28.80	136.48	-114.86
2-tert-butyl-propylene	>	7	-2.48	109.95	38.07	112.44	-108.60
11-methyl-isopropyl-propylene	s	7	-13.36	115.49	30.40	128.85	-115.74
1-octene	^	8	14.96	157.68	24.01	142.72	-135.45
2,3,4-trimethyl-2-pentene	o	8	3.29	129.89	29.03	126.60	-133.58
2-octene	>	8	2.48	142.23	25.76	139.75	-133.57
3,4,4-trimethyl-2-pentene	s	8	-2.38	129.16	31.07	131.54	-131.18
Methylation (MeOH)							
ethene	^	2	115.90	208.17	25.51	92.27	-39.50
propene	^	3	88.22	194.75	35.45	106.54	-56.22
1-butene	^	4	71.09	188.50	24.82	117.41	-76.32
n-butene	o	4	67.42	177.96	31.28	110.55	-63.95
iso-butene	>	4	65.77	178.56	38.79	112.79	-66.15
1-pentene	o	5	66.19	175.04	38.42	108.85	-79.50
2-pentene	^	5	57.24	176.18	36.66	118.94	-79.32
trimethyl_ethylene	s	5	37.97	156.57	32.20	118.60	-83.88
1-hexene	o	6	54.79	182.52	37.33	127.72	-96.93
2-hexene	^	6	48.68	172.97	33.33	124.30	-99.83
tetra-methyl-ethylene	s	6	17.17	139.96	28.15	122.78	-100.01
2-heptene	o	7	57.12	198.41	29.22	141.29	-118.15
1-heptene	^	7	52.32	185.14	34.94	132.82	-118.99
2-tert-butyl-propylene	>	7	27.00	156.20	37.64	129.20	-109.54
Methylation (DME)							
ethene	^	2	125.13	215.67	23.77	90.54	-36.27
propene	^	3	105.51	208.36	35.08	102.85	-47.98
1-butene	^	4	90.16	195.25	33.85	105.09	-64.91
iso-butene	>	4	78.03	194.67	37.82	116.64	-63.09
n-butene	o	4	76.32	195.16	30.17	118.84	-64.90
2-pentene	^	5	63.69	183.15	32.42	119.46	-80.60
trimethyl_ethylene	s	5	53.75	164.56	32.22	110.81	-83.32
1-hexene	o	6	61.00	182.21	28.51	121.21	-105.64
2-hexene	^	6	57.36	190.44	22.19	133.08	-104.34
tetra-methyl-ethylene	s	6	36.49	173.17	29.31	136.67	-99.52
2-heptene	o	7	53.85	186.88	17.18	133.03	-125.89
2-tert-butyl-propylene	>	7	42.79	165.01	41.14	122.21	-111.15

Direct Cracking

n-butene	^	4	164.05	266.16	56.81	102.11	-71.46
2-pentene	^	5	133.53	238.16	56.35	104.63	-89.79
trimethyl_ethylene	o	5	124.68	211.49	56.36	86.81	-90.96
4-methyl-2-pentene	^	6	85.90	186.76	57.68	100.86	-108.33
2-methyl-2-hexene	^	7	94.19	224.35	46.25	130.16	-128.55
24-dimethyl-2-pentene	o	7	73.91	195.90	53.91	122.00	-123.09
11-methyl-isopropyl-propylene	>	7	63.39	186.87	54.05	123.48	-125.52
44-dimethyl-2-pentene	s	7	43.41	147.09	60.26	103.68	-116.29
2-methyl-2-heptene	^	8	107.76	235.60	49.35	127.84	-138.89
2-octene	o	8	88.23	213.64	56.47	125.41	-131.26
4-methyl-3-heptene	>	8	73.68	194.31	54.08	120.63	-130.94
234-trimethyl-2-pentene	s	8	43.27	168.11	57.46	124.84	-133.97
344-3methyl-2-pentene	h	8	12.66	111.10	63.89	98.44	-129.29
244-trimethyl-2-pentene	p	8	10.05	120.37	54.45	110.31	-135.98
2-methyl-2-octene	^	9	93.31	232.71	47.94	139.40	-151.38
4-methyl-4-octene	o	9	62.80	196.59	49.83	133.79	-149.99
2334-4-methyl-1-pentene	>	9	17.71	114.75	68.87	97.04	-144.48
2344-4methyl-2-pentene	s	9	-27.94	86.76	59.23	114.70	-148.89

Cracking by reverse propylation

3-hexene	o	6	99.24	213.99	41.83	114.75	-103.68
3-methyl-2-hexene	h	7	83.38	209.31	45.31	125.93	-115.94
1-heptene	p	7	78.44	199.01	43.69	120.57	-113.54
2-methyl-2-hexene	^	7	70.32	204.63	44.03	134.30	-118.12
4-methyl-3-heptene	>	8	70.46	198.67	47.07	128.21	-130.10
1-octene	*	8	65.01	186.97	45.49	121.96	-128.57
3-methyl-3-heptene	d	8	57.75	183.02	44.50	125.26	-130.60
23-dimethyl-2-hexene	<	8	55.59	183.18	46.83	127.59	-131.45
4-methyl-4-octene	o	9	56.89	194.31	42.92	137.42	-147.66
1-nonene	h	9	52.38	193.77	35.76	141.39	-148.36
4-methyl-4-octene	o	9	48.36	174.35	44.36	125.99	-145.93
233-trimethyl-1-hexene	p	9	28.82	145.81	59.99	116.98	-145.50

Cracking by reverse ethylation

n-butene	^	4	140.00	245.73	41.16	105.73	-74.21
2-pentene	^	5	101.37	215.52	44.04	114.16	-90.81
3-hexene	o	6	89.40	210.24	37.17	120.83	-107.78
3-methyl-2-pentene	>	6	80.09	200.47	51.33	120.38	-106.61
2-methyl-2-pentene	s	6	72.73	186.32	48.55	113.59	-99.24
3-methyl-2-hexene	h	7	61.69	167.51	49.12	105.82	-111.13
11-methyl-isopropyl-propylene	>	7	54.05	179.25	53.20	125.19	-117.75
4-methyl-3-heptene	>	8	44.56	169.65	50.17	125.09	-129.01
233-trimethyl-1-pentene	v	8	27.99	129.99	63.04	101.99	-127.67
4-methyl-4-octene	o	9	41.61	170.96	53.40	129.35	-147.99

Adsorption as alkoxides

ethene	^	2	-86.86	42.01	0.00	128.87	-36.40
propene	^	3	-64.98	60.63	-6.50	125.62	-55.87
1-butene	>	4	-90.40	56.81	0.87	147.22	-65.21
1-pentene	>	5	-97.85	35.26	1.51	133.11	-80.96
1-hexene	*	6	-103.26	41.45	-2.48	144.71	-100.14
1-heptene	*	7	-115.44	25.93	4.72	141.37	-103.35
Adsorption as pi-complexes							
n-butene	^	4	-72.55	33.71	11.75	106.25	-62.02
iso-butene	o	4	-68.57	40.72	12.01	109.28	-63.33
trimethyl_ethylene	^	5	-84.26	28.78	11.37	113.04	-77.28
2-pentene	o	5	-92.50	32.08	12.80	124.58	-76.60
tetra-methyl-ethylene	^	6	-94.17	34.80	5.55	128.97	-93.83
11-methyl-isopropyl-ethylene	o	6	-88.90	27.26	16.44	116.16	-88.63
2-methyl-2-pentene	>	6	-69.62	51.76	4.06	121.37	-102.74
4-methyl-2-pentene	s	6	-97.81	7.30	12.35	105.11	-92.77
3-methyl-2-pentene	h	6	-85.04	34.77	8.10	119.81	-94.72
3-hexene	p	6	-102.03	4.50	13.31	106.54	-92.71
2-hexene	d	6	-80.60	45.70	7.15	126.30	-96.57
2-tert-butyl-propylene	^	7	-93.26	21.45	14.73	114.71	-103.46
11-methyl-isopropyl-propylene	o	7	-79.43	48.81	3.32	128.24	-116.82
3-methyl-2-hexene	>	7	-96.34	18.52	11.24	114.86	-108.90
2-methyl-2-hexene	s	7	-109.35	19.57	11.72	128.91	-107.81
24-dimethyl-2-pentene	h	7	-93.02	26.43	13.46	119.45	-108.71
2-heptene	p	7	-60.26	80.50	0.00	140.77	-116.83
44-dimethyl-2-pentene	d	7	-116.57	3.06	0.00	119.63	-105.93
3-heptene	<	7	-116.59	-6.11	14.39	110.48	-108.84
344-3methyl-2-pentene	^	8	-112.68	21.64	10.57	134.31	-121.96
1-octene	o	8	-114.31	18.77	12.14	133.07	-123.74
234-trimethyl-2-pentene	>	8	-76.41	33.82	1.37	110.23	-122.97
233-trimethyl-1-pentene	s	8	-83.90	49.72	4.57	133.61	-127.41
2-octene	h	8	-116.98	15.63	4.27	132.60	-131.77
23-dimethyl-2-hexene	p	8	-86.23	42.09	2.53	128.32	-125.92
244-trimethyl-2-pentene	*	8	-124.14	15.30	10.20	139.43	-123.41
2-methyl-2-heptene	d	8	-124.93	4.66	8.94	129.60	-128.74
2344-4methyl-2-pentene	^	9	-73.67	59.86	-4.44	133.53	-143.41
2334-4-methyl-1-pentene	o	9	-112.54	8.46	11.54	121.00	-134.85
1-nonene	>	9	-95.51	72.12	-2.20	167.63	-147.14
233-trimethyl-1-hexene	s	9	-114.09	18.42	12.01	132.51	-144.91
345-methyl-2-hexene	h	9	-98.15	39.27	3.38	137.42	-142.55
2-nonene	p	9	-119.05	31.89	-0.87	150.94	-150.80
3-nonene	*	9	-118.50	20.19	-0.22	138.69	-145.97
others							
Propoxide b-H elimination		3	160.02	167.46	50.07	7.44	1.87
Ethoxide b-H elimination		2	167.40	154.59	58.91	-12.81	1.92

Gasphase molecules

1-nonene	9	-387.68	-340.04	-74.78	47.64	-15.97
2-methyl-2-octene	9	-409.18	-364.71	-73.49	44.47	-16.28
2334-4-methyl-1-pentene	9	-416.82	-352.54	-100.28	64.29	-28.97
4-methyl-4-octene	9	-408.07	-361.67	-75.69	46.40	-17.34
233-trimethyl-1-hexene	9	-408.84	-346.33	-94.25	62.51	-26.18
2344-4methyl-2-pentene	9	-399.11	-342.96	-92.43	56.16	-25.81
244-trimethyl-2-pentene	8	-350.97	-301.42	-75.28	49.55	-19.63
2-methyl-2-heptene	8	-344.66	-305.54	-61.20	39.12	-13.53
23-dimethyl-2-hexene	8	-348.45	-309.29	-64.75	39.16	-16.58
344-3methyl-2-pentene	8	-353.28	-306.81	-77.36	46.47	-19.76
233-trimethyl-1-pentene	8	-343.49	-288.46	-81.43	55.02	-22.78
4-methyl-3-heptene	8	-342.44	-302.93	-63.18	39.52	-14.44
3-methyl-3-heptene	8	-342.81	-306.07	-63.14	36.73	-14.38
4-methyl-2-pentene	6	-210.09	-181.84	-39.99	28.25	-8.53
3-hexene	6	-203.74	-179.81	-36.56	23.93	-6.63
3-methyl-2-pentene	6	-212.66	-190.94	-37.43	21.72	-9.02
44-dimethyl-2-pentene	7	-288.97	-250.17	-61.50	38.80	-14.15
345-methyl-2-hexene	9	-415.33	-359.00	-86.13	56.33	-24.31
11-methyl-isopropyl-ethylene	6	-212.89	-176.29	-44.41	36.60	-10.64
tetra-methyl-ethylene	6	-215.27	-206.66	-36.94	8.60	-8.97
2-tert-butyl-propylene	7	-286.50	-244.06	-67.05	42.44	-16.98
234-trimethyl-2-pentene	8	-349.63	-312.06	-69.83	37.57	-18.44
11-methyl-isopropyl-propylene	7	-280.85	-253.39	-54.77	27.46	-13.36
propene	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2-methyl-2-hexene	7	-279.92	-255.15	-48.86	24.78	-10.78
ethene	2	77.05	78.47	8.77	1.42	1.24
n-butene	4	-74.99	-67.81	-9.58	7.18	-1.47
3-nonene	9	-398.66	-352.64	-73.55	46.02	-14.80
2-octene	8	-334.11	-293.66	-60.04	40.44	-12.17
1-octene	8	-323.35	-280.45	-62.52	42.90	-13.24
trimethyl_ethylene	5	-149.67	-137.56	-22.52	12.12	-4.93
1-heptene	7	-258.38	-223.66	-50.25	34.71	-10.51
2-heptene	7	-269.60	-239.97	-47.76	29.63	-9.45
3-heptene	7	-269.13	-235.93	-48.97	33.21	-9.33
2-nonene	9	-398.84	-347.57	-72.30	51.27	-14.90
1-pentene	5	-129.03	-113.60	-25.68	15.43	-5.08
24-dimethyl-2-pentene	7	-287.48	-257.02	-53.47	30.46	-12.28
2-methyl-12-butene	5	-143.24	-127.37	-26.96	15.86	-6.05
2-pentene	5	-139.38	-125.42	-23.05	13.96	-4.02
1-hexene	6	-193.58	-168.76	-37.96	24.82	-7.79
2-hexene	6	-204.72	-180.64	-35.46	24.08	-6.72
3-methyl-2-hexene	7	-278.76	-246.87	-50.10	31.90	-12.16
2-methyl-2-pentene	6	-214.41	-194.24	-36.37	20.17	-7.89

1-butene	4	-63.84	-55.87	-13.32	7.97	-2.41
iso-butene	4	-81.35	-73.75	-12.90	7.59	-2.67

S5 Cartesian coordinates of optimized structures including frequencies

Below optimized structures of the zeolite and the gasphase molecules are provided in cif-format. Additionally, the electronic energies, the zero-point vibrational energy (both in eV) and the list of frequencies (cm^{-1}) is provided.

Some of the loosely bound olefins, such as π -complexes and physisorbed species exhibit an imaginary, harmonic frequency resulting from extremely soft vibrational modes and small numerical inaccuracies of the finite difference scheme for force constants. These imaginary frequencies were also raised to 10 cm^{-1} . We note that this is approximation of course influences the adsorption free energies, however as mentioned in the main text, the harmonic approximation is not very accurate in the case of weakly bound olefins in any case. An additional, small, second imaginary frequencies of transition states occurred in three out of 88 transition states, resulting from extremely soft vibrational modes and small numerical inaccuracies of the finite difference scheme for force constants, and these were also raised to 10 cm^{-1} .

```

-----
# Methylation (SMS) of ethene: ^; E= -910.211 eV; ZPVE= 2.717eV; frequencies
=362.3i, 54.4, 62.3, 72.8, 134.2, 153.7, 180.3, 211.5, 254.5, 298.9, 340.0, 385.1,
487.2, 576.2, 583.9, 606.7, 656.2, 699.5, 816.1, 944.5, 962.3, 984.7, 1017.6,
1031.3, 1043.0, 1107.2, 1197.8, 1325.8, 1343.1, 1358.8, 1429.8, 1584.5, 3020.9,
3061.2, 3068.5, 3144.6, 3170.3, 3202.7, 3257.5 cm^-1
-----
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
    'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
  Si1      1.0000 0.01623  0.23744  0.10282  Biso  1.000  Si
  Si2      1.0000 0.78814  0.78224  0.10568  Biso  1.000  Si
  Si3      1.0000 0.24741  0.01008  0.09913  Biso  1.000  Si
  Si4      1.0000 0.24085  0.00519  0.89137  Biso  1.000  Si
  Si5      1.0000 0.78635  0.77844  0.89744  Biso  1.000  Si
  Si6      1.0000 0.01377  0.23641  0.89569  Biso  1.000  Si
  Si7      1.0000 0.68173  0.57280  0.43475  Biso  1.000  Si
  Al1      1.0000 0.45265  0.11527  0.43759  Biso  1.000  Al
  Si8      1.0000 0.91621  0.33826  0.43550  Biso  1.000  Si
  Si9      1.0000 0.91291  0.34230  0.22948  Biso  1.000  Si
  Si10     1.0000 0.45085  0.11262  0.22883  Biso  1.000  Si
  Si11     1.0000 0.68465  0.57348  0.23151  Biso  1.000  Si
  Si12     1.0000 0.34640  0.89797  0.77115  Biso  1.000  Si
  Si13     1.0000 0.11669  0.44064  0.76684  Biso  1.000  Si
  Si14     1.0000 0.57968  0.67350  0.76914  Biso  1.000  Si
  Si15     1.0000 0.58843  0.67985  0.56632  Biso  1.000  Si
  Si16     1.0000 0.11622  0.44292  0.56547  Biso  1.000  Si
  Si17     1.0000 0.34702  0.89652  0.56332  Biso  1.000  Si
  Si18     1.0000 0.01290  0.77501  0.89767  Biso  1.000  Si

```

Si19	1.0000	0.24309	0.23554	0.89212	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78695	0.00652	0.89543	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78644	0.00892	0.10370	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24727	0.23959	0.09960	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01736	0.78237	0.10596	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68486	0.11302	0.23202	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91281	0.57201	0.23187	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45198	0.34187	0.22871	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44383	0.34186	0.43356	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90943	0.56723	0.43822	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68612	0.11319	0.43287	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35169	0.45416	0.56161	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57885	0.90548	0.56490	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11089	0.67524	0.56785	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11557	0.67304	0.77087	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57733	0.90389	0.76923	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34796	0.44459	0.76616	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91797	0.10662	0.12169	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92002	0.81654	0.12423	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21596	0.10892	0.11934	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11035	0.90486	0.87551	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82154	0.90957	0.87741	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11225	0.20437	0.87783	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57363	0.44707	0.44339	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59346	0.15202	0.43543	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88836	0.44017	0.45298	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78127	0.24522	0.21366	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48594	0.24450	0.21048	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78196	0.53903	0.21449	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24661	0.76819	0.79147	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24867	0.47619	0.78333	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54707	0.77262	0.77908	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45714	0.58274	0.55050	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12903	0.56722	0.55876	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44444	0.86046	0.55026	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99724	0.32362	0.16462	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70257	0.67448	0.16513	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35646	0.03062	0.15619	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32783	0.98641	0.83101	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67764	0.69183	0.83916	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03370	0.34286	0.83545	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67234	0.66181	0.50057	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36604	0.99946	0.50227	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02243	0.35644	0.49594	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03142	0.68506	0.84058	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32821	0.33976	0.82917	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68012	0.98509	0.83511	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69962	0.03146	0.16118	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35381	0.32698	0.15956	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99834	0.67919	0.17053	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35960	0.36938	0.49134	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00845	0.65894	0.50277	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65841	0.00811	0.49898	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13793	0.25009	0.12755	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77376	0.88889	0.13425	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13928	0.89101	0.13230	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25267	0.12568	0.86513	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89127	0.76022	0.87099	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89315	0.12851	0.86858	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79473	0.56879	0.46186	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43348	0.22674	0.46683	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80963	0.21767	0.46278	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92755	0.46510	0.20576	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56137	0.09955	0.21578	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56224	0.46480	0.21082	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46699	0.91101	0.79928	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10181	0.54932	0.78433	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46872	0.55311	0.79229	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60265	0.80229	0.54451	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23670	0.45585	0.53952	Biso	1.000	O

O54	1.0000	0.22494	0.78738	0.53660	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01389	0.26993	0.99939	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75587	0.74980	0.00205	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27391	0.00540	0.99523	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69343	0.61867	0.33290	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39517	0.07228	0.32726	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95052	0.33991	0.33154	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34436	0.92801	0.66769	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07908	0.39333	0.66594	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62469	0.67406	0.66875	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01583	0.74750	0.00282	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27931	0.27017	0.99550	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75442	0.00543	0.99946	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69816	0.07482	0.33145	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94747	0.60864	0.33549	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40440	0.33315	0.32898	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34792	0.40936	0.66285	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61379	0.94772	0.66765	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07947	0.68732	0.67038	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21889	0.00761	0.34167	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22651	0.98057	0.40820	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23432	0.09342	0.33304	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.20549	0.95332	0.28500	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03288	0.89896	0.37952	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03990	0.98517	0.32979	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03176	0.97918	0.25757	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.01813	0.81970	0.34955	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.03479	0.90251	0.45193	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.04872	0.06176	0.36063	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 1-butene: ^; E= -943.921 eV; ZPVE= 4.217eV; frequencies =379.1i, 32.8, 65.5, 68.3, 93.3, 102.6, 136.5, 146.9, 187.0, 201.8, 241.7, 272.1, 301.4, 333.9, 356.1, 389.2, 447.3, 583.5, 587.5, 599.9, 659.3, 691.3, 697.9, 781.2, 850.5, 928.5, 938.4, 965.5, 980.0, 995.8, 1014.8, 1026.9, 1052.5, 1123.4, 1168.8, 1233.5, 1280.8, 1293.7, 1347.4, 1352.7, 1373.9, 1400.8, 1414.9, 1444.6, 1452.2, 1590.6, 2918.2, 2984.0, 2996.1, 3038.0, 3045.9, 3052.9, 3063.8, 3072.9, 3162.0, 3235.1, 3253.8 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01465	0.24135	0.10609	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78718	0.78564	0.10914	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24588	0.01314	0.10276	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23939	0.00895	0.89503	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78446	0.78187	0.90093	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01190	0.24056	0.90031	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68011	0.57642	0.43840	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45244	0.11926	0.44098	Biso	1.000	Al

Si8	1.0000	0.91317	0.34268	0.44001	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91068	0.34578	0.23257	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44852	0.11422	0.23293	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68261	0.57622	0.23445	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34452	0.90067	0.77562	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11478	0.44444	0.77016	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57795	0.67670	0.77296	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58678	0.68355	0.57004	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11538	0.44743	0.56852	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34671	0.89973	0.56764	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01099	0.77808	0.90107	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24196	0.23905	0.89654	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78510	0.00996	0.89919	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78495	0.01193	0.10724	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24629	0.24226	0.10325	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01613	0.78474	0.10876	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68336	0.11546	0.23586	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91241	0.57494	0.23500	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45174	0.34556	0.23219	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44475	0.34661	0.43803	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90861	0.57079	0.44141	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68483	0.11710	0.43617	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35064	0.45841	0.56522	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57712	0.90877	0.56910	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11104	0.67981	0.57065	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11371	0.67646	0.77422	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57581	0.90769	0.77320	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34596	0.44865	0.77006	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91630	0.11050	0.12434	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91873	0.81877	0.12702	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21415	0.11159	0.12369	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10899	0.90802	0.88001	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81903	0.91272	0.88041	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11090	0.20859	0.88530	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57522	0.44934	0.45134	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59386	0.15824	0.43623	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88326	0.44264	0.45984	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77960	0.24742	0.21659	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48340	0.24618	0.21602	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78189	0.54415	0.22002	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24447	0.77111	0.79635	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24692	0.48068	0.78671	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54664	0.77674	0.78268	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45487	0.58775	0.55398	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13122	0.57295	0.56161	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44206	0.86077	0.55508	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99697	0.32605	0.17088	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70153	0.67818	0.16881	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35490	0.03311	0.15978	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32619	0.98986	0.83465	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67599	0.69462	0.84272	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03221	0.34565	0.83822	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67011	0.66532	0.50390	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37023	0.00504	0.50802	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02070	0.36183	0.49915	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02852	0.68846	0.84268	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32528	0.34325	0.83280	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67862	0.98955	0.83883	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69777	0.03360	0.16514	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35110	0.32889	0.16504	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99771	0.68225	0.17385	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36044	0.37412	0.49565	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00822	0.66235	0.50565	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65459	0.01187	0.50280	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13671	0.25366	0.12828	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77368	0.89269	0.13816	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13826	0.89318	0.13426	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25005	0.12880	0.86780	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88978	0.76437	0.87462	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89184	0.13194	0.87309	Biso	1.000	O

O43	1.0000	0.79632	0.57759	0.46279	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43075	0.22924	0.46914	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80876	0.22033	0.46683	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92453	0.46728	0.20558	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55947	0.10161	0.22073	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56232	0.46662	0.20981	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46503	0.91363	0.80387	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09894	0.55239	0.78818	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46662	0.55688	0.79684	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60333	0.80718	0.54892	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23435	0.45708	0.54206	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22396	0.79294	0.53902	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01012	0.27574	0.00343	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75398	0.75356	0.00556	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27370	0.01085	0.99873	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68526	0.61819	0.33604	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94679	0.34665	0.33561	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34251	0.92978	0.67203	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07773	0.39802	0.66897	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62207	0.67613	0.67245	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01353	0.74864	0.00577	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28146	0.27317	0.99951	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75195	0.00777	0.00318	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69820	0.07801	0.33528	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94888	0.60780	0.33863	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40889	0.34298	0.33314	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34675	0.41416	0.66665	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61195	0.95204	0.67166	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07958	0.69130	0.67324	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39212	0.07244	0.33139	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22103	0.00474	0.34828	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23175	0.98587	0.41642	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20233	0.94236	0.29643	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22714	0.08497	0.33135	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02954	0.89564	0.36395	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03551	0.83459	0.40716	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.00283	0.87008	0.29543	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.03623	0.99176	0.39669	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.01375	0.07226	0.34590	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.00533	0.05176	0.27458	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.92922	0.05591	0.36791	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.05837	0.01227	0.46696	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.10032	0.19731	0.36301	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.18485	0.22089	0.33749	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.07411	0.25255	0.33047	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.10900	0.21710	0.43429	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of n-butene:o; E= -944.109 eV; ZPVE= 4.208eV; frequencies
=359.2i, 52.6, 67.0, 73.8, 95.7, 114.1, 159.6, 176.7, 202.2, 213.1, 240.1, 256.2,
288.4, 302.4, 334.4, 351.0, 385.3, 497.2, 582.6, 584.6, 598.8, 656.2, 697.9, 789.2,
858.0, 922.3, 945.8, 959.9, 977.8, 996.4, 1029.8, 1035.6, 1086.7, 1113.2, 1146.8,
1288.6, 1290.7, 1342.0, 1357.5, 1360.4, 1370.8, 1417.7, 1423.1, 1427.8, 1443.8,
1624.7, 2961.2, 2972.1, 3023.8, 3028.3, 3039.7, 3042.6, 3047.7, 3061.5, 3071.6,
3230.7, 3264.4 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00880 0.23100 0.10370 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.78197 0.77696 0.10562 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.24079 0.00296 0.09978 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.23401 0.99855 0.89231 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.77935 0.77214 0.89792 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.00690 0.23040 0.89772 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.67649 0.56902 0.43542 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.44580 0.10849 0.43840 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.90712 0.33388 0.43715 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.90529 0.33648 0.22970 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.44372 0.10655 0.22973 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.67751 0.56719 0.23178 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.33954 0.89138 0.77215 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.10981 0.43428 0.76735 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.57258 0.66669 0.76994 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.58078 0.67369 0.56703 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.10956 0.43629 0.56592 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.34092 0.89119 0.56413 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.00644 0.76890 0.89841 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.23727 0.22992 0.89429 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.78020 0.00020 0.89595 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.77906 0.00249 0.10425 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.24122 0.23322 0.10024 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.01094 0.77679 0.10642 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.67796 0.10587 0.23324 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.90629 0.56434 0.23178 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.44736 0.33681 0.22904 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.44278 0.33802 0.43590 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.90444 0.56188 0.43835 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.67984 0.10586 0.43294 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.34543 0.44796 0.56203 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.57246 0.90004 0.56592 Biso 1.000 Si
Si32     1.0000 0.10586 0.66896 0.56843 Biso 1.000 Si
Si33     1.0000 0.10835 0.66627 0.77145 Biso 1.000 Si
Si34     1.0000 0.57023 0.89759 0.77025 Biso 1.000 Si
Si35     1.0000 0.34114 0.43853 0.76684 Biso 1.000 Si
O1       1.0000 0.91057 0.10018 0.12222 Biso 1.000 O
O2       1.0000 0.91424 0.81231 0.12228 Biso 1.000 O
O3       1.0000 0.20962 0.10237 0.11840 Biso 1.000 O
O4       1.0000 0.10344 0.89880 0.87570 Biso 1.000 O
O5       1.0000 0.81454 0.90318 0.87740 Biso 1.000 O
O6       1.0000 0.10585 0.19824 0.88303 Biso 1.000 O
O7       1.0000 0.57244 0.44160 0.44871 Biso 1.000 O
O8       1.0000 0.58576 0.14284 0.43358 Biso 1.000 O
O9       1.0000 0.87664 0.43307 0.45813 Biso 1.000 O
O10      1.0000 0.77401 0.23803 0.21448 Biso 1.000 O
O11      1.0000 0.48018 0.23867 0.21064 Biso 1.000 O
O12      1.0000 0.77503 0.53247 0.21889 Biso 1.000 O
O13      1.0000 0.23936 0.76161 0.79205 Biso 1.000 O
O14      1.0000 0.24213 0.47065 0.78307 Biso 1.000 O
O15      1.0000 0.54098 0.76655 0.77951 Biso 1.000 O
O16      1.0000 0.44906 0.57745 0.55028 Biso 1.000 O
O17      1.0000 0.12633 0.56212 0.55967 Biso 1.000 O
O18      1.0000 0.43865 0.85574 0.54990 Biso 1.000 O
O19      1.0000 0.99128 0.31577 0.16840 Biso 1.000 O
O20      1.0000 0.69838 0.66927 0.16582 Biso 1.000 O
O21      1.0000 0.35066 0.02502 0.15649 Biso 1.000 O
O22      1.0000 0.32086 0.98020 0.83143 Biso 1.000 O
O23      1.0000 0.67128 0.68524 0.83919 Biso 1.000 O
O24      1.0000 0.02796 0.33601 0.83601 Biso 1.000 O
O25      1.0000 0.66535 0.65711 0.50098 Biso 1.000 O

```

O26	1.0000	0.35929	0.99439	0.50389	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01443	0.35165	0.49625	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02418	0.67881	0.84076	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31991	0.33279	0.82931	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67349	0.97923	0.83567	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69165	0.02495	0.16111	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34459	0.31881	0.16375	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98949	0.67271	0.17081	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35647	0.36450	0.49206	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00409	0.65213	0.50277	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65341	0.00231	0.50020	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13086	0.24305	0.12614	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76642	0.88264	0.13515	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13295	0.88453	0.13374	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24618	0.11966	0.86745	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88448	0.75388	0.87259	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88691	0.12223	0.86975	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79344	0.57156	0.45884	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43006	0.22179	0.46845	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80256	0.21141	0.46299	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91887	0.45741	0.20077	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55369	0.09199	0.21994	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55628	0.45894	0.20684	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45963	0.90368	0.80122	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09434	0.54244	0.78553	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46159	0.54668	0.79420	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59607	0.79666	0.54640	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22794	0.44438	0.53909	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21955	0.78146	0.53806	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00459	0.26505	0.00093	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74742	0.74378	0.00237	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26699	0.99701	0.99594	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67991	0.61023	0.33306	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94187	0.33932	0.33287	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33913	0.92210	0.66876	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07194	0.38687	0.66640	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61591	0.66552	0.66927	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01091	0.74175	0.00338	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27717	0.26690	0.99696	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74734	0.99867	0.99992	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69352	0.06739	0.33198	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94439	0.59579	0.33522	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40595	0.33225	0.33087	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34263	0.40423	0.66343	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60617	0.94217	0.66879	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07253	0.67963	0.67071	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38540	0.06794	0.32806	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22504	0.04052	0.34185	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22195	0.01186	0.40967	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19262	0.97758	0.28927	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25447	0.12881	0.32745	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02764	0.97760	0.33424	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.97496	0.85656	0.36176	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.02306	0.99416	0.26352	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.06785	0.06681	0.39151	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.10229	0.18549	0.36733	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.18398	0.24689	0.39719	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.10615	0.19868	0.29525	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.04020	0.20649	0.39508	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.06850	0.04895	0.46248	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.00965	0.81123	0.32468	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.98550	0.84732	0.43304	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.88341	0.81303	0.34722	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of iso-butene->; E= -944.219 eV; ZPVE= 4.197eV; frequencies
=393.0i, 45.5, 51.1, 65.1, 88.5, 102.2, 148.4, 159.3, 194.3, 202.8, 211.6, 280.9,
311.0, 349.5, 390.2, 392.3, 435.7, 458.5, 583.5, 585.8, 595.9, 662.0, 700.0, 770.0,
814.0, 921.2, 925.0, 944.8, 955.3, 973.8, 978.6, 1025.3, 1049.0, 1053.5, 1133.2,
1280.1, 1345.5, 1352.7, 1356.3, 1365.7, 1378.0, 1404.3, 1417.7, 1430.4, 1452.3,

1595.4, 2950.0, 2956.1, 3004.8, 3009.6, 3040.0, 3054.7, 3057.4, 3058.9, 3150.0,
3233.1, 3253.5 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01114	0.23686	0.10276	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78282	0.78132	0.10528	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24233	0.00902	0.09835	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23552	0.00462	0.89096	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78037	0.77760	0.89743	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00820	0.23590	0.89569	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67609	0.57171	0.43495	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44693	0.11432	0.43755	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91061	0.33806	0.43550	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90784	0.34164	0.22936	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44519	0.11098	0.22849	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67954	0.57235	0.23109	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34039	0.89656	0.77129	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11049	0.43982	0.76652	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57401	0.67275	0.76906	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58310	0.67917	0.56587	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11040	0.44221	0.56526	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34188	0.89513	0.56308	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00730	0.77406	0.89749	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23739	0.23499	0.89183	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78102	0.00587	0.89553	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78103	0.00803	0.10370	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24192	0.23855	0.09928	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01225	0.78113	0.10518	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68001	0.11226	0.23215	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90848	0.57190	0.23186	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44713	0.34152	0.22836	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43837	0.34173	0.43353	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90467	0.56751	0.43778	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68070	0.11302	0.43273	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34620	0.45408	0.56109	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57366	0.90495	0.56490	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10589	0.67511	0.56728	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10978	0.67251	0.77055	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57184	0.90365	0.76922	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34212	0.44448	0.76610	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91233	0.10632	0.12130	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91463	0.81503	0.12227	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21121	0.10807	0.11835	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10504	0.90395	0.87557	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81510	0.90862	0.87716	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10655	0.20379	0.87739	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56805	0.44606	0.44603	Biso	1.000	O

O8	1.0000	0.58790	0.15179	0.43400	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88363	0.44034	0.45304	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77625	0.24431	0.21313	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47985	0.24289	0.21200	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77750	0.53878	0.21483	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24060	0.76711	0.79274	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24256	0.47569	0.78316	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54253	0.77266	0.77886	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45181	0.58237	0.54877	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12290	0.56628	0.55867	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43913	0.85880	0.55000	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99262	0.32308	0.16494	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69779	0.67402	0.16538	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35175	0.02982	0.15531	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32221	0.98616	0.82988	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67236	0.69080	0.83852	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02765	0.34204	0.83519	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66754	0.66161	0.50041	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36256	0.99973	0.50357	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01679	0.35535	0.49574	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02464	0.68405	0.83939	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32220	0.33906	0.82851	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67454	0.98523	0.83504	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69404	0.03016	0.16147	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34846	0.32568	0.15942	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99353	0.67815	0.16976	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35292	0.36782	0.49136	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00296	0.65888	0.50296	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65275	0.00802	0.49907	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13253	0.24879	0.12767	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76895	0.88825	0.13397	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13445	0.88974	0.13065	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24679	0.12500	0.86488	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88588	0.76023	0.87143	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88748	0.12788	0.86901	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78946	0.56815	0.46115	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42625	0.22523	0.46519	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80398	0.21752	0.46324	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92256	0.46443	0.20586	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55613	0.09853	0.21689	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55793	0.46328	0.20854	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46112	0.90992	0.79946	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09524	0.54835	0.78341	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46259	0.55295	0.79289	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59853	0.80236	0.54483	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23095	0.45529	0.53908	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22015	0.78644	0.53522	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00928	0.26997	0.99938	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74879	0.74851	0.00181	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26988	0.00527	0.99447	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68524	0.61537	0.33277	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94462	0.33862	0.33163	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33795	0.92500	0.66760	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07335	0.39210	0.66560	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61779	0.67199	0.66847	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01072	0.74539	0.00216	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27366	0.26997	0.99517	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74838	0.00450	0.99954	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69400	0.07472	0.33166	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94330	0.60840	0.33532	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40102	0.33598	0.32875	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34297	0.41024	0.66256	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60821	0.94762	0.66762	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07563	0.68836	0.66987	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38817	0.06899	0.32704	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22258	0.01408	0.33890	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22436	0.98877	0.40697	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20054	0.95189	0.28641	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.23512	0.09748	0.32419	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02980	0.93600	0.33943	Biso	1.000	C

H4	1.0000	0.01024	0.84954	0.35414	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.02098	0.95548	0.27060	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.04303	0.00939	0.40622	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.05837	0.12405	0.38756	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.05985	0.14131	0.31624	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.98859	0.13097	0.41827	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.13668	0.19135	0.41843	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.04457	0.97956	0.50155	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.12518	0.04147	0.53314	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.97722	0.98486	0.53803	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.03218	0.89404	0.50996	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-pentene:~; E= -960.736 eV; ZPVE= 4.949eV; frequencies
=360.5i, 29.1, 50.8, 55.6, 71.4, 88.1, 102.2, 130.0, 156.8, 184.7, 201.9, 221.0,
240.8, 292.9, 304.4, 312.3, 348.5, 377.2, 438.4, 480.9, 574.9, 586.6, 597.7, 657.1,
696.3, 759.7, 826.7, 867.1, 903.3, 930.7, 940.1, 985.3, 998.8, 1007.2, 1035.6,
1050.4, 1090.2, 1116.1, 1152.1, 1233.5, 1275.3, 1296.9, 1321.0, 1337.4, 1356.6,
1359.6, 1360.4, 1416.0, 1429.5, 1433.8, 1441.4, 1452.0, 1616.9, 2958.2, 2958.5,
2963.4, 2999.7, 3018.2, 3032.3, 3037.4, 3040.9, 3043.3, 3043.7, 3058.2, 3231.2,
3260.4 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00143	0.23865	0.08945	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77126	0.78223	0.09075	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23148	0.01088	0.08744	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22721	0.00703	0.87926	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77134	0.77979	0.88433	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00025	0.23789	0.88230	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66982	0.57634	0.42150	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44332	0.11926	0.42490	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90263	0.34025	0.42219	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.89717	0.34327	0.21566	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43485	0.11295	0.21677	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67025	0.57498	0.21845	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33225	0.89936	0.75915	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10302	0.44303	0.75325	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56626	0.67508	0.75561	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57533	0.68190	0.55234	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10414	0.44633	0.55144	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33518	0.89825	0.55180	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00033	0.77733	0.88478	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23000	0.23777	0.87998	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77336	0.00838	0.88190	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77186	0.01004	0.09033	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23308	0.24153	0.08732	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00307	0.78320	0.09178	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.66979	0.11330	0.21912	Biso	1.000	Si

Si25	1.0000	0.89830	0.57303	0.21818	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43769	0.34284	0.21671	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43266	0.34460	0.42191	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89647	0.56883	0.42454	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67407	0.11527	0.41865	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33923	0.45635	0.54855	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56523	0.90680	0.55254	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09940	0.67849	0.55340	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10162	0.67498	0.75727	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56427	0.90604	0.75610	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33457	0.44736	0.75365	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90325	0.10787	0.10849	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90292	0.81438	0.10431	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20167	0.11098	0.10670	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09685	0.90733	0.86126	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80700	0.91086	0.86328	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09883	0.20561	0.86555	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56153	0.45081	0.43134	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58415	0.15785	0.41766	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87352	0.44108	0.44099	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76532	0.24575	0.20055	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47116	0.24510	0.19805	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76732	0.54040	0.20175	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23234	0.76969	0.77964	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23518	0.47908	0.76963	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53511	0.77516	0.76598	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44424	0.58477	0.53500	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12020	0.57203	0.54414	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42953	0.85782	0.54114	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98157	0.32423	0.15120	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68728	0.67531	0.15167	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34072	0.03111	0.14433	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31486	0.98812	0.81961	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66594	0.69298	0.82338	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02075	0.34408	0.82138	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66077	0.66554	0.48727	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36207	0.00431	0.49174	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01033	0.36036	0.48168	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01605	0.68750	0.82500	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31394	0.34198	0.81640	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66631	0.98785	0.82224	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68431	0.03249	0.14721	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33889	0.32828	0.14836	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98283	0.67986	0.15644	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34679	0.36964	0.47995	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99606	0.66043	0.48884	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64112	0.00972	0.48567	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12351	0.25220	0.11409	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75918	0.88995	0.12091	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12272	0.89294	0.12060	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24025	0.12818	0.85289	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87773	0.76247	0.86214	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87992	0.12994	0.85463	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78272	0.57224	0.44827	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42409	0.23026	0.45558	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79797	0.21812	0.44984	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91156	0.46554	0.19069	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54502	0.09849	0.20592	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54779	0.46576	0.19862	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45313	0.91201	0.78550	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08710	0.55099	0.77153	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45505	0.55567	0.78061	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59085	0.80509	0.53123	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22361	0.45647	0.52612	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21202	0.79263	0.52226	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99912	0.27117	0.98589	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73404	0.74993	0.98776	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25817	0.00593	0.98340	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67970	0.62122	0.31960	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.93531	0.34223	0.31782	Biso	1.000	O

O60	1.0000	0.32871	0.92915	0.65574	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.06585	0.39712	0.65193	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.60917	0.67401	0.65489	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.00821	0.74963	0.98902	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.26642	0.27283	0.98329	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74094	0.00718	0.98591	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68639	0.07512	0.31789	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.93392	0.60782	0.32170	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.39174	0.33428	0.31764	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33629	0.41328	0.65023	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60209	0.95050	0.65475	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.06795	0.68978	0.65609	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.37869	0.07426	0.31591	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21661	0.03062	0.34551	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22277	0.98356	0.40125	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.17828	0.98552	0.28420	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24140	0.11916	0.35302	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03197	0.01688	0.37284	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06108	0.10793	0.37576	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05480	0.96973	0.44391	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11052	0.03040	0.52812	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.18527	0.02153	0.54184	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.14205	0.12187	0.52081	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.02207	0.87785	0.44316	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.02854	0.98207	0.60724	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.99779	0.89103	0.61608	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.95438	0.99284	0.59811	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.95951	0.95353	0.29567	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.87928	0.95486	0.29881	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.99904	0.99297	0.23198	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.93867	0.86451	0.29533	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.07154	0.02554	0.66887	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 1-pentene:o; E= -960.633 eV; ZPVE= 4.963eV; frequencies
=376.5i, 27.7, 45.9, 48.4, 68.9, 76.2, 103.9, 126.5, 154.9, 180.5, 195.3, 237.0,
254.6, 288.8, 323.8, 342.7, 388.2, 408.1, 423.9, 579.1, 587.1, 599.2, 658.4, 696.8,
717.4, 734.4, 854.1, 870.7, 925.5, 935.3, 950.7, 968.4, 993.3, 1006.9, 1025.1,
1034.7, 1068.2, 1114.0, 1164.5, 1223.3, 1243.2, 1279.3, 1296.2, 1319.1, 1340.3,
1362.0, 1364.2, 1401.2, 1429.2, 1437.2, 1441.3, 1451.8, 1592.3, 2932.2, 2954.2,
2961.4, 2982.5, 3001.5, 3033.3, 3036.1, 3044.9, 3054.8, 3060.3, 3158.9, 3228.4,
3254.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.00963	0.24207	0.09974	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78126	0.78694	0.10224	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24049	0.01483	0.09615	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23459	0.01039	0.88844	Biso	1.000	Si

Si5	1.0000	0.77931	0.78324	0.89421	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00692	0.24083	0.89264	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67565	0.57784	0.43176	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44709	0.12083	0.43476	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90980	0.34383	0.43250	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90617	0.34715	0.22625	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44335	0.11638	0.22632	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67807	0.57779	0.22820	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33934	0.90212	0.76902	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10976	0.44540	0.76365	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57318	0.67813	0.76599	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58252	0.68517	0.56303	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11029	0.44833	0.56218	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34164	0.90110	0.56125	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00630	0.77998	0.89426	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23636	0.24028	0.88921	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77993	0.01133	0.89261	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77993	0.01365	0.10099	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24064	0.24421	0.09672	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01059	0.78704	0.10208	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67836	0.11788	0.22940	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90692	0.57699	0.22871	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44573	0.34677	0.22582	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43824	0.34751	0.43091	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90403	0.57308	0.43478	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68016	0.11892	0.42979	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34581	0.45990	0.55855	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57312	0.91067	0.56247	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10574	0.68094	0.56445	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10890	0.67785	0.76794	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57097	0.90883	0.76642	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34115	0.44988	0.76331	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91147	0.11128	0.11855	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91315	0.82106	0.11932	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20918	0.11361	0.11630	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10426	0.90973	0.87229	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81377	0.91406	0.87358	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10535	0.20866	0.87494	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56837	0.45178	0.44242	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58819	0.15876	0.43083	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88223	0.44578	0.45058	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77429	0.25018	0.21074	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47874	0.24839	0.20909	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77585	0.54380	0.21236	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23962	0.77255	0.79023	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24194	0.48167	0.78015	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54138	0.77781	0.77602	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45095	0.58872	0.54698	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12389	0.57297	0.55535	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43807	0.86348	0.54922	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99029	0.32797	0.16162	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69648	0.67905	0.16193	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34950	0.03502	0.15334	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32179	0.99152	0.82833	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67133	0.69600	0.83554	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02708	0.34714	0.83201	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66650	0.66728	0.49734	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36420	0.00582	0.50119	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01634	0.36196	0.49264	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02357	0.68978	0.83633	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32090	0.34469	0.82607	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67299	0.99046	0.83267	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69315	0.03650	0.15839	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34722	0.33126	0.15684	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99144	0.68396	0.16687	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35397	0.37471	0.48895	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00293	0.66458	0.49975	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65111	0.01379	0.49639	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13170	0.25558	0.12407	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76662	0.89332	0.13130	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.13275	0.89519	0.12818	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24612	0.13064	0.86154	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88496	0.76616	0.86802	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88632	0.13303	0.86530	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78971	0.57548	0.45808	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42645	0.23141	0.46336	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80371	0.22296	0.46036	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92126	0.46998	0.20203	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55419	0.10350	0.21424	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55638	0.46882	0.20605	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46014	0.91512	0.79611	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09417	0.55369	0.78112	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46192	0.55823	0.78967	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59851	0.80858	0.54163	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23049	0.46077	0.53616	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21931	0.79343	0.53252	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00683	0.27449	0.99625	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74788	0.75459	0.99863	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26800	0.01131	0.99220	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68471	0.62191	0.32967	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94348	0.34521	0.32850	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33621	0.93102	0.66546	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07268	0.39851	0.66254	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61786	0.67839	0.66553	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.00944	0.75154	0.99906	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27290	0.27475	0.99250	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74792	0.01023	0.99667	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69278	0.08002	0.32875	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94267	0.61341	0.33216	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40021	0.34112	0.32634	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34181	0.41531	0.65990	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60881	0.95340	0.66507	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07502	0.69350	0.66701	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38694	0.07500	0.32492	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21573	0.00231	0.34300	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22534	0.96877	0.40580	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19800	0.95089	0.28365	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22190	0.08480	0.34048	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02203	0.91952	0.33887	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00470	0.84013	0.30784	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.01541	0.98139	0.29686	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.03359	0.93200	0.42845	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.04311	0.02870	0.48112	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.12235	0.06625	0.52034	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.04766	0.09575	0.43741	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.03268	0.86292	0.46660	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.94234	0.98845	0.54618	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.93671	0.91856	0.58698	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.86295	0.95256	0.50777	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.95338	0.08416	0.60582	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.03072	0.11920	0.64663	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.95658	0.15379	0.56662	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.88053	0.05364	0.65104	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-methyl-12-butene:>; E= -960.874 eV; ZPVE= 4.957eV;
frequencies =396.9i, 35.0, 53.8, 70.1, 77.0, 99.0, 106.1, 148.6, 152.9, 172.5,
201.5, 234.8, 276.2, 284.2, 302.4, 350.2, 390.6, 411.6, 422.3, 529.4, 582.7, 590.9,
596.7, 664.1, 700.7, 744.9, 763.7, 810.4, 916.8, 927.7, 938.6, 959.9, 974.6, 990.4,
1015.0, 1017.4, 1055.3, 1073.0, 1133.2, 1226.5, 1282.8, 1300.4, 1345.3, 1354.5,
1355.5, 1372.9, 1385.5, 1405.5, 1421.4, 1437.9, 1447.1, 1453.6, 1585.1, 2925.0,
2951.8, 2987.6, 3000.9, 3006.1, 3044.0, 3057.3, 3058.9, 3061.9, 3072.5, 3158.5,
3241.0, 3255.1 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01348 0.23906 0.10580 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78644 0.78329 0.10880 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24460 0.01079 0.10201 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23783 0.00689 0.89424 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78333 0.77943 0.90082 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01066 0.23869 0.90017 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67847 0.57342 0.43831 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45085 0.11622 0.44021 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91190 0.34066 0.43973 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90974 0.34362 0.23230 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44734 0.11118 0.23215 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68118 0.57329 0.23411 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34342 0.89852 0.77555 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11346 0.44199 0.76983 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57673 0.67482 0.77265 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58574 0.68141 0.56963 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11433 0.44517 0.56827 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34561 0.89729 0.56736 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00980 0.77573 0.90052 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24102 0.23720 0.89624 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78432 0.00772 0.89900 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78410 0.00961 0.10695 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24514 0.23981 0.10288 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01521 0.78241 0.10819 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68251 0.11321 0.23545 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91220 0.57295 0.23507 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45121 0.34401 0.23161 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44423 0.34505 0.43759 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90836 0.56903 0.44084 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68354 0.11504 0.43583 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34958 0.45627 0.56491 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57617 0.90667 0.56883 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11041 0.67784 0.57038 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11314 0.67456 0.77404 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57484 0.90578 0.77296 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34485 0.44660 0.76989 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91542 0.10815 0.12404 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91819 0.81698 0.12608 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21272 0.10905 0.12327 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10753 0.90572 0.87916 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81835 0.91049 0.88059 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.11022 0.20753 0.88526 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57498 0.44590 0.45383 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59250 0.15619 0.43572 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88189 0.44054 0.45973 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77875 0.24509 0.21622 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48114 0.24307 0.21762 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.78155 0.54244 0.22188 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24379 0.76895 0.79703 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.24549 0.47810 0.78679 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.54509 0.77464 0.78237 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.45376 0.58563 0.55356 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.13043 0.57082 0.56177 Biso 1.000 O

O18	1.0000	0.44108	0.85848	0.55488	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99612	0.32372	0.17088	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70151	0.67618	0.16904	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35425	0.03119	0.15846	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32487	0.98803	0.83393	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67480	0.69281	0.84236	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03048	0.34353	0.83794	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66905	0.66278	0.50374	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36963	0.00330	0.50847	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01934	0.35974	0.49901	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02741	0.68616	0.84214	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32466	0.34130	0.83253	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67792	0.98726	0.83849	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69695	0.03116	0.16500	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34977	0.32615	0.16494	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99649	0.67975	0.17314	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35961	0.37165	0.49577	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00694	0.65992	0.50607	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65344	0.00997	0.50261	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13575	0.25165	0.12745	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77260	0.89020	0.13750	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13761	0.89056	0.13347	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24818	0.12658	0.86694	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88840	0.76168	0.87418	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89106	0.12962	0.87270	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79619	0.57673	0.46046	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42723	0.22557	0.46597	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80744	0.21828	0.46649	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92334	0.46490	0.20495	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55879	0.09966	0.21974	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56237	0.46344	0.20647	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46439	0.91239	0.80360	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09792	0.55022	0.78731	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46541	0.55499	0.79652	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60253	0.80516	0.54841	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23313	0.45454	0.54147	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22312	0.79070	0.53798	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00835	0.27361	0.00325	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75259	0.75053	0.00533	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27224	0.00896	0.99789	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67920	0.61262	0.33579	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94565	0.34479	0.33540	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34059	0.92645	0.67181	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07682	0.39536	0.66864	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62087	0.67426	0.67214	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01264	0.74636	0.00516	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28088	0.27080	0.99920	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75105	0.00583	0.00291	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69671	0.07573	0.33501	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95064	0.60579	0.33839	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41101	0.34604	0.33264	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34548	0.41218	0.66642	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61111	0.94995	0.67137	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07998	0.69049	0.67302	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39070	0.06671	0.33053	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22392	0.99975	0.34445	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23124	0.98390	0.41404	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20464	0.93377	0.29575	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22626	0.07720	0.32407	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03056	0.89854	0.36225	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03324	0.83241	0.40122	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.00555	0.88007	0.29271	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.03551	0.99092	0.40210	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.01419	0.07254	0.34993	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.00602	0.05037	0.27899	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.92985	0.05741	0.37105	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.10111	0.19826	0.36368	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.18672	0.21902	0.34293	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.07782	0.25127	0.32433	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.10599	0.22425	0.43324	Biso	1.000	H

C6	1.0000	0.06152	0.01380	0.49886	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.14451	0.09102	0.50877	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.99856	0.03026	0.53112	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.06265	0.94309	0.53280	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of trimethyl_ethylene:s; E= -960.997 eV; ZPVE= 4.941eV;
frequencies =375.7i, 47.6, 52.7, 68.4, 82.2, 94.7, 117.4, 130.6, 146.3, 175.3,
201.4, 214.5, 253.9, 289.9, 304.8, 318.7, 349.0, 385.4, 394.6, 464.1, 521.6, 581.7,
583.6, 594.6, 661.9, 702.5, 770.6, 849.9, 913.0, 922.7, 945.9, 958.9, 966.6,
1006.6, 1024.8, 1046.1, 1052.6, 1110.7, 1126.2, 1216.7, 1324.3, 1343.8, 1359.2,
1362.7, 1364.0, 1373.6, 1409.0, 1418.3, 1426.4, 1431.7, 1440.5, 1442.8, 1613.6,
2955.4, 2962.4, 2974.0, 3006.0, 3025.2, 3029.0, 3044.3, 3047.0, 3064.9, 3069.6,
3073.9, 3232.4, 3261.6 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.00851	0.23112	0.10311	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78196	0.77666	0.10580	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24037	0.00294	0.09931	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23327	0.99805	0.89183	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77873	0.77120	0.89825	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00622	0.23012	0.89757	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67560	0.56768	0.43570	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44548	0.10791	0.43811	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90703	0.33324	0.43710	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90533	0.33624	0.22967	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44364	0.10616	0.22916	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67715	0.56671	0.23182	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33915	0.89087	0.77209	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10942	0.43380	0.76712	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57215	0.66624	0.77004	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58092	0.67335	0.56696	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10929	0.43593	0.56563	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34059	0.89012	0.56400	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00593	0.76802	0.89843	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23721	0.22957	0.89403	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78007	0.99961	0.89587	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77938	0.00245	0.10416	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24138	0.23316	0.09950	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01094	0.77633	0.10634	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67787	0.10546	0.23312	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90642	0.56418	0.23194	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44725	0.33692	0.22881	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44188	0.33753	0.43578	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90416	0.56119	0.43829	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67925	0.10555	0.43275	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34507	0.44787	0.56171	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57200	0.89925	0.56594	Biso	1.000	Si

Si32	1.0000	0.10529	0.66864	0.56829	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10816	0.66596	0.77136	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56993	0.89711	0.77031	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34059	0.43811	0.76668	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91082	0.10024	0.12213	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91419	0.81175	0.12196	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20895	0.10213	0.11806	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10280	0.89791	0.87547	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81400	0.90224	0.87764	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10599	0.19891	0.88400	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57156	0.44041	0.45030	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58575	0.14342	0.43304	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87685	0.43257	0.45834	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77405	0.23762	0.21469	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47971	0.23831	0.21143	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77523	0.53269	0.21937	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23916	0.76108	0.79235	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24165	0.47018	0.78344	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54044	0.76601	0.77976	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44930	0.57701	0.54990	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12503	0.56135	0.55956	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43789	0.85395	0.55030	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99141	0.31575	0.16831	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69850	0.66950	0.16651	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35071	0.02536	0.15566	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32029	0.97981	0.83102	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67066	0.68448	0.83937	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02709	0.33534	0.83543	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66562	0.65650	0.50127	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36012	0.99378	0.50386	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01411	0.35053	0.49631	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02369	0.67805	0.84061	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31954	0.33207	0.82864	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67327	0.97868	0.83568	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69179	0.02471	0.16101	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34428	0.31836	0.16356	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98969	0.67245	0.17090	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35527	0.36342	0.49218	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00316	0.65176	0.50306	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65211	0.00201	0.50027	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13125	0.24399	0.12387	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76670	0.88260	0.13491	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13306	0.88419	0.13326	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24477	0.11874	0.86647	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88382	0.75285	0.87289	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88699	0.12125	0.86905	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79263	0.57004	0.45826	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42773	0.22026	0.46723	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80226	0.21072	0.46270	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91851	0.45701	0.20075	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55369	0.09185	0.21944	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55646	0.45842	0.20552	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45945	0.90360	0.80108	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09385	0.54194	0.78492	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46111	0.54615	0.79399	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59643	0.79643	0.54612	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22809	0.44519	0.53848	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21905	0.78088	0.53745	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00240	0.26479	0.00051	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74672	0.74282	0.00266	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26660	0.99724	0.99543	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67749	0.60795	0.33333	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94197	0.33905	0.33284	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33833	0.92097	0.66858	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07225	0.38631	0.66612	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61565	0.66539	0.66937	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01083	0.74096	0.00334	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27880	0.26648	0.99638	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74763	0.99886	0.99983	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69261	0.06654	0.33193	Biso	1.000	O

O67	1.0000	0.94478	0.59524	0.33534	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40663	0.33392	0.33065	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34169	0.40404	0.66315	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60594	0.94144	0.66878	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07281	0.68007	0.67065	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38499	0.06606	0.32756	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22780	0.03731	0.33971	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22277	0.00887	0.40780	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19466	0.97404	0.28742	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25361	0.12486	0.32555	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03169	0.97902	0.34013	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.97811	0.85661	0.36455	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.02727	0.99615	0.26955	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.06798	0.06944	0.39665	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.10132	0.18470	0.36146	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.18323	0.25019	0.38843	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.10453	0.18826	0.28874	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.03905	0.20856	0.38365	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.07326	0.06170	0.49550	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.01007	0.81235	0.32297	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.99110	0.84223	0.43414	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.88596	0.81488	0.35286	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.04908	0.97670	0.51973	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.15933	0.12184	0.51950	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.01656	0.08797	0.52631	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-hexene:~; E= -977.449 eV; ZPVE= 5.711eV; frequencies
=359.2i, 40.8, 48.0, 56.1, 60.3, 79.0, 93.5, 109.1, 129.0, 162.7, 181.0, 223.9,
237.9, 238.9, 280.8, 296.2, 306.9, 332.9, 349.4, 374.2, 423.0, 527.5, 580.5, 588.0,
595.9, 655.1, 697.6, 733.2, 805.2, 856.2, 883.9, 908.1, 912.2, 942.1, 982.3,
1006.0, 1020.6, 1033.1, 1039.2, 1069.7, 1095.3, 1119.2, 1152.5, 1213.2, 1251.4,
1274.9, 1294.6, 1307.9, 1326.9, 1342.0, 1359.9, 1361.6, 1362.5, 1416.0, 1427.9,
1434.2, 1438.1, 1442.4, 1452.6, 1622.0, 2944.9, 2954.4, 2962.1, 2965.1, 2977.7,
3001.0, 3022.9, 3034.0, 3035.5, 3036.5, 3044.5, 3052.6, 3061.3, 3227.2, 3254.6 cm^-
1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.00241 0.23857 0.09117 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.77160 0.78142 0.09124 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.23326 0.01047 0.08925 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.22967 0.00693 0.88186 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.77216 0.77942 0.88568 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00159 0.23794 0.88480 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67128 0.57700 0.42284 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44499 0.11955 0.42748 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.90377 0.34050 0.42417 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.89877 0.34346 0.21747 Biso 1.000 Si

Si10	1.0000	0.43650	0.11307	0.21886	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67139	0.57495	0.21994	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33336	0.89890	0.76096	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10443	0.44295	0.75508	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56763	0.67450	0.75703	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57600	0.68155	0.55351	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10544	0.44618	0.55321	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33608	0.89849	0.55321	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00215	0.77702	0.88682	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23204	0.23817	0.88269	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77428	0.00829	0.88352	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77282	0.00966	0.09182	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23495	0.24182	0.08888	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00419	0.78240	0.09267	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67130	0.11290	0.22097	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89900	0.57244	0.21959	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43873	0.34254	0.21879	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43419	0.34454	0.42396	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89727	0.56842	0.42627	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67575	0.11473	0.42052	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34039	0.45611	0.55000	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56644	0.90688	0.55412	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10074	0.67832	0.55474	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10249	0.67467	0.75874	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56546	0.90578	0.75794	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33589	0.44730	0.75543	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90405	0.10778	0.10997	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90328	0.81288	0.10278	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20396	0.11118	0.10723	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09922	0.90711	0.86428	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80726	0.91036	0.86440	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10056	0.20579	0.87023	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56265	0.45173	0.43243	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58539	0.15668	0.42020	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87384	0.44062	0.44352	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76719	0.24522	0.20240	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47218	0.24491	0.19926	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76804	0.53981	0.20300	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23292	0.76956	0.78181	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23668	0.47930	0.77145	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53770	0.77536	0.76810	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44511	0.58448	0.53553	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12180	0.57196	0.54579	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43119	0.85916	0.54156	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98372	0.32413	0.15389	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68834	0.67490	0.15277	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34136	0.03011	0.14744	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31666	0.98854	0.82091	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66845	0.69225	0.82354	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02246	0.34353	0.82298	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66216	0.66621	0.48852	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36192	0.00487	0.49398	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01133	0.36029	0.48365	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01630	0.68724	0.82574	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31448	0.34116	0.81756	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66769	0.98866	0.82362	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68526	0.03178	0.14901	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33930	0.32811	0.15125	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98369	0.68016	0.15867	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34784	0.36899	0.48182	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99741	0.66010	0.49012	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64399	0.00966	0.48770	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12434	0.25113	0.11470	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76066	0.88964	0.12200	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12330	0.89287	0.12155	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24239	0.12830	0.85686	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87987	0.76364	0.86547	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88169	0.12955	0.85676	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78393	0.57262	0.44998	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42738	0.23136	0.45835	Biso	1.000	O

O45	1.0000	0.79961	0.21791	0.45124	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91248	0.46522	0.19143	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54675	0.09879	0.20778	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54860	0.46571	0.20094	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45382	0.91066	0.78764	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08809	0.55069	0.77334	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45634	0.55548	0.78291	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59140	0.80474	0.53313	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22454	0.45573	0.52763	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21333	0.79240	0.52360	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99892	0.27193	0.98801	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73239	0.74900	0.98861	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26165	0.00504	0.98565	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68179	0.62202	0.32090	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.93690	0.34376	0.31980	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.32999	0.92826	0.65750	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.06738	0.39700	0.65374	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.60913	0.67266	0.65603	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01064	0.74756	0.99052	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27053	0.27531	0.98543	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74157	0.00677	0.98747	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68760	0.07450	0.31969	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.93431	0.60633	0.32323	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.39268	0.33294	0.31977	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33810	0.41405	0.65190	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60247	0.95005	0.65651	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.06934	0.68946	0.65746	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38104	0.07529	0.31827	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21953	0.03293	0.34494	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22652	0.99446	0.40596	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18253	0.97949	0.28691	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24125	0.12113	0.34433	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03273	0.01831	0.36188	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06010	0.10897	0.36478	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05131	0.97087	0.43480	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.09634	0.03081	0.52104	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.16452	0.01687	0.54619	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.13382	0.12304	0.51193	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.02031	0.87933	0.43400	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.00113	0.98803	0.59108	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.96842	0.89697	0.60314	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.92961	0.99512	0.56423	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.04225	0.05419	0.67775	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.11544	0.05059	0.70458	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.06865	0.14410	0.66758	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96689	0.95528	0.28231	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.88548	0.95432	0.28126	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.01025	0.99606	0.22009	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.94819	0.86695	0.28276	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.97553	0.02030	0.72862	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 1-hexene:o; E= -977.305 eV; ZPVE= 5.733eV; frequencies
=379.0i, 14.3, 44.7, 60.9, 67.1, 69.8, 96.1, 104.7, 126.4, 156.7, 179.4, 190.7,
246.8, 259.9, 265.1, 312.2, 342.5, 364.1, 385.5, 400.4, 462.5, 579.3, 591.5, 600.0,
660.9, 698.0, 717.0, 726.8, 785.1, 887.2, 903.5, 924.7, 932.0, 951.5, 980.4,
1001.9, 1015.7, 1027.7, 1042.3, 1053.8, 1089.7, 1120.8, 1166.4, 1212.4, 1229.1,
1269.0, 1285.9, 1294.9, 1304.5, 1335.9, 1342.2, 1359.7, 1361.6, 1403.1, 1429.0,
1434.6, 1439.7, 1451.0, 1456.5, 1594.3, 2928.8, 2940.4, 2947.0, 2967.4, 2973.3,
2989.2, 3004.7, 3036.8, 3043.5, 3059.7, 3063.0, 3063.8, 3166.2, 3227.8, 3256.5 cm⁻¹
1

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"

_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.00804	0.24819	0.09778	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77995	0.79177	0.10112	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23843	0.01838	0.09379	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23128	0.01473	0.88650	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77596	0.78843	0.89338	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00436	0.24738	0.89301	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66987	0.58021	0.43038	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44355	0.12388	0.43240	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90498	0.34836	0.43202	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90377	0.35156	0.22518	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44074	0.11853	0.22482	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67403	0.58055	0.22598	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33589	0.90540	0.76873	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10605	0.44999	0.76246	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56985	0.68256	0.76489	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57827	0.68895	0.56196	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10801	0.45464	0.56033	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33759	0.90512	0.55947	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00232	0.78322	0.89297	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23149	0.24367	0.88756	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77432	0.01495	0.89292	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77533	0.01658	0.09877	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23645	0.24616	0.09551	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00836	0.78980	0.09984	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67583	0.12208	0.22811	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90505	0.58069	0.22768	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44327	0.35208	0.22356	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43484	0.35279	0.42828	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90004	0.57653	0.43325	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67605	0.12364	0.42952	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34184	0.46317	0.55764	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56653	0.91314	0.56026	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10287	0.68598	0.56258	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10517	0.68189	0.76702	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56659	0.91299	0.76541	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33729	0.45385	0.76244	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90672	0.11741	0.10994	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91183	0.82507	0.11678	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20564	0.11578	0.11525	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10116	0.91288	0.87220	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81048	0.91942	0.87299	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10068	0.21284	0.87298	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56592	0.45291	0.44570	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58583	0.16584	0.43165	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87426	0.44809	0.45072	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77268	0.25366	0.20901	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47216	0.25007	0.21283	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77428	0.54934	0.21394	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23522	0.77669	0.79111	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23783	0.48529	0.77964	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53837	0.78243	0.77525	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44653	0.59234	0.54681	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12521	0.58071	0.55267	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43175	0.86510	0.54416	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98914	0.33184	0.16263	Biso	1.000	O

O20	1.0000	0.69562	0.68429	0.16135	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34753	0.03893	0.15091	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31809	0.99660	0.82533	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66811	0.70088	0.83458	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02138	0.34964	0.82864	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66115	0.67030	0.49554	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36190	0.01266	0.50240	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01263	0.36906	0.49156	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01786	0.69316	0.83352	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31716	0.34890	0.82549	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67147	0.99663	0.82879	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69079	0.03895	0.15928	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34377	0.33375	0.15466	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98929	0.68794	0.16601	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35096	0.37832	0.48833	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99795	0.66678	0.49939	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64566	0.01757	0.49548	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12728	0.25638	0.12420	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76769	0.89927	0.13094	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13141	0.89752	0.12439	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24063	0.13392	0.85914	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88179	0.77164	0.86738	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88127	0.13907	0.87323	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78740	0.58321	0.45316	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41709	0.23226	0.45395	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80081	0.22608	0.45962	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91777	0.47338	0.19875	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55336	0.10993	0.20944	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55547	0.47072	0.19788	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45614	0.91848	0.79801	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09059	0.55801	0.78139	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45827	0.56251	0.78813	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59389	0.81222	0.54045	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22644	0.46332	0.53419	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21383	0.80040	0.52956	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01254	0.28881	0.99552	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74450	0.75936	0.99779	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26715	0.01745	0.98980	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67178	0.61956	0.32773	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.93952	0.35164	0.32808	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33379	0.93166	0.66456	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.06988	0.40581	0.66078	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61451	0.68291	0.66437	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.00527	0.75214	0.99719	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.26728	0.27656	0.99114	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.73481	0.00638	0.99594	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68703	0.08450	0.32826	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94294	0.61545	0.33106	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40219	0.35726	0.32372	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33698	0.41851	0.65911	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.59868	0.95553	0.66318	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07327	0.69762	0.66556	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38621	0.07047	0.32291	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21530	0.99331	0.33752	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22477	0.96301	0.40188	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19936	0.93956	0.27983	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21951	0.07465	0.33187	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02134	0.91100	0.33065	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.99880	0.82818	0.30356	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.01743	0.97195	0.28573	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.03972	0.93112	0.41911	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06207	0.03641	0.46574	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.14471	0.07283	0.50017	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.06803	0.10053	0.41799	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.03583	0.86326	0.46081	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.97005	0.01248	0.53540	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.96275	0.94624	0.58162	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.88706	0.97767	0.50215	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.99563	0.11919	0.58709	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.07773	0.15210	0.62154	Biso	1.000	H

H12	1.0000	0.00607	0.18546	0.53982	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.90261	0.09793	0.65337	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.92158	0.17578	0.68896	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.82093	0.06762	0.61966	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.89214	0.03386	0.70280	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 11-methyl-isopropyl-ethylene:>; E= -977.584 eV; ZPVE=
5.699eV; frequencies =399.7i, 20.0, 34.1, 55.5, 61.8, 67.9, 88.7, 150.8, 170.0,
187.6, 210.5, 222.6, 258.4, 267.9, 297.3, 308.3, 321.4, 346.0, 370.6, 388.8, 428.3,
481.2, 574.1, 580.3, 586.8, 593.9, 658.8, 699.1, 722.7, 800.2, 882.5, 901.9, 915.1,
938.2, 940.7, 951.6, 965.1, 981.4, 1000.1, 1014.9, 1074.9, 1103.1, 1126.3, 1142.9,
1230.7, 1252.2, 1327.4, 1343.3, 1349.9, 1353.5, 1360.8, 1368.0, 1386.1, 1423.7,
1429.5, 1439.8, 1443.2, 1456.1, 1463.5, 1579.0, 2906.8, 2963.6, 2966.7, 2969.0,
3020.0, 3036.2, 3039.8, 3045.8, 3048.4, 3061.6, 3063.4, 3064.8, 3155.4, 3238.8,
3258.2 cm^-1

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1
```

```
loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01082  0.23140  0.10312  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.78319  0.77661  0.10570  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24214  0.00362  0.09936  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.23548  0.99896  0.89148  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.78082  0.77230  0.89764  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.00816  0.23022  0.89619  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.67693  0.56742  0.43512  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.44759  0.10873  0.43797  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.90988  0.33279  0.43573  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.90786  0.33650  0.22959  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.44547  0.10647  0.22897  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.67947  0.56746  0.23153  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34067  0.89136  0.77173  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11092  0.43427  0.76702  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.57407  0.66704  0.76952  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58262  0.67335  0.56652  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11081  0.43627  0.56602  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.34211  0.89007  0.56378  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.00760  0.76885  0.89773  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.23792  0.22948  0.89257  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78165  0.00052  0.89556  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78122  0.00298  0.10405  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.24233  0.23332  0.09961  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01232  0.77655  0.10595  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68015  0.10681  0.23248  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.90796  0.56626  0.23200  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.44740  0.33654  0.22892  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.44008  0.33646  0.43417  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.90476  0.56189  0.43787  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68133  0.10660  0.43265  Biso  1.000  Si
```


Si30	1.0000	0.34642	0.44777	0.56165	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57417	0.89967	0.56560	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10681	0.66905	0.56810	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11004	0.66688	0.77109	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57215	0.89805	0.76953	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34247	0.43872	0.76655	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91243	0.10095	0.12253	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91511	0.81104	0.12302	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21107	0.10281	0.11922	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10517	0.89854	0.87493	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81574	0.90330	0.87709	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10700	0.19847	0.87913	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56964	0.44128	0.44580	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58805	0.14469	0.43351	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88068	0.43350	0.45292	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77632	0.23892	0.21363	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48074	0.23845	0.21172	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77672	0.53281	0.21563	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24090	0.76176	0.79284	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24305	0.47019	0.78327	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54251	0.76694	0.77887	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45115	0.57667	0.54955	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12610	0.56148	0.56042	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43977	0.85419	0.55112	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99288	0.31782	0.16552	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69820	0.66891	0.16544	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35220	0.02518	0.15576	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32280	0.98061	0.83111	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67242	0.68547	0.83909	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02840	0.33675	0.83592	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66715	0.65641	0.50075	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36258	0.99412	0.50367	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01624	0.35110	0.49627	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02521	0.67849	0.84029	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32231	0.33335	0.82903	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67451	0.97930	0.83572	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69361	0.02520	0.16094	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34793	0.32025	0.16065	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99238	0.67252	0.16972	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35453	0.36229	0.49204	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00404	0.65092	0.50314	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65359	0.00191	0.49921	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13279	0.24396	0.12673	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76827	0.88291	0.13440	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13457	0.88454	0.13229	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24692	0.11939	0.86528	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88598	0.75442	0.87140	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88803	0.12225	0.86819	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79114	0.56559	0.46152	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42920	0.22078	0.46647	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80436	0.21142	0.46323	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92210	0.45891	0.20551	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55609	0.09323	0.21843	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55743	0.45881	0.20919	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46139	0.90440	0.79946	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09581	0.54284	0.78400	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46281	0.54721	0.79355	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59825	0.79660	0.54566	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23002	0.44657	0.53918	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22075	0.78081	0.53623	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00716	0.26356	0.99978	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74974	0.74391	0.00214	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26857	0.99920	0.99528	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68568	0.61122	0.33303	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94477	0.33395	0.33196	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33807	0.92050	0.66820	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07331	0.38589	0.66626	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61766	0.66584	0.66894	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01136	0.74175	0.00270	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27544	0.26465	0.99570	Biso	1.000	O

O65	1.0000	0.74993	0.00000	0.99965	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69518	0.06868	0.33155	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94343	0.60224	0.33539	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40165	0.32987	0.32958	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34349	0.40421	0.66315	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60940	0.94271	0.66816	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07541	0.68219	0.67042	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38775	0.06535	0.32748	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22466	0.01840	0.34010	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22648	0.00058	0.41011	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19826	0.94975	0.29265	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.23886	0.10055	0.31902	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03130	0.94757	0.34344	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00701	0.86332	0.36852	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.02425	0.95576	0.27194	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.04752	0.03372	0.39899	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06965	0.14477	0.36142	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.08835	0.15169	0.29010	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.99419	0.15367	0.37022	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.13934	0.21707	0.39633	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.04519	0.02407	0.49903	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.12865	0.09344	0.52187	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.02901	0.91187	0.53452	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.03522	0.91510	0.60733	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.94496	0.84045	0.51720	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.09329	0.89263	0.50954	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95429	0.04795	0.53819	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.96951	0.13294	0.52192	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.86940	0.98541	0.51392	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.95399	0.04108	0.61092	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of tetra-methyl-ethylene:s; E= -977.628 eV; ZPVE= 5.670eV;
frequencies =362.4i, 24.4, 62.1, 77.0, 83.7, 87.1, 93.0, 99.8, 109.6, 136.6, 154.2,
170.5, 205.1, 224.9, 266.8, 310.0, 327.6, 336.7, 359.2, 393.9, 410.0, 418.2, 489.7,
505.6, 581.5, 588.8, 591.7, 658.5, 698.1, 700.4, 881.3, 894.4, 905.6, 923.7, 932.2,
953.6, 976.9, 1001.4, 1006.7, 1045.0, 1050.4, 1135.3, 1156.4, 1164.7, 1260.4,
1347.9, 1352.2, 1356.6, 1359.0, 1364.8, 1371.6, 1411.0, 1414.6, 1420.3, 1427.6,
1430.6, 1438.3, 1443.9, 1454.8, 1609.9, 2958.8, 2961.6, 2963.8, 2975.3, 3012.5,
3019.1, 3036.6, 3040.1, 3042.3, 3070.8, 3072.7, 3081.2, 3082.8, 3227.2, 3258.1 cm⁻¹
1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.00751	0.23104	0.09705	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77752	0.77437	0.09629	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23779	0.00234	0.09468	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23366	0.99866	0.88695	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77697	0.77156	0.89120	Biso	1.000	Si

Si6	1.0000	0.00631	0.23013	0.89091	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67734	0.56959	0.42773	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44906	0.11113	0.43276	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90358	0.33344	0.42979	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90286	0.33538	0.22303	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44097	0.10500	0.22406	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67662	0.56716	0.22470	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33818	0.89083	0.76735	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10892	0.43443	0.76111	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57206	0.66627	0.76258	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57641	0.67323	0.55981	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11125	0.43829	0.55951	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34068	0.89105	0.55915	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00665	0.76815	0.89217	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23618	0.22956	0.88822	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77878	0.99994	0.88947	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77744	0.00160	0.09738	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23931	0.23309	0.09488	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00961	0.77419	0.09755	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67579	0.10454	0.22660	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90458	0.56437	0.22511	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44545	0.33585	0.22317	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44611	0.33920	0.42893	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90142	0.55991	0.43144	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67950	0.10653	0.42578	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34530	0.44890	0.55648	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57007	0.89922	0.56010	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10985	0.66889	0.56128	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10763	0.66598	0.76504	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56983	0.89782	0.76378	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34090	0.43885	0.76143	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90856	0.10038	0.11465	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90925	0.80556	0.10650	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20831	0.10269	0.11366	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10357	0.89819	0.86935	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81253	0.90262	0.87020	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10497	0.19779	0.87521	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57815	0.43900	0.43678	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58966	0.14924	0.42383	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.86464	0.42750	0.44634	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77143	0.23686	0.20758	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47743	0.23700	0.20462	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77354	0.53207	0.21003	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23751	0.76174	0.78864	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24102	0.46992	0.77675	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54241	0.76738	0.77299	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44238	0.58159	0.54563	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14212	0.56945	0.55504	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43474	0.85020	0.54712	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98874	0.31569	0.16087	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69525	0.66806	0.15821	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34662	0.02243	0.15220	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32166	0.98089	0.82683	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67347	0.68472	0.82865	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02646	0.33507	0.82872	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65664	0.65199	0.49263	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36775	0.99799	0.50041	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01243	0.36036	0.49023	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02007	0.67829	0.83063	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31968	0.33302	0.82381	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67266	0.98044	0.82904	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68968	0.02337	0.15469	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34362	0.31935	0.15748	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98844	0.67226	0.16416	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36610	0.37167	0.48702	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00463	0.64162	0.49643	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64659	0.00181	0.49332	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12903	0.24283	0.12121	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76675	0.88236	0.12780	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12869	0.88420	0.12689	Biso	1.000	O

O40	1.0000	0.24558	0.11953	0.86137	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88421	0.75479	0.87175	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88598	0.12186	0.86395	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79628	0.57847	0.45559	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43019	0.22231	0.46357	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80367	0.20872	0.45730	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91699	0.45691	0.19558	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55083	0.08994	0.21435	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55481	0.45816	0.20228	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45834	0.90224	0.79464	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09381	0.54250	0.78084	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46086	0.54747	0.78923	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59747	0.79854	0.53950	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22305	0.43347	0.53151	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21750	0.78625	0.52915	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00565	0.26571	0.99404	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73655	0.74128	0.99404	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26568	0.99784	0.99088	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68319	0.61260	0.32575	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.93959	0.33695	0.32604	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33526	0.91981	0.66378	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07106	0.38898	0.65972	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61219	0.66301	0.66125	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01636	0.73868	0.99568	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27414	0.26587	0.99124	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74490	0.99753	0.99323	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69261	0.06644	0.32526	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94122	0.59722	0.32868	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40396	0.33038	0.32517	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34383	0.40562	0.65785	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60573	0.94288	0.66239	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07530	0.67903	0.66317	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38378	0.06732	0.32345	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.23022	0.04029	0.34625	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23164	0.00997	0.41256	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18710	0.97815	0.29404	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25434	0.12806	0.33501	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02786	0.97509	0.38245	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.00019	0.86807	0.43110	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.08474	0.08111	0.42034	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.09928	0.18488	0.37339	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.17776	0.26099	0.39402	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09856	0.17892	0.30081	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.02931	0.19924	0.39231	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.12690	0.10243	0.51439	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.01535	0.81181	0.38800	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.04834	0.88091	0.49238	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.90932	0.82137	0.44822	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.10281	0.02547	0.55285	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.21985	0.15616	0.51672	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.09280	0.15057	0.54858	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96941	0.95425	0.29409	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.01028	0.02491	0.24716	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.96276	0.87885	0.26212	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.88188	0.93691	0.30399	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 1-heptene: ^; E= -993.768 eV; ZPVE= 6.516eV; frequencies
=384.3i, 38.5, 54.5, 60.6, 74.0, 87.0, 108.9, 126.3, 146.5, 162.5, 166.8, 180.6,
186.8, 237.9, 262.2, 266.4, 306.3, 334.7, 347.5, 355.2, 390.7, 432.3, 472.4, 577.2,
591.3, 598.9, 664.5, 696.1, 713.0, 716.4, 747.5, 828.4, 882.4, 928.3, 933.0, 943.3,
954.1, 980.8, 992.7, 1012.1, 1031.4, 1035.7, 1053.7, 1062.3, 1099.9, 1125.8,
1158.3, 1197.1, 1217.5, 1249.1, 1275.8, 1285.9, 1288.8, 1295.0, 1326.0, 1338.4,
1347.8, 1358.8, 1370.1, 1403.8, 1429.3, 1430.2, 1439.6, 1450.3, 1452.9, 1464.3,
1595.9, 2933.2, 2936.2, 2945.8, 2950.5, 2967.7, 2976.3, 2988.9, 3003.1, 3028.1,
3037.6, 3064.1, 3070.2, 3098.0, 3114.1, 3168.2, 3229.8, 3255.7 cm^-1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067

_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01168 0.25196 0.09834 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78346 0.79510 0.10246 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24200 0.02193 0.09520 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23494 0.01796 0.88787 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78004 0.79195 0.89519 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00795 0.25017 0.89395 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67365 0.58348 0.43151 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44788 0.12780 0.43340 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91001 0.35273 0.43269 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90921 0.35571 0.22753 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44502 0.12272 0.22571 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67756 0.58418 0.22705 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.33998 0.90913 0.77046 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11422 0.45676 0.76571 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57418 0.68525 0.76597 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58219 0.69311 0.56291 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11416 0.46049 0.56032 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34162 0.90952 0.56084 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00636 0.78685 0.89447 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23470 0.24640 0.88900 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.77797 0.01755 0.89439 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.77926 0.02017 0.09982 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24024 0.25003 0.09647 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01244 0.79313 0.10127 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67867 0.12418 0.22997 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90846 0.58364 0.22852 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44662 0.35642 0.22484 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.43900 0.35675 0.42910 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90350 0.57943 0.43429 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.67821 0.12575 0.42996 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34512 0.46687 0.55838 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.56837 0.91561 0.56135 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10663 0.68929 0.56337 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10828 0.68456 0.76883 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.56718 0.91242 0.76815 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34149 0.45724 0.76392 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91057 0.12116 0.11056 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91512 0.82741 0.11773 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.20959 0.11970 0.11611 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10483 0.91641 0.87305 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81617 0.92345 0.87542 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10312 0.21357 0.87553 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57038 0.45587 0.44687 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59037 0.17087 0.43322 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87689 0.45070 0.45192 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77818 0.25577 0.21568 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.47468 0.25379 0.21492 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77814 0.55359 0.21463 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.23806 0.78081 0.79142 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.24591 0.49312 0.78482 Biso 1.000 O

O15	1.0000	0.53806	0.78161	0.77824	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45033	0.59600	0.54937	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13224	0.58665	0.54955	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43392	0.86763	0.54301	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99282	0.33543	0.16338	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69881	0.68827	0.16304	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35141	0.04291	0.15212	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32202	0.00046	0.82657	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67297	0.70526	0.83550	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02823	0.35272	0.82862	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66439	0.67340	0.49655	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36631	0.01740	0.50409	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01387	0.37158	0.49629	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02084	0.69674	0.83435	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31920	0.35082	0.82589	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67377	0.99581	0.83038	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69483	0.04288	0.16013	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34706	0.33781	0.15596	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99350	0.69103	0.16719	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35620	0.38201	0.49052	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00144	0.66969	0.50040	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64891	0.02280	0.49916	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13091	0.26014	0.12462	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77220	0.90322	0.13221	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13496	0.90135	0.12642	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24477	0.13726	0.86074	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88544	0.77449	0.86981	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88414	0.14236	0.87453	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79146	0.58717	0.45420	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42006	0.23546	0.45332	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80511	0.22859	0.45453	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91973	0.47559	0.19923	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55845	0.11606	0.20869	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55924	0.47436	0.19849	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45857	0.92015	0.80234	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09535	0.56204	0.78714	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46527	0.56271	0.78782	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59705	0.81583	0.53995	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23058	0.46674	0.53093	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21613	0.80640	0.53266	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01579	0.29270	0.99614	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74713	0.76222	0.99933	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27022	0.01989	0.99123	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67502	0.62258	0.32891	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95037	0.36115	0.32967	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34139	0.93669	0.66622	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08317	0.41823	0.66266	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62013	0.68964	0.66525	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01075	0.75619	0.99858	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27176	0.28078	0.99220	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.73804	0.00946	0.99718	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68334	0.08077	0.32954	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94637	0.61767	0.33200	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40630	0.36319	0.32492	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33625	0.42164	0.66012	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.59606	0.95323	0.66543	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07525	0.69591	0.66676	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39170	0.07336	0.32386	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22155	0.99583	0.33836	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23154	0.96712	0.40323	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20601	0.94116	0.28137	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22386	0.07620	0.33164	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02683	0.90859	0.33198	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00843	0.82697	0.30494	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.01833	0.96714	0.28733	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.04635	0.92995	0.42018	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06096	0.03255	0.46663	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.14653	0.07948	0.49633	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.05366	0.09020	0.41914	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.04781	0.86468	0.46180	Biso	1.000	H

C5	1.0000	0.97220	0.99920	0.54096	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.99179	0.95712	0.59510	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.88792	0.93615	0.51539	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.96633	0.10119	0.57590	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.05098	0.16756	0.59853	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.94348	0.13892	0.52054	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.87990	0.07063	0.65062	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.80263	0.99066	0.63330	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.91295	0.05272	0.71168	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.85030	0.16331	0.66675	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.78884	0.14196	0.72043	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.92603	0.24339	0.68389	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.81417	0.17795	0.60663	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-heptene:o; E= -993.985 eV; ZPVE= 6.486eV; frequencies
=365.6i, 35.5, 47.0, 69.2, 74.2, 82.2, 96.0, 106.7, 131.0, 133.6, 166.6, 181.0,
231.5, 238.9, 249.8, 274.2, 290.8, 297.0, 327.5, 349.5, 364.0, 394.6, 460.2, 530.8,
585.3, 592.4, 595.5, 658.5, 695.7, 716.2, 781.3, 818.9, 876.8, 896.1, 916.9, 929.9,
957.7, 983.3, 992.7, 1016.3, 1021.3, 1047.8, 1052.4, 1075.2, 1103.6, 1124.7,
1149.9, 1195.8, 1230.1, 1255.3, 1280.1, 1289.2, 1304.7, 1307.3, 1336.8, 1341.5,
1361.9, 1362.2, 1367.2, 1419.4, 1428.4, 1434.0, 1436.3, 1444.8, 1450.4, 1457.4,
1624.6, 2938.2, 2949.9, 2961.6, 2962.7, 2966.7, 2978.8, 2990.2, 3014.1, 3024.1,
3032.6, 3034.6, 3043.5, 3052.3, 3068.4, 3083.6, 3222.4, 3252.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00638	0.23763	0.09422	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77438	0.77861	0.09354	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23586	0.00705	0.09193	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23182	0.00552	0.88470	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77324	0.77832	0.88894	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00457	0.23740	0.89015	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67231	0.57456	0.42566	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44796	0.11826	0.43091	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90479	0.33784	0.42839	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90054	0.34003	0.22140	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43911	0.10959	0.22179	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67368	0.57196	0.22278	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33509	0.89686	0.76485	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10495	0.44165	0.75916	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56914	0.67266	0.76067	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57612	0.67884	0.55659	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10733	0.44607	0.55584	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33750	0.89688	0.55635	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00369	0.77459	0.88953	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23161	0.23474	0.88560	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77281	0.00500	0.88896	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77335	0.00519	0.09437	Biso	1.000	Si

Si22	1.0000	0.23541	0.23690	0.09315	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00679	0.77710	0.09358	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67372	0.10994	0.22473	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90136	0.56919	0.22300	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44104	0.33958	0.22129	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43557	0.34238	0.42630	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89842	0.56571	0.42964	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67732	0.11305	0.42468	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34217	0.45250	0.55433	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56553	0.90343	0.55696	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10364	0.67597	0.55608	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10405	0.67156	0.76272	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56650	0.90408	0.76183	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33769	0.44477	0.75887	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90463	0.10670	0.10497	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90551	0.80728	0.10133	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20564	0.10671	0.11188	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10138	0.90495	0.86881	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80777	0.90904	0.86696	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10000	0.20134	0.87105	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56429	0.44891	0.43523	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58882	0.15730	0.42379	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87419	0.43761	0.44730	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76920	0.24204	0.20521	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47404	0.24134	0.20293	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77040	0.53672	0.20680	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23354	0.76832	0.78611	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23681	0.47497	0.77201	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54094	0.77453	0.77295	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44498	0.58179	0.53909	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12941	0.57327	0.54107	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43030	0.85473	0.54292	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98596	0.32019	0.15900	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69176	0.67220	0.15545	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34330	0.02614	0.15092	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31877	0.98762	0.82342	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67092	0.69005	0.82604	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02215	0.33858	0.82423	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66197	0.66303	0.49146	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36578	0.00485	0.49848	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01279	0.35828	0.48743	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01525	0.68620	0.82498	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31568	0.33981	0.82268	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67062	0.98957	0.82522	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68852	0.02762	0.15474	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34198	0.32454	0.15310	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98591	0.67635	0.16144	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34957	0.36697	0.48447	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99819	0.65711	0.49380	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64352	0.00729	0.49150	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12496	0.24496	0.12205	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76749	0.88846	0.12657	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12608	0.88791	0.12175	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24300	0.12591	0.85853	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88187	0.76347	0.87109	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88096	0.12918	0.87196	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78548	0.57103	0.45265	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42793	0.22880	0.46030	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80153	0.21494	0.45631	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91474	0.46186	0.19501	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54932	0.09551	0.20994	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55121	0.46247	0.20299	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45472	0.90770	0.79318	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09124	0.54947	0.78420	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45706	0.55427	0.78692	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59193	0.80221	0.53602	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22417	0.44869	0.53488	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21328	0.79350	0.52654	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01352	0.28039	0.99227	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73145	0.74767	0.99150	Biso	1.000	O

O57	1.0000	0.26615	0.00577	0.98822	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68256	0.61908	0.32357	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.93722	0.34013	0.32403	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33309	0.92530	0.66111	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.06530	0.40324	0.65699	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.60925	0.67041	0.65923	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01371	0.74100	0.99188	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.26701	0.26929	0.98910	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.73205	0.99400	0.99181	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68953	0.07293	0.32403	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.93663	0.60333	0.32663	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.39460	0.33134	0.32200	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34333	0.41105	0.65593	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.59942	0.94606	0.65960	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07243	0.68039	0.65987	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38500	0.07146	0.32160	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22519	0.02851	0.34601	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23160	0.99623	0.41040	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18938	0.96941	0.29100	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24365	0.11542	0.33992	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03698	0.00894	0.35382	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06191	0.09902	0.35070	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05441	0.96950	0.43166	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.09032	0.03939	0.51448	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13426	0.01180	0.56083	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.14945	0.12911	0.49841	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.02564	0.87877	0.43746	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.98269	0.02929	0.55710	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.92665	0.94160	0.58020	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.93501	0.04394	0.50453	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.00380	0.11271	0.63228	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.03815	0.09198	0.69115	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.06908	0.19844	0.61114	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.89429	0.11191	0.65492	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.90622	0.17405	0.70605	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.85981	0.13157	0.59590	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.82933	0.02784	0.67871	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.97353	0.93825	0.27652	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.88951	0.93156	0.27371	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.01542	0.97637	0.21336	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.96024	0.85199	0.28172	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-tert-butyl-propylene:>; E= -994.244 eV; ZPVE= 6.432eV;
frequencies =407.7i, 17.3, 34.1, 48.3, 58.5, 69.2, 81.3, 133.4, 173.5, 181.4,
202.9, 213.5, 248.1, 264.7, 271.7, 296.8, 305.5, 312.2, 341.9, 350.6, 374.6, 386.7,
391.8, 460.9, 479.2, 572.0, 581.0, 587.9, 594.6, 660.6, 670.6, 701.1, 797.3, 831.2,
908.8, 911.1, 920.0, 929.2, 934.2, 938.3, 962.4, 979.0, 991.8, 1012.1, 1018.6,
1023.1, 1125.1, 1168.0, 1172.6, 1191.9, 1278.3, 1341.2, 1343.6, 1348.7, 1352.6,
1363.5, 1371.3, 1384.1, 1413.5, 1428.0, 1428.5, 1436.6, 1440.2, 1453.3, 1458.3,
1469.8, 1567.1, 2963.9, 2966.8, 2968.7, 2971.6, 3030.1, 3036.4, 3038.0, 3042.4,
3044.9, 3048.2, 3054.4, 3056.4, 3061.9, 3065.9, 3153.7, 3236.9, 3258.1 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01168	0.23079	0.10223	Biso 1.000 Si
Si2	1.0000	0.78386	0.77606	0.10430	Biso 1.000 Si
Si3	1.0000	0.24244	0.00310	0.09879	Biso 1.000 Si
Si4	1.0000	0.23677	0.99880	0.89080	Biso 1.000 Si
Si5	1.0000	0.78189	0.77207	0.89609	Biso 1.000 Si
Si6	1.0000	0.00955	0.22971	0.89522	Biso 1.000 Si
Si7	1.0000	0.67867	0.56762	0.43333	Biso 1.000 Si
Al1	1.0000	0.44935	0.10900	0.43708	Biso 1.000 Al
Si8	1.0000	0.90960	0.33270	0.43438	Biso 1.000 Si
Si9	1.0000	0.90793	0.33582	0.22837	Biso 1.000 Si
Si10	1.0000	0.44606	0.10565	0.22806	Biso 1.000 Si
Si11	1.0000	0.68024	0.56728	0.23029	Biso 1.000 Si
Si12	1.0000	0.34172	0.89102	0.77103	Biso 1.000 Si
Si13	1.0000	0.11191	0.43381	0.76603	Biso 1.000 Si
Si14	1.0000	0.57539	0.66676	0.76845	Biso 1.000 Si
Si15	1.0000	0.58228	0.67328	0.56563	Biso 1.000 Si
Si16	1.0000	0.11213	0.43580	0.56504	Biso 1.000 Si
Si17	1.0000	0.34340	0.89012	0.56331	Biso 1.000 Si
Si18	1.0000	0.00890	0.76875	0.89657	Biso 1.000 Si
Si19	1.0000	0.23909	0.22912	0.89193	Biso 1.000 Si
Si20	1.0000	0.78257	0.00013	0.89427	Biso 1.000 Si
Si21	1.0000	0.78211	0.00222	0.10287	Biso 1.000 Si
Si22	1.0000	0.24278	0.23273	0.09932	Biso 1.000 Si
Si23	1.0000	0.01306	0.77595	0.10480	Biso 1.000 Si
Si24	1.0000	0.68036	0.10563	0.23139	Biso 1.000 Si
Si25	1.0000	0.90910	0.56561	0.23073	Biso 1.000 Si
Si26	1.0000	0.44882	0.33587	0.22782	Biso 1.000 Si
Si27	1.0000	0.44412	0.33695	0.43307	Biso 1.000 Si
Si28	1.0000	0.90603	0.56138	0.43635	Biso 1.000 Si
Si29	1.0000	0.68193	0.10627	0.43118	Biso 1.000 Si
Si30	1.0000	0.34795	0.44790	0.56119	Biso 1.000 Si
Si31	1.0000	0.57476	0.89930	0.56473	Biso 1.000 Si
Si32	1.0000	0.10934	0.66826	0.56712	Biso 1.000 Si
Si33	1.0000	0.11108	0.66616	0.77019	Biso 1.000 Si
Si34	1.0000	0.57334	0.89776	0.76874	Biso 1.000 Si
Si35	1.0000	0.34374	0.43817	0.76555	Biso 1.000 Si
O1	1.0000	0.91344	0.10010	0.12102	Biso 1.000 O
O2	1.0000	0.91557	0.81002	0.12169	Biso 1.000 O
O3	1.0000	0.21128	0.10215	0.11876	Biso 1.000 O
O4	1.0000	0.10654	0.89845	0.87382	Biso 1.000 O
O5	1.0000	0.81612	0.90272	0.87480	Biso 1.000 O
O6	1.0000	0.10813	0.19769	0.87780	Biso 1.000 O
O7	1.0000	0.57521	0.43906	0.44304	Biso 1.000 O
O8	1.0000	0.59011	0.14635	0.43160	Biso 1.000 O
O9	1.0000	0.87733	0.43138	0.45147	Biso 1.000 O
O10	1.0000	0.77631	0.23797	0.21328	Biso 1.000 O
O11	1.0000	0.48198	0.23771	0.21036	Biso 1.000 O
O12	1.0000	0.77796	0.53311	0.21560	Biso 1.000 O
O13	1.0000	0.24182	0.76142	0.79180	Biso 1.000 O
O14	1.0000	0.24410	0.46948	0.78147	Biso 1.000 O
O15	1.0000	0.54442	0.76696	0.77873	Biso 1.000 O
O16	1.0000	0.44946	0.57876	0.55092	Biso 1.000 O
O17	1.0000	0.13283	0.56322	0.55975	Biso 1.000 O
O18	1.0000	0.44007	0.85284	0.55106	Biso 1.000 O
O19	1.0000	0.99266	0.31660	0.16443	Biso 1.000 O
O20	1.0000	0.69856	0.66786	0.16344	Biso 1.000 O
O21	1.0000	0.35231	0.02433	0.15526	Biso 1.000 O
O22	1.0000	0.32424	0.98018	0.83085	Biso 1.000 O
O23	1.0000	0.67392	0.68439	0.83754	Biso 1.000 O
O24	1.0000	0.02970	0.33611	0.83489	Biso 1.000 O
O25	1.0000	0.66422	0.65330	0.49933	Biso 1.000 O
O26	1.0000	0.36532	0.99463	0.50321	Biso 1.000 O
O27	1.0000	0.01619	0.35284	0.49534	Biso 1.000 O
O28	1.0000	0.02610	0.67830	0.83889	Biso 1.000 O

O29	1.0000	0.32367	0.33337	0.82871	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67560	0.97993	0.83466	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69466	0.02488	0.15953	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34877	0.31947	0.16015	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99324	0.67175	0.16829	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36178	0.36703	0.49068	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00620	0.64765	0.50197	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65287	0.00201	0.49844	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13362	0.24382	0.12682	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76897	0.88219	0.13360	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13500	0.88395	0.13157	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24867	0.11939	0.86439	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88749	0.75478	0.87028	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88921	0.12190	0.86750	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79544	0.57090	0.45966	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42981	0.22016	0.46642	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80568	0.21013	0.46148	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92185	0.45779	0.20313	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55612	0.09156	0.21715	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55864	0.45812	0.20781	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46226	0.90354	0.79851	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09709	0.54236	0.78405	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46398	0.54699	0.79229	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59997	0.79714	0.54394	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22885	0.44064	0.53793	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22162	0.78180	0.53544	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00923	0.26337	0.99881	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75066	0.74422	0.00059	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26921	0.99904	0.99474	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68566	0.61172	0.33152	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94567	0.33517	0.33079	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33920	0.92081	0.66763	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07340	0.38590	0.66526	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61884	0.66629	0.66767	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01268	0.74153	0.00149	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27561	0.26386	0.99528	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75080	0.99868	0.99843	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69467	0.06683	0.33039	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94596	0.60095	0.33398	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40415	0.32941	0.32883	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34525	0.40324	0.66229	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61049	0.94201	0.66728	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07644	0.68020	0.66923	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38869	0.06530	0.32685	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22665	0.02007	0.34122	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22828	0.99991	0.41071	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19821	0.95226	0.29274	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24166	0.10317	0.32219	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03442	0.95669	0.34577	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00568	0.86888	0.36368	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.03251	0.97450	0.27530	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.04881	0.03605	0.40790	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.08158	0.15338	0.37797	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.08001	0.15943	0.30539	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.02498	0.18094	0.40632	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.16713	0.21568	0.40147	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.03161	0.01051	0.50715	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.92137	0.00994	0.53402	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.90516	0.98848	0.60496	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.92768	0.09283	0.52452	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.84793	0.94620	0.49631	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.13158	0.10284	0.56109	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.21292	0.10954	0.54295	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.13965	0.18658	0.55231	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.11709	0.08162	0.63211	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.01710	0.89438	0.53037	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.09101	0.88730	0.51063	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.00714	0.88134	0.60258	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.94126	0.82439	0.49950	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 11-methyl-isopropyl-propylene:s; E= -994.355 eV; ZPVE= 6.446eV; frequencies =380.0i, 19.6, 45.1, 56.1, 64.3, 81.9, 94.2, 103.8, 142.8, 184.4, 197.4, 213.2, 220.9, 238.1, 245.6, 257.5, 273.2, 300.4, 307.2, 322.6, 343.8, 378.4, 390.5, 477.7, 542.7, 578.1, 582.6, 589.5, 592.9, 660.9, 700.6, 703.4, 859.1, 879.1, 904.0, 906.3, 919.3, 944.9, 958.2, 995.2, 998.3, 1004.0, 1031.0, 1045.9, 1087.6, 1107.3, 1122.2, 1152.9, 1217.5, 1268.1, 1296.5, 1339.4, 1344.2, 1351.6, 1357.9, 1367.2, 1371.5, 1375.5, 1417.2, 1424.3, 1427.8, 1433.3, 1438.2, 1444.8, 1452.9, 1458.8, 1597.2, 2961.1, 2963.0, 2964.5, 2967.1, 2974.5, 3030.7, 3031.3, 3034.6, 3038.4, 3044.2, 3045.6, 3046.3, 3048.2, 3061.6, 3069.1, 3231.9, 3261.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01006	0.22763	0.10289	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78318	0.77370	0.10435	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24155	0.99952	0.09901	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23531	0.99569	0.89136	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78050	0.76919	0.89691	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00824	0.22750	0.89655	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67769	0.56533	0.43391	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44831	0.10677	0.43765	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90840	0.33122	0.43599	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90608	0.33302	0.22842	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44461	0.10284	0.22877	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67838	0.56360	0.23064	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34076	0.88867	0.77134	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11099	0.43118	0.76626	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57420	0.66407	0.76889	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58240	0.67157	0.56613	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11131	0.43386	0.56477	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34290	0.88786	0.56352	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00791	0.76563	0.89715	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23812	0.22669	0.89307	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78126	0.99699	0.89522	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78001	0.99879	0.10349	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24169	0.22946	0.09968	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01220	0.77310	0.10474	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67885	0.10220	0.23237	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90783	0.56088	0.23067	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44876	0.33356	0.22767	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44513	0.33571	0.43450	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90645	0.55912	0.43675	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68110	0.10401	0.43179	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34762	0.44650	0.56142	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57409	0.89714	0.56539	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10816	0.66662	0.56687	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11008	0.66356	0.77022	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57191	0.89486	0.76942	Biso	1.000	Si

Si35	1.0000	0.34264	0.43541	0.76587	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91135	0.09697	0.12082	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91551	0.80871	0.11950	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21042	0.09877	0.11797	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10500	0.89552	0.87433	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81564	0.90014	0.87580	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10698	0.19536	0.88041	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57617	0.43652	0.44748	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58890	0.14366	0.43124	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87724	0.42993	0.45732	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77480	0.23427	0.21346	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48109	0.23487	0.21014	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77656	0.52957	0.21944	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24074	0.75900	0.79187	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24314	0.46688	0.78202	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54250	0.76381	0.77904	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44967	0.57705	0.55114	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12937	0.56019	0.55836	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43943	0.85037	0.55115	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99205	0.31240	0.16716	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70012	0.66584	0.16456	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35136	0.02124	0.15580	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32273	0.97780	0.83073	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67287	0.68202	0.83789	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02864	0.33299	0.83484	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66485	0.65203	0.49993	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36468	0.99233	0.50355	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01589	0.34951	0.49514	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02483	0.67556	0.83872	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32183	0.33005	0.82871	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67463	0.97662	0.83513	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69244	0.02108	0.16039	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34602	0.31531	0.16233	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99029	0.66884	0.16909	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36173	0.36585	0.49072	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00577	0.64895	0.50165	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65234	0.00036	0.49956	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13175	0.23949	0.12637	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76787	0.87926	0.13466	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13412	0.88061	0.13238	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24703	0.11647	0.86600	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88593	0.75115	0.87224	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88790	0.11922	0.86937	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79635	0.57084	0.45611	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42884	0.21797	0.46736	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80453	0.20827	0.46215	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91918	0.45354	0.19883	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55436	0.08798	0.21931	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55795	0.45508	0.20431	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46115	0.90114	0.79948	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09618	0.53978	0.78433	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46306	0.54399	0.79271	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59999	0.79542	0.54459	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22908	0.44052	0.53811	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22120	0.77956	0.53584	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00738	0.26217	0.99993	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74752	0.74094	0.00116	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26811	0.99451	0.99505	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67819	0.60581	0.33178	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94269	0.33661	0.33167	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33904	0.91857	0.66790	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07319	0.38426	0.66517	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61825	0.66401	0.66825	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01324	0.73803	0.00183	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27645	0.26258	0.99609	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74797	0.99441	0.99916	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69434	0.06406	0.33130	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94763	0.59189	0.33381	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40850	0.33047	0.32961	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34430	0.40121	0.66240	Biso	1.000	O

O70	1.0000	0.60905	0.93941	0.66806	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07543	0.67756	0.66925	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38644	0.06394	0.32755	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22880	0.03074	0.34179	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22475	0.00232	0.40979	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19606	0.96734	0.28960	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25107	0.11753	0.32828	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03196	0.97259	0.33956	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03690	0.00183	0.27102	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05917	0.05159	0.40540	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.09940	0.17249	0.38175	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.10265	0.18564	0.30967	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.04230	0.19938	0.41049	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.18333	0.23057	0.41003	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.04145	0.01950	0.50283	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.92305	0.99744	0.53086	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.90700	0.96987	0.60062	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.91722	0.07489	0.52529	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.85532	0.93127	0.49017	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.13348	0.10677	0.56433	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.21912	0.12623	0.54483	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.13183	0.18664	0.56570	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.11854	0.07358	0.63255	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.97458	0.84695	0.35122	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.97965	0.82104	0.41921	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.88404	0.80860	0.33415	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.01044	0.80902	0.30683	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.04131	0.93897	0.51059	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 1-octene: E= -1010.411 eV; ZPVE= 7.278eV; frequencies
=375.7i, 29.3, 38.4, 48.2, 78.2, 84.0, 105.7, 117.1, 140.9, 145.4, 147.5, 165.4,
183.5, 205.4, 237.5, 251.9, 270.0, 299.6, 314.9, 334.5, 355.0, 385.4, 407.7, 430.1,
487.7, 580.7, 590.4, 599.3, 661.1, 701.1, 704.0, 726.8, 757.9, 793.5, 845.1, 887.3,
918.7, 933.4, 942.0, 956.6, 971.2, 975.1, 996.3, 1011.0, 1031.6, 1037.7, 1069.3,
1081.3, 1100.9, 1123.5, 1136.0, 1192.4, 1212.7, 1242.2, 1261.9, 1272.6, 1284.0,
1289.8, 1295.0, 1325.5, 1331.1, 1338.9, 1348.1, 1357.9, 1369.2, 1402.3, 1427.7,
1432.1, 1439.2, 1442.7, 1448.2, 1450.0, 1459.0, 1590.1, 2922.8, 2933.5, 2941.5,
2943.6, 2963.7, 2973.7, 2996.7, 3005.1, 3012.0, 3029.8, 3042.0, 3042.6, 3056.5,
3057.2, 3096.4, 3123.8, 3154.1, 3233.4, 3261.7 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00782 0.26136 0.10005 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.77942 0.80422 0.10484 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.23879 0.03109 0.09649 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.23102 0.02716 0.88939 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.77524 0.79961 0.89820 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.00511 0.25981 0.89562 Biso 1.000 Si
```

Si7	1.0000	0.67141	0.59322	0.43412	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44424	0.13810	0.43533	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90628	0.36058	0.43343	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90439	0.36450	0.22846	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44249	0.13539	0.22589	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67462	0.59571	0.23055	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33681	0.91989	0.76972	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10780	0.46424	0.76650	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56959	0.69555	0.76870	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57780	0.70188	0.56552	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10970	0.46872	0.56256	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33747	0.91849	0.56076	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00257	0.79761	0.89594	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23192	0.25700	0.89102	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77309	0.02749	0.89665	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77377	0.03026	0.10047	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23627	0.26000	0.09856	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00833	0.80356	0.10394	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67528	0.13408	0.23193	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90291	0.59367	0.22998	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44245	0.36457	0.22668	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43497	0.36359	0.43198	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89863	0.58774	0.43592	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67568	0.13540	0.43217	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34146	0.47539	0.56068	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56455	0.92400	0.56178	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10215	0.69740	0.56550	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10469	0.69422	0.76971	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56464	0.92362	0.76899	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33722	0.46593	0.76533	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90524	0.13105	0.11130	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91126	0.83796	0.12253	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20734	0.12985	0.11630	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10022	0.92740	0.87411	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80908	0.93103	0.88227	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10072	0.22435	0.87523	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56591	0.46601	0.44299	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58594	0.17811	0.43411	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87380	0.45932	0.45013	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77320	0.26567	0.21438	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47619	0.26699	0.20860	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77222	0.56180	0.21310	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23554	0.79059	0.78914	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23934	0.49901	0.78464	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53499	0.79290	0.78169	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44592	0.60498	0.55267	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12892	0.59535	0.55336	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43024	0.87684	0.54411	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98859	0.34587	0.16360	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69387	0.69915	0.16655	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34844	0.05287	0.15340	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31683	0.00920	0.82692	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66781	0.71386	0.83836	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02206	0.36162	0.83074	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65961	0.68036	0.50034	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35942	0.02309	0.50090	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01210	0.38212	0.49561	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01977	0.70802	0.83724	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31760	0.36125	0.82835	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67254	0.00833	0.82953	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68978	0.05123	0.16266	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34284	0.34795	0.15837	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98886	0.69989	0.16809	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35298	0.39282	0.49069	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99825	0.67698	0.50097	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64549	0.03093	0.49980	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12576	0.26752	0.12822	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76738	0.91292	0.13049	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13095	0.91174	0.12938	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24277	0.14787	0.86447	Biso	1.000	O

O41	1.0000	0.88136	0.78424	0.86994	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88170	0.15090	0.87744	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78632	0.59303	0.46100	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42094	0.24673	0.46430	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80127	0.23834	0.45946	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91622	0.48585	0.20382	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55352	0.12347	0.21315	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55255	0.48739	0.20756	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45600	0.93224	0.80196	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09178	0.57152	0.78776	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45958	0.57353	0.78943	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59287	0.82403	0.54027	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22640	0.47473	0.53479	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21195	0.81408	0.53560	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01495	0.30270	0.99776	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74447	0.76672	0.00218	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26575	0.02622	0.99260	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68120	0.63835	0.33243	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94398	0.36434	0.33025	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33956	0.94973	0.66573	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07454	0.42396	0.66400	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61622	0.70067	0.66809	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.00590	0.76857	0.00060	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.26681	0.29235	0.99444	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.73081	0.02183	0.99853	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68465	0.09363	0.33142	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.93754	0.62964	0.33364	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.39666	0.35748	0.32739	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33386	0.42921	0.66197	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.59358	0.96174	0.66577	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.06819	0.70402	0.66832	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38741	0.09421	0.32459	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21737	0.03743	0.33617	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22273	0.01173	0.40339	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19810	0.97806	0.28207	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.23202	0.12242	0.32488	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03398	0.00477	0.32974	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.01445	0.97404	0.26152	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.04678	0.08936	0.34270	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.03025	0.93743	0.39783	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.04565	0.96996	0.49329	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.11752	0.96308	0.52002	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.06779	0.05910	0.50071	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.01193	0.85118	0.38242	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.94090	0.89144	0.54945	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.92420	0.80417	0.54250	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.86559	0.89159	0.52285	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.95775	0.92651	0.64780	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.92014	0.84984	0.68949	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.04922	0.97220	0.66350	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.90544	0.99877	0.67461	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.81216	0.94481	0.67206	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.92673	0.02374	0.74455	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.93860	0.10492	0.61922	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.03128	0.16266	0.62272	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.91842	0.08188	0.54864	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.87635	0.16573	0.65012	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.89503	0.23818	0.60791	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.78445	0.10831	0.64877	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.89932	0.19667	0.71831	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 234-trimethyl-2-pentene:o; E= -1010.749 eV; ZPVE= 7.176eV;
frequencies =367.8i, 26.7, 41.3, 57.1, 69.5, 78.8, 86.5, 96.4, 101.9, 109.6, 140.5,
163.6, 178.7, 210.2, 222.7, 246.8, 263.7, 273.3, 313.1, 316.8, 327.0, 335.3, 353.6,
369.9, 411.3, 426.1, 456.6, 551.3, 583.1, 589.4, 590.3, 593.5, 656.8, 659.2, 699.2,
833.6, 884.3, 890.7, 902.5, 916.0, 928.9, 941.8, 965.7, 977.3, 982.8, 994.5,
1043.0, 1048.7, 1072.0, 1105.2, 1117.9, 1143.7, 1178.1, 1241.3, 1261.5, 1342.3,
1346.2, 1349.2, 1352.2, 1360.5, 1362.3, 1369.0, 1372.9, 1417.6, 1423.9, 1425.8,
1428.9, 1433.7, 1437.8, 1439.5, 1452.8, 1458.1, 1465.9, 1587.7, 2955.0, 2957.6,

2961.0, 2962.7, 2967.9, 2971.0, 3014.9, 3017.5, 3028.4, 3032.4, 3044.4, 3049.4,
3061.5, 3065.8, 3087.3, 3092.8, 3126.5, 3233.0, 3268.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.00897	0.23155	0.09610	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77869	0.77470	0.09611	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23931	0.00254	0.09341	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23536	0.99969	0.88604	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77869	0.77272	0.89020	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00810	0.23144	0.88979	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67811	0.56932	0.42709	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45174	0.11242	0.43173	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90593	0.33389	0.42874	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90375	0.33540	0.22179	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44179	0.10501	0.22349	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67739	0.56767	0.22402	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33988	0.89206	0.76585	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11001	0.43545	0.76017	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57340	0.66775	0.76188	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57964	0.67456	0.55888	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11273	0.43975	0.55863	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34341	0.89046	0.55794	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00791	0.76970	0.89076	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23769	0.23109	0.88723	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78002	0.00091	0.88859	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77792	0.00184	0.09610	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24051	0.23383	0.09395	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01056	0.77452	0.09692	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67673	0.10458	0.22569	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90605	0.56480	0.22386	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44639	0.33576	0.22276	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44571	0.33860	0.42890	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90354	0.56079	0.43013	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68132	0.10783	0.42453	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34724	0.45039	0.55556	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57208	0.89957	0.55909	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11078	0.67074	0.56001	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10949	0.66767	0.76371	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57165	0.89944	0.76256	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34217	0.44015	0.76071	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90889	0.10119	0.11258	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91000	0.80524	0.10848	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21050	0.10349	0.11120	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10496	0.89986	0.86846	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81391	0.90372	0.86936	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10663	0.19919	0.87252	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57733	0.43961	0.43723	Biso	1.000	O

O8	1.0000	0.59282	0.15229	0.42157	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.86868	0.42903	0.44593	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77245	0.23671	0.20621	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47827	0.23693	0.20372	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77540	0.53407	0.20922	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23960	0.76285	0.78739	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24188	0.47052	0.77658	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54375	0.76887	0.77202	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44596	0.58228	0.54382	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14103	0.56996	0.55401	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43601	0.84755	0.54735	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98997	0.31627	0.15962	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69492	0.66818	0.15740	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34749	0.02226	0.15167	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32260	0.98211	0.82475	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67416	0.68582	0.82853	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02705	0.33617	0.82772	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66064	0.65345	0.49253	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37347	0.99768	0.49862	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01495	0.36067	0.48897	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02245	0.68008	0.82982	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32175	0.33426	0.82276	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67461	0.98213	0.82764	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69006	0.02314	0.15374	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34467	0.31956	0.15693	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99055	0.67197	0.16244	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36494	0.37035	0.48682	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00576	0.64466	0.49524	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64636	0.00267	0.49208	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12979	0.24230	0.12133	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76787	0.88294	0.12671	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12981	0.88474	0.12561	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24758	0.12100	0.86146	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88568	0.75614	0.86898	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88748	0.12297	0.86383	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79659	0.57650	0.45356	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43093	0.22208	0.46349	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80575	0.20928	0.45657	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91707	0.45654	0.19437	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55166	0.08987	0.21401	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55600	0.45789	0.20184	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46039	0.90438	0.79335	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09511	0.54384	0.77904	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46197	0.54906	0.78828	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60130	0.80013	0.53826	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22603	0.43768	0.53086	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21962	0.78704	0.52754	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00931	0.26732	0.99304	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74012	0.74231	0.99335	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26770	0.99742	0.98972	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68313	0.61235	0.32519	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94068	0.33677	0.32474	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33721	0.92041	0.66212	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07282	0.38992	0.65873	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61421	0.66459	0.66078	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01585	0.74001	0.99451	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27446	0.26804	0.99033	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74469	0.99732	0.99208	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69462	0.06709	0.32430	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94340	0.59744	0.32732	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.40462	0.32983	0.32474	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34496	0.40724	0.65707	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.60811	0.94414	0.66114	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07722	0.68177	0.66205	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38489	0.06795	0.32301	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.23130	0.03987	0.34789	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23216	0.00640	0.41298	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18797	0.97994	0.29439	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25534	0.12802	0.33968	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03030	0.98251	0.37765	Biso	1.000	C

C3	1.0000	0.98722	0.86440	0.41207	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.08044	0.08023	0.42773	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.09980	0.18883	0.38480	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.14514	0.26189	0.42880	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.14843	0.20828	0.32264	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01844	0.18254	0.36685	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.10483	0.09335	0.52711	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.99800	0.81217	0.36162	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.02724	0.85926	0.47322	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.89532	0.82434	0.42461	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.18149	0.17746	0.53411	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.98873	0.98522	0.28540	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.04585	0.06094	0.24701	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.97403	0.91093	0.24684	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.90673	0.98298	0.28960	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.12898	0.01076	0.57877	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.19289	0.99609	0.54687	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.16352	0.04842	0.64410	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.05229	0.92875	0.59123	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.00652	0.10010	0.57268	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.92774	0.01762	0.56869	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.02644	0.12152	0.64329	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.99028	0.16401	0.54266	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 2-octene:>; E= -1010.681 eV; ZPVE= 7.244eV; frequencies
=369.5i, 36.5, 48.1, 56.9, 74.0, 83.8, 92.8, 105.3, 117.3, 128.1, 146.5, 159.9,
185.3, 190.4, 212.7, 242.0, 265.0, 283.9, 295.7, 308.5, 342.8, 351.2, 389.2, 405.5,
468.9, 505.6, 582.9, 588.3, 594.5, 656.9, 695.6, 723.3, 771.1, 807.3, 841.3, 873.1,
910.2, 912.8, 920.8, 947.8, 972.0, 979.9, 1007.3, 1018.4, 1038.0, 1042.0, 1067.0,
1086.2, 1105.0, 1120.9, 1142.9, 1190.2, 1201.1, 1254.0, 1265.0, 1279.0, 1295.3,
1299.3, 1318.1, 1324.2, 1335.7, 1354.4, 1358.1, 1362.1, 1375.6, 1415.5, 1427.7,
1430.3, 1435.4, 1438.2, 1447.8, 1452.7, 1463.5, 1618.6, 2920.7, 2943.4, 2948.9,
2955.0, 2961.4, 2963.2, 2983.7, 2995.3, 3010.5, 3023.7, 3035.5, 3041.4, 3043.3,
3052.1, 3072.0, 3083.8, 3088.9, 3236.6, 3256.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00834	0.24629	0.09426	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77822	0.78801	0.09847	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23835	0.01545	0.09174	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23187	0.01174	0.88443	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77658	0.78553	0.89187	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00565	0.24474	0.88984	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67351	0.57925	0.42838	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44683	0.12326	0.43015	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90783	0.34546	0.42902	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90396	0.34864	0.22299	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44109	0.11799	0.22166	Biso	1.000	Si

Si11	1.0000	0.67550	0.58009	0.22473	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33750	0.90447	0.76517	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10932	0.44958	0.76063	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57081	0.68019	0.76259	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58079	0.68741	0.55912	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11038	0.45285	0.55634	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34029	0.90198	0.55634	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00447	0.78249	0.89064	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23291	0.24239	0.88581	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77498	0.01203	0.89077	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77498	0.01427	0.09533	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23803	0.24634	0.09272	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00923	0.78808	0.09831	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67567	0.11841	0.22620	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90456	0.57865	0.22453	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44308	0.34854	0.22198	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43652	0.34909	0.42739	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90152	0.57419	0.43078	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67742	0.12071	0.42557	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34368	0.46188	0.55430	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56756	0.90981	0.55745	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10361	0.68295	0.55918	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10618	0.67965	0.76423	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56624	0.90897	0.76322	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33875	0.45188	0.75988	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90629	0.11566	0.10569	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90927	0.81885	0.11391	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20926	0.11621	0.10972	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10133	0.91224	0.86704	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81254	0.91718	0.87324	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10130	0.20884	0.87072	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56636	0.45308	0.43904	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58850	0.16451	0.42448	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87932	0.44672	0.44715	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77248	0.25038	0.20811	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47541	0.24980	0.20455	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77402	0.54750	0.20784	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23652	0.77549	0.78613	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24097	0.48515	0.77905	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53663	0.77803	0.77398	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44940	0.59038	0.54309	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12532	0.57766	0.54637	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43226	0.85905	0.54192	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98841	0.32957	0.15867	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69278	0.68209	0.15969	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34779	0.03641	0.14863	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31869	0.99478	0.82221	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67008	0.69964	0.83138	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02376	0.34666	0.82464	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66491	0.66853	0.49443	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36689	0.00851	0.49720	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01370	0.36364	0.48994	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01993	0.69246	0.83095	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31729	0.34540	0.82149	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67232	0.99222	0.82583	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69035	0.03643	0.15598	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34391	0.33323	0.15365	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99028	0.68446	0.16228	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35228	0.37565	0.48598	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99983	0.66590	0.49574	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64477	0.01586	0.49338	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12687	0.25316	0.12195	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76848	0.89739	0.12725	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12955	0.89795	0.12585	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24415	0.13304	0.86066	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88238	0.76831	0.86711	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88201	0.13640	0.87150	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78725	0.57650	0.45421	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42393	0.23238	0.45917	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80187	0.22367	0.45536	Biso	1.000	O

O46	1.0000	0.91679	0.47024	0.19795	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55229	0.10564	0.21028	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55397	0.47054	0.20258	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45713	0.91687	0.79589	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09238	0.55637	0.78119	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46088	0.55881	0.78557	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59718	0.81070	0.53622	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22907	0.46263	0.52908	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21576	0.79758	0.52853	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01480	0.28767	0.99205	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74168	0.75423	0.99556	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26448	0.00839	0.98787	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68186	0.62333	0.32645	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94254	0.34802	0.32508	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33793	0.93233	0.66097	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07646	0.40863	0.65812	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61574	0.68228	0.66195	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01154	0.75482	0.99502	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.26921	0.28007	0.98879	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.73319	0.00391	0.99299	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.68910	0.07917	0.32534	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.93977	0.61384	0.32811	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.39786	0.34240	0.32283	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.33720	0.41776	0.65608	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.59784	0.95016	0.66079	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07263	0.69171	0.66243	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38502	0.07664	0.32044	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22224	0.02985	0.34492	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22753	0.98553	0.40289	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18664	0.98296	0.28378	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24478	0.11800	0.35038	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04763	0.03450	0.37390	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.08952	0.12160	0.39947	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.04687	0.95294	0.42664	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.09145	0.97122	0.51959	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.12423	0.91367	0.53293	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.16297	0.05840	0.52750	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.00086	0.86501	0.40286	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.99967	0.95090	0.58863	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.03321	0.94901	0.65488	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.92419	0.86655	0.57864	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.96740	0.04307	0.58606	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.04550	0.12674	0.59106	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.92955	0.04257	0.52112	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.88598	0.03411	0.65919	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.80606	0.95256	0.65289	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.92220	0.03175	0.72410	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.86363	0.13303	0.65519	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.80351	0.12776	0.70583	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.94275	0.21350	0.66462	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.82954	0.13700	0.59019	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.98613	0.01385	0.28820	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.04075	0.07009	0.23516	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.94926	0.92569	0.26600	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.91655	0.03241	0.29626	Biso	1.000	H

Methylation (SMS) of 344-3methyl-2-pentene:s; E= -1010.787 eV; ZPVE= 7.192eV;
frequencies =382.8i, 34.1, 44.4, 59.2, 64.1, 71.0, 91.3, 110.5, 153.6, 180.1,
211.8, 218.0, 227.7, 243.7, 255.5, 258.2, 284.5, 299.5, 306.5, 313.6, 326.2, 343.7,
359.8, 385.0, 391.8, 406.5, 453.4, 564.7, 578.1, 585.7, 587.5, 593.7, 648.1, 661.3,
698.0, 820.2, 854.0, 901.8, 910.9, 914.6, 931.4, 935.7, 946.1, 986.4, 992.9,
1007.5, 1012.9, 1024.3, 1038.7, 1078.8, 1117.4, 1140.5, 1170.4, 1193.6, 1230.1,
1331.7, 1341.4, 1347.4, 1351.5, 1358.1, 1365.4, 1371.7, 1384.8, 1416.9, 1421.3,
1425.8, 1430.0, 1437.1, 1440.0, 1447.0, 1452.9, 1463.3, 1474.9, 1575.8, 2959.8,
2968.5, 2974.6, 2977.5, 2980.6, 3032.0, 3033.2, 3038.2, 3039.3, 3041.5, 3045.2,
3046.5, 3051.5, 3058.5, 3064.2, 3077.7, 3083.6, 3233.0, 3260.1 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625

_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01057 0.22605 0.10189 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78279 0.77141 0.10258 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24136 0.99794 0.09797 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23589 0.99464 0.89001 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78043 0.76754 0.89556 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00882 0.22618 0.89528 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67785 0.56304 0.43256 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44802 0.10513 0.43616 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.90809 0.32983 0.43467 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90610 0.33121 0.22714 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44411 0.10031 0.22763 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67867 0.56184 0.22925 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34111 0.88716 0.77039 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11117 0.42989 0.76515 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57485 0.66295 0.76746 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58239 0.67048 0.56458 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11175 0.43241 0.56368 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34368 0.88607 0.56269 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00881 0.76478 0.89546 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23897 0.22580 0.89196 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78181 0.99586 0.89412 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78077 0.99724 0.10254 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24226 0.22825 0.09881 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01286 0.77107 0.10272 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67889 0.10046 0.23104 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90886 0.55988 0.22935 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44941 0.33194 0.22652 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44635 0.33447 0.43348 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90708 0.55806 0.43509 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68087 0.10315 0.43051 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34834 0.44619 0.56033 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57501 0.89607 0.56446 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10937 0.66533 0.56543 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11057 0.66247 0.76875 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57306 0.89422 0.76834 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34309 0.43467 0.76495 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91201 0.09543 0.12018 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91502 0.80536 0.11656 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21098 0.09761 0.11725 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10566 0.89464 0.87218 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81515 0.89835 0.87429 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10791 0.19458 0.87882 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57832 0.43337 0.44673 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58902 0.14331 0.42940 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87638 0.42834 0.45516 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77483 0.23250 0.21180 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48055 0.23239 0.20930 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77777 0.52912 0.21837 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24108 0.75760 0.79138 Biso 1.000 O

O14	1.0000	0.24331	0.46573	0.78117	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54434	0.76343	0.77816	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44901	0.57745	0.55018	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13109	0.55920	0.55772	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43998	0.84814	0.55128	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99227	0.31092	0.16585	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69996	0.66405	0.16328	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35119	0.01898	0.15440	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32363	0.97664	0.82984	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67389	0.68011	0.83576	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02885	0.33184	0.83388	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66360	0.64915	0.49833	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36625	0.99082	0.50276	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01561	0.34886	0.49417	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02463	0.67450	0.83641	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32272	0.32936	0.82771	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67512	0.97631	0.83441	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69291	0.01909	0.15952	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34657	0.31408	0.16144	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99116	0.66691	0.16698	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36484	0.36688	0.48989	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00689	0.64672	0.50009	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65160	0.99946	0.49834	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13239	0.23839	0.12550	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76873	0.87761	0.13321	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13371	0.87928	0.13130	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24802	0.11566	0.86472	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88661	0.75042	0.87186	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88879	0.11768	0.86782	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79799	0.57157	0.45459	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42721	0.21551	0.46607	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80432	0.20704	0.46129	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91937	0.45189	0.19798	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55417	0.08582	0.21790	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55904	0.45271	0.20217	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46174	0.89976	0.79782	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09617	0.53846	0.78280	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46332	0.54345	0.79179	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60193	0.79511	0.54300	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22889	0.43799	0.53638	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22229	0.77810	0.53392	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00770	0.26013	0.99880	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74598	0.73877	0.99954	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26757	0.99297	0.99389	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67683	0.60274	0.33049	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94243	0.33430	0.33046	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.33843	0.91645	0.66692	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07369	0.38268	0.66406	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.61812	0.66245	0.66663	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01566	0.73698	0.99983	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.27679	0.26122	0.99512	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74917	0.99357	0.99816	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69446	0.06300	0.33021	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94899	0.59145	0.33237	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41030	0.33043	0.32859	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34507	0.40105	0.66135	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61077	0.93869	0.66699	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07688	0.67709	0.66764	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38564	0.06128	0.32631	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22730	0.02776	0.34268	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22691	0.00395	0.41150	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.19240	0.96102	0.29302	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24832	0.11347	0.32613	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.03172	0.97406	0.34863	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03943	0.00892	0.28177	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05918	0.05136	0.41612	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.10382	0.17265	0.38976	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.10546	0.18294	0.31740	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.05068	0.20463	0.41798	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.18936	0.22903	0.41595	Biso	1.000	H

C5	1.0000	0.03855	0.02471	0.51567	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.91951	0.00865	0.53504	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.90039	0.99008	0.60614	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.91524	0.08529	0.51977	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.85299	0.93768	0.49697	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.12677	0.12411	0.57238	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.21349	0.14144	0.55959	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.12432	0.20239	0.56100	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.10817	0.10245	0.64306	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.03987	0.91738	0.54602	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.11838	0.91876	0.52673	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.03558	0.91336	0.61897	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.96760	0.83879	0.52145	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.96947	0.84689	0.35253	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.01598	0.81246	0.38791	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.88668	0.81380	0.38528	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.95328	0.81261	0.28496	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of ethene:~; E= -925.188 eV; ZPVE= 3.393eV; frequencies
=331.1i, 32.3, 41.8, 53.7, 78.5, 108.8, 135.8, 150.0, 194.1, 224.5, 255.0, 265.5,
274.6, 335.3, 389.9, 509.4, 558.3, 558.4, 576.6, 632.8, 659.2, 678.5, 688.2, 814.5,
836.2, 924.7, 974.8, 1012.9, 1025.8, 1044.2, 1053.0, 1092.7, 1195.1, 1317.6,
1332.4, 1358.1, 1427.1, 1571.8, 1612.5, 3038.5, 3062.4, 3067.4, 3147.2, 3172.1,
3205.9, 3228.5, 3251.3, 3562.7 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01251	0.23895	0.10817	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78389	0.78237	0.11112	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24269	0.01066	0.10379	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23496	0.00595	0.89568	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78042	0.77896	0.90312	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00791	0.23700	0.90098	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67515	0.57049	0.44110	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44367	0.11296	0.43985	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91087	0.33798	0.44075	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90989	0.34306	0.23557	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44583	0.11118	0.23439	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67988	0.57222	0.23628	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33959	0.89697	0.77694	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11050	0.44112	0.77242	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57395	0.67422	0.77430	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58322	0.68028	0.57128	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11043	0.44277	0.57126	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34186	0.89597	0.56847	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00701	0.77550	0.90227	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23681	0.23571	0.89666	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78088	0.00719	0.90158	Biso	1.000	Si

Si21	1.0000	0.78252	0.00987	0.10974	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24212	0.23904	0.10451	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01320	0.78222	0.11048	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67991	0.11513	0.23639	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90901	0.57349	0.23760	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44675	0.34289	0.23440	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43628	0.34231	0.43774	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90395	0.56806	0.44338	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67836	0.11529	0.43908	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34607	0.45542	0.56689	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57438	0.90651	0.57028	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10610	0.67595	0.57268	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11042	0.67420	0.77629	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57221	0.90513	0.77415	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34180	0.44625	0.77211	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91430	0.10786	0.12726	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91569	0.81642	0.12953	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20875	0.10791	0.12416	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10456	0.90511	0.87983	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81545	0.91018	0.88378	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10601	0.20479	0.88210	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56722	0.44533	0.45187	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58663	0.15472	0.44514	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88491	0.44157	0.45588	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77874	0.24648	0.21815	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47899	0.24383	0.22233	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77786	0.53900	0.21878	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24099	0.76758	0.80048	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24267	0.47799	0.78996	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54191	0.77381	0.78331	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45187	0.58388	0.55482	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12211	0.56671	0.56532	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43924	0.85955	0.55712	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99439	0.32566	0.16993	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69927	0.67627	0.17249	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35329	0.03361	0.15886	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32191	0.98712	0.83509	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67184	0.69286	0.84453	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02736	0.34367	0.84117	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66702	0.66232	0.50496	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36130	0.99927	0.50842	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01613	0.35590	0.50235	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02418	0.68526	0.84424	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32199	0.34081	0.83436	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67378	0.98538	0.84139	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69670	0.03141	0.16897	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34983	0.32628	0.16325	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99355	0.67851	0.17441	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35334	0.36911	0.49811	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00299	0.65949	0.50838	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65219	0.00858	0.50343	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13377	0.25105	0.13326	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77156	0.89028	0.14001	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13471	0.89114	0.13598	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24627	0.12608	0.86862	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88538	0.76119	0.87620	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88683	0.12923	0.87449	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78878	0.56790	0.46896	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42192	0.22392	0.46541	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80318	0.21853	0.46849	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92526	0.46672	0.21481	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55904	0.10392	0.21436	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55838	0.46430	0.21304	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46152	0.91213	0.80318	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09408	0.54925	0.78783	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46276	0.55447	0.79834	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59933	0.80381	0.55001	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23136	0.45759	0.54424	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22020	0.78657	0.53689	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00938	0.27076	0.00476	Biso	1.000	O

O56	1.0000	0.75004	0.74942	0.00781	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26823	0.00685	0.99933	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68754	0.61538	0.33859	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39264	0.06291	0.33085	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94636	0.33721	0.33743	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33307	0.92193	0.67292	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07432	0.39265	0.67164	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61859	0.67348	0.67387	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01019	0.74726	0.00712	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27265	0.26921	0.00012	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74914	0.00626	0.00584	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68894	0.07751	0.33710	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94076	0.61254	0.34122	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40080	0.34412	0.33358	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34190	0.41205	0.66860	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61029	0.94972	0.67284	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07941	0.69309	0.67516	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27335	0.92711	0.34162	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.07545	0.91453	0.35196	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.01507	0.82483	0.36163	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.12316	0.96673	0.40792	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.10684	0.93870	0.28455	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20052	0.85461	0.35054	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.20508	0.83172	0.41154	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.92265	0.92386	0.37061	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.99567	0.01226	0.31866	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.98919	0.00734	0.24638	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.85530	0.84546	0.34158	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.92290	0.93089	0.44282	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.05749	0.09379	0.34730	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of propene: ^; E= -942.303 eV; ZPVE= 4.134eV; frequencies
=344.9i, 34.1, 39.7, 56.0, 63.7, 84.2, 112.2, 141.5, 165.4, 176.2, 228.1, 239.9,
277.4, 285.4, 304.9, 338.3, 396.0, 416.5, 533.3, 561.7, 576.3, 634.8, 662.3, 682.4,
707.3, 736.6, 878.3, 899.9, 919.3, 949.7, 970.7, 995.8, 1010.1, 1022.4, 1045.7,
1095.6, 1173.7, 1284.7, 1335.8, 1341.2, 1358.5, 1382.9, 1404.6, 1436.7, 1585.7,
1612.8, 2949.1, 2999.1, 3045.7, 3054.0, 3057.4, 3072.2, 3152.3, 3172.6, 3234.0,
3252.7, 3534.6 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label						
_atom_site_occupancy						
_atom_site_fract_x						
_atom_site_fract_y						
_atom_site_fract_z						
_atom_site_thermal_displace_type						
_atom_site_B_iso_or_equiv						
_atom_site_type_symbol						
Si1	1.0000	0.01131	0.23798	0.10740	Biso	1.000 Si
Si2	1.0000	0.78260	0.78107	0.11063	Biso	1.000 Si
Si3	1.0000	0.24117	0.00929	0.10327	Biso	1.000 Si
Si4	1.0000	0.23354	0.00473	0.89507	Biso	1.000 Si
Si5	1.0000	0.77878	0.77762	0.90285	Biso	1.000 Si
Si6	1.0000	0.00645	0.23594	0.90039	Biso	1.000 Si
Si7	1.0000	0.67338	0.56832	0.44063	Biso	1.000 Si

All	1.0000	0.44246	0.11149	0.43909	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90928	0.33657	0.44023	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90894	0.34195	0.23508	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44454	0.10949	0.23356	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67850	0.57072	0.23548	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33817	0.89587	0.77653	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10909	0.43991	0.77182	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57245	0.67295	0.77382	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58130	0.67878	0.57056	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10903	0.44130	0.57052	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34047	0.89462	0.56817	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00558	0.77402	0.90169	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23540	0.23435	0.89591	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77945	0.00599	0.90133	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78144	0.00865	0.10941	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24087	0.23770	0.10371	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01195	0.78072	0.10963	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67863	0.11394	0.23578	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90817	0.57252	0.23704	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44579	0.34203	0.23335	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43533	0.34111	0.43689	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90280	0.56683	0.44260	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67655	0.11427	0.43878	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34463	0.45391	0.56625	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57286	0.90499	0.56989	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10512	0.67454	0.57185	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10914	0.67299	0.77581	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57091	0.90382	0.77380	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34044	0.44481	0.77146	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91308	0.10714	0.12665	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91426	0.81455	0.12805	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20768	0.10682	0.12386	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10334	0.90356	0.87917	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81386	0.90890	0.88353	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10475	0.20401	0.88159	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56649	0.44231	0.45242	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58575	0.15499	0.44518	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88339	0.44009	0.45523	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77795	0.24518	0.21778	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47652	0.24184	0.22249	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77704	0.53812	0.21851	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23950	0.76661	0.80037	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24113	0.47631	0.78925	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54027	0.77242	0.78330	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44960	0.58273	0.55439	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12173	0.56563	0.56402	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43755	0.85780	0.55735	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99384	0.32469	0.16976	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69800	0.67506	0.17210	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35182	0.03197	0.15824	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32090	0.98628	0.83466	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67061	0.69162	0.84374	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02563	0.34234	0.84035	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66431	0.65943	0.50457	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36051	0.99799	0.50790	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01459	0.35426	0.50171	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02220	0.68381	0.84306	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32078	0.33944	0.83370	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67236	0.98422	0.84108	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69562	0.03003	0.16884	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34813	0.32503	0.16285	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99265	0.67704	0.17352	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35239	0.36794	0.49731	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00173	0.65785	0.50789	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64980	0.00751	0.50314	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13256	0.24990	0.13237	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77056	0.88917	0.13934	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13349	0.88960	0.13504	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24437	0.12456	0.86758	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88397	0.76010	0.87620	Biso	1.000	O

O42	1.0000	0.88549	0.12796	0.87408	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78778	0.56696	0.46800	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41793	0.22106	0.46303	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80187	0.21696	0.46780	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92414	0.46543	0.21438	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55828	0.10353	0.21277	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55768	0.46241	0.21064	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46020	0.91108	0.80235	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09308	0.54818	0.78760	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46127	0.55310	0.79777	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59764	0.80234	0.54895	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22922	0.45458	0.54324	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21892	0.78550	0.53586	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00814	0.27013	0.00412	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74770	0.74777	0.00737	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26697	0.00625	0.99873	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68350	0.61148	0.33802	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39218	0.06015	0.33011	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94560	0.33569	0.33701	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33093	0.92046	0.67249	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07278	0.39173	0.67097	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61660	0.67231	0.67322	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00945	0.74549	0.00632	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27157	0.26769	0.99937	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74783	0.00540	0.00554	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68631	0.07632	0.33674	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94035	0.61108	0.34064	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40068	0.34498	0.33268	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34051	0.41049	0.66793	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60925	0.94801	0.67244	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07874	0.69151	0.67438	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27494	0.92595	0.34067	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.08591	0.91690	0.35690	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02479	0.83089	0.37684	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.14121	0.97800	0.40592	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.10410	0.93316	0.28665	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20171	0.85358	0.35021	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.20662	0.83085	0.41130	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.94666	0.94487	0.37228	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01359	0.04542	0.32976	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.01023	0.04584	0.25702	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.09136	0.15450	0.37329	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.88243	0.87172	0.33566	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.93971	0.94132	0.44462	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.09456	0.14768	0.44571	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.06291	0.21568	0.35795	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.17775	0.19297	0.34572	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 1-butene: ^; E= -958.936 eV; ZPVE= 4.914eV; frequencies
=343.6i, 32.5, 49.0, 54.2, 66.0, 77.6, 89.7, 129.3, 169.0, 175.3, 184.1, 217.5,
248.1, 267.9, 279.7, 284.3, 338.8, 388.7, 395.7, 437.5, 542.3, 559.0, 579.8, 632.3,
664.2, 679.5, 709.6, 746.4, 791.6, 855.4, 874.9, 950.9, 966.3, 1000.6, 1007.2,
1012.0, 1014.1, 1037.3, 1061.2, 1111.0, 1169.4, 1242.4, 1273.5, 1290.6, 1333.2,
1353.5, 1356.7, 1404.3, 1426.2, 1441.9, 1450.1, 1584.2, 1608.5, 2954.8, 2985.5,
3005.4, 3046.6, 3054.8, 3059.9, 3064.7, 3073.3, 3153.1, 3196.2, 3241.5, 3254.2,
3559.1 cm^-1

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
```

'x, y, z'

```
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00624  0.24370  0.10571  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.77764  0.78703  0.10864  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.23704  0.01644  0.10179  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.22937  0.01053  0.89419  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.77457  0.78313  0.90134  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.00138  0.24207  0.89981  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.66907  0.57473  0.43909  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.43874  0.11600  0.43815  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.90429  0.34414  0.43885  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.90652  0.35045  0.23369  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.44166  0.11575  0.23180  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.67368  0.57619  0.23334  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.33407  0.90175  0.77525  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.10573  0.44592  0.77100  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.56811  0.67805  0.77199  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.57507  0.68342  0.56909  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.10471  0.44580  0.56960  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.33627  0.90228  0.56680  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.00104  0.77838  0.90122  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.23165  0.23997  0.89513  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.77585  0.01179  0.89952  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.77789  0.01513  0.10770  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.23744  0.24444  0.10175  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.00708  0.78672  0.10812  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.67342  0.12026  0.23338  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.90350  0.57695  0.23450  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.44082  0.34939  0.23267  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.43297  0.34828  0.43515  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.89736  0.57060  0.44234  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.67125  0.11775  0.43724  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.33941  0.45847  0.56503  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.56996  0.91207  0.56831  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.10216  0.67958  0.57046  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.10479  0.67869  0.77377  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.56654  0.90911  0.77225  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.33608  0.45065  0.77086  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.90971  0.11247  0.12538  Biso  1.000  O
O2       1.0000 0.90968  0.82111  0.12511  Biso  1.000  O
O3       1.0000 0.20309  0.11341  0.12287  Biso  1.000  O
O4       1.0000 0.09934  0.90816  0.88035  Biso  1.000  O
O5       1.0000 0.81031  0.91460  0.88229  Biso  1.000  O
O6       1.0000 0.10113  0.21136  0.88429  Biso  1.000  O
O7       1.0000 0.56470  0.44749  0.45266  Biso  1.000  O
O8       1.0000 0.58090  0.15792  0.45181  Biso  1.000  O
O9       1.0000 0.87215  0.44257  0.45944  Biso  1.000  O
O10      1.0000 0.77581  0.25111  0.22092  Biso  1.000  O
O11      1.0000 0.46804  0.24652  0.22506  Biso  1.000  O
O12      1.0000 0.77291  0.54442  0.21720  Biso  1.000  O
O13      1.0000 0.23519  0.77230  0.79815  Biso  1.000  O
O14      1.0000 0.23770  0.48315  0.78989  Biso  1.000  O
O15      1.0000 0.53576  0.77752  0.78073  Biso  1.000  O
O16      1.0000 0.44315  0.58783  0.55290  Biso  1.000  O
O17      1.0000 0.11978  0.57121  0.56431  Biso  1.000  O
O18      1.0000 0.43606  0.86985  0.55345  Biso  1.000  O
O19      1.0000 0.99043  0.32965  0.17021  Biso  1.000  O
O20      1.0000 0.69397  0.68118  0.17062  Biso  1.000  O
O21      1.0000 0.34599  0.03766  0.15848  Biso  1.000  O
O22      1.0000 0.31636  0.99167  0.83362  Biso  1.000  O
O23      1.0000 0.66715  0.69781  0.84131  Biso  1.000  O
```

O24	1.0000	0.02170	0.34848	0.83928	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65788	0.66512	0.50220	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35037	0.00360	0.50630	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00720	0.36030	0.50240	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01800	0.68927	0.84137	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31589	0.34421	0.83185	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66804	0.98885	0.83967	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69246	0.03757	0.16674	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34284	0.33167	0.16246	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98898	0.68618	0.17534	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35037	0.37254	0.49814	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99965	0.66225	0.50507	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65088	0.01284	0.50156	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12918	0.25791	0.12674	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76486	0.89462	0.13706	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12899	0.89604	0.13185	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23787	0.12899	0.86541	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87987	0.76535	0.87553	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88187	0.13340	0.87126	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78622	0.57866	0.46614	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41404	0.22643	0.45610	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79897	0.22057	0.45943	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91882	0.47120	0.20578	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55680	0.11530	0.20477	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55398	0.46741	0.20688	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45580	0.91628	0.80117	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08875	0.55387	0.78514	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45743	0.55825	0.79706	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59071	0.80673	0.54880	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22294	0.45598	0.53955	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21712	0.78961	0.53500	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99846	0.27573	0.00305	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74203	0.75267	0.00558	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26524	0.01511	0.99758	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67687	0.61544	0.33604	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39579	0.06215	0.32867	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94646	0.35556	0.33616	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32755	0.92747	0.67127	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07095	0.39678	0.67031	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61104	0.67578	0.67129	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00366	0.74774	0.00567	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27209	0.27366	0.99782	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74493	0.01265	0.00368	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67100	0.07714	0.33424	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93550	0.60904	0.33924	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39934	0.35845	0.33192	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33466	0.41666	0.66716	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60481	0.95439	0.67113	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07429	0.69754	0.67236	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30160	0.91577	0.33579	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.11115	0.88795	0.35415	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.05026	0.79810	0.35968	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.15779	0.93731	0.41164	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13657	0.92194	0.28775	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.23520	0.83719	0.34100	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.23690	0.81396	0.40247	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.96328	0.90320	0.38051	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03013	0.00353	0.33809	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.02047	0.00667	0.26597	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.11384	0.11135	0.38142	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.89660	0.83059	0.34502	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.96310	0.89713	0.45285	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.12382	0.09759	0.45208	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.19739	0.14304	0.34973	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.07802	0.20125	0.37090	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.07209	0.21902	0.30064	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.14096	0.28070	0.40236	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.99550	0.17327	0.40242	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of n-butene:o; E= -959.175 eV; ZPVE= 4.875eV; frequencies
 =329.3i, 28.9, 31.8, 56.1, 67.5, 71.0, 112.4, 127.3, 156.7, 180.4, 195.6, 207.4,
 229.3, 239.6, 276.6, 297.8, 305.5, 335.9, 345.0, 395.4, 493.7, 514.7, 563.8, 576.5,
 638.0, 658.9, 687.6, 721.1, 807.9, 854.6, 879.8, 935.9, 962.6, 972.0, 988.6,
 1010.4, 1038.6, 1040.7, 1083.2, 1088.1, 1149.3, 1282.9, 1287.1, 1332.2, 1349.9,
 1356.8, 1362.2, 1415.8, 1418.2, 1424.0, 1437.2, 1608.1, 1611.0, 2958.1, 2958.9,
 3017.5, 3020.1, 3038.1, 3043.7, 3046.5, 3058.4, 3063.7, 3176.9, 3228.9, 3255.0,
 3561.6 cm⁻¹

```
-----
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00653  0.23145  0.09284  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.77829  0.77458  0.09600  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.23630  0.00263  0.08958  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.22913  0.99752  0.88115  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.77443  0.77030  0.88857  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.00206  0.22906  0.88686  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.66841  0.56147  0.42608  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.43780  0.10390  0.42467  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.90431  0.33120  0.42630  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.90455  0.33606  0.22038  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.43976  0.10218  0.21960  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.67352  0.56363  0.22060  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.33390  0.88861  0.76285  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.10558  0.43317  0.75732  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.56869  0.66558  0.75916  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.57631  0.67159  0.55608  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.10476  0.43459  0.55580  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.33582  0.88891  0.55400  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.00161  0.76685  0.88794  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.23211  0.22742  0.88253  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.77566  0.99905  0.88654  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.77759  0.00222  0.09472  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.23722  0.23129  0.08918  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.00812  0.77471  0.09573  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.67416  0.10669  0.22142  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.90436  0.56554  0.22234  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.44223  0.33600  0.21890  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.43248  0.33516  0.42292  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.89909  0.56050  0.42826  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.67249  0.10648  0.42426  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.33971  0.44632  0.55173  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.56839  0.89849  0.55533  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.10098  0.66789  0.55762  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.10458  0.66571  0.76163  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.56635  0.89615  0.75972  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.33613  0.43755  0.75685  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.90906  0.10048  0.11220  Biso  1.000  O
```

O2	1.0000	0.90990	0.80804	0.11195	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20327	0.10047	0.10964	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09919	0.89621	0.86436	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80935	0.90144	0.86851	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10114	0.19740	0.87115	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56352	0.43491	0.44186	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58034	0.14532	0.43214	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87693	0.43317	0.44497	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77371	0.23799	0.20462	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47131	0.23451	0.20978	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77317	0.53225	0.20628	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23499	0.75929	0.78605	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23793	0.47060	0.77461	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53625	0.76487	0.76897	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44471	0.57520	0.54037	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11787	0.55914	0.54939	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43399	0.85396	0.54095	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98991	0.31735	0.15684	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69414	0.66864	0.15777	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34776	0.02571	0.14373	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31685	0.97905	0.82101	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66700	0.68410	0.82872	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02265	0.33492	0.82545	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65953	0.65312	0.48972	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35343	0.99259	0.49494	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00967	0.34754	0.48736	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01762	0.67643	0.82886	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31553	0.33182	0.81888	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66846	0.97717	0.82622	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69133	0.02366	0.15375	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34277	0.31800	0.15010	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98816	0.67072	0.15943	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34792	0.36014	0.48317	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99783	0.65202	0.49369	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64838	0.00081	0.48930	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12914	0.24514	0.11445	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76546	0.88225	0.12438	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12942	0.88304	0.12138	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23967	0.11714	0.85294	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87988	0.75289	0.86260	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88212	0.12062	0.85875	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78548	0.56455	0.45161	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41292	0.21369	0.44711	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79764	0.21019	0.45216	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91843	0.45812	0.19607	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55393	0.09692	0.19896	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55421	0.45481	0.19298	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45561	0.90302	0.78875	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08856	0.54085	0.77305	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45770	0.54525	0.78243	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59202	0.79498	0.53468	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22447	0.44692	0.52782	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21477	0.77908	0.52196	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99995	0.26368	0.98991	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74209	0.74064	0.99282	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26196	0.99941	0.98483	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67310	0.60122	0.32332	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38726	0.05179	0.31603	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94162	0.33459	0.32301	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32746	0.91371	0.65872	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06954	0.38515	0.65634	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61301	0.66584	0.65839	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00665	0.73898	0.99238	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27190	0.26164	0.98522	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74433	0.99922	0.99066	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68098	0.06780	0.32228	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93847	0.60042	0.32617	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40097	0.34328	0.31879	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33484	0.40243	0.65330	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60375	0.94025	0.65815	Biso	1.000	O

O72	1.0000	0.07426	0.68443	0.66016	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26113	0.92368	0.32702	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09737	0.94129	0.38549	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03287	0.85842	0.40886	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16919	0.99212	0.42865	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09853	0.96325	0.31617	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18480	0.85669	0.34010	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.19550	0.82547	0.39570	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.96136	0.97716	0.43140	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05717	0.08055	0.42065	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.91934	0.91777	0.51816	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.88596	0.82593	0.51263	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.84755	0.92792	0.53978	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.98488	0.95292	0.56994	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.08865	0.15153	0.33918	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.17855	0.18596	0.32220	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.07905	0.22594	0.35251	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.03527	0.10569	0.28198	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.90412	0.94124	0.37435	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.11159	0.11901	0.47886	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of iso-butene;>; E= -959.297 eV; ZPVE= 4.874eV; frequencies
=386.6i, 36.1, 40.6, 55.0, 57.7, 90.5, 97.8, 119.4, 146.6, 151.9, 168.2, 196.5,
251.5, 270.9, 278.4, 294.0, 338.9, 395.3, 401.5, 435.4, 461.9, 549.6, 564.0, 574.8,
634.1, 664.8, 687.2, 763.4, 791.2, 817.4, 914.7, 920.7, 947.3, 956.8, 983.0, 992.0,
1006.2, 1022.2, 1049.3, 1052.0, 1099.4, 1284.1, 1341.4, 1346.9, 1351.3, 1354.3,
1371.9, 1401.0, 1416.9, 1429.5, 1451.4, 1580.0, 1609.9, 2949.7, 2956.8, 3002.9,
3008.2, 3046.8, 3050.2, 3060.1, 3067.4, 3094.8, 3141.2, 3244.7, 3252.1, 3529.9 cm^-
1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00911	0.23648	0.09575	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78099	0.77937	0.09962	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23900	0.00762	0.09245	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23167	0.00271	0.88413	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77686	0.77504	0.89228	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00449	0.23415	0.88977	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67125	0.56581	0.43009	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43966	0.10876	0.42809	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90752	0.33513	0.42930	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90769	0.34054	0.22395	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44294	0.10763	0.22255	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67645	0.56822	0.22429	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33640	0.89363	0.76573	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10776	0.43793	0.76053	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57111	0.67102	0.76258	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57981	0.67704	0.55944	Biso	1.000	Si

Si16	1.0000	0.10731	0.43914	0.55919	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33845	0.89286	0.55699	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00416	0.77188	0.89109	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23469	0.23275	0.88557	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77813	0.00389	0.89012	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78010	0.00713	0.09816	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23966	0.23614	0.09232	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01071	0.77957	0.09888	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67717	0.11258	0.22437	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90672	0.57072	0.22609	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44441	0.34095	0.22257	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43425	0.33987	0.42635	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90160	0.56544	0.43173	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67461	0.11243	0.42782	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34275	0.45197	0.55515	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57155	0.90357	0.55848	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10351	0.67259	0.56085	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10758	0.67103	0.76486	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56930	0.90170	0.76264	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33870	0.44280	0.76032	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91162	0.10558	0.11525	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91283	0.81330	0.11576	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20539	0.10508	0.11253	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10159	0.90136	0.86785	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81203	0.90633	0.87278	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10396	0.20319	0.87358	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56526	0.43960	0.44490	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58267	0.15165	0.43567	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88233	0.43889	0.44553	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77667	0.24377	0.20675	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47414	0.23986	0.21357	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77530	0.53576	0.20863	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23798	0.76430	0.78979	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23992	0.47502	0.77832	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53851	0.77022	0.77212	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44816	0.58046	0.54351	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11884	0.56292	0.55293	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43667	0.85797	0.54496	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99280	0.32302	0.15926	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69739	0.67368	0.16182	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35031	0.03114	0.14703	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31904	0.98414	0.82362	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66908	0.68941	0.83254	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02426	0.33996	0.82863	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66295	0.65796	0.49340	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35594	0.99595	0.49725	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01263	0.35134	0.49072	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02051	0.68167	0.83204	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31876	0.33717	0.82222	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67112	0.98211	0.82960	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69424	0.02861	0.15765	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34536	0.32261	0.15321	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99056	0.67568	0.16290	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35014	0.36524	0.48671	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00030	0.65672	0.49710	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64956	0.00596	0.49201	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13159	0.24996	0.11764	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76827	0.88720	0.12771	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13226	0.88783	0.12457	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24206	0.12230	0.85620	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88223	0.75757	0.86601	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88464	0.12534	0.86217	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78667	0.56597	0.45648	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41408	0.21810	0.45054	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79970	0.21571	0.45659	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92288	0.46394	0.20270	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55702	0.10265	0.20105	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55634	0.46013	0.19722	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45866	0.90915	0.79122	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09112	0.54592	0.77575	Biso	1.000	O

O51	1.0000	0.45997	0.55082	0.78598	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59512	0.80012	0.53775	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22768	0.45306	0.53144	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21785	0.78262	0.52422	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00282	0.26875	0.99286	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74479	0.74484	0.99657	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26488	0.00440	0.98779	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67806	0.60606	0.32717	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39079	0.05633	0.31898	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94395	0.33519	0.32617	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32869	0.91755	0.66149	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07199	0.38937	0.65963	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61562	0.67097	0.66199	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00908	0.74384	0.99562	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27411	0.26659	0.98838	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74649	0.00420	0.99420	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68378	0.07499	0.32558	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93980	0.60894	0.32976	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40228	0.34754	0.32224	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33758	0.40796	0.65673	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60723	0.94584	0.66119	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07803	0.69054	0.66335	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27713	0.92283	0.32753	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09505	0.90943	0.36361	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02739	0.82193	0.35861	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.13806	0.94225	0.42645	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.12542	0.96052	0.30394	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20415	0.84931	0.33623	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.21121	0.82200	0.39507	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.95842	0.94477	0.38616	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03555	0.05527	0.40665	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.07647	0.09125	0.49932	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.03884	0.02073	0.54676	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.05505	0.15595	0.52011	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.16972	0.13304	0.50256	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.08456	0.14459	0.33677	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.17794	0.18774	0.33713	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.06390	0.21145	0.35193	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.05291	0.11131	0.27018	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.92107	0.92263	0.31986	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.91444	0.88294	0.43884	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 1-pentene:o; E= -975.682 eV; ZPVE= 5.636eV; frequencies
=360.4i, 6.5, 33.1, 43.8, 61.1, 66.1, 81.7, 98.8, 113.0, 123.8, 149.3, 178.6,
237.0, 239.5, 251.9, 277.8, 284.2, 310.5, 335.6, 399.8, 411.9, 428.4, 475.4, 568.4,
573.1, 634.2, 657.9, 683.6, 693.5, 704.6, 738.2, 847.8, 870.8, 894.1, 937.2, 968.6,
979.8, 1008.2, 1011.9, 1015.2, 1025.6, 1044.3, 1074.5, 1077.1, 1165.8, 1219.7,
1247.6, 1278.0, 1287.5, 1331.5, 1332.2, 1349.2, 1362.7, 1393.4, 1419.8, 1436.0,
1444.7, 1449.8, 1581.6, 1613.0, 2916.2, 2954.1, 2960.5, 2977.1, 2997.1, 3029.8,
3042.7, 3043.4, 3047.3, 3058.6, 3108.5, 3155.2, 3243.4, 3252.6, 3603.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	
_atom_site_occupancy	
_atom_site_fract_x	

_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol			
Si1	1.0000	0.00076	0.20438	0.11416	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77322	0.74825	0.11745	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23168	0.97603	0.11089	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22384	0.97176	0.90248	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.76932	0.74435	0.90987	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99674	0.20285	0.90719	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66366	0.53652	0.44731	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43438	0.07917	0.44638	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.89958	0.30499	0.44713	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.89906	0.30951	0.24109	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43500	0.07695	0.24049	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.66794	0.53795	0.24235	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.32889	0.86340	0.78335	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.09979	0.40703	0.77854	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56292	0.63978	0.78067	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57132	0.64531	0.57760	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.09990	0.40931	0.57717	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33033	0.86284	0.57473	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99566	0.74051	0.90919	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22575	0.20082	0.90336	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.76992	0.97295	0.90776	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77076	0.97530	0.11558	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23078	0.20390	0.11149	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00208	0.74796	0.11716	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.66873	0.07953	0.24283	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89791	0.53830	0.24329	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43619	0.30940	0.24004	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.42700	0.30871	0.44448	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89305	0.53322	0.44934	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66812	0.07987	0.44527	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33451	0.41933	0.57346	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56229	0.87153	0.57637	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09520	0.64184	0.57870	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.09916	0.63971	0.78255	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56068	0.87011	0.78069	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33086	0.41088	0.77836	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90191	0.07406	0.13339	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90485	0.78243	0.13467	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.19893	0.07379	0.13327	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09378	0.87019	0.88708	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80420	0.87566	0.89083	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09535	0.17118	0.88893	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.55709	0.41060	0.46195	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57702	0.12015	0.45235	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87042	0.40551	0.46612	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76863	0.21038	0.22548	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46652	0.20900	0.22806	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76682	0.50556	0.22737	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.22982	0.73388	0.80569	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23175	0.44278	0.79554	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.52997	0.73871	0.79033	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44010	0.54774	0.56187	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11446	0.53435	0.57047	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42786	0.82675	0.56208	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98459	0.29138	0.17718	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68828	0.64218	0.17870	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34254	0.99817	0.16556	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31112	0.95300	0.84212	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66109	0.65867	0.85053	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01621	0.30906	0.84674	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65550	0.62790	0.51167	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34960	0.96648	0.51495	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00516	0.32236	0.50840	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01298	0.65075	0.85047	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31142	0.30641	0.84158	Biso	1.000	O

O30	1.0000	0.66339	0.95108	0.84670	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68400	0.99560	0.17489	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33714	0.29241	0.17093	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98225	0.64394	0.18080	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34115	0.33292	0.50398	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99172	0.62426	0.51472	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64284	0.97414	0.51056	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12181	0.21555	0.13881	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75941	0.85562	0.14480	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12456	0.85580	0.14106	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23391	0.09098	0.87365	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87456	0.72723	0.88229	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87622	0.09468	0.88013	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.77891	0.53610	0.47253	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41033	0.18897	0.47101	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79423	0.18258	0.47303	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91152	0.43080	0.21614	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54881	0.07076	0.22136	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54765	0.42945	0.21616	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45046	0.87776	0.80997	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08431	0.51541	0.79502	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45197	0.51935	0.80368	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58558	0.76793	0.55571	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21943	0.42052	0.55037	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.20803	0.75447	0.54440	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99764	0.23691	0.01086	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73837	0.71392	0.01415	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25826	0.97568	0.00608	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.66935	0.57731	0.34473	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38254	0.02944	0.33745	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93644	0.30877	0.34368	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32401	0.88995	0.67940	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06297	0.35937	0.67752	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60778	0.64021	0.68012	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99828	0.71149	0.01371	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26180	0.23272	0.00699	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73767	0.97324	0.01162	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67669	0.04060	0.34348	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93237	0.57225	0.34707	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39322	0.31260	0.34017	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.32993	0.37507	0.67497	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59812	0.91387	0.67905	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06686	0.65647	0.68136	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.24871	0.91737	0.35061	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10415	0.97430	0.38136	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02150	0.90014	0.39212	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16211	0.01334	0.43658	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13120	0.99904	0.31325	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.16725	0.86136	0.36467	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.17061	0.83114	0.42304	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.07355	0.11722	0.37658	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.98052	0.04730	0.42614	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.90154	0.99012	0.39100	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97448	0.04327	0.52462	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.06673	0.12399	0.30494	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.15164	0.18175	0.40810	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.05942	0.09596	0.55375	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.92499	0.08476	0.54277	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.91418	0.92301	0.56411	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.83175	0.87222	0.53070	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.96380	0.88106	0.54979	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.89636	0.92330	0.66417	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.97730	0.97181	0.69981	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.84380	0.96144	0.68009	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.85367	0.83650	0.69066	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 2-pentene:^; E= -975.887 eV; ZPVE= 5.624eV; frequencies
=338.2i, 41.6, 47.2, 54.5, 56.9, 69.8, 80.8, 100.3, 115.4, 155.4, 178.5, 183.7,
203.3, 211.6, 242.4, 245.0, 274.5, 312.0, 331.0, 344.6, 395.9, 416.4, 468.3, 513.3,
556.7, 573.1, 636.4, 656.1, 684.6, 721.1, 736.6, 834.5, 868.2, 894.2, 927.6, 951.2,

979.1, 1001.6, 1007.9, 1021.8, 1035.6, 1056.4, 1072.1, 1090.4, 1150.1, 1232.3,
1257.7, 1286.4, 1331.5, 1332.9, 1342.1, 1363.3, 1372.0, 1410.1, 1422.5, 1432.4,
1441.3, 1453.1, 1602.7, 1611.9, 2921.8, 2957.0, 2966.2, 2997.7, 3015.9, 3030.3,
3038.7, 3042.1, 3049.4, 3054.0, 3058.8, 3138.5, 3237.2, 3259.1, 3566.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01324	0.22692	0.10284	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78519	0.77061	0.10585	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24383	0.99874	0.09896	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23613	0.99450	0.89081	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78146	0.76702	0.89819	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00903	0.22588	0.89606	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67594	0.55863	0.43587	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44523	0.10173	0.43450	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91188	0.32763	0.43610	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91082	0.33183	0.22984	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44634	0.09867	0.22947	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68049	0.56026	0.23061	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34084	0.88566	0.77196	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11183	0.42964	0.76683	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57539	0.66294	0.76885	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58480	0.66908	0.56602	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11221	0.43200	0.56549	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34306	0.88522	0.56307	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00807	0.76383	0.89730	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23835	0.22433	0.89206	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78202	0.99558	0.89635	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78309	0.99789	0.10400	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24347	0.22724	0.09956	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01459	0.77099	0.10552	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68117	0.10299	0.23135	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91129	0.56184	0.23193	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44918	0.33199	0.22846	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43942	0.33196	0.43287	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90636	0.55702	0.43772	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68018	0.10391	0.43393	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34733	0.44375	0.56163	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57549	0.89498	0.56458	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10794	0.66521	0.56714	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11185	0.66295	0.77106	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57321	0.89329	0.76889	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34276	0.43402	0.76646	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91452	0.09618	0.12103	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91678	0.80470	0.12339	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21109	0.09670	0.11907	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10587	0.89345	0.87458	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81635	0.89833	0.87894	Biso	1.000	O

O6	1.0000	0.10777	0.19434	0.87772	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57014	0.43268	0.45147	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58790	0.14275	0.43988	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88511	0.43004	0.45440	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77985	0.23417	0.21321	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47915	0.23116	0.21781	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78018	0.52896	0.21605	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24242	0.75622	0.79553	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24396	0.46622	0.78440	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54223	0.76175	0.77837	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45329	0.57207	0.55093	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12458	0.55624	0.55963	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44078	0.84964	0.55036	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99586	0.31314	0.16590	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70051	0.66477	0.16737	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35484	0.02128	0.15359	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32298	0.97602	0.82954	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67282	0.68125	0.83926	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02833	0.33184	0.83516	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66836	0.65092	0.49976	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36182	0.98971	0.50450	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01784	0.34474	0.49672	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02532	0.67384	0.83866	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32321	0.32886	0.82889	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67564	0.97397	0.83518	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69726	0.01903	0.16390	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35014	0.31454	0.15931	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99512	0.66668	0.16865	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35489	0.35782	0.49245	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00464	0.64883	0.50327	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65457	0.99751	0.49845	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13484	0.23938	0.12665	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77129	0.87794	0.13331	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13665	0.87889	0.12988	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24675	0.11432	0.86314	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88666	0.74987	0.87053	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88850	0.11743	0.86921	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79204	0.55964	0.46087	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42121	0.21153	0.45940	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80498	0.20712	0.46323	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92512	0.45420	0.20599	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56003	0.09181	0.21075	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56103	0.45143	0.20350	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46296	0.90110	0.79798	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09559	0.53789	0.78202	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46421	0.54235	0.79122	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59953	0.79185	0.54380	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23279	0.44592	0.53833	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22150	0.77629	0.53092	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00974	0.26011	0.99958	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75068	0.73662	0.00251	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27021	0.99623	0.99417	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68098	0.59893	0.33318	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39276	0.05039	0.32609	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94694	0.32912	0.33247	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33428	0.91014	0.66772	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07612	0.38136	0.66580	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62139	0.66411	0.66853	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01105	0.73530	0.00187	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27542	0.25805	0.99519	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74907	0.99503	0.00016	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69100	0.06555	0.33220	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94585	0.59719	0.33564	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40778	0.33773	0.32852	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34112	0.39813	0.66297	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61070	0.93712	0.66731	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08173	0.68242	0.66972	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26290	0.92941	0.33882	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09725	0.94306	0.40279	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02986	0.85784	0.41768	Biso	1.000	H

H3	1.0000	0.16657	0.98996	0.44887	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.10335	0.97670	0.33639	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18557	0.86386	0.35241	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.19660	0.82933	0.40598	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.98353	0.02084	0.40965	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01027	0.01162	0.49565	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.95442	0.93207	0.53070	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.09916	0.10588	0.55023	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.03660	0.10212	0.37598	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.16105	0.17377	0.50687	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.05419	0.14300	0.58580	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15892	0.07041	0.61843	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.09761	0.00301	0.66236	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.21186	0.04038	0.58683	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.87941	0.93614	0.36196	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.83340	0.85534	0.39788	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.89853	0.92048	0.29419	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.82156	0.97036	0.35471	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.21561	0.14305	0.66012	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of trimethyl_ethylene:s; E= -976.152 eV; ZPVE= 5.614eV;
frequencies =350.1i, 25.3, 49.0, 52.4, 72.6, 78.2, 78.3, 305.5, 334.0, 341.7, 391.0, 396.5,
460.3, 522.6, 536.8, 563.5, 575.8, 637.7, 657.7, 684.2, 761.9, 768.0, 855.9, 903.8,
919.9, 942.4, 963.8, 973.0, 991.4, 1006.9, 1022.6, 1049.4, 1050.0, 1087.8, 1108.8,
1216.8, 1319.7, 1335.3, 1348.7, 1356.5, 1359.1, 1367.3, 1406.3, 1417.0, 1421.8,
1427.8, 1438.4, 1443.6, 1598.0, 1612.7, 2957.2, 2963.1, 2968.1, 3015.5, 3020.9,
3024.2, 3045.1, 3047.5, 3054.3, 3066.5, 3073.8, 3123.3, 3242.4, 3251.6, 3538.4 cm⁻¹
1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00813	0.23264	0.09310	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78011	0.77625	0.09536	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23822	0.00457	0.08931	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23129	0.99989	0.88098	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77630	0.77195	0.88833	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00408	0.23114	0.88673	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67120	0.56416	0.42597	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43918	0.10630	0.42447	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90578	0.33361	0.42642	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90600	0.33780	0.22019	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44132	0.10403	0.21961	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67554	0.56534	0.22033	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33622	0.89089	0.76275	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10721	0.43503	0.75725	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57067	0.66798	0.75871	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57852	0.67461	0.55586	Biso	1.000	Si

Si16	1.0000	0.10684	0.43684	0.55578	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33836	0.89117	0.55385	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00374	0.76925	0.88743	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23441	0.23007	0.88259	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77788	0.00121	0.88630	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77910	0.00403	0.09426	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23903	0.23327	0.08941	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00991	0.77694	0.09527	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67616	0.10870	0.22130	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90631	0.56740	0.22201	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44468	0.33790	0.21873	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43625	0.33819	0.42299	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90163	0.56324	0.42804	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67441	0.10925	0.42381	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34236	0.44959	0.55174	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57088	0.90120	0.55504	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10385	0.67044	0.55733	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10711	0.66812	0.76136	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56868	0.89871	0.75930	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33815	0.43963	0.75667	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91073	0.10156	0.11244	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91206	0.81090	0.11133	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20505	0.10230	0.10918	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10125	0.89874	0.86413	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81131	0.90329	0.86928	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10363	0.20030	0.87051	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56779	0.43672	0.44153	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58195	0.14785	0.43016	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87869	0.43573	0.44505	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77501	0.24015	0.20387	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47422	0.23672	0.20927	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77489	0.53348	0.20633	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23753	0.76146	0.78606	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23946	0.47200	0.77446	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53829	0.76733	0.76840	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44622	0.57913	0.54103	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12103	0.56178	0.54951	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43626	0.85595	0.54084	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99118	0.31850	0.15694	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69684	0.67079	0.15783	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34969	0.02774	0.14352	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31881	0.98134	0.82064	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66882	0.68629	0.82835	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02423	0.33726	0.82573	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66068	0.65509	0.48914	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35612	0.99498	0.49495	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01146	0.35015	0.48725	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02017	0.67900	0.82848	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31827	0.33431	0.81892	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67093	0.97940	0.82577	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69312	0.02547	0.15368	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34470	0.31959	0.15039	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98943	0.67277	0.15900	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35310	0.36538	0.48284	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00095	0.65438	0.49315	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64975	0.00351	0.48873	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13078	0.24667	0.11510	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76603	0.88340	0.12295	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13141	0.88487	0.12116	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24206	0.11975	0.85328	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88192	0.75498	0.86196	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88454	0.12250	0.85825	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78891	0.56873	0.45146	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41478	0.21621	0.44819	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79903	0.21298	0.45281	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92080	0.46025	0.19570	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55510	0.09761	0.20000	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55622	0.45692	0.19236	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45812	0.90580	0.78868	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09071	0.54307	0.77263	Biso	1.000	O

O51	1.0000	0.45951	0.54778	0.78198	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59499	0.79813	0.53417	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22592	0.44777	0.52759	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21738	0.78160	0.52128	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00175	0.26473	0.99006	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74374	0.74104	0.99241	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26413	0.00125	0.98462	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67526	0.60325	0.32301	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38748	0.05422	0.31594	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94234	0.33632	0.32302	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32956	0.91557	0.65856	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07116	0.38690	0.65620	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61521	0.66829	0.65805	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00854	0.74129	0.99192	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27349	0.26425	0.98543	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74641	0.00242	0.99027	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68471	0.07065	0.32214	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94082	0.60264	0.32578	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40451	0.34558	0.31887	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33694	0.40460	0.65306	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60594	0.94314	0.65783	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07721	0.68718	0.65983	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26188	0.92796	0.32740	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09031	0.92914	0.38326	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02519	0.84424	0.40189	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.15615	0.98012	0.43085	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09365	0.95829	0.31574	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18650	0.85903	0.34042	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.19841	0.82874	0.39615	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.95053	0.96431	0.41953	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04301	0.07113	0.42997	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.09964	0.10906	0.51857	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.06559	0.04041	0.56778	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.08607	0.17745	0.54351	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.19211	0.14572	0.51347	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.87219	0.92043	0.34163	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.91123	0.96400	0.27921	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.79823	0.93106	0.35407	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.83851	0.82906	0.33228	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.08940	0.15763	0.35753	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.18189	0.19522	0.35191	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.07553	0.22837	0.37499	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.05062	0.12495	0.29253	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.92020	0.91202	0.47958	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 1-hexene:o; E= -992.362 eV; ZPVE= 6.407eV; frequencies
=363.0i, 36.0, 45.6, 53.7, 58.9, 65.1, 72.7, 98.9, 122.9, 126.5, 141.2, 158.0,
160.8, 226.8, 239.4, 262.8, 271.5, 276.9, 299.2, 336.7, 361.4, 394.0, 397.3, 470.4,
509.2, 558.6, 578.6, 633.5, 660.3, 684.4, 708.7, 716.4, 736.3, 783.8, 882.5, 887.4,
905.4, 913.3, 971.2, 975.7, 1007.5, 1012.2, 1014.3, 1021.3, 1032.0, 1050.7, 1076.1,
1087.3, 1165.0, 1207.8, 1228.3, 1265.9, 1277.9, 1294.2, 1304.5, 1336.7, 1345.5,
1354.8, 1365.5, 1394.6, 1422.8, 1431.6, 1439.5, 1445.3, 1453.7, 1580.5, 1608.5,
2923.7, 2939.6, 2949.6, 2963.0, 2966.0, 2984.3, 3000.4, 3026.6, 3045.7, 3050.1,
3061.9, 3062.6, 3156.9, 3163.0, 3244.0, 3254.3, 3554.8 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.99891 0.20495 0.11745 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.76985 0.74723 0.12144 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.22981 0.97618 0.11390 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.22215 0.97085 0.90669 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.76596 0.74277 0.91437 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.99443 0.20253 0.91108 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.66126 0.53532 0.45183 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.43117 0.07912 0.45106 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.89781 0.30406 0.45112 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.89665 0.30892 0.24528 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.43227 0.07635 0.24518 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.66593 0.53748 0.24657 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.32601 0.86178 0.78756 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.09687 0.40581 0.78211 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.56076 0.63910 0.78458 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.57017 0.64572 0.58147 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.09757 0.40885 0.58079 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.32828 0.86158 0.57880 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.99316 0.73916 0.91354 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.22368 0.20076 0.90674 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.76643 0.97183 0.91232 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.76807 0.97526 0.11934 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.22888 0.20458 0.11418 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.99933 0.74675 0.12060 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.66622 0.08013 0.24686 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.89569 0.53859 0.24783 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.43344 0.30889 0.24416 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.42292 0.30825 0.44805 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.89040 0.53286 0.45397 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.66515 0.08080 0.44982 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.33244 0.42050 0.57687 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.56055 0.87133 0.58022 Biso 1.000 Si
Si32     1.0000 0.09249 0.64162 0.58273 Biso 1.000 Si
Si33     1.0000 0.09660 0.63898 0.78659 Biso 1.000 Si
Si34     1.0000 0.55852 0.86965 0.78460 Biso 1.000 Si
Si35     1.0000 0.32808 0.41038 0.78187 Biso 1.000 Si
O1       1.0000 0.89963 0.07421 0.13490 Biso 1.000 O
O2       1.0000 0.90179 0.78109 0.13827 Biso 1.000 O
O3       1.0000 0.19630 0.07376 0.13383 Biso 1.000 O
O4       1.0000 0.09203 0.86875 0.89288 Biso 1.000 O
O5       1.0000 0.79980 0.87382 0.89591 Biso 1.000 O
O6       1.0000 0.09318 0.17108 0.89249 Biso 1.000 O
O7       1.0000 0.55343 0.41029 0.46509 Biso 1.000 O
O8       1.0000 0.57424 0.12118 0.45736 Biso 1.000 O
O9       1.0000 0.87052 0.40611 0.46898 Biso 1.000 O
O10      1.0000 0.76583 0.21101 0.22873 Biso 1.000 O
O11      1.0000 0.46388 0.20843 0.23300 Biso 1.000 O
O12      1.0000 0.76492 0.50562 0.22948 Biso 1.000 O
O13      1.0000 0.22693 0.73270 0.81129 Biso 1.000 O
O14      1.0000 0.22862 0.44150 0.80051 Biso 1.000 O
O15      1.0000 0.52872 0.73861 0.79486 Biso 1.000 O
O16      1.0000 0.43895 0.54861 0.56571 Biso 1.000 O
O17      1.0000 0.10917 0.53274 0.57488 Biso 1.000 O
O18      1.0000 0.42568 0.82527 0.56641 Biso 1.000 O
O19      1.0000 0.98170 0.29116 0.18056 Biso 1.000 O
O20      1.0000 0.68551 0.64247 0.18392 Biso 1.000 O
O21      1.0000 0.33877 0.99760 0.17072 Biso 1.000 O
O22      1.0000 0.30867 0.95256 0.84511 Biso 1.000 O
O23      1.0000 0.65856 0.65677 0.85452 Biso 1.000 O
O24      1.0000 0.01228 0.30741 0.84966 Biso 1.000 O
O25      1.0000 0.65426 0.62795 0.51557 Biso 1.000 O

```

O26	1.0000	0.34818	0.96581	0.51971	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00355	0.32135	0.51193	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.00959	0.64947	0.85404	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.30913	0.30497	0.84381	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66106	0.95139	0.85049	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68258	0.99575	0.18000	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33549	0.29187	0.17389	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98099	0.64474	0.18591	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.33852	0.33378	0.50779	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.98908	0.62489	0.51891	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.63980	0.97432	0.51435	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.11980	0.21578	0.14193	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75859	0.85617	0.14877	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12099	0.85649	0.14429	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23110	0.08988	0.87908	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87220	0.72685	0.88788	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87398	0.09314	0.88574	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.77520	0.53301	0.47854	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.40719	0.18898	0.47474	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79125	0.18301	0.47802	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91054	0.43146	0.22239	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54596	0.07025	0.22441	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54546	0.42910	0.22095	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.44777	0.87646	0.81386	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08113	0.51429	0.79794	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.44921	0.51896	0.80728	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58536	0.76873	0.55934	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21861	0.42407	0.55384	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.20607	0.75315	0.54717	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99670	0.23870	0.01430	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73407	0.71181	0.01858	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25834	0.97411	0.00983	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67008	0.57747	0.34915	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38068	0.02809	0.34211	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93331	0.30559	0.34757	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.31995	0.88667	0.68349	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06143	0.35831	0.68103	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60623	0.64044	0.68412	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99553	0.70872	0.01789	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26051	0.23512	0.00993	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73242	0.97137	0.01589	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67391	0.04219	0.34781	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92791	0.57420	0.35168	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.38962	0.31242	0.34370	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.32695	0.37576	0.67831	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59592	0.91333	0.68302	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06605	0.65811	0.68544	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.25580	0.90098	0.35510	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.07516	0.90882	0.35871	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.00620	0.83043	0.38513	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.13278	0.97506	0.40350	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09402	0.91173	0.28852	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.17889	0.83343	0.36574	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.18151	0.81085	0.42730	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.99365	0.99976	0.31330	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.92930	0.96255	0.38850	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.85046	0.88031	0.38615	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.95645	0.02344	0.47449	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.96170	0.95640	0.25011	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.06810	0.08466	0.31064	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.03779	0.10372	0.47065	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.89023	0.04659	0.48603	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.95511	0.95113	0.55338	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.87332	0.87087	0.55494	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.02097	0.92754	0.54362	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97533	0.01196	0.64246	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.05338	0.09551	0.63855	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.90566	0.02921	0.65564	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.98551	0.94294	0.71790	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.05807	0.92978	0.70714	Biso	1.000	H

```
H16      1.0000 0.90905 0.85870 0.72271 Biso  1.000  H
H17      1.0000 0.99764 0.98516 0.78227 Biso  1.000  H
```

```
-----
# Methylation (MeOH) of 2-hexene:^; E= -992.525 eV; ZPVE= 6.394eV; frequencies
=336.1i, 35.4, 41.9, 44.2, 58.3, 64.9, 80.6, 100.9, 117.6, 132.3, 153.2, 161.2,
200.4, 205.1, 227.3, 240.1, 270.7, 274.0, 302.1, 325.1, 333.6, 345.2, 395.5, 399.2,
497.7, 517.0, 561.1, 571.7, 637.7, 659.2, 687.7, 720.1, 730.0, 800.0, 854.7, 889.1,
900.0, 909.7, 945.9, 978.8, 1003.5, 1009.7, 1023.5, 1041.1, 1043.9, 1075.3, 1080.0,
1098.7, 1149.6, 1213.1, 1235.6, 1277.0, 1290.0, 1305.4, 1335.6, 1341.6, 1349.9,
1364.2, 1366.9, 1410.0, 1424.0, 1432.3, 1435.1, 1446.5, 1455.8, 1609.5, 1611.7,
2919.6, 2951.2, 2959.4, 2974.9, 2979.2, 3002.8, 3026.5, 3032.0, 3045.3, 3048.3,
3052.0, 3070.0, 3075.5, 3142.5, 3237.9, 3257.0, 3563.9 cm^-1
-----
```

```
data_image0
```

```
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
```

```
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
```

```
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01361 0.23001 0.10671 Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.78378 0.77350 0.10680 Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24479 0.00225 0.10134 Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.23959 0.99903 0.89603 Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.78350 0.77186 0.90097 Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.01235 0.23048 0.89876 Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.67751 0.56362 0.43924 Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.44678 0.10720 0.43801 Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.91373 0.33299 0.43859 Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.91151 0.33668 0.23237 Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.44725 0.10414 0.23318 Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.68079 0.56523 0.23355 Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34371 0.89202 0.77518 Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11441 0.43539 0.77071 Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.57649 0.66825 0.77145 Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58577 0.67458 0.56760 Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11307 0.43663 0.56917 Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.34535 0.88960 0.56608 Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.01134 0.77157 0.89976 Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.24237 0.23280 0.89701 Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78445 0.00255 0.89943 Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78255 0.00350 0.10563 Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.24481 0.23450 0.10195 Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01482 0.77747 0.10867 Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68159 0.10765 0.23444 Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.91183 0.56708 0.23446 Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.45029 0.33703 0.23231 Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.44107 0.33724 0.43706 Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.90827 0.56266 0.44030 Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68148 0.10982 0.43663 Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.34962 0.45070 0.56401 Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.57706 0.90030 0.56727 Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.10936 0.67018 0.57051 Biso  1.000  Si
```

Si33	1.0000	0.11447	0.66898	0.77459	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57510	0.89893	0.77158	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34621	0.44039	0.77001	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91409	0.09960	0.12549	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91575	0.80969	0.12598	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21492	0.10345	0.11270	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10889	0.90111	0.87604	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81783	0.90387	0.88726	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11117	0.19919	0.87922	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57186	0.43787	0.45587	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58992	0.14967	0.44183	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88744	0.43585	0.45652	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78044	0.23879	0.21611	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48104	0.23681	0.22120	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78067	0.53424	0.21862	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24494	0.76283	0.79891	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24639	0.47116	0.78778	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54347	0.76719	0.78069	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45440	0.57913	0.54937	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12529	0.56086	0.56297	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44188	0.85243	0.55314	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99580	0.31767	0.16773	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70040	0.67036	0.17111	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35459	0.02649	0.15821	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32570	0.98354	0.83126	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67705	0.68905	0.83925	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03179	0.33808	0.83983	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67079	0.65676	0.50268	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36524	0.99408	0.50727	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01896	0.34976	0.50003	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02840	0.68053	0.84234	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32624	0.33327	0.83029	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67898	0.97937	0.83668	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69697	0.02282	0.16737	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34972	0.31815	0.16450	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99489	0.67201	0.17076	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35618	0.36289	0.49620	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00663	0.65454	0.50601	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65505	0.00363	0.50155	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13416	0.24123	0.13273	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76801	0.88091	0.12939	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13508	0.88627	0.13614	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25423	0.12251	0.87769	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89006	0.75743	0.87240	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89213	0.12259	0.87030	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79392	0.56506	0.46385	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42254	0.21669	0.46377	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80647	0.21276	0.46567	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92553	0.45919	0.20892	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56035	0.09638	0.21401	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56133	0.45661	0.20618	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46568	0.90757	0.80210	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09888	0.54418	0.78599	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46660	0.54847	0.79776	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60353	0.79880	0.54648	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23370	0.45069	0.54218	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22313	0.78119	0.53442	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01212	0.26185	0.00286	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75017	0.73440	0.00414	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27111	0.98901	0.99826	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68145	0.60304	0.33638	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39349	0.05612	0.32976	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94856	0.33425	0.33486	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33778	0.91545	0.67069	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07744	0.38692	0.66980	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61868	0.66625	0.67047	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01453	0.74469	0.00473	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27730	0.27533	0.99914	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75068	0.00765	0.00220	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69186	0.07036	0.33518	Biso	1.000	O

O68	1.0000	0.94692	0.60319	0.33807	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41021	0.34320	0.33262	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34824	0.40957	0.66593	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61155	0.94272	0.66997	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08347	0.68752	0.67319	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26694	0.92991	0.33907	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.08604	0.92584	0.38998	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.04539	0.85387	0.43468	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16227	0.00267	0.40968	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.05702	0.91414	0.32163	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.19164	0.86043	0.35073	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.20264	0.83046	0.40688	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.97060	0.00244	0.39275	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.98761	0.98501	0.47940	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.92430	0.90504	0.51028	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.07780	0.06987	0.53862	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.03082	0.08426	0.36276	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.14359	0.14034	0.49916	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.03754	0.10785	0.57930	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.13167	0.02115	0.60125	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.06561	0.95665	0.64463	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.16690	0.97737	0.56253	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22621	0.11409	0.65622	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.29321	0.17684	0.61305	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.19376	0.15852	0.69714	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.86762	0.92643	0.34015	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.81692	0.84253	0.37075	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.88929	0.91682	0.27172	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.81344	0.96519	0.33550	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.26553	0.07960	0.70034	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of tetra-methyl-ethylene:s; E= -992.883 eV; ZPVE= 6.351eV;
frequencies =337.7i, 9.9, 31.0, 41.5, 75.6, 79.1, 81.1, 95.4, 113.4, 131.8, 144.5,
155.4, 170.1, 172.8, 180.5, 209.8, 246.7, 277.3, 283.3, 337.1, 357.2, 383.0, 399.1,
414.3, 428.0, 484.9, 502.3, 538.2, 564.7, 573.1, 637.7, 658.8, 686.7, 690.5, 763.8,
877.1, 898.3, 910.4, 912.2, 956.0, 967.7, 972.4, 988.8, 1009.3, 1012.1, 1043.6,
1052.0, 1089.7, 1155.9, 1161.5, 1256.6, 1331.5, 1348.4, 1354.2, 1356.9, 1358.8,
1371.1, 1409.4, 1415.8, 1418.6, 1425.5, 1431.8, 1439.6, 1444.6, 1461.7, 1592.7,
1611.3, 2961.2, 2965.5, 2970.3, 2973.1, 3018.5, 3020.3, 3034.0, 3035.2, 3048.6,
3071.1, 3076.7, 3080.9, 3086.4, 3117.0, 3242.4, 3255.8, 3536.5 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.00722	0.23185	0.09315	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77925	0.77563	0.09511	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23709	0.00356	0.08921	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23025	0.99891	0.88068	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77541	0.77144	0.88777	Biso	1.000	Si

Si6	1.0000	0.00312	0.23019	0.88682	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66959	0.56094	0.42430	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43770	0.10541	0.42418	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90333	0.33324	0.42614	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90490	0.33709	0.22014	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44025	0.10310	0.21913	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67457	0.56478	0.21969	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33508	0.88990	0.76252	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10664	0.43429	0.75740	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56981	0.66701	0.75864	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57415	0.67278	0.55652	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10570	0.43492	0.55547	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33762	0.88999	0.55384	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00265	0.76828	0.88694	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23303	0.22856	0.88247	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77667	0.00034	0.88615	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77825	0.00308	0.09429	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23780	0.23202	0.08941	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00887	0.77583	0.09487	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67476	0.10751	0.22120	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90519	0.56634	0.22135	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44346	0.33701	0.21820	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43767	0.33724	0.42152	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90055	0.56293	0.42761	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67242	0.10830	0.42351	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34118	0.44952	0.55272	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57001	0.89993	0.55496	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10414	0.66872	0.55685	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10610	0.66689	0.76115	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56762	0.89734	0.75946	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33697	0.43821	0.75664	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90981	0.10074	0.11216	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91097	0.80962	0.11119	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20405	0.10124	0.10975	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10038	0.89764	0.86361	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81002	0.90253	0.86803	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10220	0.19869	0.87048	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57251	0.42965	0.43526	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58064	0.14783	0.42988	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87412	0.43412	0.44457	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77396	0.23894	0.20460	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47278	0.23566	0.20878	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77396	0.53302	0.20567	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23636	0.76058	0.78596	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23896	0.47150	0.77460	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53702	0.76598	0.76949	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.43934	0.58242	0.54718	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12406	0.56164	0.54914	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43524	0.85416	0.54158	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99001	0.31737	0.15715	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69520	0.66957	0.15673	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34859	0.02643	0.14320	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31808	0.98040	0.82068	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66785	0.68492	0.82822	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02363	0.33625	0.82565	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.64832	0.64392	0.48861	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35604	0.99380	0.49473	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00811	0.34990	0.48794	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01877	0.67803	0.82768	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31715	0.33342	0.81943	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66953	0.97875	0.82592	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69221	0.02470	0.15348	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34388	0.31910	0.14967	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98867	0.67168	0.15847	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36323	0.37376	0.48300	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00120	0.65201	0.49262	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64810	0.00314	0.48910	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12980	0.24575	0.11514	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76542	0.88269	0.12344	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13037	0.88370	0.12069	Biso	1.000	O

O40	1.0000	0.24087	0.11856	0.85250	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88106	0.75451	0.86143	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88323	0.12187	0.85849	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79064	0.57380	0.45166	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41017	0.21347	0.44792	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79731	0.21182	0.45173	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91910	0.45900	0.19455	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55412	0.09699	0.19926	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55520	0.45603	0.19232	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45705	0.90478	0.78797	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08989	0.54206	0.77331	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45891	0.54622	0.78084	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59569	0.79793	0.53267	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22190	0.44009	0.52587	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21684	0.78076	0.52089	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00115	0.26420	0.99009	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74329	0.74148	0.99197	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26284	0.00077	0.98441	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67485	0.60356	0.32226	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38676	0.05329	0.31555	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94163	0.33735	0.32309	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32810	0.91460	0.65837	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07063	0.38650	0.65631	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61518	0.66915	0.65785	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00733	0.74026	0.99143	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27191	0.26213	0.98534	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74535	0.00071	0.99024	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68178	0.06845	0.32206	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93960	0.60107	0.32518	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40265	0.34409	0.31826	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33420	0.40155	0.65323	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60568	0.94084	0.65785	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07659	0.68490	0.65923	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26158	0.92759	0.32743	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09672	0.93578	0.38563	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02988	0.85275	0.40642	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16461	0.98681	0.43175	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09791	0.96379	0.31807	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18555	0.85990	0.34117	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.19738	0.82893	0.39657	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.95006	0.96858	0.42793	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04884	0.07267	0.43176	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11403	0.12059	0.51639	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.09365	0.05809	0.56919	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.09502	0.18525	0.54169	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.20585	0.16399	0.50433	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.89878	0.89555	0.50867	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.86152	0.80524	0.49237	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.82817	0.90647	0.53216	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.95773	0.91510	0.56406	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.87413	0.92757	0.34776	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.91569	0.96909	0.28550	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.80247	0.94257	0.35798	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.83650	0.83544	0.33937	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.09207	0.15501	0.35574	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.18396	0.19087	0.34706	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.08017	0.22739	0.37167	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.04996	0.11971	0.29224	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 2-heptene:o; E= -1008.978 eV; ZPVE= 7.170eV; frequencies
=339.4i, 34.3, 51.8, 56.5, 64.0, 73.8, 94.0, 107.5, 116.6, 130.7, 132.1, 146.9,
163.0, 201.8, 208.5, 237.1, 237.4, 270.5, 275.4, 300.6, 308.4, 323.0, 336.3, 356.7,
397.6, 443.9, 481.4, 524.2, 564.3, 576.1, 641.6, 656.6, 688.7, 709.1, 725.5, 770.3,
824.9, 874.5, 882.9, 906.9, 921.1, 942.7, 964.9, 996.9, 1005.2, 1008.4, 1033.6,
1042.5, 1061.5, 1065.5, 1096.0, 1100.0, 1150.9, 1199.9, 1225.4, 1260.8, 1284.6,
1287.9, 1293.5, 1325.2, 1334.3, 1345.6, 1349.3, 1362.0, 1374.0, 1413.7, 1424.2,
1435.1, 1437.4, 1445.5, 1454.3, 1463.5, 1611.2, 1614.1, 2923.3, 2946.1, 2962.2,
2964.1, 2979.8, 2993.2, 3009.2, 3010.9, 3033.7, 3036.0, 3047.0, 3057.2, 3083.0,
3083.0, 3094.4, 3123.6, 3248.8, 3265.3, 3573.0 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01807  0.22925  0.10671  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.78813  0.77226  0.10576  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24983  0.00215  0.10167  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.24612  0.99974  0.89630  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.78859  0.77135  0.90082  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.01771  0.22924  0.89929  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.68288  0.56390  0.43924  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.45209  0.10581  0.43788  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.91837  0.33328  0.43853  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.91606  0.33638  0.23191  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.45135  0.10280  0.23424  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.68531  0.56479  0.23329  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34867  0.88924  0.77651  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11897  0.43532  0.77053  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.58180  0.66772  0.77143  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.59050  0.67393  0.56728  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11872  0.43659  0.56884  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.35092  0.88897  0.56618  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.01735  0.77335  0.89938  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.24854  0.23324  0.89840  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78941  0.00309  0.89927  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78712  0.00351  0.10472  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.25036  0.23451  0.10263  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01975  0.77752  0.10830  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68639  0.10676  0.23436  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.91757  0.56700  0.23396  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.45578  0.33716  0.23315  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.44816  0.33817  0.43769  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.91429  0.56292  0.43973  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68725  0.10893  0.43621  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.35607  0.45150  0.56402  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.58208  0.90026  0.56715  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.11569  0.67017  0.57009  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.11899  0.66802  0.77475  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.58054  0.89940  0.77137  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.35164  0.44318  0.77126  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.91865  0.09876  0.12594  Biso  1.000  O
O2       1.0000 0.92011  0.80902  0.12580  Biso  1.000  O
O3       1.0000 0.22006  0.10337  0.11316  Biso  1.000  O
O4       1.0000 0.11485  0.90312  0.87628  Biso  1.000  O
O5       1.0000 0.82092  0.90296  0.88926  Biso  1.000  O
O6       1.0000 0.11619  0.19671  0.88295  Biso  1.000  O
O7       1.0000 0.57884  0.43806  0.45833  Biso  1.000  O
O8       1.0000 0.59518  0.14806  0.44089  Biso  1.000  O
O9       1.0000 0.89095  0.43530  0.45708  Biso  1.000  O
O10      1.0000 0.78519  0.23784  0.21570  Biso  1.000  O

```

O11	1.0000	0.48467	0.23553	0.22337	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78664	0.53570	0.21979	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24974	0.76005	0.80002	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25190	0.47445	0.78692	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55139	0.76845	0.77912	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45930	0.58010	0.54618	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13334	0.56184	0.56225	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44711	0.85155	0.55112	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00082	0.31690	0.16820	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70497	0.67041	0.17130	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35946	0.02606	0.15861	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33065	0.98101	0.83219	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68375	0.68898	0.83774	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03885	0.33668	0.83953	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67668	0.65766	0.50242	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37180	0.99544	0.50965	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02416	0.35061	0.49954	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03379	0.68222	0.84160	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32911	0.33494	0.83125	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68498	0.98061	0.83566	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70117	0.02155	0.16719	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35391	0.31755	0.16650	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00015	0.67180	0.17000	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36317	0.36204	0.49839	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01233	0.65379	0.50603	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66124	0.00288	0.50118	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13906	0.24100	0.13168	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77176	0.87992	0.12570	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13987	0.88616	0.13597	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26251	0.12417	0.87813	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89650	0.75977	0.87166	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89818	0.12173	0.86917	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80105	0.56808	0.46175	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42996	0.21706	0.46115	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81195	0.21232	0.46543	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92941	0.45832	0.20717	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56497	0.09576	0.21524	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56724	0.45526	0.20437	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47052	0.90526	0.80435	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10018	0.54199	0.78693	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47153	0.55017	0.80147	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61026	0.79940	0.54870	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23833	0.44786	0.54226	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22825	0.78208	0.53385	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01490	0.26086	0.00300	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75478	0.73090	0.00347	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27684	0.98944	0.99867	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68289	0.60091	0.33617	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39679	0.05344	0.33038	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95299	0.33542	0.33466	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34383	0.91126	0.67165	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08218	0.38730	0.66950	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62035	0.66121	0.67011	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01978	0.74545	0.00422	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28531	0.27629	0.00020	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75596	0.01090	0.00163	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69798	0.06949	0.33484	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95445	0.60209	0.33749	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41863	0.34772	0.33353	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35789	0.41565	0.66705	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61462	0.94413	0.66973	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08964	0.68686	0.67292	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26235	0.93881	0.34217	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.07208	0.92775	0.39257	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.04706	0.86741	0.44671	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.14354	0.01277	0.40007	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.03219	0.89781	0.32833	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18575	0.87161	0.35522	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.19740	0.83994	0.41018	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.94061	0.98806	0.39335	Biso	1.000	C

C3	1.0000	0.95909	0.97232	0.48002	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.90289	0.88890	0.50963	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.03919	0.06358	0.54089	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.99400	0.07282	0.36496	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.08507	0.14461	0.50468	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.98598	0.07526	0.59060	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.12430	0.04041	0.58986	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.08031	0.95612	0.62168	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.18392	0.03805	0.54176	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.19288	0.13256	0.65861	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.19945	0.21266	0.63638	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.14583	0.11107	0.72180	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.31155	0.14990	0.67087	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.35869	0.17746	0.60823	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.30814	0.07077	0.69033	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.35988	0.21361	0.72159	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.84349	0.90557	0.33863	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.79848	0.82079	0.36843	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.87053	0.90025	0.27105	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.78268	0.93625	0.33187	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 1-heptene: ^; E= -1008.935 eV; ZPVE= 7.166eV; frequencies
=366.0i, 33.7, 47.8, 50.0, 56.9, 68.5, 72.7, 90.1, 92.6, 116.8, 131.4, 134.6,
170.9, 185.3, 211.6, 229.2, 250.2, 270.3, 273.9, 294.9, 337.7, 345.1, 397.2, 401.3,
412.7, 452.5, 517.3, 559.4, 578.6, 637.0, 663.0, 687.6, 713.6, 720.5, 760.6, 773.6,
838.7, 863.4, 875.3, 901.1, 923.2, 940.5, 965.2, 981.0, 1005.0, 1011.4, 1018.8,
1029.1, 1046.8, 1066.2, 1073.5, 1087.8, 1140.8, 1190.1, 1208.7, 1251.5, 1258.6,
1284.2, 1286.0, 1291.3, 1312.5, 1327.1, 1343.1, 1348.3, 1371.1, 1396.6, 1432.2,
1436.1, 1441.3, 1444.6, 1449.2, 1458.4, 1572.9, 1605.8, 2928.8, 2936.4, 2949.1,
2955.3, 2969.6, 2973.3, 2975.6, 3003.6, 3020.7, 3041.4, 3050.0, 3055.6, 3062.0,
3066.6, 3154.7, 3178.7, 3242.5, 3285.5, 3536.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.03697	0.24813	0.12091	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.80769	0.79176	0.12261	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.26719	0.01953	0.11708	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.26121	0.01614	0.91039	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.80562	0.78963	0.91500	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.03380	0.24765	0.91403	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.70012	0.58159	0.45297	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.47031	0.12506	0.45360	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.93467	0.34898	0.45389	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.93338	0.35277	0.24790	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.47023	0.12081	0.24822	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.70394	0.58200	0.24841	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.36463	0.90742	0.79036	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.13582	0.45172	0.78514	Biso	1.000	Si

Si14	1.0000	0.59901	0.68471	0.78669	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.60710	0.69099	0.58334	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.13571	0.45387	0.58353	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.36683	0.90633	0.58188	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.03231	0.78623	0.91476	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.26232	0.24693	0.91055	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.80547	0.01778	0.91434	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.80614	0.01912	0.12166	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.26651	0.24920	0.11756	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.03712	0.79174	0.12240	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.70406	0.12399	0.24975	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.93325	0.58235	0.24961	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.47186	0.35238	0.24726	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.46278	0.35320	0.45112	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.92884	0.57832	0.45574	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.70318	0.12612	0.45164	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.37102	0.46622	0.57953	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.59729	0.91600	0.58324	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.13148	0.68665	0.58500	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.13553	0.68455	0.78907	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.59697	0.91540	0.78724	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.36712	0.45652	0.78487	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.93806	0.11693	0.13727	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.93960	0.82610	0.14053	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.23408	0.11788	0.13427	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.13062	0.91605	0.89377	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.83992	0.92076	0.89618	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13127	0.21463	0.89441	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59411	0.45533	0.46487	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.61384	0.16874	0.45614	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.90638	0.45065	0.47109	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.80203	0.25567	0.23193	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50440	0.25350	0.23477	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80209	0.54875	0.23241	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.26583	0.77820	0.81383	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.26791	0.48818	0.80259	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56704	0.78426	0.79695	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47522	0.59571	0.56774	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15046	0.57919	0.57713	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.46170	0.86644	0.57083	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.01748	0.33328	0.18350	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72344	0.68537	0.18385	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37634	0.04221	0.17407	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34731	0.99834	0.84773	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.69799	0.70336	0.85562	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05267	0.35356	0.85340	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69001	0.67224	0.51685	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.39042	0.01128	0.52245	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.04048	0.36746	0.51504	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.04887	0.69610	0.85609	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.34705	0.35063	0.84674	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69964	0.99709	0.85296	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72135	0.04106	0.18198	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37359	0.33501	0.17740	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.01723	0.68854	0.18710	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38047	0.38135	0.51076	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02805	0.66916	0.52091	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.67364	0.01920	0.51685	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15753	0.25949	0.14740	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79432	0.89904	0.15116	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.15835	0.90037	0.14802	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27315	0.13720	0.88619	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91149	0.77341	0.88812	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91218	0.13992	0.88863	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81541	0.58214	0.48012	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.44731	0.23480	0.48046	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82895	0.22755	0.48110	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94844	0.47557	0.22387	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58246	0.11169	0.22857	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58278	0.47372	0.22472	Biso	1.000	O

O49	1.0000	0.48644	0.92238	0.81673	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11955	0.55981	0.80144	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48816	0.56479	0.81105	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.62475	0.81522	0.56149	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25525	0.46575	0.55630	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.24394	0.79953	0.54949	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03696	0.28280	0.01767	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77393	0.75859	0.01926	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29546	0.01420	0.01329	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70984	0.62520	0.35042	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41712	0.07455	0.34519	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97019	0.35047	0.35032	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35825	0.93216	0.68629	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.09948	0.40437	0.68408	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64286	0.68477	0.68582	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03409	0.75585	0.01927	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.29740	0.28353	0.01369	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77110	0.01532	0.01804	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.71344	0.08608	0.35041	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.96672	0.61878	0.35325	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42731	0.35374	0.34690	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36747	0.42310	0.68121	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63391	0.95902	0.68558	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10483	0.70272	0.68769	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.29638	0.94391	0.35905	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10748	0.93899	0.36138	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.06323	0.86770	0.31704	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.09178	0.92766	0.43224	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.18011	0.01725	0.33840	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.22124	0.87397	0.36904	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.22398	0.85158	0.43067	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.01530	0.01910	0.31663	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.92899	0.94834	0.37178	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.87697	0.85921	0.35198	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.89677	0.98066	0.45640	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.02032	0.99464	0.24859	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.06652	0.10926	0.33251	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.92528	0.07188	0.45657	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.80347	0.93419	0.45876	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.94229	0.95204	0.54119	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.88342	0.93824	0.59612	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.94049	0.87066	0.53264	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.06118	0.04706	0.56578	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.11661	0.07550	0.50663	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.05557	0.12184	0.58664	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.11920	0.01604	0.63844	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.12663	0.94260	0.61649	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.06519	0.98755	0.69830	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.23628	0.11523	0.66084	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.22999	0.18718	0.68727	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.29077	0.14528	0.60168	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.28012	0.09215	0.71049	Biso	1.000	H

Methylation (MeOH) of 2-tert-butyl-propylene->; E= -1009.329 eV; ZPVE= 7.127eV;
frequencies =393.9i, 40.2, 41.2, 52.5, 58.5, 71.9, 90.1, 105.4, 131.4, 147.6,
169.1, 183.8, 209.9, 242.9, 246.7, 268.0, 273.7, 284.1, 292.1, 298.8, 308.8, 339.8,
349.4, 371.6, 390.3, 402.9, 462.8, 476.9, 548.4, 562.8, 573.6, 575.3, 635.3, 662.4,
669.8, 689.1, 771.9, 814.6, 830.8, 907.0, 916.2, 917.5, 928.3, 931.2, 955.7, 978.9,
985.4, 996.8, 1005.2, 1007.0, 1020.2, 1027.8, 1088.1, 1161.8, 1171.4, 1190.8,
1278.5, 1334.0, 1344.0, 1346.1, 1348.9, 1353.6, 1372.9, 1385.8, 1412.9, 1426.6,
1431.5, 1438.0, 1439.8, 1451.6, 1458.7, 1472.8, 1561.4, 1610.5, 2964.9, 2968.3,
2970.1, 2973.6, 3024.5, 3035.8, 3041.9, 3045.8, 3048.7, 3054.2, 3057.0, 3061.9,
3063.1, 3069.8, 3071.6, 3155.1, 3255.9, 3259.5, 3541.6 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
```

_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01635	0.24370	0.09029	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78822	0.78722	0.09345	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24599	0.01533	0.08646	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23809	0.01010	0.87795	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78373	0.78263	0.88578	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01108	0.24112	0.88338	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67804	0.57382	0.42347	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44628	0.11641	0.42132	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91330	0.34307	0.42299	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91453	0.34842	0.21757	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45003	0.11534	0.21594	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68344	0.57614	0.21782	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34312	0.90155	0.75938	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11430	0.44533	0.75465	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57760	0.67840	0.75629	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58532	0.68445	0.55335	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11386	0.44652	0.55339	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34504	0.90117	0.55098	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01072	0.77934	0.88485	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24059	0.23965	0.87906	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78491	0.01117	0.88385	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78727	0.01470	0.09223	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24628	0.24357	0.08668	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01778	0.78736	0.09288	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68390	0.11982	0.21808	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91376	0.57814	0.21963	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45168	0.34889	0.21597	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44206	0.34807	0.41946	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90787	0.57265	0.42569	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68098	0.11957	0.42120	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34937	0.45944	0.54919	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57818	0.91145	0.55253	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11084	0.67993	0.55487	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11436	0.67852	0.75866	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57611	0.90933	0.75632	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34538	0.45012	0.75424	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91852	0.11302	0.10982	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91992	0.82102	0.10991	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21281	0.11285	0.10716	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10806	0.90882	0.86134	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81909	0.91391	0.86576	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10987	0.20953	0.86556	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57367	0.44678	0.43795	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58911	0.15878	0.42938	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88574	0.44517	0.44012	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78361	0.25100	0.20107	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48105	0.24749	0.20729	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78263	0.54412	0.20259	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24489	0.77200	0.78294	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24650	0.48226	0.77199	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54508	0.77773	0.76539	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45313	0.58903	0.53817	Biso	1.000	O

O17	1.0000	0.12836	0.57157	0.54739	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44337	0.86629	0.53945	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99941	0.33066	0.15281	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70414	0.68129	0.15515	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35774	0.03877	0.14027	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32581	0.99156	0.81791	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67563	0.69702	0.82630	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03095	0.34759	0.82299	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66752	0.66480	0.48668	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36237	0.00382	0.49074	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01828	0.36030	0.48490	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02755	0.68925	0.82606	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32530	0.34459	0.81634	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67741	0.98911	0.82385	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70089	0.03605	0.15111	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35336	0.33090	0.14597	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99798	0.68369	0.15705	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35946	0.37469	0.48050	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00761	0.66291	0.49079	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65622	0.01335	0.48568	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13854	0.25725	0.11350	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77521	0.89472	0.12182	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13942	0.89541	0.11841	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24865	0.12962	0.84952	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88886	0.76487	0.85918	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89088	0.13285	0.85550	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79485	0.57699	0.45024	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42130	0.22606	0.44331	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80629	0.22271	0.44952	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92914	0.47129	0.19489	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56412	0.11050	0.19449	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56388	0.46777	0.19042	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46543	0.91692	0.78439	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09809	0.55356	0.76997	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46654	0.55831	0.77998	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60189	0.80808	0.53183	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23282	0.45741	0.52523	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22455	0.79075	0.51841	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01088	0.27494	0.98687	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75258	0.75324	0.99020	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27105	0.01220	0.98162	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68477	0.61426	0.32064	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39773	0.06375	0.31230	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95098	0.34521	0.32004	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33525	0.92648	0.65534	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07798	0.39678	0.65378	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62196	0.67808	0.65563	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01553	0.75164	0.98947	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27818	0.27290	0.98219	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75418	0.01160	0.98805	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68957	0.08132	0.31918	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94682	0.61497	0.32357	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41021	0.35656	0.31556	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34465	0.41535	0.65069	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61488	0.95413	0.65506	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08430	0.69758	0.65716	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.28520	0.93142	0.32068	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09825	0.90771	0.35766	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03336	0.82050	0.34579	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.13437	0.93362	0.42345	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13190	0.96758	0.30316	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.21322	0.85663	0.32891	Biso	1.000	O
H5	1.0000	0.22102	0.82920	0.38742	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.95326	0.93521	0.37202	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01878	0.02782	0.42437	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.01633	0.02155	0.52556	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.09494	0.13973	0.38120	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.18457	0.16465	0.39131	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.08491	0.20776	0.41130	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.07904	0.13778	0.30960	Biso	1.000	H

H9	1.0000	0.94433	0.94610	0.30120	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.89108	0.85429	0.40085	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.94522	0.07550	0.55666	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.98296	0.16456	0.53665	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.94031	0.07224	0.62962	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.85854	0.02916	0.53013	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.13665	0.08981	0.56501	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.13111	0.08535	0.63788	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.17899	0.17963	0.54623	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.19200	0.05658	0.54438	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.95901	0.89948	0.56100	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.96145	0.90149	0.63397	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.00186	0.85353	0.53892	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.86952	0.84958	0.54131	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of ethene: ^; E= -941.255 eV; ZPVE= 4.139eV; frequencies
=329.9i, 27.5, 52.3, 59.6, 70.2, 73.0, 87.2, 100.6, 136.5, 145.8, 160.0, 200.4,
233.8, 277.0, 282.9, 293.4, 347.5, 388.2, 554.3, 559.1, 579.6, 633.0, 667.8, 679.2,
817.1, 853.3, 970.6, 977.1, 1010.5, 1019.3, 1040.1, 1040.6, 1050.6, 1096.3, 1125.3,
1130.4, 1197.5, 1314.0, 1339.7, 1344.6, 1364.3, 1414.8, 1427.0, 1440.6, 1445.4,
1575.6, 2952.7, 2997.0, 3026.4, 3052.7, 3064.2, 3068.9, 3147.4, 3172.7, 3186.3,
3234.6, 3263.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00009	0.24416	0.09375	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77128	0.78686	0.09780	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23007	0.01663	0.09101	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22182	0.00923	0.88291	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.76738	0.78102	0.89081	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99490	0.24075	0.88788	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66030	0.57086	0.42832	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43132	0.11378	0.42451	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.89828	0.34243	0.42679	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90217	0.35086	0.22266	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43853	0.11857	0.21783	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.66674	0.57586	0.22179	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.32925	0.90441	0.76193	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.09977	0.44561	0.76063	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56170	0.67713	0.76057	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.56692	0.68157	0.55713	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.09739	0.44501	0.55756	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.32873	0.90348	0.55558	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99522	0.77845	0.89103	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22579	0.23947	0.88371	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.76894	0.01045	0.88785	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77133	0.01544	0.09575	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23097	0.24473	0.09001	Biso	1.000	Si

Si23	1.0000	0.00204	0.78806	0.09858	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.66683	0.12069	0.22096	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89674	0.57676	0.22312	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43464	0.35111	0.22068	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.42449	0.34631	0.42242	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89005	0.56890	0.43092	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66228	0.11640	0.42572	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33162	0.45554	0.55350	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56106	0.91003	0.55567	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09188	0.67619	0.56069	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.09643	0.67630	0.76282	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.55926	0.90750	0.76064	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33005	0.44876	0.75916	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90263	0.11346	0.11366	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90295	0.82022	0.11447	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.19647	0.11386	0.11094	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09179	0.90785	0.86693	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80265	0.91244	0.87199	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09548	0.21124	0.87239	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.55662	0.44337	0.44307	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57267	0.15670	0.44460	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.86671	0.44147	0.44744	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77191	0.25039	0.21132	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46212	0.24830	0.21530	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76661	0.54496	0.20532	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.22767	0.77433	0.77804	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23108	0.48009	0.77863	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.52910	0.77625	0.77057	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.43537	0.58495	0.54122	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11305	0.57052	0.54791	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42740	0.86948	0.54011	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98550	0.33156	0.15751	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68767	0.68274	0.16126	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34198	0.04139	0.14502	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.30995	0.99073	0.82356	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66083	0.69618	0.82967	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01412	0.34625	0.82680	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.64971	0.66223	0.49082	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.33864	0.99952	0.49008	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.99903	0.35656	0.49204	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01331	0.68884	0.83297	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31104	0.34292	0.82027	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66206	0.98815	0.82689	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68570	0.03666	0.15575	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33647	0.33217	0.15049	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98349	0.68615	0.16470	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34217	0.36919	0.48683	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99178	0.66191	0.49343	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64322	0.01109	0.48930	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12293	0.25849	0.11456	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75896	0.89512	0.12463	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12298	0.89735	0.12420	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23161	0.12822	0.85443	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87294	0.76316	0.86585	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87593	0.13129	0.85949	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.77810	0.57552	0.45458	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.40256	0.22226	0.43891	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79113	0.21906	0.44456	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91236	0.47095	0.19527	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55407	0.12074	0.18762	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54783	0.46799	0.19267	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.44851	0.91430	0.79026	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08622	0.55471	0.77935	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45122	0.55690	0.78489	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58055	0.80389	0.53542	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21544	0.45399	0.52886	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.20645	0.79072	0.53449	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99186	0.27517	0.99084	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73447	0.75034	0.99506	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.25484	0.01131	0.98659	Biso	1.000	O

O58	1.0000	0.66739	0.61103	0.32525	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39658	0.06092	0.31415	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94383	0.35653	0.32477	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33124	0.94009	0.65911	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06387	0.40037	0.65922	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60413	0.67626	0.65940	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00083	0.75121	0.99579	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26625	0.27400	0.98618	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73759	0.01273	0.99181	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.65692	0.07526	0.32207	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92882	0.60872	0.32800	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39505	0.36360	0.31970	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.32784	0.41411	0.65559	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59552	0.95087	0.65881	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.05482	0.68309	0.66235	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.31464	0.91379	0.30022	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.12884	0.88053	0.34927	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.06755	0.79062	0.34801	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.18867	0.91487	0.40459	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.14732	0.93108	0.28948	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.24740	0.83779	0.28813	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.98481	0.91198	0.36473	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05262	0.94819	0.43766	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.26489	0.74840	0.31984	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.18424	0.66866	0.31244	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.29108	0.75943	0.38988	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.32949	0.74393	0.27880	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.91175	0.82640	0.36115	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.12151	0.03572	0.44439	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.99716	0.96844	0.30911	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.03499	0.89265	0.49489	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of propene: ^; E= -958.292 eV; ZPVE= 4.873eV; frequencies
=349.9i, 12.5, 25.2, 61.5, 78.1, 93.8, 107.4, 121.0, 129.4, 136.9, 151.3, 175.5,
189.8, 222.4, 254.5, 273.8, 285.7, 323.9, 351.0, 403.8, 420.3, 561.5, 573.1, 632.2,
661.6, 681.8, 709.8, 899.0, 908.1, 920.8, 950.3, 966.7, 996.0, 1005.1, 1015.8,
1032.8, 1047.5, 1110.5, 1118.4, 1125.8, 1176.1, 1278.3, 1333.5, 1343.8, 1358.2,
1381.3, 1403.2, 1408.9, 1415.3, 1437.9, 1442.3, 1450.0, 1584.7, 2942.0, 2951.0,
2991.0, 3024.3, 3034.9, 3045.7, 3049.0, 3055.6, 3065.1, 3080.8, 3149.5, 3234.8,
3242.1 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.00297	0.23922	0.08846	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77548	0.78260	0.09297	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23457	0.01159	0.08485	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22568	0.00518	0.87786	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77130	0.77695	0.88535	Biso	1.000	Si

Si6	1.0000	0.99787	0.23691	0.88245	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66470	0.56745	0.42344	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43613	0.11195	0.42078	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90222	0.33698	0.42211	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90345	0.34484	0.21680	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44014	0.11442	0.21244	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67011	0.57234	0.21768	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33195	0.89875	0.75707	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10248	0.44011	0.75416	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56509	0.67287	0.75609	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57344	0.67840	0.55309	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10150	0.44123	0.55236	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33296	0.89599	0.55004	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99683	0.77159	0.88620	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22829	0.23424	0.87806	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77239	0.00599	0.88241	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77418	0.01020	0.09034	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23380	0.23879	0.08511	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00380	0.78148	0.09252	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67111	0.11474	0.21677	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89884	0.57203	0.21859	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43782	0.34455	0.21444	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.42730	0.34034	0.41925	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89295	0.56368	0.42606	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66832	0.11267	0.42010	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33614	0.45267	0.54822	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56428	0.90429	0.55118	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09509	0.67290	0.55545	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10011	0.67236	0.75734	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56235	0.90285	0.75598	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33299	0.44327	0.75327	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90516	0.10874	0.10814	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90700	0.81635	0.11008	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20121	0.10865	0.10705	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09594	0.90136	0.86600	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80605	0.90810	0.86567	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09880	0.20819	0.86597	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.55819	0.44130	0.43666	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57871	0.15463	0.43102	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87235	0.43712	0.44220	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77290	0.24548	0.20293	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47001	0.24566	0.20078	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76828	0.53915	0.20033	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23124	0.76888	0.77566	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23376	0.47439	0.77255	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53160	0.77140	0.76614	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44211	0.58096	0.53769	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11354	0.56527	0.54567	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42953	0.85895	0.53672	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98800	0.32665	0.15203	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69083	0.67778	0.15549	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34498	0.03321	0.14012	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31219	0.98652	0.81641	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66275	0.69104	0.82628	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01660	0.34247	0.82146	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65662	0.65925	0.48723	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34924	0.99576	0.48627	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00620	0.35314	0.48464	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01583	0.68301	0.82738	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31454	0.33798	0.81497	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66534	0.98388	0.82177	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68772	0.03124	0.14939	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33913	0.32779	0.14533	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98589	0.68059	0.15957	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34329	0.36612	0.47941	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99365	0.65690	0.48922	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64338	0.00680	0.48503	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12545	0.25244	0.10908	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76179	0.89011	0.11950	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12708	0.89002	0.11124	Biso	1.000	O

O40	1.0000	0.23146	0.12194	0.84714	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87660	0.75962	0.85796	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87913	0.12710	0.85407	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.77947	0.56684	0.45092	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.40895	0.21977	0.44637	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79574	0.21458	0.44481	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91500	0.46607	0.19179	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55370	0.10911	0.19042	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54892	0.46543	0.19161	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45195	0.91045	0.78544	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08889	0.54970	0.77016	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45419	0.55189	0.77805	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58759	0.80072	0.53042	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22186	0.45515	0.52448	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.20983	0.78579	0.52653	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99534	0.27090	0.98552	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74044	0.74702	0.98979	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26486	0.01375	0.98042	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67378	0.60976	0.32094	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39097	0.06620	0.31017	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94258	0.34603	0.31911	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33205	0.93103	0.65364	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06691	0.39247	0.65310	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61049	0.67418	0.65556	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99595	0.73906	0.99031	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26817	0.26686	0.98081	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74091	0.00743	0.98628	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67125	0.07230	0.31757	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93020	0.60442	0.32341	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39511	0.34541	0.31496	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33019	0.40754	0.64963	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59889	0.94587	0.65412	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06121	0.68465	0.65717	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27441	0.94342	0.30189	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10301	0.90666	0.38698	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03695	0.81908	0.37758	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16911	0.92682	0.43570	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.11267	0.96863	0.33734	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20029	0.87014	0.29676	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.98158	0.91435	0.47039	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.06128	0.02428	0.48846	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.14389	0.06299	0.56216	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13528	0.99317	0.60404	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.13223	0.12325	0.60362	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.23147	0.11190	0.53672	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.22248	0.77820	0.30610	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.14200	0.70101	0.32028	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.28282	0.79318	0.36002	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.25643	0.76696	0.24290	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.96686	0.84640	0.51650	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.06686	0.09048	0.44373	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.91616	0.89473	0.42051	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of 1-butene: ^; E= -974.998 eV; ZPVE= 5.634eV; frequencies
=345.5i, 17.4, 35.5, 47.2, 58.8, 69.0, 78.5, 85.1, 103.2, 124.5, 132.3, 148.2,
159.3, 177.0, 214.5, 254.1, 262.4, 276.6, 308.7, 349.9, 395.5, 405.1, 429.6, 560.8,
574.4, 632.8, 667.6, 685.7, 751.1, 791.8, 861.9, 898.0, 940.3, 960.9, 987.8, 990.0,
1006.2, 1010.4, 1024.4, 1039.4, 1052.7, 1108.2, 1115.9, 1127.8, 1173.3, 1245.6,
1271.7, 1290.5, 1336.6, 1351.2, 1353.8, 1405.8, 1409.6, 1414.0, 1426.6, 1437.0,
1441.2, 1449.2, 1450.3, 1579.8, 2944.6, 2950.0, 2975.5, 3003.6, 3022.2, 3040.3,
3046.8, 3051.6, 3056.0, 3057.9, 3067.5, 3077.9, 3150.8, 3234.0, 3247.7 cm^-1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.00441 0.24128 0.08889 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.77690 0.78457 0.09336 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.23593 0.01359 0.08547 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.22725 0.00694 0.87833 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.77304 0.77873 0.88563 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.99956 0.23847 0.88300 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.66648 0.56972 0.42401 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.43743 0.11349 0.42119 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.90400 0.33871 0.42237 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90530 0.34691 0.21738 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44192 0.11670 0.21294 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67161 0.57464 0.21841 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.33371 0.90076 0.75737 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.10402 0.44185 0.75484 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.56639 0.67462 0.75687 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.57475 0.68015 0.55340 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.10311 0.44288 0.55309 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.33447 0.89796 0.55043 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.99881 0.77390 0.88657 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23052 0.23652 0.87911 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.77445 0.00785 0.88256 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.77602 0.01236 0.09075 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.23561 0.24115 0.08568 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.00545 0.78372 0.09317 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67269 0.11654 0.21720 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90035 0.57408 0.21916 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.43929 0.34665 0.21550 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.42903 0.34215 0.42013 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.89462 0.56538 0.42650 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.66980 0.11417 0.42036 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.33823 0.45486 0.54880 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.56610 0.90643 0.55179 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.09687 0.67449 0.55612 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10208 0.67422 0.75796 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.56430 0.90514 0.75638 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.33497 0.44585 0.75439 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.90688 0.11085 0.10918 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.90832 0.81814 0.11064 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.20252 0.11076 0.10710 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.09732 0.90375 0.86569 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.80788 0.90984 0.86565 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10083 0.21000 0.86756 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.55986 0.44372 0.43712 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58003 0.15583 0.43154 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87372 0.43866 0.44221 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77486 0.24720 0.20385 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.47180 0.24801 0.20171 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.76978 0.54139 0.20121 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.23334 0.77066 0.77587 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.23526 0.47627 0.77338 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.53369 0.77375 0.76654 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.44357 0.58323 0.53647 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.11583 0.56717 0.54640 Biso 1.000 O
O18 1.0000 0.43135 0.86116 0.53748 Biso 1.000 O

O19	1.0000	0.98980	0.32908	0.15227	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69217	0.67978	0.15587	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34682	0.03595	0.14037	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31377	0.98823	0.81699	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66475	0.69296	0.82638	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01838	0.34402	0.82204	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65883	0.66157	0.48810	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35020	0.99710	0.48629	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00763	0.35496	0.48538	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01814	0.68532	0.82808	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31595	0.33965	0.81522	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66723	0.98603	0.82229	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68917	0.03331	0.14938	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34045	0.32968	0.14646	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98726	0.68240	0.15987	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34510	0.36742	0.48085	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99517	0.65802	0.49003	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64541	0.00861	0.48546	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12717	0.25493	0.10891	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76338	0.89216	0.11997	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12842	0.89237	0.11268	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23402	0.12437	0.84821	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87820	0.76108	0.85847	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88139	0.12857	0.85378	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78127	0.56888	0.45124	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41144	0.22190	0.44690	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79743	0.21619	0.44451	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91612	0.46787	0.19250	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55558	0.11156	0.19075	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55030	0.46769	0.19272	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45387	0.91276	0.78569	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09043	0.55141	0.77103	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45555	0.55437	0.78061	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58952	0.80285	0.53138	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22316	0.45597	0.52539	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21143	0.78743	0.52709	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99565	0.27207	0.98593	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74206	0.74920	0.99011	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26548	0.01442	0.98102	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67572	0.61258	0.32161	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39254	0.06795	0.31048	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94514	0.34838	0.31952	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33357	0.93320	0.65402	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06836	0.39421	0.65381	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61009	0.67425	0.65608	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99854	0.74220	0.99080	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27120	0.26991	0.98159	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74355	0.00972	0.98651	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67231	0.07341	0.31785	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93221	0.60686	0.32393	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39644	0.34745	0.31595	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33419	0.41207	0.65062	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60104	0.94837	0.65462	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06292	0.68624	0.65781	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27663	0.94412	0.30197	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09957	0.90190	0.38332	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03444	0.81538	0.36866	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16174	0.91795	0.43459	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.11351	0.96761	0.33585	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20323	0.87042	0.29575	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.97066	0.90096	0.46331	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04943	0.01013	0.48431	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.12972	0.04651	0.55995	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.12432	0.97257	0.59423	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.21699	0.09804	0.53430	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.22627	0.77917	0.30561	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.14589	0.70145	0.31896	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.28567	0.79424	0.36029	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.26172	0.76860	0.24294	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.95559	0.83108	0.50739	Biso	1.000	H

H11	1.0000	0.05505	0.07845	0.44207	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.90695	0.88291	0.41226	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.10660	0.11967	0.62532	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.02341	0.07033	0.65738	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.10920	0.19245	0.59152	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.17216	0.15233	0.67697	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of iso-butene:>; E= -975.334 eV; ZPVE= 5.614eV; frequencies
=388.7i, 34.3, 40.4, 69.4, 73.4, 87.5, 94.3, 101.7, 115.6, 130.6, 150.5, 162.3,
173.7, 178.0, 199.2, 265.8, 273.0, 279.1, 327.2, 346.9, 395.5, 405.6, 435.3, 463.6,
563.0, 573.2, 626.1, 663.3, 683.5, 783.0, 815.1, 913.5, 920.6, 943.9, 951.9, 978.6,
980.3, 1001.7, 1015.8, 1037.4, 1047.7, 1050.5, 1116.0, 1120.3, 1128.3, 1281.3,
1339.4, 1348.2, 1353.3, 1356.5, 1371.6, 1399.6, 1408.4, 1410.5, 1415.7, 1427.6,
1442.2, 1446.5, 1450.4, 1581.3, 2947.8, 2952.7, 2954.6, 2997.3, 3001.8, 3007.2,
3033.2, 3042.8, 3054.3, 3055.1, 3059.2, 3077.2, 3147.0, 3242.6, 3244.8 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00530 0.24040 0.09045 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.77689 0.78347 0.09449 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.23577 0.01280 0.08719 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.22732 0.00601 0.87982 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.77269 0.77777 0.88688 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.99986 0.23711 0.88394 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.66679 0.56907 0.42471 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.43709 0.11277 0.42288 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.90400 0.33821 0.42360 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.90542 0.34583 0.21874 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.44229 0.11564 0.21431 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.67243 0.57393 0.21941 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.33351 0.89938 0.75906 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.10394 0.44099 0.75626 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.56676 0.67370 0.75759 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.57474 0.67967 0.55468 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.10295 0.44243 0.55419 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.33428 0.89790 0.55229 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.99879 0.77335 0.88777 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.22954 0.23485 0.87930 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.77336 0.00665 0.88455 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.77594 0.01125 0.09241 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.23524 0.24016 0.08701 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.00570 0.78281 0.09448 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.67266 0.11599 0.21871 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.90079 0.57344 0.22038 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.43927 0.34594 0.21637 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.42882 0.34208 0.41998 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.89483 0.56549 0.42777 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.66930 0.11410 0.42253 Biso 1.000 Si
```


Si30	1.0000	0.33767	0.45408	0.54998	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56571	0.90566	0.55306	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09636	0.67393	0.55750	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10129	0.67276	0.75932	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56374	0.90358	0.75793	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33440	0.44436	0.75497	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90702	0.10998	0.10986	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90819	0.81668	0.11205	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20271	0.11011	0.10913	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09725	0.90321	0.86714	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80709	0.90888	0.86745	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09965	0.20715	0.86588	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56007	0.44262	0.43597	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57973	0.15590	0.43462	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87486	0.43892	0.44285	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77486	0.24657	0.20511	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47144	0.24682	0.20434	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77036	0.54055	0.20149	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23264	0.76930	0.77660	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23536	0.47568	0.77447	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53360	0.77236	0.76807	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44310	0.58266	0.53964	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11497	0.56633	0.54673	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43119	0.86121	0.53827	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98939	0.32801	0.15308	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69189	0.67854	0.15675	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34670	0.03519	0.14202	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31388	0.98644	0.81939	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66444	0.69161	0.82771	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01826	0.34272	0.82321	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65721	0.65976	0.48867	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34936	0.99685	0.48813	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00738	0.35364	0.48670	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01775	0.68446	0.82945	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31592	0.33914	0.81674	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66661	0.98493	0.82376	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68988	0.03214	0.15215	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34217	0.32943	0.14573	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98807	0.68154	0.16105	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34596	0.36831	0.48109	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99544	0.65837	0.49093	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64549	0.00845	0.48729	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12739	0.25375	0.11322	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76398	0.89132	0.12147	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12825	0.89177	0.11498	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23510	0.12364	0.84926	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87814	0.76056	0.85992	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88013	0.12795	0.85679	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78086	0.56753	0.45295	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41002	0.22115	0.44598	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79714	0.21609	0.44619	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91695	0.46724	0.19466	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55601	0.11117	0.19075	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55099	0.46664	0.19459	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45314	0.91047	0.78773	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08980	0.55011	0.77306	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45576	0.55284	0.77955	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58881	0.80197	0.53206	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22285	0.45547	0.52591	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21141	0.78693	0.52959	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99986	0.27194	0.98718	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74182	0.74804	0.99136	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26486	0.01350	0.98277	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67774	0.61277	0.32244	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39420	0.06561	0.31196	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94511	0.34628	0.32083	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33466	0.93323	0.65595	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06845	0.39408	0.65499	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61203	0.67522	0.65701	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99915	0.74191	0.99205	Biso	1.000	O

O65	1.0000	0.26728	0.26769	0.98243	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74183	0.00791	0.98851	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67103	0.07360	0.31978	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93191	0.60689	0.32510	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39423	0.34676	0.31613	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33144	0.40882	0.65130	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60008	0.94671	0.65612	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06140	0.68373	0.65924	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.28418	0.93948	0.30352	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10644	0.89949	0.37255	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.04026	0.81207	0.36329	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16448	0.92241	0.42818	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.11926	0.96137	0.32185	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.21045	0.86577	0.29646	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.97663	0.91558	0.44401	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04996	0.02863	0.45887	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.12513	0.06903	0.53844	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.11217	0.99965	0.58280	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.10926	0.12926	0.57596	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.21509	0.11711	0.51857	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.06043	0.11704	0.39480	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.14950	0.17290	0.37517	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.03467	0.17292	0.42790	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.00781	0.08088	0.33535	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22894	0.77228	0.31182	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.14633	0.69668	0.32388	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.28457	0.78687	0.36909	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.26660	0.75875	0.25165	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.96120	0.85302	0.49546	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.91468	0.88882	0.39026	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of n-butene:o; E= -975.249 eV; ZPVE= 5.628eV; frequencies
=332.0i, 32.1, 44.1, 46.6, 60.0, 90.5, 108.0, 124.5, 144.2, 158.5, 161.1, 178.2,
189.8, 207.6, 216.1, 242.3, 264.0, 278.8, 298.2, 310.6, 348.9, 363.3, 404.5, 490.0,
556.7, 576.7, 628.3, 658.8, 684.5, 807.1, 852.6, 908.2, 933.2, 960.8, 978.1, 982.7,
1002.9, 1033.3, 1038.6, 1042.3, 1083.9, 1102.0, 1108.9, 1129.5, 1146.2, 1284.8,
1288.2, 1326.8, 1359.7, 1361.6, 1362.1, 1408.8, 1415.4, 1417.9, 1419.8, 1425.3,
1440.1, 1440.9, 1454.4, 1608.7, 2956.2, 2958.4, 2959.1, 3015.4, 3017.6, 3029.3,
3031.6, 3037.8, 3044.2, 3055.6, 3058.1, 3061.9, 3099.6, 3217.0, 3253.5 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00534	0.23767	0.08484	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77868	0.78223	0.08829	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23764	0.00971	0.08130	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22962	0.00460	0.87506	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77473	0.77768	0.88017	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00078	0.23619	0.87871	Biso	1.000	Si

Si7	1.0000	0.66926	0.57049	0.41830	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44018	0.11391	0.41952	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90480	0.33701	0.41831	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90396	0.34289	0.21207	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44259	0.11483	0.20983	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67273	0.57252	0.21369	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33410	0.89717	0.75293	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10471	0.43940	0.74933	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56751	0.67174	0.75223	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57650	0.67769	0.54947	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10417	0.44070	0.54805	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33567	0.89606	0.54514	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99914	0.77107	0.88173	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23005	0.23307	0.87461	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77423	0.00560	0.87815	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77551	0.00839	0.08602	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23563	0.23684	0.08187	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00550	0.77953	0.08772	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67317	0.11185	0.21383	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89942	0.56921	0.21333	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44036	0.34195	0.21078	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43116	0.33992	0.41638	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89528	0.56278	0.42159	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67304	0.11072	0.41656	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33919	0.45206	0.54405	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56728	0.90424	0.54726	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09801	0.67268	0.55027	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10198	0.67144	0.75216	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56412	0.90191	0.75220	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33526	0.44260	0.74900	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90639	0.10730	0.10310	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91020	0.81629	0.10613	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20331	0.10635	0.10224	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09948	0.90110	0.86440	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80860	0.90849	0.85991	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09984	0.20481	0.86154	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56072	0.44572	0.42909	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58100	0.14930	0.42706	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87452	0.43651	0.44019	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77356	0.24287	0.19832	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47642	0.24651	0.19183	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76876	0.53662	0.19557	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23316	0.76732	0.77097	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23654	0.47493	0.76681	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53467	0.77080	0.76163	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44571	0.58017	0.53316	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11548	0.56442	0.54152	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43380	0.86144	0.52966	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98931	0.32429	0.14855	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69301	0.67583	0.14911	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34613	0.03076	0.13918	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31411	0.98517	0.81177	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66550	0.69055	0.82227	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02055	0.34199	0.81756	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66157	0.66172	0.48327	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35020	0.99684	0.48329	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01022	0.35337	0.47913	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01815	0.68316	0.82204	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31525	0.33716	0.81125	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66743	0.98383	0.81739	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68868	0.02888	0.14513	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34127	0.32555	0.14205	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98669	0.67840	0.15489	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34573	0.36628	0.47414	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99728	0.65737	0.48329	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65072	0.00580	0.48182	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12692	0.24952	0.10702	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76403	0.88887	0.11585	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13022	0.88670	0.10505	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23522	0.12147	0.84469	Biso	1.000	O

O41	1.0000	0.88025	0.76115	0.85189	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88065	0.12758	0.85120	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78249	0.56732	0.44683	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42050	0.22487	0.45015	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79924	0.21432	0.44174	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91496	0.46331	0.18506	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55373	0.10382	0.19136	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54943	0.46597	0.19210	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45345	0.90831	0.78266	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08979	0.54834	0.76502	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45650	0.55101	0.77457	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59020	0.80011	0.52796	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22530	0.45572	0.52144	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21340	0.78496	0.52167	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00033	0.27104	0.98187	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74514	0.74852	0.98474	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27097	0.01361	0.97718	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68182	0.61543	0.31617	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39233	0.07482	0.30853	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94275	0.34619	0.31472	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33584	0.92941	0.64937	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06823	0.39099	0.64851	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61315	0.67246	0.65183	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99512	0.73589	0.98554	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26898	0.26650	0.97747	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74161	0.00461	0.98203	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67794	0.07069	0.31429	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93047	0.59968	0.31826	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39532	0.33493	0.31166	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33415	0.40722	0.64547	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59957	0.94551	0.65036	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06375	0.68476	0.65193	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26231	0.96785	0.30443	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09841	0.92640	0.40481	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.04068	0.83561	0.40876	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.17556	0.96158	0.44427	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.08715	0.97589	0.35366	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.18619	0.89646	0.30242	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.95347	0.92278	0.48332	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05364	0.00746	0.51683	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11076	0.99877	0.59854	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.07619	0.91055	0.62036	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.09791	0.04576	0.65267	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.20297	0.03837	0.58941	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.88452	0.93640	0.41278	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.92937	0.02023	0.38108	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.80584	0.92590	0.44246	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.85736	0.87003	0.36165	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.20907	0.80418	0.30199	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.13151	0.72694	0.32130	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.27763	0.81954	0.34835	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.23268	0.79377	0.23417	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.91553	0.83950	0.51563	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.08947	0.09203	0.48703	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of 2-pentene:~; E= -991.960 eV; ZPVE= 6.378eV; frequencies
=334.5i, 24.8, 44.1, 51.3, 57.2, 73.9, 85.9, 98.8, 109.7, 122.6, 136.3, 143.9,
168.7, 179.9, 186.3, 195.7, 216.0, 242.4, 274.2, 298.4, 307.3, 341.3, 348.3, 406.0,
446.9, 486.7, 559.3, 576.4, 628.9, 661.4, 682.5, 777.4, 833.4, 863.6, 902.2, 918.2,
949.8, 979.6, 996.0, 1002.5, 1010.9, 1032.1, 1036.4, 1048.7, 1094.1, 1103.2,
1110.9, 1128.3, 1151.6, 1231.8, 1271.8, 1300.2, 1312.3, 1324.6, 1355.7, 1357.5,
1359.0, 1408.6, 1414.2, 1420.7, 1425.5, 1434.9, 1440.8, 1441.1, 1452.5, 1454.7,
1606.4, 2953.4, 2956.2, 2958.9, 2970.1, 3002.1, 3013.5, 3026.9, 3031.6, 3035.7,
3040.7, 3045.0, 3048.1, 3060.0, 3064.1, 3089.5, 3222.2, 3258.2 cm^-1

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
```

```

_cell_angle_beta      90
_cell_angle_gamma    120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number    1

```

```

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00764 0.23988 0.08872 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.78052 0.78427 0.09212 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.23998 0.01242 0.08525 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.23206 0.00689 0.87884 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.77688 0.77910 0.88391 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.00322 0.23789 0.88240 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.67105 0.57195 0.42234 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.44081 0.11450 0.42261 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.90711 0.33903 0.42200 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.90745 0.34581 0.21630 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.44507 0.11687 0.21321 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.67544 0.57465 0.21746 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.33679 0.89974 0.75635 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.10721 0.44158 0.75369 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.57001 0.67396 0.75562 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.57818 0.67963 0.55271 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.10591 0.44253 0.55238 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.33739 0.89876 0.54902 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.00218 0.77394 0.88601 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.23335 0.23587 0.87851 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.77725 0.00762 0.88149 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.77849 0.01111 0.08984 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.23856 0.23993 0.08547 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.00810 0.78262 0.09229 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.67605 0.11508 0.21711 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.90279 0.57259 0.21789 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.44268 0.34492 0.21456 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.43280 0.34216 0.41978 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.89774 0.56540 0.42582 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.67460 0.11251 0.42000 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.34058 0.45363 0.54773 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.57001 0.90667 0.55055 Biso 1.000 Si
Si32     1.0000 0.09983 0.67474 0.55507 Biso 1.000 Si
Si33     1.0000 0.10488 0.67383 0.75656 Biso 1.000 Si
Si34     1.0000 0.56714 0.90420 0.75557 Biso 1.000 Si
Si35     1.0000 0.33749 0.44480 0.75272 Biso 1.000 Si
O1       1.0000 0.90931 0.10951 0.10835 Biso 1.000 O
O2       1.0000 0.91196 0.81835 0.11051 Biso 1.000 O
O3       1.0000 0.20645 0.10963 0.10624 Biso 1.000 O
O4       1.0000 0.10152 0.90416 0.86756 Biso 1.000 O
O5       1.0000 0.81082 0.90988 0.86352 Biso 1.000 O
O6       1.0000 0.10309 0.20755 0.86605 Biso 1.000 O
O7       1.0000 0.56249 0.44737 0.43379 Biso 1.000 O
O8       1.0000 0.58153 0.14955 0.43135 Biso 1.000 O
O9       1.0000 0.87727 0.43904 0.44291 Biso 1.000 O
O10      1.0000 0.77693 0.24610 0.20249 Biso 1.000 O
O11      1.0000 0.47754 0.24841 0.19709 Biso 1.000 O
O12      1.0000 0.77218 0.53971 0.19940 Biso 1.000 O
O13      1.0000 0.23645 0.76953 0.77425 Biso 1.000 O
O14      1.0000 0.23900 0.47717 0.77146 Biso 1.000 O
O15      1.0000 0.53726 0.77301 0.76568 Biso 1.000 O

```

O16	1.0000	0.44758	0.58144	0.53677	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11652	0.56593	0.54626	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43680	0.86579	0.53373	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99222	0.32728	0.15200	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69521	0.67835	0.15347	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34931	0.03361	0.14190	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31662	0.98691	0.81617	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66794	0.69214	0.82564	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02297	0.34414	0.82187	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66352	0.66385	0.48660	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34966	0.99781	0.48617	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01140	0.35482	0.48393	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02210	0.68600	0.82723	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31830	0.33966	0.81496	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67007	0.98584	0.82122	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69152	0.03214	0.14828	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34393	0.32889	0.14570	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98995	0.68158	0.15926	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34713	0.36748	0.47821	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99909	0.65945	0.48813	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65380	0.00774	0.48483	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12966	0.25244	0.11016	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76597	0.89106	0.11956	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13204	0.89049	0.11039	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23874	0.12432	0.84880	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88257	0.76251	0.85631	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88393	0.12898	0.85365	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78438	0.56897	0.45091	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42173	0.22625	0.45132	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80052	0.21685	0.44479	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91883	0.46674	0.19044	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55729	0.10808	0.19380	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55267	0.46797	0.19495	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45660	0.91127	0.78521	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09234	0.55056	0.76933	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45899	0.55317	0.77765	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59074	0.80132	0.53048	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22699	0.45787	0.52489	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21579	0.78624	0.52648	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00078	0.27146	0.98563	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74706	0.75027	0.98859	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27212	0.01482	0.98111	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68355	0.61650	0.32009	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39456	0.07373	0.31142	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94650	0.34803	0.31874	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33778	0.93281	0.65310	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07097	0.39287	0.65293	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61544	0.67526	0.65506	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99892	0.73993	0.99002	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27266	0.26956	0.98125	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74603	0.00803	0.98559	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67951	0.07297	0.31749	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93357	0.60419	0.32275	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39784	0.34004	0.31517	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33507	0.40891	0.64922	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60348	0.94733	0.65371	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06550	0.68676	0.65669	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27153	0.95780	0.30590	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09891	0.91707	0.39280	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03934	0.82671	0.39549	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.17010	0.95170	0.43875	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09538	0.96732	0.33843	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.19650	0.88525	0.30227	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.94254	0.91610	0.45374	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03923	0.99762	0.49385	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.08013	0.98568	0.58331	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.04291	0.89531	0.60040	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.17301	0.02337	0.58246	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.88606	0.93313	0.37540	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.93769	0.01682	0.34462	Biso	1.000	H

H8	1.0000	0.80516	0.92556	0.39700	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.86365	0.86672	0.32496	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.21913	0.79305	0.30591	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.14064	0.71614	0.32440	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.28554	0.80887	0.35463	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.24544	0.78122	0.23946	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.89760	0.83250	0.48558	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.08172	0.08319	0.46512	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.04782	0.04614	0.65396	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.95540	0.00934	0.65800	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.08546	0.13698	0.63891	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.07846	0.03852	0.71954	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of trimethyl_ethylene:s; E= -992.163 eV; ZPVE= 6.349eV;
frequencies =361.2i, 14.0, 26.2, 50.5, 68.7, 74.5, 87.5, 93.0, 107.3, 121.6, 133.1,
139.2, 155.0, 164.7, 178.2, 188.3, 217.1, 257.3, 275.9, 300.9, 325.2, 336.1, 348.5,
393.0, 408.1, 462.3, 516.7, 564.0, 573.5, 628.1, 665.5, 685.1, 768.5, 850.3, 907.3,
919.7, 939.8, 956.7, 962.4, 986.1, 1001.1, 1019.8, 1030.7, 1047.7, 1052.3, 1101.9,
1114.1, 1115.9, 1127.7, 1215.7, 1317.4, 1337.2, 1349.8, 1354.0, 1358.6, 1368.4,
1403.9, 1408.7, 1414.1, 1415.7, 1422.7, 1428.0, 1438.9, 1441.6, 1443.1, 1449.2,
1596.8, 2950.9, 2953.4, 2963.8, 2965.6, 3006.5, 3007.9, 3020.2, 3029.8, 3033.1,
3044.0, 3048.5, 3050.6, 3064.6, 3070.8, 3084.9, 3243.5, 3246.7 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00399	0.23891	0.09222	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77723	0.78276	0.09555	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23612	0.01156	0.08811	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22746	0.00587	0.88065	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77259	0.77700	0.88828	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99960	0.23662	0.88598	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66609	0.56732	0.42654	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43537	0.11092	0.42358	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90322	0.33857	0.42521	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90583	0.34536	0.22011	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44167	0.11436	0.21552	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67125	0.57116	0.21944	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33394	0.89939	0.76005	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10394	0.44079	0.75797	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56680	0.67324	0.75850	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57359	0.67874	0.55573	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10209	0.44122	0.55595	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33448	0.89812	0.55313	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99887	0.77328	0.88835	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23030	0.23492	0.88174	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77371	0.00654	0.88575	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77483	0.01031	0.09372	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23471	0.23833	0.08892	Biso	1.000	Si

Si23	1.0000	0.00573	0.78237	0.09509	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67281	0.11538	0.21984	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90070	0.57260	0.22115	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43948	0.34580	0.21745	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43076	0.34241	0.42228	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89582	0.56674	0.42859	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66915	0.11328	0.42369	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33729	0.45310	0.55181	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56654	0.90614	0.55396	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09713	0.67343	0.55844	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10151	0.67256	0.76030	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56408	0.90357	0.75878	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33464	0.44418	0.75670	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90545	0.10898	0.11298	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90906	0.81751	0.11265	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20280	0.10846	0.11099	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09744	0.90309	0.86772	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80699	0.90829	0.86997	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10033	0.20755	0.86992	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56228	0.44013	0.44199	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57745	0.15220	0.43595	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87456	0.43973	0.44412	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77574	0.24543	0.20539	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46933	0.24507	0.20608	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76993	0.53868	0.20257	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23280	0.76938	0.77752	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23549	0.47553	0.77541	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53413	0.77233	0.76815	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44145	0.58256	0.54131	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11552	0.56563	0.54787	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43277	0.86353	0.53786	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99083	0.32775	0.15544	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69367	0.67870	0.15917	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34735	0.03388	0.14247	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31422	0.98657	0.82020	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66464	0.69159	0.82857	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01908	0.34273	0.82545	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65527	0.65895	0.48857	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34661	0.99628	0.48941	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00598	0.35305	0.48856	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01770	0.68432	0.83008	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31602	0.33944	0.81913	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66699	0.98442	0.82478	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68785	0.02999	0.15336	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33918	0.32763	0.14964	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98706	0.68056	0.16138	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34745	0.36858	0.48281	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99732	0.65913	0.49120	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64804	0.00807	0.48804	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12567	0.25059	0.11313	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76305	0.89010	0.12176	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12877	0.89041	0.11574	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23516	0.12366	0.85063	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87822	0.76049	0.86058	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88076	0.12730	0.85716	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78313	0.57133	0.45384	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.40867	0.21968	0.44558	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79568	0.21705	0.44772	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91730	0.46662	0.19554	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55657	0.11189	0.19278	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55095	0.46476	0.19077	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45343	0.91015	0.78903	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09023	0.55011	0.77499	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45582	0.55282	0.78149	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58869	0.80163	0.53371	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22117	0.45201	0.52793	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21272	0.78582	0.53115	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99623	0.26982	0.98920	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74158	0.74586	0.99267	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26483	0.01282	0.98360	Biso	1.000	O

O58	1.0000	0.67203	0.60555	0.32315	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39267	0.06349	0.31273	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94446	0.34619	0.32254	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33590	0.93337	0.65694	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06731	0.39360	0.65691	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61137	0.67346	0.65781	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99893	0.74162	0.99262	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26945	0.26698	0.98479	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74243	0.00909	0.98965	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67215	0.07349	0.32092	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93198	0.60688	0.32563	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40062	0.35247	0.31818	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33230	0.40841	0.65317	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60032	0.94730	0.65706	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06156	0.68277	0.66009	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.27980	0.93978	0.30416	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10345	0.90668	0.37041	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03469	0.81995	0.36368	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16034	0.93020	0.42690	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.11880	0.96626	0.31716	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.20556	0.86654	0.29782	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.96385	0.92760	0.42915	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05111	0.03465	0.44888	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11525	0.05864	0.53430	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.08762	0.98211	0.57469	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.10243	0.11988	0.57328	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.20726	0.09946	0.52251	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.88098	0.89638	0.35433	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.91609	0.95139	0.29594	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.80662	0.90147	0.37683	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.84873	0.80838	0.33305	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.08577	0.13442	0.38923	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.17810	0.18050	0.37891	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.06639	0.19516	0.42207	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.04309	0.11279	0.32459	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.22411	0.77303	0.31309	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.14220	0.69814	0.32824	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.28294	0.78957	0.36841	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.25810	0.75710	0.25183	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.94032	0.86327	0.48107	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of 1-hexene:o; E= -1008.387 eV; ZPVE= 7.155eV; frequencies
=372.0i, 14.7, 35.0, 45.4, 63.3, 64.8, 73.2, 85.2, 89.8, 106.6, 128.0, 134.4,
138.9, 151.2, 159.6, 180.8, 233.6, 247.1, 258.8, 278.4, 290.0, 326.0, 353.6, 360.8,
404.7, 413.0, 465.5, 569.7, 577.8, 628.0, 652.9, 692.8, 712.0, 738.0, 780.2, 881.8,
903.1, 912.6, 943.8, 956.6, 1002.8, 1007.9, 1015.3, 1020.0, 1029.2, 1038.4, 1051.5,
1054.6, 1085.7, 1095.2, 1113.9, 1135.2, 1162.8, 1208.4, 1225.5, 1263.1, 1278.9,
1291.8, 1300.0, 1327.4, 1329.8, 1343.9, 1366.7, 1397.6, 1412.2, 1414.5, 1425.7,
1428.2, 1433.5, 1440.9, 1450.2, 1453.8, 1454.2, 1579.4, 2929.9, 2935.2, 2941.6,
2955.6, 2968.5, 2972.6, 2980.7, 2986.0, 3004.4, 3044.0, 3045.7, 3046.6, 3052.4,
3058.9, 3066.3, 3077.1, 3163.1, 3239.0, 3260.7 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy

```

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00151	0.19639	0.11850	Biso 1.000 Si
Si2	1.0000	0.77478	0.74091	0.11953	Biso 1.000 Si
Si3	1.0000	0.23365	0.96820	0.11410	Biso 1.000 Si
Si4	1.0000	0.22543	0.96351	0.90759	Biso 1.000 Si
Si5	1.0000	0.77048	0.73665	0.91221	Biso 1.000 Si
Si6	1.0000	0.99683	0.19557	0.91217	Biso 1.000 Si
Si7	1.0000	0.66596	0.53157	0.44945	Biso 1.000 Si
Al1	1.0000	0.43584	0.07271	0.45162	Biso 1.000 Al
Si8	1.0000	0.89722	0.29882	0.45131	Biso 1.000 Si
Si9	1.0000	0.89963	0.30282	0.24431	Biso 1.000 Si
Si10	1.0000	0.43908	0.07344	0.24217	Biso 1.000 Si
Si11	1.0000	0.66889	0.53146	0.24550	Biso 1.000 Si
Si12	1.0000	0.33045	0.85701	0.78560	Biso 1.000 Si
Si13	1.0000	0.10035	0.39841	0.78264	Biso 1.000 Si
Si14	1.0000	0.56281	0.63066	0.78429	Biso 1.000 Si
Si15	1.0000	0.56824	0.63654	0.58101	Biso 1.000 Si
Si16	1.0000	0.09935	0.39973	0.58192	Biso 1.000 Si
Si17	1.0000	0.33204	0.85641	0.57776	Biso 1.000 Si
Si18	1.0000	0.99605	0.72944	0.91451	Biso 1.000 Si
Si19	1.0000	0.22639	0.19222	0.90689	Biso 1.000 Si
Si20	1.0000	0.77158	0.96466	0.91076	Biso 1.000 Si
Si21	1.0000	0.77278	0.96697	0.11950	Biso 1.000 Si
Si22	1.0000	0.23202	0.19537	0.11375	Biso 1.000 Si
Si23	1.0000	0.00242	0.73796	0.11936	Biso 1.000 Si
Si24	1.0000	0.67005	0.07053	0.24644	Biso 1.000 Si
Si25	1.0000	0.89578	0.52796	0.24593	Biso 1.000 Si
Si26	1.0000	0.43766	0.30086	0.24260	Biso 1.000 Si
Si27	1.0000	0.43071	0.30038	0.44813	Biso 1.000 Si
Si28	1.0000	0.89172	0.52400	0.45413	Biso 1.000 Si
Si29	1.0000	0.66903	0.07036	0.44861	Biso 1.000 Si
Si30	1.0000	0.33503	0.41142	0.57647	Biso 1.000 Si
Si31	1.0000	0.56453	0.86522	0.58079	Biso 1.000 Si
Si32	1.0000	0.09749	0.63234	0.58263	Biso 1.000 Si
Si33	1.0000	0.09960	0.63115	0.78496	Biso 1.000 Si
Si34	1.0000	0.56141	0.86213	0.78495	Biso 1.000 Si
Si35	1.0000	0.33224	0.40197	0.78161	Biso 1.000 Si
O1	1.0000	0.90338	0.06616	0.13859	Biso 1.000 O
O2	1.0000	0.90674	0.77507	0.13492	Biso 1.000 O
O3	1.0000	0.19877	0.06485	0.13470	Biso 1.000 O
O4	1.0000	0.09538	0.85976	0.89709	Biso 1.000 O
O5	1.0000	0.80593	0.86781	0.89128	Biso 1.000 O
O6	1.0000	0.09642	0.16509	0.89540	Biso 1.000 O
O7	1.0000	0.56142	0.40369	0.45914	Biso 1.000 O
O8	1.0000	0.57739	0.10954	0.45616	Biso 1.000 O
O9	1.0000	0.86220	0.39441	0.47305	Biso 1.000 O
O10	1.0000	0.77005	0.20155	0.22971	Biso 1.000 O
O11	1.0000	0.47387	0.20561	0.22386	Biso 1.000 O
O12	1.0000	0.76476	0.49496	0.22927	Biso 1.000 O
O13	1.0000	0.23024	0.72719	0.80531	Biso 1.000 O
O14	1.0000	0.23199	0.43230	0.79798	Biso 1.000 O
O15	1.0000	0.53153	0.73079	0.79387	Biso 1.000 O
O16	1.0000	0.43570	0.54232	0.56462	Biso 1.000 O
O17	1.0000	0.12055	0.52703	0.57592	Biso 1.000 O
O18	1.0000	0.43121	0.82247	0.56482	Biso 1.000 O
O19	1.0000	0.98695	0.28267	0.18403	Biso 1.000 O
O20	1.0000	0.68997	0.63395	0.17988	Biso 1.000 O
O21	1.0000	0.34351	0.99079	0.17066	Biso 1.000 O
O22	1.0000	0.31108	0.94494	0.84515	Biso 1.000 O
O23	1.0000	0.66317	0.65038	0.85224	Biso 1.000 O
O24	1.0000	0.01690	0.30203	0.85190	Biso 1.000 O
O25	1.0000	0.65070	0.61799	0.51416	Biso 1.000 O
O26	1.0000	0.34788	0.95702	0.51578	Biso 1.000 O
O27	1.0000	0.00278	0.31740	0.51271	Biso 1.000 O
O28	1.0000	0.01389	0.64215	0.85330	Biso 1.000 O

O29	1.0000	0.31164	0.29589	0.84331	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66354	0.94274	0.85166	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68511	0.98735	0.17763	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33669	0.28305	0.17527	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98228	0.63812	0.18822	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34686	0.32953	0.50549	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99564	0.61316	0.51608	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64725	0.96690	0.51499	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12351	0.20840	0.14025	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76158	0.84776	0.14972	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12676	0.84497	0.13797	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23063	0.08024	0.87747	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87594	0.71865	0.88767	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87731	0.08701	0.88354	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78248	0.53552	0.47827	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41662	0.18417	0.48190	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79517	0.17391	0.47466	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91084	0.42240	0.21478	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55012	0.06184	0.22541	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54572	0.42489	0.22306	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45062	0.86888	0.81410	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08755	0.50824	0.79930	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45199	0.51086	0.80958	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58683	0.76094	0.56083	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21507	0.40287	0.55392	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21125	0.74481	0.55257	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99477	0.22884	0.01578	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73773	0.70819	0.01643	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26629	0.97261	0.00985	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67610	0.57533	0.34724	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38729	0.03444	0.34055	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93643	0.30839	0.34786	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32983	0.88798	0.68222	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06124	0.34956	0.68208	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60358	0.62765	0.68301	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99420	0.69327	0.01787	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26592	0.22613	0.00983	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74120	0.96403	0.01520	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67755	0.03059	0.34684	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92814	0.55680	0.35049	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39218	0.29415	0.34359	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33447	0.36881	0.67785	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59964	0.90705	0.68365	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06289	0.64339	0.68426	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.25156	0.96776	0.33694	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.11042	0.04008	0.36531	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.02916	0.97304	0.34180	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.14013	0.03867	0.43179	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.16843	0.10009	0.31688	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.16684	0.93008	0.32682	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.07521	0.17298	0.39078	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.98065	0.08963	0.43164	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.90407	0.04034	0.39142	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97121	0.05839	0.52689	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07145	0.19855	0.32287	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.15079	0.22951	0.42909	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.05235	0.11212	0.56117	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.90892	0.07883	0.55591	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.92964	0.93213	0.54327	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.84953	0.87948	0.50721	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.99147	0.91065	0.51560	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.91323	0.90049	0.64178	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.98551	0.96573	0.68017	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.83755	0.90158	0.66660	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.90292	0.78507	0.65753	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.98193	0.78693	0.63896	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.83435	0.71837	0.61782	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.88609	0.75947	0.72739	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.11081	0.82633	0.37616	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.01938	0.78786	0.36435	Biso	1.000	H

```
H18      1.0000 0.12880 0.84069 0.44759 Biso 1.000 H
H19      1.0000 0.13835 0.76777 0.35204 Biso 1.000 H
```

```
-----
# Methylation (DME) of 2-hexene: E= -1008.504 eV; ZPVE= 7.161eV; frequencies
=345.3i, 24.4, 50.5, 54.1, 63.8, 72.5, 85.4, 99.7, 114.0, 121.7, 126.7, 143.0,
158.0, 171.5, 185.2, 206.2, 234.4, 251.3, 257.2, 279.5, 302.8, 318.3, 330.8, 349.2,
364.0, 407.3, 413.3, 515.9, 570.0, 570.3, 625.8, 654.2, 688.5, 714.2, 801.1, 862.6,
894.0, 904.5, 958.7, 961.8, 1004.3, 1014.4, 1019.6, 1033.2, 1047.1, 1048.9, 1052.2,
1078.6, 1094.5, 1104.2, 1115.3, 1140.1, 1151.8, 1214.1, 1239.0, 1278.4, 1286.2,
1307.3, 1325.4, 1341.0, 1345.5, 1364.3, 1365.8, 1403.3, 1408.1, 1415.2, 1417.6,
1433.4, 1437.0, 1439.3, 1444.7, 1449.0, 1461.8, 1607.4, 2918.1, 2951.7, 2958.7,
2963.7, 2972.8, 2983.0, 2988.5, 2995.8, 3030.5, 3038.2, 3041.9, 3053.2, 3053.8,
3054.8, 3067.0, 3083.9, 3087.9, 3218.6, 3262.6 cm^-1
-----
```

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.99973 0.20490 0.11113 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.77450 0.74893 0.11327 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.23167 0.97589 0.10730 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.22405 0.97136 0.90060 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.76923 0.74406 0.90599 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.99478 0.20317 0.90592 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.66532 0.53725 0.44346 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.43602 0.08087 0.44514 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.89636 0.30665 0.44466 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.89880 0.31067 0.23747 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.43929 0.08245 0.23407 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.66679 0.53905 0.23887 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.32885 0.86475 0.77812 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.09906 0.40612 0.77565 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.56150 0.63828 0.77852 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.56783 0.64492 0.57569 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.09870 0.40658 0.57499 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.33239 0.86352 0.57107 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.99422 0.73760 0.90667 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.22576 0.20016 0.90122 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.76993 0.97306 0.90478 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.77214 0.97569 0.11316 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.23082 0.20285 0.10678 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.00088 0.74527 0.11213 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.66779 0.07751 0.23966 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.89326 0.53386 0.23779 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.43662 0.30956 0.23579 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.43260 0.30901 0.44207 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.89161 0.53119 0.44680 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.66723 0.07880 0.44260 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.33569 0.42232 0.57066 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.56489 0.87319 0.57494 Biso 1.000 Si
```

Si32	1.0000	0.09654	0.63942	0.57579	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.09713	0.63849	0.77714	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56002	0.86978	0.77881	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33046	0.41031	0.77552	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90256	0.07470	0.13279	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90639	0.78343	0.12939	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.19563	0.07168	0.12758	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09409	0.86768	0.88940	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80293	0.87502	0.88680	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09560	0.17356	0.89282	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56562	0.40669	0.45366	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57838	0.12151	0.45337	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.86099	0.40175	0.46844	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76995	0.20772	0.22465	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47273	0.21436	0.21692	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76254	0.50247	0.22263	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.22811	0.73466	0.79645	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23105	0.44180	0.79199	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53037	0.73852	0.78764	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.43367	0.55457	0.56111	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11896	0.53362	0.57010	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43087	0.82828	0.55974	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98683	0.29138	0.17758	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68965	0.64350	0.17494	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34173	0.99932	0.16402	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.30949	0.95232	0.83819	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66108	0.65756	0.84695	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01597	0.30933	0.84470	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.64617	0.62078	0.50859	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34842	0.96265	0.50722	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00226	0.32434	0.50551	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01232	0.64985	0.84615	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.30893	0.30347	0.83651	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66139	0.95050	0.84604	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68379	0.99366	0.17235	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33333	0.28975	0.17045	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.97976	0.64387	0.17979	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35394	0.34409	0.50025	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99681	0.62135	0.50735	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64551	0.97540	0.50899	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12263	0.21778	0.12860	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76093	0.85599	0.14129	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12583	0.85158	0.13091	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.22889	0.08795	0.87025	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87487	0.72762	0.87852	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87650	0.09399	0.87546	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78472	0.54671	0.47107	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.40962	0.18858	0.47420	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79522	0.18075	0.46562	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.90708	0.42815	0.20530	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55024	0.07183	0.21407	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54391	0.43342	0.21397	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.44853	0.87574	0.80706	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08466	0.51526	0.79104	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45055	0.51853	0.80355	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59027	0.77072	0.55486	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21466	0.41042	0.54601	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21143	0.75150	0.54695	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.98836	0.23616	0.00886	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.73833	0.71395	0.01029	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26441	0.98021	0.00296	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67168	0.57986	0.34132	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39144	0.04319	0.33335	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93648	0.32056	0.34116	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32992	0.89755	0.67489	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06147	0.35615	0.67513	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60338	0.63541	0.67750	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99155	0.70169	0.01019	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26919	0.23399	0.00339	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74072	0.97521	0.00906	Biso	1.000	O

O67	1.0000	0.66927	0.03624	0.34062	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92633	0.56056	0.34253	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39509	0.30584	0.33771	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33269	0.37753	0.67164	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59967	0.91517	0.67780	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.05954	0.65072	0.67661	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.25645	0.96922	0.32953	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10945	0.01426	0.39547	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.06772	0.01091	0.33348	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.07240	0.94374	0.44168	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.19674	0.07986	0.40741	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.17153	0.92831	0.32081	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.08764	0.15350	0.44317	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.99184	0.05900	0.47215	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.91854	0.01876	0.42731	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97469	0.01287	0.56429	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.15802	0.19529	0.49009	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.05636	0.05186	0.59993	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.92228	0.04246	0.59868	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.91383	0.88312	0.57143	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.83166	0.84652	0.53685	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.96276	0.85010	0.53687	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.89648	0.84325	0.66772	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.97792	0.87740	0.70290	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.84511	0.87180	0.70397	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.12506	0.81287	0.34822	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.03260	0.77292	0.34474	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.15096	0.80709	0.41610	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.15219	0.76826	0.30228	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.10110	0.21348	0.35761	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.10813	0.29605	0.37071	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.02878	0.16542	0.31307	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.17984	0.23144	0.32378	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.85324	0.75039	0.67196	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of tetra-methyl-ethylene:s; E= -1008.869 eV; ZPVE= 7.094eV;
frequencies =339.5i, 39.4, 41.7, 56.5, 75.6, 77.0, 88.3, 97.1, 103.3, 112.1, 124.4,
145.7, 153.4, 159.4, 164.4, 170.6, 180.9, 187.3, 214.7, 263.2, 277.1, 317.0, 348.4,
362.0, 376.4, 409.1, 415.4, 426.5, 484.9, 501.4, 565.8, 574.1, 628.7, 664.0, 685.2,
690.8, 874.7, 897.5, 909.3, 910.3, 934.0, 950.6, 966.5, 982.0, 994.9, 1009.2,
1031.2, 1042.7, 1050.1, 1109.6, 1117.9, 1126.5, 1153.9, 1160.7, 1255.2, 1331.5,
1353.8, 1354.1, 1357.3, 1360.3, 1370.1, 1407.5, 1408.8, 1416.1, 1418.1, 1422.1,
1424.2, 1431.8, 1440.5, 1441.2, 1444.5, 1456.5, 1460.7, 1590.6, 2955.4, 2959.4,
2961.6, 2966.3, 2967.3, 2996.5, 3018.0, 3021.8, 3023.3, 3037.4, 3041.4, 3042.8,
3063.4, 3073.5, 3077.7, 3086.8, 3103.9, 3232.8, 3256.2 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

```

Si1	1.0000	0.00458	0.23426	0.09155	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77763	0.77843	0.09418	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23656	0.00664	0.08738	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22840	0.00167	0.88034	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77370	0.77361	0.88628	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99991	0.23237	0.88516	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66750	0.56368	0.42333	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43654	0.10826	0.42375	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90186	0.33437	0.42437	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90427	0.33995	0.21881	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44172	0.11033	0.21457	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67208	0.56842	0.21851	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33419	0.89546	0.75839	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10456	0.43650	0.75664	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56736	0.66850	0.75750	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57151	0.67408	0.55565	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10252	0.43622	0.55442	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33526	0.89407	0.55242	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99905	0.76842	0.88748	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22955	0.22958	0.88072	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77370	0.00205	0.88457	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77526	0.00527	0.09272	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23478	0.23327	0.08830	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00536	0.77661	0.09382	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67243	0.10879	0.21971	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89948	0.56653	0.21893	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43976	0.33936	0.21593	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43381	0.33747	0.42053	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89533	0.56160	0.42730	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66969	0.10807	0.42240	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33797	0.44953	0.55152	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56653	0.90135	0.55353	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09785	0.66780	0.55704	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10089	0.66733	0.75829	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56350	0.89810	0.75854	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33481	0.43868	0.75515	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90590	0.10414	0.11123	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90897	0.81194	0.11212	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20319	0.10348	0.11072	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09838	0.89842	0.86882	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80754	0.90453	0.86667	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09947	0.20173	0.86835	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56772	0.43344	0.43151	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57845	0.14785	0.43262	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87061	0.43355	0.44461	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77419	0.23938	0.20523	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47321	0.24173	0.19955	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76916	0.53418	0.20007	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23205	0.76543	0.77337	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23628	0.47111	0.77312	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53392	0.76696	0.76824	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.43723	0.58195	0.54614	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12006	0.56232	0.54609	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43266	0.85798	0.53762	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98980	0.32173	0.15521	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69187	0.67282	0.15551	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34651	0.02729	0.14293	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31439	0.98183	0.81942	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66515	0.68679	0.82761	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02005	0.33844	0.82428	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.64686	0.64731	0.48721	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34810	0.99119	0.48728	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00525	0.34970	0.48719	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01820	0.68023	0.82847	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31564	0.33467	0.81867	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66629	0.97978	0.82436	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68812	0.02514	0.15189	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34051	0.32324	0.14770	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98733	0.67523	0.16037	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35768	0.37355	0.48031	Biso	1.000	O

O35	1.0000	0.99947	0.65332	0.48820	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64795	0.00408	0.48828	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12613	0.24596	0.11345	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76396	0.88564	0.12178	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12907	0.88453	0.11272	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23516	0.11877	0.84943	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87930	0.75704	0.85861	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88011	0.12375	0.85700	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78570	0.57177	0.45372	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41152	0.21688	0.45156	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79613	0.21163	0.44660	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91481	0.46015	0.19180	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55457	0.10294	0.19487	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54990	0.46154	0.19487	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45252	0.90425	0.78836	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09135	0.54590	0.77467	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45662	0.54721	0.77895	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59083	0.79830	0.53216	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21911	0.44161	0.52589	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21281	0.78213	0.53252	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99839	0.26635	0.98850	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74346	0.74406	0.99081	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26758	0.01066	0.98302	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67881	0.60878	0.32142	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39104	0.06598	0.31260	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94322	0.34381	0.32156	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33885	0.93234	0.65573	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06722	0.38955	0.65558	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61337	0.67097	0.65683	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99685	0.73467	0.99145	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26791	0.26124	0.98389	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74239	0.00258	0.98866	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67380	0.06663	0.32041	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92964	0.59806	0.32376	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39625	0.33688	0.31679	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33172	0.40115	0.65185	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60013	0.94158	0.65678	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.05827	0.67368	0.65816	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.26975	0.95045	0.30767	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10146	0.92486	0.38214	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03185	0.83820	0.38709	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16609	0.95706	0.43352	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.10673	0.97526	0.32483	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.19359	0.87869	0.30457	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.95999	0.95124	0.44822	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05616	0.05736	0.45192	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.13116	0.10109	0.53226	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.11330	0.03713	0.58331	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12027	0.16866	0.56280	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.22113	0.14063	0.51369	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.91947	0.87176	0.52643	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.87827	0.78294	0.50503	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.85456	0.88188	0.56244	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.98629	0.88613	0.57386	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.87499	0.91505	0.37377	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.90899	0.96177	0.31162	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.80407	0.92723	0.39436	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.83765	0.82412	0.35957	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.08864	0.14476	0.38010	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.17972	0.18510	0.36505	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.07486	0.21333	0.40430	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.04100	0.11262	0.31813	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.21233	0.78433	0.31458	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.13233	0.71025	0.33441	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.27754	0.80140	0.36469	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.23839	0.76747	0.24976	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of 2-heptene:o; E= -1025.068 eV; ZPVE= 7.920eV; frequencies
=346.3i, 53.9i, 35.6, 48.5, 68.2, 78.7, 79.7, 84.9, 99.8, 114.0, 123.5, 132.1,
136.0, 145.2, 149.2, 171.8, 205.0, 233.4, 238.9, 251.3, 259.2, 280.6, 313.9, 323.9,

331.7, 353.0, 387.1, 409.0, 442.8, 524.1, 566.4, 577.3, 626.4, 651.0, 686.2, 713.7,
 771.8, 831.8, 871.4, 901.9, 920.7, 947.8, 975.2, 979.7, 1005.1, 1014.2, 1022.3,
 1031.9, 1044.9, 1053.3, 1056.4, 1089.6, 1096.0, 1103.3, 1114.0, 1137.9, 1154.1,
 1198.2, 1223.8, 1257.6, 1280.2, 1286.6, 1291.8, 1322.0, 1328.7, 1333.5, 1344.9,
 1364.2, 1371.0, 1402.1, 1410.0, 1414.3, 1416.2, 1431.8, 1435.5, 1441.3, 1442.3,
 1450.1, 1456.0, 1456.4, 1607.3, 2925.0, 2940.8, 2953.5, 2958.5, 2967.5, 2979.3,
 2991.5, 2994.5, 2996.7, 3001.2, 3038.8, 3050.1, 3052.5, 3061.5, 3063.2, 3070.2,
 3084.9, 3087.5, 3106.7, 3243.8, 3254.3 cm⁻¹

 data_image0

_cell_length_a 13.625
 _cell_length_b 13.625
 _cell_length_c 15.067
 _cell_angle_alpha 90
 _cell_angle_beta 90
 _cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
 _symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.99919	0.20125	0.11180	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77176	0.74334	0.11363	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.22956	0.97127	0.11031	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22278	0.96609	0.90295	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.76649	0.73735	0.90837	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99483	0.19786	0.90738	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66534	0.53298	0.44467	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43632	0.07748	0.44666	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.89313	0.30200	0.44618	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.89578	0.30532	0.23788	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43767	0.07688	0.23647	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.66641	0.53468	0.24085	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.32923	0.86108	0.78091	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.09777	0.40094	0.77705	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56054	0.63322	0.78018	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.56342	0.63935	0.57678	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.09969	0.40379	0.57580	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33208	0.86044	0.57413	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99521	0.73234	0.90933	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22695	0.19593	0.90385	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77005	0.96694	0.90580	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77238	0.97089	0.11443	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23081	0.19911	0.10885	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00104	0.74015	0.11322	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.66753	0.07288	0.24056	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89304	0.53007	0.24028	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43735	0.30412	0.23746	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43561	0.30468	0.44398	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89053	0.52654	0.44866	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.66765	0.07493	0.44359	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33627	0.41688	0.57322	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56292	0.86798	0.57643	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09976	0.63367	0.57679	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.09812	0.63257	0.78030	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56055	0.86575	0.78054	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33144	0.40449	0.77677	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90273	0.07075	0.13331	Biso	1.000	O

O2	1.0000	0.90356	0.77536	0.12433	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.19448	0.06786	0.13023	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09286	0.86284	0.88987	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80161	0.86810	0.88659	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09709	0.17013	0.89616	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56974	0.40061	0.45276	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57899	0.11822	0.45065	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.85407	0.39486	0.46785	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76674	0.20375	0.22222	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47377	0.20936	0.21732	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76215	0.49805	0.22517	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.22821	0.73113	0.79895	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.22900	0.43226	0.78927	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53188	0.73496	0.79083	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.42809	0.55143	0.56371	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13271	0.53504	0.56726	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42836	0.82208	0.56328	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98481	0.28664	0.17858	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68895	0.63877	0.17672	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34017	0.99451	0.16614	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31000	0.94790	0.84203	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66196	0.65084	0.84615	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01449	0.30171	0.84417	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.63931	0.61182	0.50966	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35104	0.96027	0.51010	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00239	0.32618	0.50532	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01099	0.64562	0.84567	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31032	0.29874	0.83887	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66239	0.94732	0.84713	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68368	0.98925	0.17299	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33287	0.28485	0.17353	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.97911	0.64030	0.18259	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36001	0.34473	0.50077	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99735	0.61124	0.50993	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64170	0.97001	0.50968	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12291	0.21548	0.12866	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76248	0.85216	0.14420	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12339	0.84819	0.13578	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.22884	0.08321	0.87268	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87325	0.72006	0.88786	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87774	0.08729	0.87739	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78684	0.54752	0.47315	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41185	0.18528	0.47903	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79488	0.17573	0.47104	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.90698	0.42457	0.20742	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54711	0.06284	0.21855	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.54374	0.42861	0.21607	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.44898	0.87153	0.80888	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08811	0.51138	0.79993	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.44892	0.51474	0.80686	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58878	0.76601	0.55529	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.21077	0.39554	0.55154	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.20941	0.75125	0.54946	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.98740	0.23263	0.00964	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.72892	0.70833	0.01179	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26055	0.97355	0.00585	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67157	0.57667	0.34292	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38795	0.03974	0.33557	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.92990	0.31143	0.34214	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32993	0.89473	0.67793	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.05582	0.35698	0.67585	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.59898	0.62924	0.67835	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99974	0.69717	0.01208	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27122	0.22997	0.00583	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74057	0.96815	0.01018	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67532	0.03518	0.34166	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.92675	0.55741	0.34479	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39629	0.29865	0.33974	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33907	0.37277	0.67345	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59934	0.91002	0.67912	Biso	1.000	O

O72	1.0000	0.06089	0.63773	0.67833	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.25142	0.96690	0.33375	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.11271	0.02911	0.38920	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03237	0.97415	0.35693	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.13361	0.00664	0.45266	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17847	0.09799	0.35093	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.16665	0.92927	0.32511	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.09797	0.17265	0.43266	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.99540	0.08540	0.45969	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.92388	0.05259	0.41310	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97023	0.03710	0.55098	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.16670	0.20667	0.48124	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.04652	0.08155	0.59290	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.90701	0.05723	0.57866	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.92222	0.90859	0.55666	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.84733	0.86404	0.51325	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.98553	0.88783	0.53112	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.89113	0.86286	0.65145	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.95672	0.92208	0.69796	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.81194	0.86045	0.67113	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.87966	0.74600	0.65962	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.96214	0.75166	0.64908	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.82094	0.68694	0.60991	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.84890	0.70795	0.72510	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.11300	0.81684	0.36076	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.02118	0.78049	0.35311	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.13400	0.81680	0.43112	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.13896	0.76463	0.32284	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.11860	0.23941	0.34965	Biso	1.000	C
H19	1.0000	0.11991	0.31879	0.36540	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.05154	0.19356	0.30064	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.20120	0.26322	0.32019	Biso	1.000	H

Methylation (DME) of 2-tert-butyl-propylene:>; E= -1025.375 eV; ZPVE= 7.858eV;
frequencies =406.3i, 25.6, 37.2, 41.9, 54.7, 63.1, 72.2, 94.5, 107.0, 119.4, 132.4,
150.4, 157.1, 167.9, 181.5, 209.6, 242.8, 246.6, 266.5, 275.3, 284.6, 292.4, 307.3,
331.8, 348.8, 353.9, 368.8, 397.4, 415.1, 465.3, 479.5, 562.2, 575.5, 577.7, 623.6,
661.5, 672.8, 681.4, 815.3, 831.7, 907.2, 910.9, 921.7, 930.5, 937.3, 953.2, 960.0,
983.9, 989.4, 996.3, 1012.5, 1017.4, 1022.5, 1034.8, 1105.6, 1114.3, 1125.7,
1161.9, 1174.4, 1192.1, 1282.2, 1331.3, 1342.1, 1345.6, 1347.8, 1355.0, 1371.0,
1383.0, 1407.8, 1411.1, 1419.2, 1424.9, 1428.7, 1435.0, 1440.0, 1440.4, 1449.9,
1452.7, 1458.7, 1470.1, 1558.8, 2942.9, 2957.0, 2964.6, 2970.8, 2974.0, 2974.7,
3019.6, 3034.6, 3040.2, 3042.5, 3045.0, 3050.0, 3051.2, 3052.7, 3056.4, 3062.7,
3063.3, 3088.9, 3159.2, 3248.0, 3256.3 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01824 0.24392 0.08470 Biso 1.000 Si

```

Si2	1.0000	0.79068	0.78803	0.08776	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24994	0.01654	0.08123	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24174	0.01082	0.87444	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78710	0.78306	0.87966	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01333	0.24165	0.87796	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68138	0.57626	0.41764	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45103	0.11919	0.41843	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91671	0.34320	0.41766	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91751	0.34959	0.21221	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45542	0.12094	0.20859	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68557	0.57893	0.21334	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34738	0.90500	0.75201	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11742	0.44563	0.74994	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58006	0.67789	0.75159	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58760	0.68423	0.54873	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11609	0.44686	0.54796	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34780	0.90380	0.54554	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01211	0.77739	0.88144	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24289	0.23912	0.87362	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78719	0.01134	0.87774	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78901	0.01508	0.08608	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24847	0.24357	0.08139	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01830	0.78627	0.08764	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68594	0.11875	0.21334	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91264	0.57642	0.21353	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45290	0.34869	0.20985	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44374	0.34646	0.41457	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90788	0.56978	0.42147	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68399	0.11727	0.41611	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35189	0.45846	0.54380	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57929	0.91081	0.54705	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11025	0.67770	0.55052	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11485	0.67692	0.75250	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57693	0.90805	0.75189	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34866	0.44821	0.74833	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91992	0.11356	0.10420	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92211	0.82188	0.10587	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21636	0.11350	0.10330	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11160	0.90751	0.86310	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82123	0.91399	0.85951	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11297	0.21139	0.86000	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57436	0.45021	0.42690	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59256	0.15667	0.42664	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88631	0.44281	0.43802	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78700	0.24978	0.19890	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48811	0.25247	0.19220	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78210	0.54361	0.19523	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24584	0.77498	0.76815	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24872	0.47872	0.76579	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54735	0.77693	0.76172	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45588	0.58791	0.53335	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13120	0.57176	0.53826	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44549	0.86810	0.53089	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00206	0.33126	0.14749	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70502	0.68188	0.14866	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35951	0.03748	0.13743	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32753	0.99145	0.81293	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67837	0.69630	0.82123	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03248	0.34756	0.81737	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67084	0.66564	0.48255	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36082	0.00155	0.48104	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02052	0.35856	0.48024	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03158	0.68948	0.82238	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32925	0.34317	0.81082	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67985	0.98948	0.81769	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70225	0.03599	0.14488	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35500	0.33322	0.14029	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00007	0.68535	0.15488	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36047	0.37498	0.47289	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00989	0.66259	0.48353	Biso	1.000	O

O36	1.0000	0.66165	0.01298	0.48181	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14023	0.25685	0.10702	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77662	0.89502	0.11541	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14214	0.89425	0.10598	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24766	0.12751	0.84332	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89265	0.76637	0.85199	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89373	0.13279	0.84976	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79533	0.57470	0.44681	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43050	0.23005	0.44720	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81082	0.22060	0.44054	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92860	0.47043	0.18648	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56735	0.11170	0.18912	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56277	0.47205	0.19135	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46615	0.91459	0.78165	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10547	0.55559	0.76890	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46913	0.55727	0.77436	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60201	0.80675	0.52698	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23522	0.45696	0.52195	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22493	0.79205	0.52471	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01238	0.27532	0.98136	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75710	0.75415	0.98424	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28150	0.02000	0.97692	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69456	0.62187	0.31567	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40518	0.07847	0.30703	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95709	0.35212	0.31463	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35040	0.94049	0.64919	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07902	0.39954	0.64881	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62495	0.67885	0.65092	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00918	0.74337	0.98546	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28064	0.27153	0.97674	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75631	0.01206	0.98187	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68834	0.07670	0.31386	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94390	0.60876	0.31831	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40683	0.34260	0.31023	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34881	0.41353	0.64485	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61330	0.95170	0.65019	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07298	0.68368	0.65229	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.28461	0.96409	0.30396	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09588	0.90626	0.37434	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.03719	0.81833	0.35842	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.14847	0.92667	0.43325	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.10812	0.97261	0.32830	Biso	1.000	H
O73	1.0000	0.21017	0.89083	0.29688	Biso	1.000	O
C2	1.0000	0.94677	0.90087	0.43121	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.00493	0.00493	0.47171	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.03356	0.01814	0.57023	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.04038	0.10991	0.41819	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13341	0.15834	0.41078	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01786	0.16767	0.45169	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.00191	0.09059	0.35182	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.23225	0.79843	0.30289	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.15186	0.72073	0.31586	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.29260	0.81168	0.35629	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.26615	0.79004	0.23871	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.91342	0.82286	0.46955	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.90854	0.89385	0.36609	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.15559	0.11522	0.58692	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.21896	0.10025	0.55389	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.17338	0.12254	0.65855	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.16826	0.19719	0.56394	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.94890	0.04780	0.61520	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.86064	0.98057	0.60444	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.95815	0.12804	0.59088	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.96533	0.05626	0.68710	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.01876	0.90929	0.61307	Biso	1.000	C
H19	1.0000	0.93129	0.83809	0.60896	Biso	1.000	H
H20	1.0000	0.04053	0.92504	0.68388	Biso	1.000	H
H21	1.0000	0.07521	0.88276	0.58286	Biso	1.000	H

Direct Cracking of n-butene: ^; E= -926.835 eV; ZPVE= 3.321eV; frequencies
=386.3i, 51.2, 68.9, 70.6, 88.3, 94.9, 105.7, 122.3, 134.0, 261.6, 292.7, 322.8,
341.7, 357.2, 523.6, 545.2, 581.2, 586.8, 657.8, 693.3, 773.4, 799.6, 809.6, 841.8,
916.8, 975.5, 983.4, 1003.9, 1020.2, 1109.0, 1197.0, 1199.9, 1234.2, 1284.0,
1336.6, 1400.0, 1419.8, 1426.5, 1536.0, 1608.8, 3015.9, 3061.1, 3068.1, 3069.9,
3104.2, 3141.5, 3167.4, 3172.7 cm^-1

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01950	0.23437	0.09753	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79299	0.78001	0.09984	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25159	0.00630	0.09344	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24502	0.00239	0.88570	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79015	0.77568	0.89160	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01739	0.23343	0.89047	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68607	0.57020	0.42978	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45447	0.11065	0.43193	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91902	0.33553	0.43010	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91600	0.33865	0.22402	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45390	0.10991	0.22378	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68819	0.57001	0.22550	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34976	0.89425	0.76552	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12000	0.43746	0.76105	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58319	0.67013	0.76349	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59183	0.67651	0.56069	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11926	0.43888	0.55987	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35089	0.89329	0.55730	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01647	0.77213	0.89147	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24654	0.23232	0.88713	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79020	0.00365	0.88969	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78868	0.00571	0.09788	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25013	0.23503	0.09463	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02120	0.77905	0.09959	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68842	0.10969	0.22703	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91655	0.56915	0.22619	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45636	0.33941	0.22335	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44930	0.33969	0.42910	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91462	0.56624	0.43189	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68988	0.10971	0.42714	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35513	0.45078	0.55605	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58322	0.90304	0.55919	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11513	0.67207	0.56207	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11889	0.66987	0.76491	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58082	0.90098	0.76340	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35126	0.44189	0.76099	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91989	0.10398	0.11664	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92501	0.81496	0.11835	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21857	0.10419	0.11387	Biso	1.000	O

O4	1.0000	0.11443	0.90199	0.87014	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82477	0.90671	0.87185	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11552	0.20080	0.87311	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57872	0.44471	0.44096	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59441	0.14467	0.42741	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89303	0.43879	0.44624	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78449	0.24156	0.20683	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49093	0.24235	0.20565	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78514	0.53508	0.20928	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24988	0.76459	0.78628	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25224	0.47395	0.77764	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55146	0.76992	0.77264	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46069	0.57935	0.54404	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13149	0.56281	0.55362	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44940	0.85874	0.54341	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00134	0.32089	0.15956	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70825	0.67290	0.16034	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36163	0.02884	0.14989	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33141	0.98329	0.82483	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68126	0.68884	0.83356	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03772	0.33989	0.83013	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67679	0.66040	0.49447	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36862	0.99643	0.49741	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02513	0.35259	0.49032	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03454	0.68198	0.83431	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33100	0.33700	0.82420	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68363	0.98240	0.82924	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70127	0.02724	0.15563	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35598	0.32191	0.15550	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00070	0.67475	0.16324	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36344	0.36546	0.48647	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01342	0.65685	0.49679	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66413	0.00523	0.49332	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14037	0.24512	0.12229	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77777	0.88632	0.12855	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14399	0.88645	0.12518	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25657	0.12289	0.85954	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89521	0.75815	0.86441	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89657	0.12574	0.86340	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80006	0.56805	0.45608	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43940	0.22453	0.46141	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81136	0.21619	0.45847	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93095	0.46168	0.20122	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56407	0.09549	0.21411	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56572	0.46237	0.20293	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47022	0.90716	0.79411	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10428	0.54570	0.77802	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47206	0.55023	0.78746	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60672	0.79939	0.53981	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23976	0.45170	0.53364	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23021	0.78262	0.53099	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01731	0.26700	0.99418	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76017	0.74697	0.99638	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27888	0.00320	0.98938	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69529	0.61390	0.32729	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95223	0.33429	0.32618	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34829	0.92372	0.66200	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08255	0.38903	0.66037	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62744	0.66922	0.66304	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01804	0.74359	0.99643	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28279	0.26653	0.99065	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75705	0.00216	0.99369	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70555	0.07292	0.32598	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95189	0.60757	0.32925	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41193	0.33383	0.32425	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35178	0.40706	0.65761	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61733	0.94551	0.66199	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08354	0.68480	0.66442	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39420	0.07008	0.32137	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19391	0.05195	0.36333	Biso	1.000	C

H1	1.0000	0.20257	0.03518	0.43325	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.27782	0.04671	0.33225	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22006	0.14029	0.34793	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10305	0.96779	0.31581	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06478	0.87873	0.33515	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08274	0.98349	0.24917	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.89459	0.90449	0.37669	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.94060	0.01077	0.34503	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.90453	0.88746	0.44597	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.84225	0.83086	0.33506	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.98973	0.08457	0.38736	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.92692	0.02744	0.27658	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2-pentene:~; E= -943.688 eV; ZPVE= 4.052eV; frequencies
=804.5i, 29.0, 58.1, 66.1, 81.9, 94.2, 105.6, 110.8, 143.5, 150.6, 216.8, 256.1,
296.1, 318.6, 344.2, 421.7, 488.5, 522.8, 585.7, 593.8, 636.8, 665.1, 672.1, 711.7,
782.9, 862.9, 914.2, 926.6, 936.5, 949.0, 961.7, 980.6, 1024.6, 1043.7, 1169.5,
1193.7, 1242.4, 1285.3, 1290.9, 1340.4, 1351.7, 1391.2, 1414.6, 1418.5, 1438.3,
1531.9, 1622.8, 2971.0, 3019.3, 3023.5, 3050.5, 3067.4, 3071.2, 3079.9, 3106.5,
3161.9, 3168.5 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01730	0.22953	0.09642	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79148	0.77453	0.09955	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24883	0.00041	0.09277	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24202	0.99622	0.88504	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78740	0.76843	0.89217	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01548	0.22823	0.89052	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68270	0.56336	0.43045	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45194	0.10431	0.43119	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91569	0.33122	0.43026	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91330	0.33368	0.22333	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45204	0.10387	0.22234	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68479	0.56383	0.22531	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34820	0.88925	0.76554	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11820	0.43177	0.76057	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58066	0.66453	0.76382	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58931	0.67111	0.56085	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11739	0.43367	0.55902	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34902	0.88789	0.55716	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01448	0.76633	0.89117	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24602	0.22768	0.88780	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78850	0.99768	0.88932	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78682	0.00067	0.09654	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24877	0.22992	0.09415	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01977	0.77430	0.09953	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68632	0.10340	0.22687	Biso	1.000	Si

Si25	1.0000	0.91611	0.56386	0.22627	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45773	0.33597	0.22170	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45130	0.33628	0.42994	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91450	0.56176	0.43108	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68746	0.10402	0.42652	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35304	0.44529	0.55533	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58048	0.89700	0.55885	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11365	0.66673	0.56217	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11738	0.66422	0.76517	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57839	0.89488	0.76365	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34916	0.43559	0.76015	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91827	0.09861	0.11457	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92387	0.81080	0.11695	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21595	0.09857	0.11202	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11162	0.89609	0.86818	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82214	0.89974	0.87341	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11503	0.19705	0.87598	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58112	0.43636	0.44977	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59179	0.13881	0.42582	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88794	0.43296	0.44885	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78198	0.23531	0.20710	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48941	0.23648	0.20617	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78473	0.53225	0.21466	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24830	0.75955	0.78626	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25017	0.46749	0.77730	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54814	0.76368	0.77414	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45770	0.57469	0.54489	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13160	0.55842	0.55294	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44686	0.85246	0.54259	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99906	0.31423	0.16062	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70853	0.66978	0.16257	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36037	0.02447	0.14794	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32925	0.97833	0.82418	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67867	0.68250	0.83360	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03520	0.33326	0.82871	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67365	0.65360	0.49518	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36723	0.99112	0.49732	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02223	0.34797	0.48980	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03266	0.67588	0.83446	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32938	0.33081	0.82324	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68288	0.97689	0.82785	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69979	0.02148	0.15549	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35210	0.31430	0.15825	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99809	0.66919	0.16250	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36372	0.36184	0.48514	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01157	0.65119	0.49749	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66166	0.99998	0.49344	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13873	0.24060	0.11964	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77548	0.88093	0.12607	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14229	0.88119	0.12620	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25399	0.11720	0.86006	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89251	0.75110	0.86473	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89601	0.11901	0.86300	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80216	0.56968	0.45009	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43514	0.21743	0.45888	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80867	0.21081	0.45752	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92676	0.45521	0.19707	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56160	0.08862	0.21387	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56628	0.45612	0.19365	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46872	0.90252	0.79475	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10333	0.54030	0.77858	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46991	0.54393	0.78651	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60493	0.79412	0.53820	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23682	0.44419	0.53216	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22817	0.77776	0.53124	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01331	0.26329	0.99362	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75676	0.73822	0.99672	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27484	0.99526	0.98870	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67835	0.59889	0.32756	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94945	0.33326	0.32609	Biso	1.000	O

O60	1.0000	0.34766	0.91866	0.66189	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08092	0.38433	0.65966	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62550	0.66565	0.66324	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01801	0.73967	0.99623	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28520	0.26341	0.99082	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75401	0.99789	0.99273	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70249	0.06580	0.32577	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95673	0.59940	0.32878	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42272	0.33957	0.32406	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34914	0.40069	0.65670	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61400	0.93803	0.66183	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08186	0.67846	0.66464	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39071	0.06244	0.32000	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20613	0.07330	0.35229	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22088	0.07624	0.42398	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28610	0.05079	0.32769	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24258	0.15660	0.32058	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10229	0.98947	0.32065	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.05247	0.91046	0.35731	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.07636	0.98945	0.25211	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.91544	0.99258	0.39546	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.98266	0.08266	0.34400	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.93418	0.99736	0.46663	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.81656	0.88594	0.36339	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.05213	0.16019	0.37194	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.96439	0.08355	0.27352	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.80193	0.88793	0.29200	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.73945	0.86957	0.39930	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.82739	0.81273	0.37803	Biso	1.000	H

Direct Cracking of trimethyl_ethylene:o; E= -943.915 eV; ZPVE= 4.063eV;
frequencies =97.5i, 9.7, 32.9, 50.1, 59.0, 80.7, 88.7, 102.9, 113.4, 129.6, 176.3,
216.8, 267.8, 311.6, 329.4, 369.1, 426.4, 574.7, 578.0, 584.2, 591.5, 655.5, 694.7,
765.2, 799.6, 806.6, 907.7, 938.4, 949.6, 960.1, 971.5, 1022.0, 1040.6, 1185.6,
1198.8, 1202.6, 1220.4, 1289.5, 1312.7, 1337.3, 1355.4, 1381.3, 1419.6, 1443.5,
1501.1, 1617.7, 1789.7, 2926.4, 3014.1, 3027.4, 3055.1, 3066.2, 3082.5, 3103.5,
3118.2, 3132.6, 3159.4 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02021	0.23206	0.09708	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79414	0.77760	0.09994	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25176	0.00341	0.09394	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24443	0.99851	0.88610	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79044	0.77196	0.89199	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01763	0.23066	0.89110	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68659	0.56792	0.43016	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45508	0.10807	0.43117	Biso	1.000	Al

Si8	1.0000	0.91858	0.33208	0.43071	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91664	0.33636	0.22366	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45583	0.10872	0.22260	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68838	0.56768	0.22592	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35018	0.89199	0.76514	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12064	0.43398	0.76091	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58325	0.66687	0.76403	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59201	0.67355	0.56105	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12001	0.43547	0.55964	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35073	0.89069	0.55717	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01692	0.76799	0.89248	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24765	0.22940	0.88783	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79091	0.99996	0.88967	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79017	0.00301	0.09772	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25143	0.23262	0.09446	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02223	0.77622	0.10052	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68821	0.10577	0.22660	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91664	0.56416	0.22609	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45879	0.33760	0.22228	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45210	0.33736	0.42970	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91408	0.55986	0.43285	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68905	0.10551	0.42693	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35593	0.44726	0.55576	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58226	0.89917	0.55950	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11538	0.66787	0.56258	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11932	0.66620	0.76521	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58073	0.89734	0.76390	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35190	0.43787	0.76053	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92145	0.10132	0.11547	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92626	0.81266	0.11769	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21874	0.10145	0.11366	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11398	0.89792	0.87026	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82558	0.90304	0.87164	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11666	0.19881	0.87591	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58145	0.44158	0.44415	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59573	0.14336	0.42938	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88854	0.43185	0.45167	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78571	0.23752	0.20837	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49315	0.24101	0.20237	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78575	0.53285	0.21198	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25031	0.76202	0.78502	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25270	0.46967	0.77704	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55079	0.76611	0.77396	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46095	0.57622	0.54442	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13466	0.56050	0.55331	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44825	0.85454	0.54417	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00275	0.31716	0.16133	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71020	0.67118	0.16106	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36223	0.02655	0.14971	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33123	0.98007	0.82517	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68157	0.68536	0.83380	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03794	0.33606	0.82950	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67759	0.65791	0.49522	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36844	0.99237	0.49550	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02547	0.34956	0.49017	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03530	0.67815	0.83509	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33136	0.33283	0.82364	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68427	0.97881	0.82921	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70270	0.02430	0.15536	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35533	0.31875	0.15727	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00111	0.67289	0.16577	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36497	0.36326	0.48527	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01355	0.65123	0.49693	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66289	0.00145	0.49374	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14158	0.24325	0.12041	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77916	0.88383	0.12889	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14458	0.88378	0.12701	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25567	0.11890	0.86013	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89516	0.75325	0.86600	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89755	0.12211	0.86373	Biso	1.000	O

O43	1.0000	0.80264	0.56856	0.45382	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43943	0.22127	0.46274	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81286	0.21023	0.45601	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92939	0.45728	0.19569	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56521	0.09341	0.21080	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56689	0.46067	0.20003	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47047	0.90453	0.79404	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10604	0.54268	0.77888	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47248	0.54634	0.78731	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60629	0.79601	0.53934	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23981	0.44671	0.53354	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22903	0.78034	0.53199	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01628	0.26584	0.99426	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76000	0.74387	0.99676	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27767	0.99864	0.98978	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69155	0.60967	0.32770	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95379	0.33842	0.32648	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34919	0.92275	0.66174	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08261	0.38616	0.66016	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62774	0.66712	0.66347	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.02008	0.74016	0.99756	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28663	0.26468	0.99085	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75763	0.99834	0.99359	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70036	0.06630	0.32570	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95365	0.59588	0.32975	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41840	0.33345	0.32423	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35282	0.40310	0.65717	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61693	0.94107	0.66231	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08228	0.67910	0.66476	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39811	0.07210	0.32036	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19961	0.07823	0.35147	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21678	0.08892	0.42309	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.27789	0.06519	0.32867	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21423	0.15487	0.31674	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10743	0.97478	0.32392	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.06954	0.86797	0.37100	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.07275	0.96971	0.25739	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.86591	0.94527	0.36397	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.09803	0.87837	0.44007	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.97743	0.81215	0.36569	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.10586	0.82247	0.33490	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.94994	0.05233	0.35371	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.83991	0.90598	0.42937	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.99569	0.10582	0.41034	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.97295	0.09193	0.28823	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.81824	0.89327	0.30726	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 4-methyl-2-pentene: ^; E= -960.779 eV; ZPVE= 4.796eV;
frequencies =353.2i, 36.9, 48.2, 69.0, 77.3, 86.8, 103.4, 105.1, 118.4, 121.4,
142.2, 174.0, 223.8, 251.1, 296.6, 312.2, 347.9, 418.1, 423.0, 530.6, 582.4, 586.3,
606.3, 637.8, 660.1, 699.1, 805.4, 831.3, 891.7, 904.9, 919.0, 923.3, 928.0, 944.5,
991.5, 1020.3, 1024.2, 1079.0, 1164.0, 1183.6, 1223.0, 1288.8, 1292.2, 1319.0,
1332.8, 1351.6, 1389.0, 1391.5, 1397.4, 1414.5, 1437.2, 1441.4, 1571.7, 1645.2,
2945.0, 2972.9, 3004.6, 3022.1, 3025.9, 3050.1, 3059.2, 3074.0, 3075.7, 3093.7,
3123.5, 3149.1 cm^-1

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01791  0.22931  0.09618  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.79215  0.77396  0.09919  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24949  0.00008  0.09294  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.24257  0.99590  0.88555  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.78801  0.76799  0.89210  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.01604  0.22848  0.89100  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.68364  0.56308  0.43049  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.45417  0.10565  0.43140  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.91617  0.33002  0.43055  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.91395  0.33325  0.22302  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.45403  0.10528  0.22153  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.68527  0.56382  0.22554  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34879  0.88972  0.76475  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11869  0.43113  0.76038  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.58103  0.66442  0.76382  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58990  0.67086  0.56080  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11839  0.43305  0.55890  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.34938  0.88748  0.55678  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.01481  0.76511  0.89163  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.24694  0.22756  0.88822  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78899  0.99728  0.88936  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78759  0.00014  0.09608  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.24945  0.22947  0.09421  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01996  0.77304  0.09947  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68647  0.10250  0.22622  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.91527  0.56130  0.22564  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.45828  0.33530  0.22142  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.45225  0.33514  0.43040  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.91360  0.55827  0.43170  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68757  0.10391  0.42657  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.35429  0.44469  0.55544  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.58017  0.89598  0.55885  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.11428  0.66535  0.56185  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.11820  0.66368  0.76480  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.57901  0.89484  0.76336  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.35018  0.43482  0.76003  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.91911  0.09816  0.11298  Biso  1.000  O
O2       1.0000 0.92457  0.81018  0.11662  Biso  1.000  O
O3       1.0000 0.21617  0.09793  0.11231  Biso  1.000  O
O4       1.0000 0.11209  0.89523  0.87011  Biso  1.000  O
O5       1.0000 0.82284  0.89939  0.87373  Biso  1.000  O
O6       1.0000 0.11624  0.19807  0.87717  Biso  1.000  O
O7       1.0000 0.58222  0.43583  0.44886  Biso  1.000  O
O8       1.0000 0.59486  0.14263  0.42774  Biso  1.000  O
O9       1.0000 0.88602  0.42973  0.45177  Biso  1.000  O
O10      1.0000 0.78306  0.23421  0.20731  Biso  1.000  O
O11      1.0000 0.49138  0.23748  0.20242  Biso  1.000  O
O12      1.0000 0.78431  0.53092  0.21423  Biso  1.000  O
O13      1.0000 0.24911  0.75974  0.78482  Biso  1.000  O
O14      1.0000 0.25044  0.46580  0.77650  Biso  1.000  O
O15      1.0000 0.54838  0.76350  0.77416  Biso  1.000  O
O16      1.0000 0.45832  0.57436  0.54491  Biso  1.000  O
O17      1.0000 0.13461  0.55868  0.55220  Biso  1.000  O
O18      1.0000 0.44594  0.85005  0.54379  Biso  1.000  O
O19      1.0000 0.00032  0.31335  0.16158  Biso  1.000  O
O20      1.0000 0.70944  0.66963  0.16258  Biso  1.000  O
O21      1.0000 0.35970  0.02331  0.14940  Biso  1.000  O
O22      1.0000 0.32923  0.97791  0.82405  Biso  1.000  O
O23      1.0000 0.67928  0.68247  0.83339  Biso  1.000  O
O24      1.0000 0.03532  0.33271  0.82837  Biso  1.000  O

```

O25	1.0000	0.67431	0.65288	0.49551	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36870	0.98969	0.49517	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02361	0.34780	0.48935	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03371	0.67574	0.83409	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33055	0.33031	0.82342	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68378	0.97673	0.82741	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70082	0.02047	0.15563	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35192	0.31394	0.15896	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99860	0.66955	0.16456	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36499	0.36215	0.48445	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01223	0.64882	0.49664	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65964	0.99899	0.49310	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13941	0.24036	0.11863	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77659	0.88053	0.12527	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14271	0.88018	0.12547	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25346	0.11631	0.86024	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89318	0.75053	0.86486	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89693	0.11862	0.86367	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80308	0.56934	0.45047	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43562	0.21701	0.46212	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81072	0.20827	0.45673	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92634	0.45377	0.19405	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56273	0.08899	0.21077	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56587	0.45685	0.19477	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46939	0.90302	0.79387	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10512	0.54032	0.77908	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47033	0.54382	0.78672	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60535	0.79368	0.53801	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23748	0.44253	0.53298	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22744	0.77820	0.53125	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01369	0.26462	0.99377	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75721	0.73698	0.99652	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27680	0.99593	0.98901	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68078	0.60001	0.32779	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95020	0.33632	0.32612	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34813	0.91998	0.66120	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08053	0.38421	0.65947	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62589	0.66551	0.66328	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01728	0.73648	0.99657	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28721	0.26298	0.99108	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75345	0.99701	0.99251	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69901	0.06415	0.32563	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95514	0.59303	0.32880	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42336	0.33560	0.32429	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35129	0.40000	0.65668	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61480	0.93777	0.66154	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08144	0.67611	0.66419	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39605	0.06812	0.31999	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20701	0.07618	0.35321	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22342	0.08124	0.42481	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28723	0.05978	0.32844	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22996	0.15687	0.32122	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11230	0.97956	0.32178	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.06060	0.86900	0.36595	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.08203	0.98129	0.25475	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.90115	0.00344	0.39671	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.08894	0.87286	0.43456	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.96753	0.82689	0.36255	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.08227	0.81332	0.32735	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.97610	0.08827	0.34529	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.90746	0.01496	0.46892	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.80719	0.89350	0.36357	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.04230	0.16784	0.37345	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.97080	0.08198	0.27294	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.80902	0.88607	0.29114	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.72455	0.88342	0.38221	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.80914	0.82148	0.39485	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2-methyl-2-hexene: ^; E= -977.252 eV; ZPVE= 5.589eV;
frequencies =233.7i, 40.5, 50.2, 69.1, 88.8, 92.7, 108.5, 115.8, 127.0, 149.1,

164.1, 181.1, 203.2, 218.3, 247.5, 293.7, 316.0, 348.8, 353.2, 415.6, 428.0, 551.1, 580.2, 585.6, 629.1, 659.9, 671.6, 695.6, 775.7, 795.3, 839.2, 849.1, 891.9, 909.5, 933.0, 945.1, 963.3, 1007.4, 1020.8, 1029.2, 1055.6, 1137.1, 1167.9, 1190.1, 1222.0, 1252.8, 1275.1, 1294.9, 1301.6, 1319.1, 1340.4, 1356.8, 1381.4, 1401.6, 1416.7, 1420.6, 1438.4, 1445.8, 1451.4, 1582.1, 1641.2, 2943.5, 2949.0, 2994.3, 3003.0, 3021.3, 3031.9, 3054.0, 3060.5, 3073.0, 3094.2, 3106.9, 3123.4, 3126.2, 3145.9 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01775	0.23042	0.09782	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79037	0.77429	0.09983	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24962	0.00262	0.09479	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24398	0.99856	0.88744	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.68711	0.76860	0.89458	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01673	0.22985	0.89261	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68273	0.56263	0.43332	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45225	0.10776	0.43384	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91539	0.33231	0.43235	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91471	0.33597	0.22456	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45388	0.10746	0.22328	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68582	0.56280	0.22491	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34922	0.89141	0.76703	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11801	0.43286	0.76211	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58225	0.66636	0.76369	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58914	0.67291	0.56200	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11732	0.43482	0.56099	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34948	0.88991	0.55905	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01570	0.76903	0.89295	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24881	0.23099	0.89003	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78868	0.00051	0.89220	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78762	0.00358	0.09728	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25042	0.23295	0.09549	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01982	0.77683	0.10108	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68781	0.10869	0.22763	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91612	0.56497	0.22670	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45892	0.33789	0.22238	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45218	0.33769	0.43265	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91288	0.56192	0.43370	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68703	0.10872	0.43008	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35419	0.44796	0.55674	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58059	0.90020	0.56145	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11404	0.66729	0.56414	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11744	0.66543	0.76691	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57997	0.89820	0.76454	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35071	0.43769	0.76104	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92006	0.09882	0.11461	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92349	0.81295	0.11748	Biso	1.000	O

03	1.0000	0.21775	0.10161	0.11269	Biso	1.000	0
04	1.0000	0.11352	0.89862	0.87033	Biso	1.000	0
05	1.0000	0.81980	0.90013	0.88104	Biso	1.000	0
06	1.0000	0.11776	0.20051	0.87911	Biso	1.000	0
07	1.0000	0.58212	0.43597	0.45508	Biso	1.000	0
08	1.0000	0.59343	0.14614	0.43321	Biso	1.000	0
09	1.0000	0.88658	0.43338	0.45085	Biso	1.000	0
010	1.0000	0.78300	0.24030	0.20615	Biso	1.000	0
011	1.0000	0.49054	0.23923	0.20310	Biso	1.000	0
012	1.0000	0.78456	0.53017	0.21023	Biso	1.000	0
013	1.0000	0.24837	0.76178	0.78641	Biso	1.000	0
014	1.0000	0.25002	0.46752	0.77676	Biso	1.000	0
015	1.0000	0.55229	0.76751	0.77163	Biso	1.000	0
016	1.0000	0.45671	0.57852	0.54615	Biso	1.000	0
017	1.0000	0.13425	0.56067	0.55435	Biso	1.000	0
018	1.0000	0.44637	0.85313	0.54506	Biso	1.000	0
019	1.0000	0.99995	0.31442	0.16318	Biso	1.000	0
020	1.0000	0.71029	0.67227	0.16625	Biso	1.000	0
021	1.0000	0.35916	0.02476	0.15164	Biso	1.000	0
022	1.0000	0.33090	0.98043	0.82635	Biso	1.000	0
023	1.0000	0.68037	0.68475	0.83345	Biso	1.000	0
024	1.0000	0.03577	0.33443	0.83048	Biso	1.000	0
025	1.0000	0.67080	0.65530	0.49317	Biso	1.000	0
026	1.0000	0.36654	0.99118	0.49717	Biso	1.000	0
027	1.0000	0.02333	0.35063	0.49059	Biso	1.000	0
028	1.0000	0.03338	0.67823	0.83618	Biso	1.000	0
029	1.0000	0.33143	0.33325	0.82443	Biso	1.000	0
030	1.0000	0.68434	0.97941	0.82903	Biso	1.000	0
031	1.0000	0.70353	0.02486	0.15963	Biso	1.000	0
032	1.0000	0.35106	0.31657	0.16190	Biso	1.000	0
033	1.0000	0.99920	0.67323	0.16572	Biso	1.000	0
034	1.0000	0.36490	0.36659	0.48459	Biso	1.000	0
035	1.0000	0.01322	0.65154	0.49787	Biso	1.000	0
036	1.0000	0.65947	0.00152	0.49409	Biso	1.000	0
037	1.0000	0.13983	0.24280	0.11985	Biso	1.000	0
038	1.0000	0.77304	0.88098	0.12101	Biso	1.000	0
039	1.0000	0.14171	0.88420	0.12830	Biso	1.000	0
040	1.0000	0.25628	0.11989	0.86317	Biso	1.000	0
041	1.0000	0.89443	0.75530	0.86615	Biso	1.000	0
042	1.0000	0.89853	0.11942	0.86427	Biso	1.000	0
043	1.0000	0.80283	0.57219	0.45727	Biso	1.000	0
044	1.0000	0.43118	0.21782	0.46425	Biso	1.000	0
045	1.0000	0.80986	0.21225	0.46199	Biso	1.000	0
046	1.0000	0.93256	0.45951	0.19859	Biso	1.000	0
047	1.0000	0.56301	0.09201	0.21145	Biso	1.000	0
048	1.0000	0.56595	0.45820	0.19236	Biso	1.000	0
049	1.0000	0.46875	0.90248	0.79671	Biso	1.000	0
050	1.0000	0.10468	0.54217	0.78151	Biso	1.000	0
051	1.0000	0.47007	0.54755	0.78829	Biso	1.000	0
052	1.0000	0.60667	0.79768	0.54460	Biso	1.000	0
053	1.0000	0.23625	0.44387	0.53569	Biso	1.000	0
054	1.0000	0.22761	0.78012	0.53441	Biso	1.000	0
055	1.0000	0.01288	0.26520	0.99535	Biso	1.000	0
056	1.0000	0.75483	0.73155	0.99809	Biso	1.000	0
057	1.0000	0.27640	0.99632	0.99104	Biso	1.000	0
058	1.0000	0.68083	0.59205	0.32876	Biso	1.000	0
059	1.0000	0.94741	0.33379	0.32795	Biso	1.000	0
060	1.0000	0.34963	0.92268	0.66357	Biso	1.000	0
061	1.0000	0.07829	0.38579	0.66137	Biso	1.000	0
062	1.0000	0.62585	0.66306	0.66342	Biso	1.000	0
063	1.0000	0.01876	0.74153	0.99804	Biso	1.000	0
064	1.0000	0.28936	0.26804	0.99272	Biso	1.000	0
065	1.0000	0.75327	0.00634	0.99444	Biso	1.000	0
066	1.0000	0.70123	0.07483	0.32811	Biso	1.000	0
067	1.0000	0.95086	0.59928	0.33051	Biso	1.000	0
068	1.0000	0.42822	0.34095	0.32593	Biso	1.000	0
069	1.0000	0.35325	0.40337	0.65772	Biso	1.000	0
070	1.0000	0.61470	0.94515	0.66349	Biso	1.000	0
071	1.0000	0.08005	0.67723	0.66628	Biso	1.000	0
072	1.0000	0.39699	0.07137	0.32192	Biso	1.000	0

C1	1.0000	0.20628	0.08334	0.34753	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23107	0.11099	0.41634	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28562	0.06511	0.32863	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21767	0.14996	0.30122	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11373	0.97554	0.33484	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.07779	0.88259	0.39830	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.07328	0.95396	0.26937	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.88186	0.98539	0.38173	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.12083	0.90905	0.46255	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.98506	0.83832	0.40677	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.09426	0.81789	0.36869	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.96493	0.07422	0.33868	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.86203	0.99684	0.45014	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.81168	0.86926	0.34367	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.01412	0.15715	0.37005	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.98340	0.06774	0.26903	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.84984	0.86319	0.28096	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.81453	0.80816	0.39021	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.68698	0.83407	0.32893	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.67874	0.88609	0.27756	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.64932	0.84396	0.38994	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.63838	0.74522	0.30829	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 24-dimethyl-2-pentene:o; E= -977.557 eV; ZPVE= 5.562eV;
frequencies =280.5i, 41.1, 67.3, 72.7, 82.3, 84.5, 97.5, 102.4, 122.2, 131.8,
149.5, 197.7, 207.3, 249.9, 256.1, 298.7, 321.7, 353.2, 378.2, 427.6, 432.8, 443.6,
551.4, 582.3, 586.8, 635.3, 663.3, 669.9, 699.0, 801.7, 819.2, 828.0, 892.9, 911.7,
913.9, 934.6, 947.1, 963.6, 983.8, 1033.6, 1049.3, 1066.7, 1120.9, 1192.6, 1221.2,
1272.9, 1295.7, 1321.7, 1349.6, 1359.6, 1360.7, 1380.5, 1388.1, 1412.6, 1429.9,
1433.7, 1437.9, 1443.3, 1451.2, 1584.5, 1645.6, 2939.4, 2956.5, 2966.3, 3012.9,
3016.9, 3017.3, 3030.1, 3054.5, 3056.1, 3061.6, 3077.8, 3105.0, 3123.0, 3141.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01727	0.23271	0.09113	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79074	0.77730	0.09495	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24794	0.00280	0.08948	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24139	0.99853	0.88170	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78742	0.77121	0.88719	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01583	0.23184	0.88696	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68340	0.56736	0.42523	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45477	0.10862	0.42684	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91440	0.33333	0.42564	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91265	0.33707	0.21806	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45295	0.10790	0.21709	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68406	0.56695	0.22095	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34842	0.89288	0.76079	Biso	1.000	Si

Si13	1.0000	0.11740	0.43356	0.75590	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58007	0.66718	0.75950	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58788	0.67276	0.55646	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11841	0.43637	0.55444	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34885	0.89094	0.55309	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01408	0.76835	0.88757	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24595	0.23027	0.88426	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78760	0.99939	0.88475	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78593	0.00233	0.09062	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24816	0.23238	0.09054	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01873	0.77659	0.09588	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68538	0.10564	0.22134	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91429	0.56441	0.22132	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45695	0.33749	0.21725	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45279	0.33781	0.42596	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91167	0.55968	0.42732	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68723	0.10571	0.42168	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35336	0.44582	0.55155	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57874	0.89813	0.55397	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11424	0.66734	0.55846	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11745	0.66602	0.76118	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57857	0.89813	0.75847	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34937	0.43731	0.75611	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91767	0.10123	0.10392	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92287	0.81301	0.11313	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21557	0.10119	0.10882	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11091	0.89839	0.86520	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82234	0.90239	0.86748	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11524	0.20044	0.87206	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58280	0.43941	0.44281	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59554	0.14568	0.42299	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87970	0.42973	0.44720	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78154	0.23780	0.20378	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49003	0.23988	0.19723	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78335	0.53424	0.21051	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24856	0.76263	0.77972	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24896	0.46748	0.77165	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54843	0.76697	0.76960	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45630	0.57601	0.54064	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14008	0.56423	0.54850	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44429	0.85229	0.53934	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99800	0.31508	0.15726	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70725	0.67140	0.15677	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35838	0.02541	0.14534	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32836	0.98026	0.82075	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67844	0.68500	0.82890	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03346	0.33425	0.82289	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67272	0.65566	0.49103	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36848	0.99281	0.49078	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02272	0.35395	0.48440	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03370	0.67891	0.83071	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33018	0.33340	0.81999	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68411	0.98085	0.82153	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70084	0.02495	0.15032	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35091	0.31732	0.15489	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99750	0.67286	0.16057	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36552	0.36396	0.48085	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01124	0.64721	0.49301	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65823	0.00062	0.48793	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13795	0.24283	0.11538	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77536	0.88366	0.12217	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14107	0.88350	0.12272	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25326	0.11938	0.85649	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89220	0.75288	0.86036	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89582	0.12173	0.86235	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80367	0.57529	0.44559	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43759	0.22051	0.45858	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81158	0.20935	0.45055	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92502	0.45717	0.18804	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56163	0.09156	0.20604	Biso	1.000	O

O48	1.0000	0.56467	0.45926	0.19132	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46892	0.90589	0.78982	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10476	0.54297	0.77628	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46899	0.54700	0.78280	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60311	0.79533	0.53371	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23526	0.44086	0.52869	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22559	0.78255	0.52854	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01716	0.27173	0.98914	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75707	0.74207	0.99183	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27414	0.99763	0.98538	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68027	0.60483	0.32284	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94956	0.34238	0.32127	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34869	0.92447	0.65737	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07874	0.38779	0.65479	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62416	0.66728	0.65884	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01670	0.74097	0.99275	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28513	0.26566	0.98726	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74849	0.99483	0.98743	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69830	0.06590	0.32039	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95453	0.59456	0.32465	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42165	0.33622	0.32024	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35108	0.40200	0.65296	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61329	0.94061	0.65651	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07937	0.67644	0.66049	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39637	0.07157	0.31579	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20521	0.07714	0.35032	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23548	0.10017	0.41883	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28504	0.06308	0.32455	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21136	0.14637	0.30959	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11270	0.96953	0.33724	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08565	0.87076	0.39218	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06437	0.95321	0.27539	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97013	0.02185	0.47042	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13124	0.89233	0.45538	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99360	0.81932	0.40250	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.10801	0.81523	0.35399	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.92854	0.01044	0.38768	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.03995	0.10256	0.49389	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97476	0.10783	0.32380	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.00122	0.08655	0.26101	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.04634	0.18517	0.35127	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.90749	0.12645	0.30613	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.83104	0.90085	0.35520	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.85469	0.86991	0.29587	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.76021	0.91280	0.33448	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.79970	0.83480	0.40632	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.93437	0.95127	0.51733	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 11-methyl-isopropyl-propylene:>; E= -977.578 eV; ZPVE= 5.551eV; frequencies =661.2i, 47.1, 59.5, 64.5, 73.3, 86.1, 89.9, 111.3, 130.0, 137.2, 166.9, 200.9, 238.8, 254.6, 271.3, 277.6, 300.6, 306.6, 324.2, 336.4, 429.0, 496.4, 504.0, 589.9, 593.7, 634.2, 659.2, 691.3, 718.4, 741.3, 853.7, 855.3, 915.8, 928.7, 953.7, 957.1, 965.5, 977.0, 1014.7, 1018.2, 1041.5, 1075.6, 1139.6, 1175.8, 1214.7, 1280.8, 1284.7, 1299.0, 1327.7, 1334.8, 1359.3, 1360.2, 1378.0, 1401.2, 1417.1, 1418.9, 1431.2, 1439.3, 1450.5, 1575.6, 1660.0, 2957.8, 2965.4, 2965.7, 3023.4, 3025.0, 3025.6, 3031.7, 3035.0, 3054.0, 3057.5, 3070.4, 3075.0, 3092.8, 3130.3 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1
```

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01517	0.22990	0.09662	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78849	0.77290	0.09972	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24620	0.99950	0.09441	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24062	0.99671	0.88775	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78529	0.76917	0.89161	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01304	0.22985	0.89279	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68282	0.56640	0.42919	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45916	0.10959	0.43440	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91035	0.33095	0.43196	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90865	0.33227	0.22285	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45072	0.10245	0.22398	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68215	0.56387	0.22554	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34541	0.88876	0.76737	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11471	0.43137	0.76086	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57810	0.66428	0.76480	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58573	0.67071	0.56187	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11837	0.43690	0.55925	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34809	0.88770	0.55924	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01136	0.76447	0.89275	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24343	0.22733	0.88928	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78516	0.99682	0.89029	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78446	0.99815	0.09681	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24637	0.22850	0.09516	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01595	0.77003	0.09964	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68333	0.10058	0.22685	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91159	0.55924	0.22522	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45371	0.33249	0.22380	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45207	0.33581	0.43104	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90861	0.55593	0.43230	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68747	0.10449	0.42712	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35208	0.44517	0.55684	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57586	0.89514	0.56066	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11514	0.66765	0.56169	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11507	0.66392	0.76535	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57656	0.89598	0.76457	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34668	0.43555	0.76172	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91581	0.09837	0.11020	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91959	0.80538	0.11774	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21246	0.09696	0.11422	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11023	0.89489	0.87466	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81909	0.89976	0.87073	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11286	0.19875	0.87919	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58310	0.43717	0.44330	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60043	0.15054	0.42616	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87237	0.42492	0.45368	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77850	0.23233	0.20655	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48687	0.23441	0.20553	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78171	0.53188	0.21333	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24550	0.75909	0.78809	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24627	0.46573	0.77759	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54828	0.76536	0.77479	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45311	0.57639	0.54632	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14479	0.56662	0.55458	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44027	0.84420	0.54764	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99688	0.31113	0.16484	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70231	0.66586	0.15954	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35356	0.02014	0.15391	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32653	0.97795	0.82594	Biso	1.000	O

O23	1.0000	0.67664	0.68141	0.83374	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03090	0.33165	0.82779	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66831	0.65175	0.49547	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37805	0.99488	0.50018	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02164	0.35764	0.48896	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02924	0.67622	0.83289	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32685	0.33060	0.82475	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68107	0.97935	0.82825	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69795	0.01869	0.15646	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34930	0.31284	0.15967	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99744	0.66834	0.16581	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36791	0.36459	0.48736	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01076	0.64311	0.49631	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65187	0.99792	0.49360	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13647	0.24013	0.11858	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77612	0.88057	0.12888	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13868	0.87844	0.12317	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24919	0.11574	0.86070	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89103	0.75238	0.86538	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89329	0.11937	0.86815	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80344	0.57597	0.45123	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43800	0.21927	0.46423	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81222	0.20515	0.45878	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92086	0.45161	0.19081	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55902	0.08589	0.21146	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56223	0.45434	0.19948	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46599	0.90186	0.79607	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10057	0.54007	0.78038	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46625	0.54502	0.78903	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60435	0.79506	0.54047	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23283	0.43689	0.53237	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22391	0.78423	0.52968	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01288	0.26939	0.99503	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75487	0.74089	0.99625	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27810	0.00012	0.99087	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68244	0.60590	0.32683	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94247	0.33885	0.32690	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34366	0.91757	0.66372	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07778	0.38681	0.65924	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62124	0.66294	0.66404	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01125	0.73149	0.99698	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28461	0.26168	0.99209	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74737	0.99056	0.99355	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69850	0.06391	0.32630	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.94991	0.58635	0.32899	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41541	0.33031	0.32609	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34907	0.40158	0.65839	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61133	0.93955	0.66274	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08140	0.67765	0.66398	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39710	0.06475	0.32409	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20559	0.04863	0.37530	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21133	0.02498	0.44376	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29093	0.04388	0.33837	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.24060	0.13918	0.36327	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11441	0.97369	0.32449	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04460	0.85209	0.34434	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.10176	0.00192	0.25965	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.93649	0.02071	0.39705	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.04654	0.83245	0.41468	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.95696	0.81806	0.32142	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.07871	0.80673	0.30588	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.99505	0.10008	0.33513	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.96734	0.03803	0.46577	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.82983	0.91163	0.38075	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.09883	0.21166	0.35154	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.96315	0.08246	0.26683	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.80843	0.89720	0.30984	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.75792	0.90974	0.41556	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.83519	0.83921	0.40746	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.16850	0.22568	0.30660	Biso	1.000	H

H14 1.0000 0.12878 0.22059 0.42033 Biso 1.000 H
H15 1.0000 0.08327 0.28193 0.33773 Biso 1.000 H

Direct Cracking of 44-dimethyl-2-pentene:s; E= -977.850 eV; ZPVE= 5.519eV;
frequencies =587.6i, 52.5, 54.1, 60.5, 68.0, 79.9, 86.3, 105.6, 112.1, 125.8,
139.2, 173.6, 184.5, 204.0, 229.0, 238.0, 300.4, 342.4, 400.6, 415.0, 432.9, 472.4,
511.9, 583.3, 587.7, 590.1, 665.4, 670.9, 694.6, 736.2, 833.7, 875.1, 890.2, 910.5,
914.1, 920.7, 946.4, 970.0, 985.2, 1002.5, 1031.0, 1039.5, 1066.9, 1156.8, 1202.1,
1285.1, 1293.7, 1306.0, 1323.9, 1344.7, 1350.9, 1373.7, 1389.3, 1394.9, 1403.3,
1420.6, 1435.0, 1437.7, 1447.8, 1570.6, 1655.4, 2898.7, 2959.3, 2963.0, 3017.2,
3018.5, 3024.9, 3039.4, 3041.0, 3050.2, 3074.1, 3086.7, 3087.9, 3134.1, 3137.0 cm^-
1

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01930 0.23140 0.08417 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79216 0.77691 0.08496 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.25084 0.00263 0.07973 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.24626 0.00013 0.87378 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.79014 0.77238 0.87799 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01923 0.23186 0.87763 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.68567 0.56720 0.41679 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.46038 0.11246 0.41745 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91585 0.33199 0.41708 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.91449 0.33592 0.20989 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.45554 0.10928 0.20813 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68704 0.56802 0.21234 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.35116 0.89649 0.74984 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.12142 0.43593 0.74793 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58285 0.66981 0.75021 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58947 0.67503 0.54563 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.12059 0.43764 0.54647 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35106 0.89003 0.54437 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01836 0.77135 0.87834 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24984 0.23315 0.87604 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.79104 0.00222 0.87587 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78852 0.00358 0.08273 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25110 0.23447 0.08124 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.02110 0.77752 0.08658 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68743 0.10559 0.21314 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91723 0.56574 0.21296 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.46041 0.33811 0.20798 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45506 0.33788 0.41731 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91376 0.56009 0.41812 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68826 0.10879 0.41219 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35587 0.44663 0.54226 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57887 0.89682 0.54544 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11756 0.66845 0.54901 Biso 1.000 Si

Si33	1.0000	0.12246	0.66886	0.75271	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58256	0.89946	0.74913	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35345	0.43810	0.74600	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91977	0.10081	0.10101	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92433	0.81284	0.10251	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22018	0.10299	0.09399	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11550	0.90137	0.85575	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82394	0.90364	0.86020	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11870	0.20080	0.86125	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58518	0.43891	0.43429	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60256	0.15676	0.40790	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88179	0.42953	0.43515	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78316	0.23763	0.19399	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49431	0.24125	0.18676	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78609	0.53502	0.20162	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25333	0.76617	0.77145	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25308	0.46855	0.76065	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54932	0.76787	0.76466	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45788	0.57723	0.53127	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14548	0.56670	0.53897	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44205	0.84467	0.54043	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00029	0.31648	0.14741	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70957	0.67213	0.14811	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36012	0.02590	0.13756	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33328	0.98437	0.81087	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68303	0.68709	0.81752	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03924	0.33773	0.81651	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67429	0.65525	0.48233	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38197	0.99228	0.47899	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02421	0.35500	0.47696	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03765	0.68196	0.82093	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33391	0.33435	0.81017	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68595	0.98240	0.81391	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70140	0.02390	0.14203	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35377	0.31738	0.14638	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99950	0.67279	0.15046	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36772	0.36568	0.47035	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01235	0.64556	0.48540	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64691	0.00237	0.47941	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14030	0.24249	0.10885	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77527	0.88272	0.11053	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14274	0.88511	0.11424	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25948	0.12245	0.85270	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89659	0.75649	0.85156	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89949	0.12314	0.84971	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80550	0.57475	0.43784	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43688	0.21974	0.45175	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81312	0.20868	0.44477	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92793	0.45741	0.18287	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56280	0.09054	0.19916	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56744	0.46043	0.18277	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47354	0.91138	0.77433	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11068	0.54635	0.76909	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47322	0.54798	0.77227	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60472	0.79663	0.51833	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23645	0.43967	0.52157	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22644	0.78515	0.51649	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01803	0.26606	0.98100	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75772	0.73995	0.98202	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27863	0.99337	0.97663	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68329	0.60540	0.31446	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95034	0.33583	0.31292	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34416	0.92649	0.64682	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07974	0.39046	0.64708	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62617	0.67445	0.64862	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.02143	0.74339	0.98327	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28734	0.27321	0.97855	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75590	0.00277	0.97894	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70172	0.06735	0.31234	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95738	0.59827	0.31611	Biso	1.000	O

O68	1.0000	0.42542	0.33526	0.31127	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35580	0.40215	0.64308	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.62240	0.93808	0.64706	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08533	0.67862	0.65152	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39765	0.07606	0.30722	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19990	0.07315	0.32140	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23308	0.16256	0.33728	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29417	0.06788	0.31623	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16740	0.04724	0.25394	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.14959	0.99342	0.38859	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.16099	0.02656	0.48306	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.89834	0.01173	0.48711	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.23307	0.11141	0.49569	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08177	0.02696	0.49927	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.16389	0.96363	0.52678	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.86640	0.94560	0.41500	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.95052	0.10397	0.48231	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.89603	0.98618	0.32147	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.93515	0.94363	0.28604	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.95363	0.07831	0.31769	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.81834	0.96534	0.28450	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.08563	0.87127	0.36733	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.13133	0.83055	0.39501	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.07268	0.85394	0.29604	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.00358	0.83168	0.40232	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.81113	0.85408	0.42356	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.87049	0.97643	0.55348	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2-methyl-2-heptene: ^; E= -993.717 eV; ZPVE= 6.345eV;
frequencies =210.1i, 24.3, 65.5, 73.0, 78.2, 95.5, 97.3, 105.8, 126.2, 127.9,
134.4, 158.2, 165.7, 181.5, 225.1, 261.2, 278.4, 285.2, 317.6, 355.9, 379.7, 422.7,
433.3, 551.1, 574.9, 582.7, 615.9, 656.1, 662.3, 694.2, 718.2, 780.7, 799.5, 844.2,
865.4, 897.8, 911.0, 928.7, 944.4, 947.7, 1000.7, 1018.8, 1036.6, 1046.5, 1071.8,
1129.4, 1161.4, 1188.3, 1233.9, 1234.7, 1248.6, 1282.2, 1289.1, 1294.7, 1316.9,
1325.5, 1353.5, 1356.6, 1379.2, 1400.9, 1426.3, 1435.5, 1438.9, 1442.8, 1452.9,
1455.4, 1592.8, 1634.6, 2920.3, 2973.0, 3005.1, 3011.0, 3023.1, 3027.3, 3042.4,
3047.9, 3051.8, 3058.0, 3058.9, 3076.0, 3087.3, 3087.9, 3118.2, 3142.4 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.02523	0.23361	0.09720	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79718	0.77848	0.10048	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25672	0.00560	0.09132	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24960	0.00140	0.88522	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79373	0.77387	0.89439	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02311	0.23415	0.89169	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68819	0.55974	0.43327	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45309	0.10855	0.43199	Biso	1.000	Al

Si8	1.0000	0.92335	0.33572	0.43141	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.92228	0.33960	0.22536	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45894	0.10927	0.22270	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69421	0.56459	0.22486	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35563	0.89488	0.76555	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12464	0.43689	0.76202	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58796	0.67061	0.76414	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59577	0.67694	0.56208	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12243	0.43678	0.56083	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35735	0.89041	0.55713	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.02160	0.77330	0.89166	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.25257	0.23438	0.88761	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79362	0.00372	0.89284	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79372	0.00659	0.09757	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25613	0.23719	0.09302	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02681	0.78190	0.10030	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69535	0.11655	0.22735	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.92406	0.57068	0.22672	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.46330	0.34078	0.22211	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45366	0.33863	0.42963	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.92122	0.56896	0.43261	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69129	0.11699	0.43117	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.36038	0.45489	0.55644	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58954	0.90372	0.55945	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11968	0.67058	0.56362	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12398	0.67011	0.76611	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58573	0.90113	0.76409	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35632	0.44167	0.76062	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92705	0.10159	0.10973	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.93055	0.81794	0.11746	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22567	0.10579	0.10542	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11884	0.90260	0.86725	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82791	0.90571	0.87965	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.12141	0.20202	0.87260	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58702	0.43109	0.44850	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59574	0.15177	0.43439	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.90272	0.44271	0.44478	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78919	0.24872	0.20572	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49532	0.24173	0.20710	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.79160	0.53057	0.20715	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25502	0.76562	0.78677	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25666	0.47249	0.77878	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55519	0.76970	0.77313	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46162	0.58651	0.54904	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13322	0.56008	0.55504	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45484	0.85465	0.54265	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00422	0.31667	0.16117	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71822	0.67360	0.16529	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36688	0.03011	0.14821	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33604	0.98524	0.82186	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68593	0.68973	0.83425	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04101	0.33914	0.83034	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67152	0.64791	0.49546	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37166	0.99123	0.49598	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02852	0.35033	0.49148	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03948	0.68205	0.83550	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33690	0.33567	0.82196	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69039	0.98249	0.82823	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.71405	0.03374	0.16032	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35998	0.32048	0.15680	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00584	0.67685	0.16341	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37472	0.37566	0.48467	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02073	0.65962	0.49717	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66603	0.00948	0.49462	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14595	0.24483	0.12320	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77796	0.88380	0.12385	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14886	0.88901	0.12766	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26270	0.12382	0.86469	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89973	0.75852	0.86543	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90202	0.12497	0.86748	Biso	1.000	O

O43	1.0000	0.80711	0.56910	0.46144	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42465	0.21512	0.45906	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81301	0.22112	0.46415	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94567	0.46663	0.20528	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56953	0.09640	0.20965	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57265	0.46078	0.19471	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47585	0.90823	0.79586	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11030	0.54617	0.77853	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47693	0.55023	0.78723	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61895	0.80339	0.53981	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24286	0.45073	0.53330	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23582	0.77988	0.53251	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02703	0.27187	0.99471	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76207	0.73843	0.99817	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28218	0.99440	0.98803	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69412	0.59496	0.32921	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95378	0.32898	0.32776	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.35657	0.92297	0.66138	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08719	0.38775	0.66150	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.63347	0.67073	0.66389	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.02587	0.74776	0.99691	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28982	0.27516	0.99003	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75491	0.00415	0.99502	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70813	0.08572	0.32899	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95539	0.61181	0.32993	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42594	0.34357	0.32391	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35661	0.40791	0.65687	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.62126	0.94522	0.66245	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08818	0.68479	0.66555	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39994	0.06686	0.32014	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19555	0.05778	0.32844	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22942	0.13673	0.36636	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28029	0.04592	0.32578	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.18213	0.06454	0.25758	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11445	0.95923	0.37077	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.10055	0.94425	0.46687	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06519	0.88320	0.33005	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.84509	0.96382	0.36002	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.14239	0.02413	0.50394	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01047	0.89214	0.48473	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.13918	0.89246	0.48626	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.94149	0.02035	0.31327	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.83311	0.00542	0.41781	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.75228	0.84562	0.34188	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.00581	0.10692	0.33049	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.95627	0.98416	0.25348	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.77868	0.80912	0.28854	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.74253	0.79568	0.40185	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.63558	0.83212	0.31978	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.64293	0.87785	0.25807	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.61357	0.87436	0.37148	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.53806	0.71044	0.30990	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.45816	0.71035	0.29894	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.52625	0.65892	0.36935	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.55020	0.66726	0.25297	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2-octene:o; E= -993.874 eV; ZPVE= 6.327eV; frequencies
=820.9i, 42.4, 52.3, 63.1, 66.6, 72.2, 83.3, 92.6, 102.0, 111.6, 127.6, 141.9,
162.0, 229.3, 262.0, 262.9, 305.2, 316.7, 342.3, 360.3, 378.5, 464.5, 489.5, 529.3,
585.4, 589.2, 663.3, 677.9, 682.4, 714.7, 721.2, 774.3, 780.5, 863.9, 891.2, 906.2,
920.4, 924.8, 950.8, 965.9, 997.6, 1015.9, 1030.2, 1040.0, 1055.8, 1092.0, 1163.4,
1187.1, 1200.2, 1208.8, 1230.2, 1266.6, 1276.9, 1290.0, 1293.5, 1307.8, 1337.8,
1344.3, 1367.4, 1401.4, 1417.4, 1423.5, 1431.5, 1441.4, 1447.8, 1454.6, 1531.7,
1613.6, 2934.7, 2940.2, 2948.7, 2959.0, 2961.6, 2978.7, 2996.9, 3026.2, 3029.8,
3057.3, 3062.4, 3073.4, 3078.7, 3113.8, 3179.9, 3185.2 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067

_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.02507 0.23249 0.09524 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79694 0.77652 0.09643 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.25842 0.00522 0.09176 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.25316 0.00121 0.88653 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.79591 0.77330 0.88972 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.02383 0.23268 0.88906 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.69250 0.57012 0.42802 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.46352 0.11252 0.43317 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.92558 0.33462 0.42920 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.92151 0.33732 0.22231 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.46003 0.10824 0.22301 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.69435 0.56887 0.22380 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.35563 0.89255 0.76454 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.12644 0.43587 0.75924 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58962 0.66889 0.76121 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.59890 0.67647 0.55802 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.12630 0.43905 0.55799 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35649 0.89181 0.55589 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.02208 0.76847 0.89179 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.25338 0.23137 0.88589 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.79545 0.00235 0.88833 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.79353 0.00400 0.09479 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25638 0.23407 0.09279 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.02539 0.77555 0.09740 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.69426 0.10767 0.22593 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.92308 0.56735 0.22512 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.46309 0.33812 0.22135 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45602 0.33981 0.42804 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.92004 0.56355 0.43137 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.69658 0.10958 0.42589 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.36171 0.45048 0.55378 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.58752 0.90081 0.55720 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.12119 0.67182 0.56033 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.12536 0.66857 0.76350 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.58653 0.89909 0.76183 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.35771 0.43980 0.75886 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.92529 0.10165 0.11127 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.92920 0.81187 0.11472 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.22566 0.10338 0.11085 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.12277 0.89861 0.87625 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.82905 0.90437 0.87249 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.12266 0.20092 0.87192 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.58460 0.44549 0.44137 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.60366 0.14804 0.42652 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.89761 0.43607 0.44821 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.78980 0.23979 0.20621 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.49617 0.23992 0.20315 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.79212 0.53495 0.20845 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.25598 0.76316 0.78633 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.25831 0.47116 0.77657 Biso 1.000 O

O15	1.0000	0.55747	0.76823	0.77229	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46819	0.57848	0.54151	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13811	0.56285	0.55200	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45347	0.85505	0.54175	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00617	0.31726	0.15887	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71310	0.67111	0.15855	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36418	0.02434	0.15267	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33735	0.98242	0.82270	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68891	0.68719	0.82972	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04287	0.33780	0.82749	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.68520	0.66174	0.49243	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37814	0.99739	0.49757	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03274	0.35234	0.48833	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03998	0.68009	0.83211	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33795	0.33446	0.82150	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69098	0.98211	0.82564	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70776	0.02550	0.15484	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.36138	0.32031	0.15484	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00800	0.67532	0.16448	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36835	0.36458	0.48380	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01822	0.65526	0.49612	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66806	0.00458	0.49242	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14589	0.24301	0.12017	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78170	0.88343	0.12250	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14847	0.88482	0.11866	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26123	0.12020	0.86009	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.90297	0.75870	0.86330	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90360	0.12363	0.86276	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80585	0.56669	0.45373	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.44702	0.22555	0.46195	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81950	0.21373	0.45702	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93635	0.45985	0.19714	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56946	0.09295	0.21283	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57273	0.46035	0.20011	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47637	0.90585	0.79296	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11129	0.54452	0.77612	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47875	0.54845	0.78471	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61319	0.79899	0.53620	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24732	0.45329	0.53179	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23516	0.78303	0.52808	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02458	0.26823	0.99234	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76315	0.74040	0.99357	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29353	0.00616	0.98898	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69988	0.61222	0.32545	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95813	0.33605	0.32484	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.35335	0.92056	0.66084	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08969	0.38835	0.65827	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.63417	0.67016	0.66054	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01865	0.73334	0.99572	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.29031	0.26751	0.98911	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75914	0.00183	0.99128	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.71024	0.07080	0.32511	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95835	0.60178	0.32859	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42089	0.33344	0.32274	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35787	0.40590	0.65516	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.62181	0.94223	0.66004	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.09124	0.68495	0.66305	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.40276	0.07134	0.32226	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20873	0.06713	0.35196	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22304	0.08719	0.42279	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29723	0.05436	0.33185	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.23112	0.14026	0.30910	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11875	0.96307	0.32673	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.08255	0.89130	0.37260	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09869	0.94215	0.25688	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.91053	0.94334	0.38165	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.95613	0.99248	0.30297	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.01080	0.08426	0.29764	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.93179	0.94494	0.24112	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.93198	0.00486	0.46736	Biso	1.000	C

H8	1.0000	0.85152	0.99890	0.48870	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.99280	0.09588	0.45794	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97236	0.95606	0.54138	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.91220	0.86438	0.54842	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.05429	0.96381	0.52253	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.98565	0.01492	0.63049	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.90213	0.00076	0.65227	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.03946	0.10749	0.62194	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.03621	0.97329	0.70118	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.98496	0.88076	0.70917	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.04058	0.01194	0.76601	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.12270	0.99364	0.68298	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.85264	0.85143	0.38380	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 4-methyl-3-heptene:>; E= -994.044 eV; ZPVE= 6.299eV;
frequencies =1059.9i, 36.4, 38.5, 56.5, 63.6, 73.9, 91.7, 96.9, 100.7, 115.6,
136.6, 163.1, 191.5, 201.9, 241.3, 245.0, 281.8, 315.9, 326.6, 339.3, 403.0, 447.2,
476.2, 503.6, 543.1, 592.3, 593.9, 634.5, 666.8, 704.9, 716.2, 743.4, 789.1, 816.4,
850.0, 881.4, 899.4, 914.4, 929.4, 966.1, 970.9, 983.0, 1001.1, 1031.9, 1039.9,
1080.7, 1085.7, 1182.1, 1209.2, 1223.8, 1256.7, 1277.4, 1284.3, 1289.8, 1330.5,
1337.6, 1356.1, 1359.3, 1390.5, 1408.2, 1418.5, 1422.4, 1439.4, 1441.8, 1443.8,
1453.0, 1535.2, 1609.5, 2922.6, 2952.4, 2956.3, 2972.4, 2975.7, 3003.4, 3019.1,
3026.5, 3031.8, 3037.0, 3068.0, 3074.6, 3076.3, 3107.7, 3160.7, 3172.1 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02014	0.23252	0.09571	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79408	0.77813	0.09839	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25155	0.00329	0.09129	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24525	0.99969	0.88408	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79043	0.77274	0.89046	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01853	0.23172	0.88953	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68544	0.56696	0.42849	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45471	0.10733	0.43093	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91789	0.33430	0.42905	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91554	0.33675	0.22227	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45450	0.10674	0.22140	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68739	0.56717	0.22380	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35049	0.89198	0.76454	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12053	0.43494	0.75949	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58359	0.66795	0.76250	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59109	0.67371	0.55982	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11945	0.43605	0.55818	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35120	0.89030	0.55594	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01724	0.77011	0.89001	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24823	0.23114	0.88663	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79087	0.00118	0.88809	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78915	0.00343	0.09540	Biso	1.000	Si

Si22	1.0000	0.25103	0.23319	0.09306	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02217	0.77754	0.09836	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68884	0.10634	0.22583	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91857	0.56696	0.22493	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45988	0.33860	0.22088	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45402	0.33923	0.42872	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91684	0.56483	0.42984	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69023	0.10654	0.42515	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35519	0.44810	0.55443	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58321	0.90024	0.55767	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11633	0.66953	0.56103	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11993	0.66765	0.76407	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58139	0.89878	0.76227	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35162	0.43910	0.75919	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92059	0.10161	0.11253	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92623	0.81386	0.11594	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21903	0.10186	0.10923	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11467	0.89988	0.86735	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82480	0.90373	0.87049	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11712	0.19954	0.87317	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58418	0.43954	0.44680	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59405	0.14064	0.42453	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88962	0.43575	0.44762	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78403	0.23851	0.20644	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49206	0.23934	0.20558	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78719	0.53536	0.21333	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25078	0.76246	0.78609	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25265	0.47112	0.77621	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55199	0.76780	0.77239	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45916	0.57800	0.54428	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13421	0.56111	0.55278	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44970	0.85582	0.54117	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00098	0.31693	0.15949	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71041	0.67196	0.15997	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36253	0.02731	0.14735	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33193	0.98183	0.82247	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68154	0.68589	0.83234	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03792	0.33700	0.82813	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67476	0.65578	0.49379	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36948	0.99415	0.49682	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02408	0.35097	0.48896	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03505	0.67960	0.83298	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33201	0.33441	0.82231	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68554	0.98124	0.82657	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70228	0.02513	0.15378	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35513	0.31720	0.15662	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00057	0.67232	0.16119	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36727	0.36530	0.48454	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01398	0.65360	0.49656	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66502	0.00287	0.49227	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14098	0.24298	0.12035	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77790	0.88411	0.12612	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14486	0.88431	0.12465	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25753	0.12104	0.86005	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89558	0.75542	0.86321	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89820	0.12309	0.86289	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80500	0.57374	0.44888	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43884	0.22096	0.45818	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81110	0.21365	0.45615	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92911	0.45825	0.19572	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56375	0.09105	0.21347	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56862	0.45884	0.19347	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47124	0.90555	0.79337	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10521	0.54336	0.77685	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47236	0.54771	0.78534	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60762	0.79720	0.53773	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23850	0.44588	0.53092	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23079	0.78015	0.52925	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01861	0.26727	0.99278	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76015	0.74380	0.99513	Biso	1.000	O

O57	1.0000	0.27861	0.99769	0.98747	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68197	0.60367	0.32584	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95205	0.33683	0.32498	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34911	0.92011	0.66074	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08314	0.38653	0.65880	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62814	0.66819	0.66195	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.02010	0.74281	0.99498	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28597	0.26790	0.98969	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75574	0.99919	0.99156	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70526	0.06834	0.32447	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95913	0.60229	0.32753	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42360	0.34120	0.32307	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35137	0.40371	0.65584	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61694	0.94215	0.66047	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08537	0.68295	0.66343	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39293	0.06535	0.31939	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20694	0.06980	0.35793	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21169	0.05131	0.42806	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29301	0.05311	0.32745	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25034	0.16006	0.34120	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10811	0.00011	0.31228	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.05106	0.91319	0.33401	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09443	0.01995	0.24490	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.92577	0.99855	0.39975	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.98554	0.08452	0.34193	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.82589	0.89035	0.36893	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.05651	0.16530	0.36384	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.95774	0.07934	0.27334	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.80525	0.89471	0.29923	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.75095	0.86908	0.40979	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.84144	0.81889	0.37656	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.95676	0.01004	0.49660	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.89221	0.02111	0.53284	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.03786	0.08915	0.50708	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96193	0.90953	0.53799	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.87926	0.83159	0.53081	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.02319	0.89447	0.50110	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.99510	0.92869	0.63601	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.93420	0.94160	0.67519	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.07942	0.00391	0.64556	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.99733	0.85540	0.66425	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 234-trimethyl-2-pentene:s; E= -994.396 eV; ZPVE= 6.282eV;
frequencies =546.4i, 49.3, 63.5, 66.4, 80.7, 90.6, 95.8, 100.5, 115.5, 126.4,
138.4, 145.9, 157.7, 190.7, 239.9, 251.2, 267.6, 290.4, 297.9, 310.2, 344.5, 380.4,
428.7, 449.1, 517.7, 521.2, 585.3, 590.8, 649.8, 666.2, 694.1, 755.5, 770.2, 799.5,
844.1, 894.5, 914.1, 932.6, 944.4, 947.4, 980.5, 993.6, 1010.7, 1039.9, 1054.2,
1066.1, 1108.5, 1190.6, 1205.4, 1213.1, 1281.9, 1324.7, 1327.8, 1335.6, 1355.3,
1362.4, 1369.6, 1384.6, 1387.1, 1413.9, 1421.6, 1424.5, 1433.0, 1439.2, 1440.9,
1446.0, 1571.4, 1658.2, 2942.2, 2948.6, 2958.5, 2962.5, 2983.7, 3009.9, 3016.3,
3018.1, 3022.0, 3036.3, 3054.4, 3058.3, 3059.1, 3090.9, 3099.4, 3124.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	
_atom_site_occupancy	

_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01664	0.23220	0.09137	Biso 1.000 Si
Si2	1.0000	0.79034	0.77713	0.09482	Biso 1.000 Si
Si3	1.0000	0.24754	0.00250	0.08945	Biso 1.000 Si
Si4	1.0000	0.24141	0.99840	0.88178	Biso 1.000 Si
Si5	1.0000	0.78727	0.77108	0.88706	Biso 1.000 Si
Si6	1.0000	0.01559	0.23158	0.88704	Biso 1.000 Si
Si7	1.0000	0.68319	0.56721	0.42515	Biso 1.000 Si
Al1	1.0000	0.45453	0.10832	0.42716	Biso 1.000 Al
Si8	1.0000	0.91384	0.33308	0.42577	Biso 1.000 Si
Si9	1.0000	0.91198	0.33665	0.21818	Biso 1.000 Si
Si10	1.0000	0.45242	0.10768	0.21708	Biso 1.000 Si
Si11	1.0000	0.68371	0.56673	0.22084	Biso 1.000 Si
Si12	1.0000	0.34819	0.89272	0.76072	Biso 1.000 Si
Si13	1.0000	0.11731	0.43339	0.75600	Biso 1.000 Si
Si14	1.0000	0.57994	0.66694	0.75934	Biso 1.000 Si
Si15	1.0000	0.58741	0.67236	0.55636	Biso 1.000 Si
Si16	1.0000	0.11798	0.43591	0.55456	Biso 1.000 Si
Si17	1.0000	0.34847	0.89062	0.55308	Biso 1.000 Si
Si18	1.0000	0.01395	0.76825	0.88752	Biso 1.000 Si
Si19	1.0000	0.24585	0.23018	0.88450	Biso 1.000 Si
Si20	1.0000	0.78750	0.99930	0.88457	Biso 1.000 Si
Si21	1.0000	0.78539	0.00211	0.09060	Biso 1.000 Si
Si22	1.0000	0.24772	0.23214	0.09072	Biso 1.000 Si
Si23	1.0000	0.01829	0.77639	0.09583	Biso 1.000 Si
Si24	1.0000	0.68504	0.10523	0.22151	Biso 1.000 Si
Si25	1.0000	0.91401	0.56424	0.22133	Biso 1.000 Si
Si26	1.0000	0.45673	0.33738	0.21733	Biso 1.000 Si
Si27	1.0000	0.45285	0.33771	0.42618	Biso 1.000 Si
Si28	1.0000	0.91157	0.55975	0.42725	Biso 1.000 Si
Si29	1.0000	0.68717	0.10507	0.42147	Biso 1.000 Si
Si30	1.0000	0.35277	0.44522	0.55155	Biso 1.000 Si
Si31	1.0000	0.57858	0.89776	0.55383	Biso 1.000 Si
Si32	1.0000	0.11396	0.66710	0.55851	Biso 1.000 Si
Si33	1.0000	0.11729	0.66594	0.76114	Biso 1.000 Si
Si34	1.0000	0.57839	0.89776	0.75833	Biso 1.000 Si
Si35	1.0000	0.34906	0.43697	0.75611	Biso 1.000 Si
O1	1.0000	0.91707	0.10078	0.10434	Biso 1.000 O
O2	1.0000	0.92251	0.81295	0.11291	Biso 1.000 O
O3	1.0000	0.21529	0.10096	0.10864	Biso 1.000 O
O4	1.0000	0.11096	0.89824	0.86516	Biso 1.000 O
O5	1.0000	0.82215	0.90224	0.86725	Biso 1.000 O
O6	1.0000	0.11512	0.20030	0.87221	Biso 1.000 O
O7	1.0000	0.58274	0.43937	0.44327	Biso 1.000 O
O8	1.0000	0.59473	0.14415	0.42202	Biso 1.000 O
O9	1.0000	0.87935	0.42969	0.44717	Biso 1.000 O
O10	1.0000	0.78074	0.23752	0.20383	Biso 1.000 O
O11	1.0000	0.48984	0.23967	0.19737	Biso 1.000 O
O12	1.0000	0.78303	0.53406	0.21066	Biso 1.000 O
O13	1.0000	0.24842	0.76248	0.77983	Biso 1.000 O
O14	1.0000	0.24892	0.46749	0.77187	Biso 1.000 O
O15	1.0000	0.54806	0.76657	0.76967	Biso 1.000 O
O16	1.0000	0.45590	0.57539	0.54085	Biso 1.000 O
O17	1.0000	0.13947	0.56372	0.54898	Biso 1.000 O
O18	1.0000	0.44426	0.85245	0.53942	Biso 1.000 O
O19	1.0000	0.99728	0.31466	0.15730	Biso 1.000 O
O20	1.0000	0.70694	0.67113	0.15661	Biso 1.000 O
O21	1.0000	0.35803	0.02516	0.14540	Biso 1.000 O
O22	1.0000	0.32840	0.98024	0.82074	Biso 1.000 O
O23	1.0000	0.67835	0.68482	0.82871	Biso 1.000 O
O24	1.0000	0.03349	0.33430	0.82320	Biso 1.000 O
O25	1.0000	0.67243	0.65552	0.49092	Biso 1.000 O
O26	1.0000	0.36799	0.99249	0.49080	Biso 1.000 O
O27	1.0000	0.02205	0.35360	0.48464	Biso 1.000 O
O28	1.0000	0.03353	0.67872	0.83072	Biso 1.000 O

O29	1.0000	0.33001	0.33323	0.82012	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68390	0.98060	0.82137	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69994	0.02478	0.14988	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35039	0.31687	0.15525	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99696	0.67252	0.16037	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36522	0.36346	0.48093	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01103	0.64705	0.49309	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65843	0.00029	0.48797	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13749	0.24257	0.11539	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77440	0.88318	0.12189	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14075	0.88318	0.12252	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25319	0.11927	0.85674	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89217	0.75295	0.86018	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89576	0.12152	0.86179	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80363	0.57556	0.44540	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43830	0.22067	0.45888	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81084	0.20928	0.45092	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92450	0.45682	0.18816	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56080	0.09075	0.20742	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56436	0.45899	0.19104	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46881	0.90579	0.78939	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10455	0.54281	0.77597	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46895	0.54661	0.78239	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60241	0.79473	0.53329	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23484	0.44053	0.52847	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22554	0.78200	0.52844	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01628	0.27086	0.98928	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75681	0.74186	0.99166	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27421	0.99741	0.98543	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67943	0.60424	0.32275	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94880	0.34184	0.32139	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34807	0.92420	0.65731	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07872	0.38717	0.65495	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62424	0.66750	0.65867	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01635	0.74080	0.99268	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28499	0.26572	0.98748	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74861	0.99508	0.98724	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69890	0.06553	0.32031	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95446	0.59450	0.32460	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42203	0.33625	0.32044	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35016	0.40129	0.65297	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61356	0.94008	0.65637	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07932	0.67675	0.66050	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39468	0.07137	0.31591	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20607	0.07729	0.35013	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23730	0.10043	0.41838	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28894	0.06293	0.32433	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21348	0.14677	0.30906	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11343	0.97035	0.33726	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08555	0.87161	0.39286	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06526	0.95389	0.27535	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97017	0.02412	0.47220	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13243	0.89349	0.45552	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99369	0.82219	0.40493	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.10548	0.81409	0.35513	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.92924	0.00938	0.38853	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.03990	0.10887	0.48910	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.93108	0.93996	0.54617	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.97600	0.10699	0.32457	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.86612	0.85425	0.52618	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.89537	0.96678	0.60056	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.00268	0.93492	0.57543	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.00285	0.08615	0.26176	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.04765	0.18413	0.35230	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.90926	0.12640	0.30680	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.83256	0.90066	0.35381	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.85781	0.87206	0.29399	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.76236	0.91356	0.33288	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.79870	0.83187	0.40250	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 344-3methyl-2-pentene:h; E= -994.729 eV; ZPVE= 6.253eV;
frequencies =725.6i, 21.9, 37.2, 45.7, 63.2, 71.4, 82.3, 94.9, 104.8, 113.6, 132.1,
150.5, 181.8, 187.3, 199.9, 222.8, 247.0, 272.0, 280.7, 300.4, 340.6, 400.5, 438.6,
477.7, 495.2, 500.8, 585.1, 588.9, 665.6, 671.3, 685.0, 717.1, 743.4, 829.3, 856.9,
878.6, 888.2, 939.4, 947.3, 954.0, 975.2, 985.7, 1022.8, 1027.3, 1046.0, 1059.7,
1067.5, 1134.4, 1206.7, 1281.9, 1287.4, 1292.7, 1300.0, 1326.6, 1343.3, 1353.3,
1358.3, 1365.3, 1393.5, 1409.0, 1418.4, 1419.3, 1424.1, 1429.7, 1439.0, 1459.4,
1565.2, 1684.6, 2942.3, 2948.4, 2953.9, 2969.2, 2995.5, 3002.1, 3023.3, 3024.2,
3032.2, 3034.4, 3037.6, 3042.0, 3058.1, 3084.5, 3089.9, 3133.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01726	0.22820	0.08490	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79050	0.77443	0.08506	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24974	0.99986	0.07962	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24481	0.99745	0.87387	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78895	0.76990	0.87840	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01784	0.22899	0.87795	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68436	0.56527	0.41686	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45744	0.10894	0.41739	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91363	0.33008	0.41737	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91285	0.33350	0.20998	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45308	0.10642	0.20897	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68545	0.56529	0.21237	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35008	0.89300	0.75120	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11956	0.43306	0.74841	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58164	0.66676	0.75017	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58804	0.67174	0.54643	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11861	0.43461	0.54716	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35022	0.88706	0.54447	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01683	0.76904	0.87856	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24872	0.23095	0.87644	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79011	0.00010	0.87596	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78608	0.00120	0.08284	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24962	0.23196	0.08147	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01943	0.77566	0.08700	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68610	0.10350	0.21315	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91575	0.56367	0.21326	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45851	0.33577	0.20868	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45387	0.33572	0.41794	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91263	0.55879	0.41829	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68748	0.10548	0.41185	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35452	0.44491	0.54259	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57846	0.89549	0.54561	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11609	0.66579	0.54994	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12047	0.66606	0.75332	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58097	0.89768	0.74928	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35213	0.43642	0.74686	Biso	1.000	Si

O1	1.0000	0.91713	0.09808	0.10264	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92290	0.81134	0.10287	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21985	0.10078	0.09334	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11401	0.89896	0.85553	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82294	0.90133	0.86149	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11753	0.19830	0.86143	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58403	0.43692	0.43485	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59838	0.14920	0.40741	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88011	0.42804	0.43481	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78153	0.23547	0.19293	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49198	0.23846	0.18789	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78438	0.53211	0.20173	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25133	0.76303	0.77244	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25133	0.46624	0.76133	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54954	0.76619	0.76124	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45594	0.57573	0.53054	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14388	0.56387	0.54079	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44201	0.84318	0.53633	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99913	0.31429	0.14774	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70821	0.66966	0.14834	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35925	0.02328	0.13732	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33145	0.98181	0.81035	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68171	0.68526	0.81788	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03789	0.33538	0.81750	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67262	0.65353	0.48180	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37821	0.99035	0.48080	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02204	0.35322	0.47731	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03586	0.67904	0.82178	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33243	0.33185	0.81017	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68522	0.97972	0.81358	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69813	0.02116	0.14143	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35179	0.31486	0.14704	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99756	0.67058	0.15051	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36661	0.36323	0.47153	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01148	0.64333	0.48580	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64978	0.99929	0.47875	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13811	0.23866	0.10926	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77218	0.87970	0.10929	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14138	0.88290	0.11468	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25863	0.12024	0.85371	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89523	0.75416	0.85117	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89855	0.12053	0.84890	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80452	0.57363	0.43834	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43645	0.21767	0.45163	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81012	0.20780	0.44596	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92699	0.45547	0.18357	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56088	0.08820	0.20184	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56577	0.45769	0.18285	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47150	0.90707	0.77820	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10830	0.54328	0.76896	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47122	0.54634	0.77439	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60566	0.79519	0.52291	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23428	0.43631	0.52185	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22555	0.78201	0.51753	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01563	0.26186	0.98150	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75656	0.73629	0.98222	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27702	0.98952	0.97657	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68163	0.60261	0.31442	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94756	0.33246	0.31323	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34624	0.92248	0.64763	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07787	0.38664	0.64768	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62377	0.66654	0.64896	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01976	0.74175	0.98361	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28598	0.27169	0.97890	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75518	0.00227	0.97881	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70355	0.06645	0.31192	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95609	0.59719	0.31629	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42384	0.33373	0.31197	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35550	0.40188	0.64372	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61779	0.93957	0.64735	Biso	1.000	O

O71	1.0000	0.08358	0.67659	0.65222	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39284	0.07275	0.30754	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19486	0.07139	0.31966	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22635	0.16174	0.32980	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29057	0.06644	0.31593	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16184	0.03848	0.25340	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.14646	0.99777	0.39081	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.16388	0.03842	0.48387	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.92961	0.04933	0.46236	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.18660	0.12752	0.48922	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08878	0.98445	0.52422	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.23451	0.03037	0.51176	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.87419	0.95257	0.41629	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.97924	0.12891	0.42569	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.92738	0.05931	0.56116	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.87025	0.94298	0.31740	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.87901	0.97576	0.59308	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.88838	0.11024	0.58025	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.01350	0.10289	0.58974	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.89715	0.88347	0.29367	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.92417	0.02535	0.28522	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.78295	0.90958	0.29324	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.08659	0.87392	0.37583	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.13312	0.83794	0.40975	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.07742	0.85086	0.30543	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.00280	0.83477	0.40790	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.82358	0.87326	0.45295	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 244-trimethyl-2-pentene;p; E= -994.665 eV; ZPVE= 6.275eV;
frequencies =653.8i, 34.4, 65.0, 66.7, 78.2, 81.5, 89.5, 99.5, 114.8, 122.0, 139.8,
150.0, 171.3, 196.0, 218.3, 234.7, 255.2, 302.6, 343.6, 378.0, 398.1, 432.4, 438.4,
440.0, 482.0, 509.2, 583.2, 589.9, 664.5, 680.4, 688.8, 690.9, 725.5, 819.8, 828.6,
874.0, 885.3, 894.8, 933.4, 944.0, 957.3, 963.0, 983.9, 985.7, 1044.6, 1048.5,
1059.8, 1062.3, 1205.6, 1268.6, 1288.5, 1304.1, 1328.1, 1341.7, 1351.0, 1356.3,
1365.3, 1388.5, 1395.5, 1408.9, 1416.5, 1424.3, 1426.1, 1436.7, 1445.9, 1459.4,
1566.5, 1664.2, 2953.7, 2953.8, 2970.4, 2970.9, 3009.1, 3028.1, 3029.2, 3036.8,
3037.7, 3055.6, 3056.0, 3081.1, 3081.3, 3089.8, 3134.5, 3141.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.01523	0.22687	0.08421	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78823	0.77182	0.08690	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24699	0.99720	0.08067	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24186	0.99438	0.87477	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78577	0.76628	0.87996	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01563	0.22718	0.87930	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68173	0.56095	0.41818	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45704	0.10627	0.41895	Biso	1.000	Al

Si8	1.0000	0.91170	0.32832	0.41809	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91005	0.33175	0.21030	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45098	0.10320	0.20982	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68212	0.56187	0.21351	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34779	0.88957	0.75263	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11659	0.42965	0.74884	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57890	0.66355	0.75191	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58597	0.66867	0.54801	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11762	0.43275	0.54697	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34874	0.88374	0.54550	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01389	0.76534	0.87986	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24622	0.22785	0.87757	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78642	0.99562	0.87714	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78307	0.99747	0.08248	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24678	0.22872	0.08269	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01709	0.77240	0.08798	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68335	0.10030	0.21392	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91316	0.56028	0.21381	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45628	0.33304	0.20960	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45287	0.33281	0.41919	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91042	0.55505	0.41925	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68592	0.10255	0.41290	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35254	0.44203	0.54371	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57610	0.89170	0.54604	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11449	0.66319	0.55048	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11792	0.66275	0.75418	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57830	0.89431	0.75039	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34903	0.43304	0.74819	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91468	0.09591	0.09682	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92055	0.80802	0.10385	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21614	0.09734	0.09523	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11098	0.89547	0.85735	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81996	0.89750	0.86154	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11530	0.19637	0.86314	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58360	0.43197	0.43737	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59850	0.14846	0.40955	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87589	0.42416	0.43844	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77881	0.23253	0.19541	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48916	0.23517	0.18958	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78210	0.53015	0.20364	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24877	0.75959	0.77366	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24794	0.46225	0.76354	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54711	0.76311	0.76379	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45357	0.57322	0.53282	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14379	0.56233	0.54078	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43951	0.83863	0.53622	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99549	0.30999	0.14926	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70584	0.66740	0.15045	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35613	0.02043	0.13874	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32821	0.97824	0.81122	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67826	0.68079	0.81998	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03286	0.33018	0.81585	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66950	0.64833	0.48382	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37809	0.98805	0.48263	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02085	0.35168	0.47715	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03309	0.67601	0.82225	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33031	0.32880	0.81149	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68407	0.97787	0.81284	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69748	0.01921	0.14245	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34851	0.31119	0.14885	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99556	0.66824	0.15232	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36641	0.36120	0.47297	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00972	0.64006	0.48629	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64761	0.99644	0.47998	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13532	0.23606	0.10946	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77177	0.87801	0.11212	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13898	0.87978	0.11516	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25496	0.11670	0.85382	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89194	0.75009	0.85324	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89579	0.11705	0.85431	Biso	1.000	O

O43	1.0000	0.80367	0.57264	0.43768	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43342	0.21369	0.45191	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81020	0.20400	0.44451	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92294	0.45229	0.18083	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55862	0.08512	0.20068	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56339	0.45432	0.18192	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46921	0.90398	0.78026	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10527	0.53976	0.77005	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46812	0.54314	0.77524	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60468	0.79229	0.52300	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23254	0.43311	0.52128	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22338	0.78007	0.51836	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01708	0.26585	0.98181	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75349	0.73434	0.98405	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27503	0.98813	0.97755	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67504	0.59621	0.31581	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94623	0.33602	0.31367	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34515	0.91869	0.64884	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07708	0.38510	0.64749	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62181	0.66467	0.65071	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01703	0.73746	0.98479	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28418	0.26778	0.98013	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74641	0.99263	0.97927	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69825	0.06127	0.31267	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95416	0.59070	0.31697	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42379	0.33301	0.31322	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35171	0.39846	0.64495	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61377	0.93463	0.64810	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08163	0.67321	0.65284	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39311	0.06831	0.30904	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19678	0.06719	0.32272	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23054	0.15813	0.33134	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29105	0.06086	0.31880	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16365	0.03343	0.25666	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.14561	0.99563	0.39456	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.16418	0.03837	0.48715	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.90981	0.01395	0.47032	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.18776	0.12781	0.49115	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08954	0.98593	0.52836	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.23518	0.03083	0.51493	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.90235	0.00133	0.38186	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.96443	0.09627	0.50112	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.96784	0.09901	0.31994	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.01050	0.07754	0.26780	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.03097	0.17587	0.35443	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.90891	0.11898	0.28531	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.82435	0.88974	0.33863	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.87126	0.86444	0.29313	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.76066	0.89593	0.29772	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.77935	0.82228	0.38754	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.08129	0.87157	0.38080	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.12641	0.83367	0.41413	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.06994	0.84739	0.31058	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.99836	0.83528	0.41392	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.85910	0.94270	0.51457	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2-methyl-2-octene: ^; E= -1010.415 eV; ZPVE= 7.097eV;
frequencies =222.8i, 37.7, 68.3, 74.0, 77.8, 90.5, 92.5, 100.7, 109.4, 113.3,
125.9, 129.8, 144.1, 164.6, 194.1, 229.2, 236.1, 259.9, 282.8, 317.9, 352.0, 356.4,
374.4, 423.3, 450.1, 549.4, 573.3, 579.7, 619.4, 660.3, 663.9, 691.9, 713.9, 776.9,
782.4, 799.8, 890.3, 893.5, 901.1, 912.6, 925.6, 932.1, 943.7, 1000.5, 1015.9,
1026.8, 1037.6, 1049.5, 1089.4, 1121.2, 1161.2, 1188.2, 1215.4, 1230.1, 1235.2,
1265.1, 1280.6, 1290.5, 1294.8, 1299.0, 1317.2, 1335.1, 1356.6, 1357.5, 1378.8,
1401.6, 1425.8, 1432.5, 1435.0, 1440.6, 1444.1, 1446.9, 1454.3, 1585.2, 1633.8,
2920.4, 2950.7, 2970.7, 2998.3, 3006.2, 3010.0, 3023.1, 3023.4, 3025.7, 3029.5,
3051.9, 3055.9, 3059.9, 3071.4, 3082.2, 3087.0, 3118.4, 3142.9 cm^-1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625

_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.02662 0.23537 0.09794 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79850 0.78013 0.10122 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.25816 0.00729 0.09195 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.25089 0.00306 0.88587 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.79502 0.77545 0.89514 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.02446 0.23589 0.89254 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.68979 0.56158 0.43411 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45431 0.11019 0.43265 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.92467 0.33757 0.43215 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.92369 0.34130 0.22605 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.46011 0.11077 0.22349 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.69559 0.56639 0.22566 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.35691 0.89631 0.76637 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.12590 0.43852 0.76273 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58917 0.67223 0.76502 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.59725 0.67877 0.56281 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.12395 0.43856 0.56146 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35890 0.89210 0.55778 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.02289 0.77493 0.89229 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.25412 0.23621 0.88848 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.79506 0.00533 0.89354 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.79500 0.00825 0.09832 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25781 0.23911 0.09374 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.02819 0.78350 0.10089 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.69670 0.11813 0.22808 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.92552 0.57245 0.22741 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.46472 0.34254 0.22302 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45543 0.34061 0.43055 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.92285 0.57092 0.43329 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.69266 0.11866 0.43176 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.36187 0.45702 0.55707 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.59109 0.90553 0.56017 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.12141 0.67248 0.56418 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.12531 0.67180 0.76670 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.58707 0.90284 0.76494 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.35753 0.44349 0.76148 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.92828 0.10341 0.11054 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.93184 0.81942 0.11811 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.22744 0.10772 0.10609 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.12007 0.90431 0.86799 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.82928 0.90729 0.88031 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.12292 0.20390 0.87384 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.58882 0.43286 0.44948 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59688 0.15314 0.43468 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.90416 0.44461 0.44556 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.79067 0.25023 0.20629 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.49636 0.24322 0.20803 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.79309 0.53253 0.20793 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.25637 0.76705 0.78774 Biso 1.000 O

O14	1.0000	0.25789	0.47428	0.77990	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55654	0.77142	0.77407	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46304	0.58865	0.54953	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13471	0.56183	0.55590	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45641	0.85638	0.54307	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00593	0.31850	0.16209	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71942	0.67532	0.16607	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36827	0.03160	0.14888	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33715	0.98677	0.82237	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68722	0.69130	0.83501	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04220	0.34067	0.83097	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67314	0.64965	0.49645	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37315	0.99314	0.49696	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02981	0.35211	0.49224	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.04073	0.68376	0.83597	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33812	0.33726	0.82252	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69190	0.98428	0.82891	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.71506	0.03514	0.16098	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.36128	0.32233	0.15786	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00736	0.67855	0.16405	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37657	0.37767	0.48565	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02245	0.66153	0.49778	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66766	0.01148	0.49555	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14736	0.24644	0.12361	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77945	0.88555	0.12464	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.15015	0.89078	0.12819	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26404	0.12553	0.86548	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.90096	0.76003	0.86614	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90353	0.12654	0.86825	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80888	0.57129	0.46217	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42621	0.21696	0.45973	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81421	0.22304	0.46481	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94688	0.46825	0.20591	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57084	0.09809	0.21069	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57414	0.46241	0.19546	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47723	0.90997	0.79682	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11122	0.54765	0.77895	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47814	0.55193	0.78826	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.62070	0.80534	0.54056	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24433	0.45261	0.53351	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23761	0.78150	0.53279	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02808	0.27370	0.99550	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76331	0.74008	0.99892	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28361	0.99605	0.98866	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69542	0.59662	0.33003	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95514	0.33085	0.32850	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.35789	0.92405	0.66213	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08905	0.38942	0.66213	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.63448	0.67227	0.66471	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.02723	0.74931	0.99751	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.29190	0.27722	0.99080	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75630	0.00571	0.99572	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70981	0.08741	0.32968	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95697	0.61361	0.33059	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42771	0.34576	0.32485	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35785	0.41023	0.65761	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.62236	0.94679	0.66325	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.09009	0.68703	0.66609	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.40083	0.06826	0.32087	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19690	0.05941	0.32925	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23070	0.13794	0.36771	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.28189	0.04758	0.32640	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.18402	0.06701	0.25842	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11548	0.96046	0.37083	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.10096	0.94436	0.46684	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06641	0.88494	0.32955	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.84738	0.96570	0.36063	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.14170	0.02388	0.50441	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01092	0.89111	0.48436	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.14069	0.89350	0.48598	Biso	1.000	H

C5	1.0000	0.94340	0.02244	0.31348	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.83556	0.00720	0.41857	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.75466	0.84739	0.34271	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.00763	0.10910	0.33055	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.95790	0.98635	0.25353	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.78067	0.81104	0.28901	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.74561	0.79753	0.40258	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.63783	0.83404	0.32176	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.64380	0.87902	0.25984	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.61695	0.87709	0.37361	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.53872	0.71271	0.31332	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.53523	0.66199	0.37139	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.55118	0.67120	0.25516	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.42551	0.70996	0.30476	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.42559	0.75986	0.24718	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.40804	0.74562	0.36432	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.35467	0.62282	0.29634	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 4-methyl-4-octene:o; E= -1010.699 eV; ZPVE= 7.074eV;
frequencies =1056.9i, 31.9, 57.6, 63.3, 68.4, 75.4, 83.7, 96.5, 102.6, 120.0,
130.4, 137.5, 146.4, 167.3, 182.7, 256.6, 268.0, 286.5, 298.0, 319.2, 341.5, 357.0,
411.1, 464.2, 480.7, 516.9, 554.3, 591.3, 596.6, 641.8, 664.6, 707.2, 718.1, 757.6,
778.6, 785.8, 838.4, 893.7, 899.1, 909.7, 914.3, 937.0, 959.9, 974.1, 989.2,
1012.1, 1025.3, 1034.9, 1058.0, 1093.0, 1098.6, 1176.1, 1197.0, 1210.3, 1236.1,
1264.2, 1283.6, 1288.8, 1293.4, 1314.7, 1342.2, 1344.0, 1355.8, 1366.6, 1388.0,
1409.7, 1418.6, 1420.8, 1432.5, 1440.5, 1443.2, 1448.7, 1455.1, 1535.7, 1612.9,
2932.8, 2938.3, 2948.1, 2957.7, 2961.5, 2972.0, 2981.5, 3001.3, 3021.2, 3027.4,
3028.5, 3063.3, 3074.3, 3078.7, 3079.8, 3112.8, 3174.6, 3182.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02377	0.23029	0.09401	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79787	0.77437	0.09872	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25675	0.99934	0.09069	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24958	0.99598	0.88573	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79266	0.76828	0.89132	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02206	0.22941	0.89029	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68817	0.56302	0.42919	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45980	0.10557	0.43221	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.92126	0.33051	0.42948	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91862	0.33258	0.22220	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45809	0.10290	0.22239	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69021	0.56320	0.22424	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35311	0.88721	0.76494	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12233	0.43020	0.75909	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58630	0.66440	0.76334	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59519	0.67055	0.56018	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12368	0.43393	0.55739	Biso	1.000	Si

Si17	1.0000	0.35423	0.88594	0.55564	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01897	0.76358	0.89197	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.25069	0.22683	0.88673	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79136	0.99600	0.88929	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78951	0.99838	0.09365	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25311	0.22770	0.09340	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02462	0.77104	0.09786	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69210	0.10195	0.22633	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.92154	0.56233	0.22572	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.46292	0.33483	0.22065	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45685	0.33587	0.42912	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91916	0.55968	0.43070	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69344	0.10374	0.42570	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35874	0.44464	0.55467	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58463	0.89513	0.55718	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11972	0.66665	0.56040	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12311	0.66350	0.76426	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58412	0.89530	0.76242	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35402	0.43444	0.75952	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92072	0.09984	0.10332	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.93004	0.80929	0.11543	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22272	0.09675	0.10941	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11886	0.89398	0.87574	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82594	0.89903	0.87156	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.12005	0.19663	0.87241	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58658	0.43611	0.44863	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59984	0.14127	0.42484	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89158	0.43064	0.44948	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78753	0.23368	0.20612	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49437	0.23497	0.20525	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.79049	0.53197	0.21401	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25377	0.75788	0.78757	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25376	0.46452	0.77711	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55557	0.76476	0.77445	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46358	0.57403	0.54472	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13887	0.55908	0.55113	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45079	0.84885	0.54023	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00463	0.31248	0.16039	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71432	0.66930	0.16140	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36446	0.02115	0.15023	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33314	0.97745	0.82098	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68412	0.68099	0.83295	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03714	0.33026	0.82535	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67949	0.65276	0.49479	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37620	0.99227	0.49834	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02869	0.34834	0.48817	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03720	0.67573	0.83182	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33570	0.32997	0.82261	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69064	0.98008	0.82388	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70480	0.01961	0.15510	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35699	0.31242	0.15715	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00501	0.66934	0.16397	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36936	0.36143	0.48431	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01579	0.64922	0.49727	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66575	0.99924	0.49264	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14181	0.23538	0.12064	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78425	0.88208	0.12592	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14867	0.87869	0.11917	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25796	0.11544	0.86058	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89889	0.75243	0.86455	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90057	0.11884	0.87013	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80741	0.56890	0.44855	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.44136	0.21764	0.45908	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81566	0.20894	0.45687	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93138	0.45362	0.19494	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56744	0.08761	0.21372	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57177	0.45497	0.19261	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47428	0.90219	0.79460	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10802	0.53907	0.77759	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47433	0.54418	0.78518	Biso	1.000	O

O52	1.0000	0.61114	0.79360	0.53696	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24290	0.44391	0.53102	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23270	0.77822	0.52752	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02934	0.27264	0.99225	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76212	0.73869	0.99592	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29070	0.99953	0.98773	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68320	0.59831	0.32638	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.95449	0.33361	0.32518	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.35171	0.91349	0.66083	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.08634	0.38436	0.65777	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.63150	0.66608	0.66275	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01717	0.72922	0.99588	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28785	0.26293	0.99001	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74813	0.98770	0.99124	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.70799	0.06456	0.32532	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.96199	0.59567	0.32843	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42824	0.33840	0.32313	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.35396	0.39952	0.65603	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61718	0.93654	0.66006	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.09035	0.67947	0.66330	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39820	0.06260	0.32101	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21208	0.07038	0.35230	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21958	0.07027	0.42461	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29931	0.05084	0.32851	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.25174	0.15496	0.32253	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11465	0.98638	0.31271	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06123	0.90564	0.34618	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.10100	0.98713	0.24156	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.92652	0.99920	0.37833	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.98430	0.05956	0.30593	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.82837	0.88169	0.36905	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.05314	0.14710	0.31167	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.95574	0.02700	0.23926	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.80442	0.85858	0.29950	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.75427	0.87244	0.40554	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.84802	0.81971	0.39884	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.95920	0.04836	0.46981	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.89193	0.06435	0.49428	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.03686	0.13200	0.46644	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.97431	0.97324	0.53783	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.89632	0.88987	0.54213	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.04176	0.95635	0.51559	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.00351	0.02693	0.63004	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.93298	0.03796	0.65396	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.07791	0.11309	0.62557	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.02706	0.95659	0.69614	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.95507	0.86937	0.70025	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.04241	0.99310	0.76305	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.10205	0.95116	0.67627	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2334-4-methyl-1-pentene:>; E= -1011.180 eV; ZPVE= 7.006eV;
frequencies =810.3i, 30.6, 41.0, 49.8, 64.6, 72.6, 81.7, 90.2, 102.2, 104.0, 120.7,
134.6, 139.0, 167.2, 181.8, 188.5, 217.3, 246.6, 286.4, 307.9, 334.5, 341.6, 359.5,
405.4, 418.3, 427.3, 484.3, 501.8, 507.7, 583.6, 589.6, 658.4, 668.0, 672.6, 690.6,
713.3, 873.7, 888.6, 897.0, 912.5, 916.4, 923.2, 942.8, 944.6, 966.5, 978.1,
1013.9, 1040.4, 1047.3, 1061.5, 1151.2, 1155.0, 1187.1, 1192.2, 1251.5, 1271.5,
1330.9, 1335.0, 1350.6, 1354.5, 1358.2, 1372.1, 1382.4, 1393.3, 1410.3, 1416.6,
1421.5, 1430.6, 1437.7, 1441.9, 1442.7, 1444.4, 1447.0, 1572.3, 1637.9, 2938.0,
2944.5, 2951.8, 2961.5, 2970.6, 2980.2, 2983.4, 3006.1, 3013.8, 3022.3, 3024.3,
3063.2, 3075.8, 3084.9, 3086.4, 3097.5, 3102.3, 3123.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"

_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01572	0.23270	0.09185	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78964	0.77781	0.09459	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24680	0.00338	0.08921	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24087	0.99951	0.88171	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78662	0.77197	0.88701	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01480	0.23235	0.88709	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68270	0.56772	0.42484	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45434	0.10987	0.42751	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91259	0.33491	0.42587	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91137	0.33752	0.21823	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45211	0.10875	0.21665	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68295	0.56740	0.22047	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34750	0.89363	0.76072	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11708	0.43458	0.75607	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57962	0.66817	0.75903	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58649	0.67398	0.55637	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11781	0.43729	0.55493	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34834	0.89156	0.55320	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01331	0.76924	0.88737	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24561	0.23148	0.88458	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78733	0.00075	0.88463	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78518	0.00323	0.09114	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24727	0.23310	0.09049	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01757	0.77721	0.09558	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68456	0.10586	0.22177	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91314	0.56485	0.22086	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45633	0.33834	0.21714	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45343	0.33908	0.42609	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91091	0.56112	0.42695	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68668	0.10680	0.42159	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35241	0.44737	0.55157	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57850	0.89930	0.55423	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11414	0.66844	0.55858	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11658	0.66715	0.76080	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57781	0.89876	0.75867	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34852	0.43819	0.75588	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91674	0.10137	0.10659	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92188	0.81389	0.11256	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21445	0.10177	0.10808	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11043	0.89929	0.86520	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82138	0.90320	0.86770	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11480	0.20162	0.87295	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58453	0.43863	0.44249	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59470	0.14656	0.42135	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87634	0.43031	0.44679	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78024	0.23805	0.20382	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48961	0.24069	0.19711	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78217	0.53465	0.21011	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24776	0.76338	0.77986	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24887	0.46937	0.77205	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54736	0.76750	0.76969	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45400	0.57852	0.54252	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14099	0.56576	0.55106	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44395	0.85306	0.54012	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99708	0.31570	0.15773	Biso	1.000	O

O20	1.0000	0.70630	0.67204	0.15653	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35727	0.02612	0.14544	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32776	0.98129	0.82058	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67786	0.68589	0.82848	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03372	0.33599	0.82385	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66897	0.65440	0.49025	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36873	0.99362	0.49080	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02105	0.35692	0.48493	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03283	0.67969	0.83051	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32929	0.33434	0.81986	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68287	0.98131	0.82218	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69897	0.02513	0.15015	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34955	0.31735	0.15550	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99620	0.67327	0.16007	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36804	0.36802	0.48061	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01145	0.64702	0.49253	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65745	0.00240	0.48855	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13720	0.24395	0.11472	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77333	0.88368	0.12138	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14019	0.88388	0.12205	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25261	0.12040	0.85671	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89166	0.75418	0.85991	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89552	0.12246	0.86025	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80461	0.57957	0.44558	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43642	0.22117	0.45924	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81051	0.21060	0.45123	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92361	0.45741	0.18763	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56017	0.09134	0.20785	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56363	0.45985	0.19030	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46812	0.90672	0.78943	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10352	0.54375	0.77499	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46879	0.54754	0.78171	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60337	0.79707	0.53306	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23363	0.44042	0.52746	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22543	0.78333	0.52810	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01324	0.26975	0.98957	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75599	0.74215	0.99149	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27402	0.99856	0.98528	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67832	0.60434	0.32246	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94789	0.34329	0.32159	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34740	0.92517	0.65732	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07878	0.38728	0.65512	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62439	0.66935	0.65841	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01552	0.74147	0.99244	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28546	0.26720	0.98743	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75017	0.99840	0.98754	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69850	0.06657	0.32071	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95334	0.59470	0.32416	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42244	0.33752	0.32039	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34879	0.40214	0.65270	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61355	0.94142	0.65681	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.07897	0.67895	0.66026	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39420	0.07274	0.31582	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20643	0.07792	0.34844	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23847	0.09850	0.41670	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29306	0.06471	0.32296	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.21461	0.14927	0.30952	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11380	0.97196	0.33376	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08780	0.87039	0.38550	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06466	0.95819	0.27278	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.97539	0.01621	0.47705	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.13433	0.88997	0.44827	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99617	0.81842	0.39719	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.11060	0.81675	0.34540	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.93567	0.00915	0.39287	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.92852	0.91868	0.54138	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.97771	0.10876	0.33090	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.86352	0.83765	0.51388	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.89078	0.93790	0.59894	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.99709	0.90676	0.56855	Biso	1.000	H

H11	1.0000	0.99971	0.08864	0.26566	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.05070	0.18690	0.35526	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.90881	0.12689	0.31835	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.83827	0.90334	0.35419	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.86142	0.88357	0.28922	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.76603	0.91646	0.34121	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.80732	0.82853	0.39655	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.06943	0.12313	0.51696	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.13579	0.10796	0.54460	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.03686	0.15004	0.57348	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.11014	0.19476	0.47105	Biso	1.000	H

Direct Cracking of 2344-4methyl-2-pentene:s; E= -1011.450 eV; ZPVE= 7.015eV;
frequencies =834.8i, 41.4, 50.4, 53.0, 62.6, 74.5, 90.8, 101.0, 103.9, 116.6,
134.6, 151.9, 172.4, 180.8, 197.9, 214.6, 231.1, 259.7, 281.3, 288.1, 300.8, 343.0,
381.7, 398.8, 438.9, 449.8, 474.8, 509.4, 519.4, 588.5, 591.6, 661.4, 667.4, 693.7,
715.2, 769.9, 807.4, 825.3, 879.2, 896.5, 932.8, 937.0, 945.9, 947.1, 976.8, 983.8,
1013.3, 1039.7, 1044.8, 1056.3, 1057.4, 1108.4, 1193.2, 1211.4, 1289.5, 1310.6,
1326.3, 1332.8, 1343.8, 1350.7, 1359.9, 1365.7, 1367.7, 1396.8, 1408.9, 1414.5,
1419.0, 1421.1, 1428.6, 1434.6, 1440.2, 1443.5, 1459.1, 1569.6, 1677.2, 2941.8,
2952.5, 2959.2, 2962.4, 2972.6, 2983.2, 2998.1, 3016.8, 3028.9, 3036.9, 3040.2,
3040.8, 3051.1, 3058.9, 3082.6, 3082.9, 3091.9, 3137.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01489	0.22693	0.08351	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78826	0.77224	0.08744	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24617	0.99636	0.08049	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24063	0.99387	0.87451	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78496	0.76673	0.87951	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01478	0.22735	0.87966	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68145	0.56103	0.41755	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45647	0.10571	0.41897	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90944	0.32741	0.41795	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90859	0.33030	0.21047	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44991	0.10225	0.20988	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68164	0.56162	0.21330	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34648	0.88848	0.75260	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11451	0.42870	0.74872	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57746	0.66290	0.75238	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58341	0.66680	0.54881	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11708	0.43261	0.54698	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34798	0.88262	0.54518	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01241	0.76466	0.87957	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24406	0.22667	0.87726	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78442	0.99428	0.87738	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78155	0.99589	0.08212	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24505	0.22725	0.08300	Biso	1.000	Si

Si23	1.0000	0.01628	0.77109	0.08766	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68255	0.09973	0.21386	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91225	0.55941	0.21364	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45500	0.33208	0.20977	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45282	0.33234	0.41870	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90893	0.55420	0.41887	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68530	0.10146	0.41276	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35094	0.44075	0.54426	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57500	0.89064	0.54589	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11484	0.66256	0.55015	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11684	0.66215	0.75397	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57747	0.89453	0.75013	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34721	0.43250	0.74878	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91315	0.09599	0.09196	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92017	0.80703	0.10441	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21481	0.09601	0.09577	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10959	0.89497	0.85775	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81930	0.89761	0.85892	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11322	0.19513	0.86168	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58449	0.43085	0.43425	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59751	0.14681	0.40905	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87157	0.42219	0.43627	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77703	0.23216	0.19506	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48836	0.23437	0.19007	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78120	0.52927	0.20313	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24774	0.75850	0.77410	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24572	0.46115	0.76394	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54703	0.76354	0.76327	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45036	0.57286	0.53424	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14713	0.56355	0.54180	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43848	0.83724	0.53567	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99373	0.30838	0.14929	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70474	0.66604	0.14911	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35538	0.01968	0.13858	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32644	0.97723	0.81068	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67640	0.67995	0.82089	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03008	0.32863	0.81501	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66564	0.64525	0.48418	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37889	0.98771	0.48291	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01926	0.35405	0.47717	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03175	0.67582	0.82144	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32900	0.32859	0.81224	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68354	0.97868	0.81215	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69703	0.01929	0.14200	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34799	0.31031	0.14806	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99492	0.66679	0.15174	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36827	0.36203	0.47377	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00926	0.63668	0.48611	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64750	0.99458	0.47917	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13374	0.23439	0.11065	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77299	0.87859	0.11513	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13858	0.87824	0.11427	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25347	0.11599	0.85308	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89049	0.74946	0.85290	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89350	0.11720	0.85828	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80401	0.57454	0.43839	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43340	0.21338	0.45187	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80878	0.20316	0.44575	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92238	0.45135	0.18156	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55725	0.08359	0.20150	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56235	0.45370	0.18316	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46813	0.90353	0.78040	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10320	0.53877	0.77009	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46593	0.54314	0.77588	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60344	0.79094	0.52410	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22987	0.42893	0.52077	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22247	0.77997	0.51719	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02111	0.26970	0.98167	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75412	0.73772	0.98409	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27469	0.98855	0.97722	Biso	1.000	O

O58	1.0000	0.67663	0.59830	0.31539	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94422	0.33302	0.31379	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34376	0.91672	0.64863	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07555	0.38457	0.64725	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62002	0.66255	0.65127	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01519	0.73601	0.98435	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28080	0.26553	0.98011	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.74125	0.98538	0.97930	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69873	0.06118	0.31247	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95300	0.59066	0.31677	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.42113	0.33125	0.31316	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34998	0.39755	0.64565	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61232	0.93509	0.64774	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08173	0.67311	0.65235	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.39148	0.06723	0.30914	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19579	0.06653	0.32451	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23056	0.15694	0.33687	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.29156	0.05959	0.31889	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16370	0.03749	0.25739	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.14366	0.99071	0.39361	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.16280	0.02693	0.48796	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.94435	0.05679	0.46844	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.18727	0.11613	0.49644	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08819	0.97217	0.52845	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.23301	0.01639	0.51325	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.91621	0.01570	0.38527	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.00739	0.14699	0.47481	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.89779	0.99663	0.55444	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.96780	0.09262	0.30685	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.84247	0.90472	0.54681	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.84816	0.02979	0.58771	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.96637	0.01161	0.60109	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.00004	0.05614	0.25744	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.03665	0.17719	0.32557	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.90220	0.10300	0.27261	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.82911	0.89606	0.36210	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.86292	0.86080	0.31279	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.75489	0.89368	0.33062	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.79853	0.83921	0.41950	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.07838	0.86752	0.37502	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.12313	0.82687	0.40455	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.06639	0.84814	0.30392	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.99563	0.82940	0.40858	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 3-hexene:o; E= -960.568 eV; ZPVE= 4.957eV;
frequencies =238.4i, 27.8, 30.1, 58.3, 69.2, 105.9, 127.9, 131.3, 154.0, 166.6,
196.2, 213.3, 245.2, 279.1, 306.7, 335.2, 374.0, 422.8, 429.5, 569.9, 580.2, 608.8,
652.7, 656.5, 689.6, 727.2, 868.7, 882.3, 885.5, 907.0, 917.4, 960.4, 973.6, 986.3,
991.4, 1028.3, 1056.6, 1090.2, 1150.5, 1165.3, 1223.8, 1285.8, 1309.8, 1345.0,
1352.8, 1390.1, 1403.5, 1411.0, 1427.5, 1436.5, 1438.9, 1450.4, 1605.0, 2951.2,
2969.9, 3002.5, 3006.4, 3048.9, 3061.4, 3064.1, 3067.9, 3086.9, 3107.8, 3109.0,
3155.9, 3221.5 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
  _atom_site_label

```


_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01109	0.23186	0.10160	Biso	1.000 Si
Si2	1.0000	0.78333	0.77693	0.10469	Biso	1.000 Si
Si3	1.0000	0.24356	0.00464	0.09605	Biso	1.000 Si
Si4	1.0000	0.23549	0.99932	0.88939	Biso	1.000 Si
Si5	1.0000	0.78087	0.77260	0.89644	Biso	1.000 Si
Si6	1.0000	0.00790	0.23109	0.89484	Biso	1.000 Si
Si7	1.0000	0.67605	0.56504	0.43410	Biso	1.000 Si
Al1	1.0000	0.44592	0.10864	0.43539	Biso	1.000 Al
Si8	1.0000	0.91044	0.33295	0.43458	Biso	1.000 Si
Si9	1.0000	0.90863	0.33745	0.22826	Biso	1.000 Si
Si10	1.0000	0.44592	0.10758	0.22702	Biso	1.000 Si
Si11	1.0000	0.67922	0.56735	0.22999	Biso	1.000 Si
Si12	1.0000	0.34118	0.89243	0.76951	Biso	1.000 Si
Si13	1.0000	0.11116	0.43461	0.76584	Biso	1.000 Si
Si14	1.0000	0.57408	0.66733	0.76822	Biso	1.000 Si
Si15	1.0000	0.58284	0.67419	0.56526	Biso	1.000 Si
Si16	1.0000	0.11017	0.43586	0.56457	Biso	1.000 Si
Si17	1.0000	0.34326	0.89009	0.56217	Biso	1.000 Si
Si18	1.0000	0.00659	0.76813	0.89656	Biso	1.000 Si
Si19	1.0000	0.23739	0.22975	0.89047	Biso	1.000 Si
Si20	1.0000	0.78112	0.00090	0.89449	Biso	1.000 Si
Si21	1.0000	0.78106	0.00353	0.10252	Biso	1.000 Si
Si22	1.0000	0.24264	0.23409	0.09746	Biso	1.000 Si
Si23	1.0000	0.01181	0.77662	0.10430	Biso	1.000 Si
Si24	1.0000	0.67961	0.10758	0.23087	Biso	1.000 Si
Si25	1.0000	0.90768	0.56608	0.23010	Biso	1.000 Si
Si26	1.0000	0.44721	0.33692	0.22682	Biso	1.000 Si
Si27	1.0000	0.43913	0.33589	0.43229	Biso	1.000 Si
Si28	1.0000	0.90453	0.56147	0.43717	Biso	1.000 Si
Si29	1.0000	0.67963	0.10793	0.43171	Biso	1.000 Si
Si30	1.0000	0.34670	0.44975	0.56006	Biso	1.000 Si
Si31	1.0000	0.57427	0.89974	0.56386	Biso	1.000 Si
Si32	1.0000	0.10555	0.66842	0.56726	Biso	1.000 Si
Si33	1.0000	0.10939	0.66689	0.76950	Biso	1.000 Si
Si34	1.0000	0.57143	0.89773	0.76840	Biso	1.000 Si
Si35	1.0000	0.34253	0.43861	0.76469	Biso	1.000 Si
O1	1.0000	0.91254	0.10130	0.12024	Biso	1.000 O
O2	1.0000	0.91527	0.81166	0.12330	Biso	1.000 O
O3	1.0000	0.21196	0.10348	0.11631	Biso	1.000 O
O4	1.0000	0.10518	0.89780	0.87540	Biso	1.000 O
O5	1.0000	0.81543	0.90367	0.87684	Biso	1.000 O
O6	1.0000	0.10681	0.19971	0.87705	Biso	1.000 O
O7	1.0000	0.57039	0.43776	0.44419	Biso	1.000 O
O8	1.0000	0.58786	0.14798	0.43466	Biso	1.000 O
O9	1.0000	0.88231	0.43418	0.45388	Biso	1.000 O
O10	1.0000	0.77730	0.23944	0.21315	Biso	1.000 O
O11	1.0000	0.48061	0.23936	0.20840	Biso	1.000 O
O12	1.0000	0.77692	0.53348	0.21290	Biso	1.000 O
O13	1.0000	0.24029	0.76298	0.78928	Biso	1.000 O
O14	1.0000	0.24301	0.46973	0.78237	Biso	1.000 O
O15	1.0000	0.54171	0.76662	0.77807	Biso	1.000 O
O16	1.0000	0.45042	0.57942	0.54972	Biso	1.000 O
O17	1.0000	0.12342	0.56022	0.55828	Biso	1.000 O
O18	1.0000	0.43951	0.85236	0.54887	Biso	1.000 O
O19	1.0000	0.99353	0.31805	0.16456	Biso	1.000 O
O20	1.0000	0.69825	0.67003	0.16510	Biso	1.000 O
O21	1.0000	0.35232	0.02568	0.15366	Biso	1.000 O
O22	1.0000	0.32218	0.98155	0.82792	Biso	1.000 O
O23	1.0000	0.67206	0.68584	0.83825	Biso	1.000 O
O24	1.0000	0.02757	0.33737	0.83451	Biso	1.000 O
O25	1.0000	0.66458	0.65333	0.49932	Biso	1.000 O
O26	1.0000	0.36246	0.99209	0.50021	Biso	1.000 O
O27	1.0000	0.01601	0.34933	0.49525	Biso	1.000 O

O28	1.0000	0.02512	0.67818	0.83945	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32254	0.33293	0.82671	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67440	0.97936	0.83400	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69439	0.02566	0.16046	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34773	0.32126	0.15866	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99354	0.67437	0.16979	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35667	0.36643	0.48959	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00501	0.65327	0.50064	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65262	0.00339	0.49836	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13261	0.24345	0.12540	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76855	0.88349	0.13252	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13472	0.88541	0.12727	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24492	0.11884	0.86334	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88595	0.75513	0.86889	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88760	0.12280	0.86763	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79102	0.56503	0.46116	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42267	0.21791	0.46506	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80411	0.21169	0.46056	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92254	0.45949	0.20253	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55700	0.09544	0.21336	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55726	0.45938	0.20693	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46086	0.90417	0.79901	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09704	0.54375	0.78283	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46306	0.54697	0.79149	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60069	0.79818	0.54345	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23002	0.44789	0.53753	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22081	0.78013	0.53788	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00807	0.26503	0.99845	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75104	0.74350	0.00111	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27197	0.00139	0.99243	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68548	0.60940	0.33206	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39049	0.06759	0.32505	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94635	0.33743	0.33072	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34208	0.92360	0.66610	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07363	0.38631	0.66508	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61857	0.66741	0.66768	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00717	0.73881	0.00150	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27517	0.26546	0.99350	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74852	0.00032	0.99840	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69056	0.06830	0.33051	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94159	0.59973	0.33405	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40214	0.33084	0.32757	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34302	0.40451	0.66112	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60794	0.94170	0.66683	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07193	0.67986	0.66919	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20463	0.00376	0.33853	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21098	0.03422	0.27098	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23531	0.06790	0.39030	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04235	0.03041	0.31198	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03110	0.01899	0.40135	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.98306	0.93336	0.42923	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.07711	0.11446	0.46573	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00021	0.95815	0.26709	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08600	0.11431	0.28128	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12706	0.19733	0.43347	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.12983	0.10472	0.51661	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.00643	0.11409	0.50182	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15503	0.88124	0.35746	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.07103	0.83718	0.32541	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.14254	0.86609	0.42905	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22050	0.82457	0.32098	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.30229	0.85779	0.35440	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.23457	0.83742	0.24934	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.16912	0.73332	0.33398	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 3-methyl-2-hexene:h; E= -977.430 eV; ZPVE= 5.707eV; frequencies =239.8i, 32.8, 39.8, 70.1, 90.7, 99.5, 105.5, 128.5, 150.0, 164.1, 177.3, 204.9, 216.0, 257.5, 267.0, 287.1, 293.2, 306.4, 335.2, 371.7, 432.5, 497.2, 574.1, 581.9, 607.1, 655.5, 690.8, 732.0, 772.5, 856.5, 873.4, 884.7, 899.6, 951.3, 953.9, 970.1, 996.5, 1020.5, 1023.3, 1070.8, 1078.2, 1118.7, 1143.1, 1147.1,

1238.3, 1286.1, 1293.6, 1304.2, 1342.8, 1359.3, 1360.7, 1400.9, 1419.3, 1420.6,
1422.3, 1431.8, 1437.6, 1438.6, 1452.9, 1628.1, 2948.7, 2959.3, 2968.6, 2998.0,
3006.8, 3017.6, 3036.6, 3043.2, 3055.7, 3063.9, 3067.3, 3087.6, 3100.4, 3112.2,
3225.1 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.00949	0.23190	0.09496	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78036	0.77585	0.09737	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24040	0.00467	0.09275	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23459	0.99937	0.88488	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77894	0.77167	0.89032	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00732	0.23053	0.88870	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67652	0.56691	0.42783	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44826	0.10975	0.43000	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90959	0.33235	0.42850	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90610	0.33682	0.22184	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44390	0.10687	0.22207	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67814	0.56742	0.22410	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34015	0.89204	0.76486	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11004	0.43431	0.75938	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57342	0.66670	0.76162	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58179	0.67337	0.55870	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11061	0.43679	0.55772	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34240	0.89156	0.55782	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00646	0.76798	0.89118	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23659	0.22890	0.88540	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77981	0.00011	0.88798	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77912	0.00285	0.09542	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24051	0.23346	0.09323	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01031	0.77585	0.09794	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67800	0.10688	0.22469	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90569	0.56518	0.22395	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44577	0.33626	0.22158	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43953	0.33604	0.42672	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90331	0.56030	0.43125	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68045	0.10683	0.42503	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34616	0.44770	0.55467	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57236	0.89889	0.55782	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10569	0.66846	0.56077	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10816	0.66596	0.76362	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57094	0.89751	0.76193	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34172	0.43807	0.75923	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91076	0.10092	0.11192	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91230	0.80957	0.11281	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20891	0.10315	0.11462	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10450	0.89783	0.86953	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81371	0.90266	0.86993	Biso	1.000	O

O6	1.0000	0.10595	0.19856	0.87159	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56945	0.44058	0.43751	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58948	0.14788	0.42694	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88001	0.43262	0.44844	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77447	0.23918	0.20697	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47950	0.23886	0.20295	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77488	0.53238	0.20674	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23896	0.76241	0.78334	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24187	0.46905	0.77531	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54226	0.76677	0.77181	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45021	0.57680	0.54260	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12721	0.56264	0.55022	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43744	0.85232	0.54442	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99040	0.31681	0.15811	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69647	0.66935	0.15863	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34981	0.02500	0.14918	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32217	0.98018	0.82553	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67221	0.68461	0.83048	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02663	0.33564	0.82710	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66580	0.65575	0.49290	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36421	0.99483	0.49633	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01669	0.35102	0.48806	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02347	0.67826	0.83240	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32174	0.33345	0.82259	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67398	0.98005	0.82704	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69305	0.02580	0.15353	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34659	0.32137	0.15340	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99114	0.67402	0.16419	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35499	0.36304	0.48478	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00454	0.65207	0.49430	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65066	0.00138	0.49138	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13105	0.24438	0.11970	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76693	0.88309	0.12610	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13185	0.88506	0.12308	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24504	0.11884	0.85664	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88517	0.75484	0.86589	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88697	0.12193	0.86222	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79047	0.56514	0.45548	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42794	0.22043	0.46039	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80472	0.21011	0.45486	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92061	0.45891	0.19560	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55446	0.09341	0.20901	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55560	0.45928	0.20278	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45984	0.90279	0.79274	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09611	0.54318	0.77855	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46200	0.54702	0.78567	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59704	0.79634	0.53739	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22973	0.44622	0.53243	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21932	0.78291	0.53267	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00794	0.26630	0.99186	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74471	0.74206	0.99429	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26848	0.00298	0.98871	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68702	0.61167	0.32582	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38907	0.06750	0.32055	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94401	0.33708	0.32424	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34033	0.92482	0.66177	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07205	0.38821	0.65824	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61718	0.66621	0.66102	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01006	0.73827	0.99559	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27315	0.26229	0.98889	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74548	0.99835	0.99153	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69191	0.06763	0.32372	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93975	0.59779	0.32800	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40038	0.32877	0.32244	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34311	0.40324	0.65593	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60733	0.94171	0.66041	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07079	0.67717	0.66286	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20872	0.00426	0.34769	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20659	0.04715	0.28729	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24484	0.05716	0.40581	Biso	1.000	H

C2	1.0000	0.04603	0.04630	0.36931	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05211	0.00598	0.45039	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.99609	0.91517	0.46296	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.12382	0.07486	0.52604	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.10008	0.13742	0.35676	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.17885	0.16435	0.50836	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.17730	0.04151	0.55169	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.06896	0.07003	0.58170	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15407	0.87915	0.35118	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.07498	0.84442	0.31244	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.13265	0.85112	0.42016	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22176	0.82536	0.31341	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.29971	0.85299	0.35138	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.24315	0.84655	0.24341	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.16810	0.73310	0.31950	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96187	0.97836	0.29932	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.89783	0.00506	0.29439	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.91658	0.88722	0.31452	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.00075	0.99191	0.23319	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 1-heptene;p; E= -977.257 eV; ZPVE= 5.719eV;
frequencies =241.8i, 26.2, 47.9, 54.0, 58.2, 94.3, 100.4, 114.0, 136.4, 155.5,
169.0, 197.7, 228.1, 229.2, 274.6, 302.3, 335.0, 359.8, 374.3, 429.5, 435.6, 574.6,
578.2, 606.1, 654.1, 689.6, 693.5, 730.0, 781.4, 849.2, 877.8, 882.3, 888.2, 955.8,
959.0, 970.3, 993.1, 999.8, 1009.1, 1049.6, 1058.6, 1097.2, 1150.5, 1168.8, 1226.9,
1245.9, 1279.1, 1295.8, 1307.8, 1344.6, 1360.0, 1401.0, 1406.3, 1425.1, 1427.9,
1436.4, 1442.0, 1450.4, 1451.0, 1597.0, 2929.3, 2969.3, 2970.2, 3001.8, 3008.2,
3042.4, 3050.5, 3055.8, 3057.5, 3064.3, 3089.1, 3106.1, 3110.4, 3148.3, 3218.6 cm⁻¹
1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01065	0.23317	0.09911	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78306	0.77831	0.10205	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24254	0.00605	0.09432	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23502	0.00074	0.88707	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78068	0.77405	0.89367	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00747	0.23225	0.89229	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67581	0.56716	0.43144	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44599	0.11031	0.43307	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91020	0.33460	0.43201	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90799	0.33873	0.22568	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44546	0.10876	0.22459	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67879	0.56875	0.22732	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34064	0.89346	0.76746	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11080	0.43582	0.76314	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57387	0.66855	0.76559	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58263	0.67571	0.56282	Biso	1.000	Si

Si16	1.0000	0.11020	0.43769	0.56196	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34270	0.89219	0.56014	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00628	0.76934	0.89409	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23681	0.23055	0.88798	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78084	0.00213	0.89195	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78097	0.00476	0.10016	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24181	0.23492	0.09550	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01138	0.77784	0.10190	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67910	0.10873	0.22840	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90709	0.56719	0.22754	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44686	0.33813	0.22433	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43883	0.33751	0.42982	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90408	0.56290	0.43461	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67950	0.10924	0.42928	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34633	0.45083	0.55770	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57389	0.90152	0.56174	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10520	0.67016	0.56487	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10873	0.66803	0.76692	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57116	0.89904	0.76599	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34207	0.43993	0.76242	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91247	0.10246	0.11779	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91490	0.81294	0.12072	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21056	0.10439	0.11565	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10489	0.89895	0.87272	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81516	0.90502	0.87363	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10627	0.20070	0.87444	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56974	0.44016	0.44176	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58778	0.14928	0.43246	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88152	0.43546	0.45154	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77658	0.24069	0.21084	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48039	0.24061	0.20608	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77635	0.53465	0.21048	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23968	0.76392	0.78681	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24270	0.47132	0.77996	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54169	0.76798	0.77526	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45046	0.58027	0.54729	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12340	0.56210	0.55628	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43924	0.85484	0.54684	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99266	0.31920	0.16189	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69771	0.67100	0.16200	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35169	0.02700	0.15134	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32214	0.98231	0.82666	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67181	0.68703	0.83563	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02732	0.33855	0.83185	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66484	0.65589	0.49656	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36190	0.99426	0.49825	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01614	0.35161	0.49242	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02458	0.67914	0.83708	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32207	0.33452	0.82481	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67378	0.98058	0.83188	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69431	0.02711	0.15796	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34752	0.32248	0.15602	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99291	0.67539	0.16720	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35577	0.36710	0.48730	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00470	0.65468	0.49804	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65271	0.00485	0.49607	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13247	0.24563	0.12290	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76815	0.88466	0.13031	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13426	0.88634	0.12517	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24451	0.11999	0.85976	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88571	0.75643	0.86628	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88713	0.12408	0.86491	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79069	0.56683	0.45848	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42348	0.22000	0.46263	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80417	0.21300	0.45798	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92182	0.46064	0.19972	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55635	0.09627	0.21083	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55682	0.46066	0.20449	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46027	0.90485	0.79657	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09618	0.54473	0.77972	Biso	1.000	O

O51	1.0000	0.46278	0.54828	0.78890	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59959	0.79945	0.54151	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23011	0.44985	0.53500	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22040	0.78209	0.53560	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00744	0.26607	0.99587	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75091	0.74545	0.99837	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27063	0.00392	0.99045	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68525	0.61126	0.32929	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39025	0.06882	0.32277	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94592	0.33919	0.32812	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34122	0.92524	0.66419	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07361	0.38734	0.66234	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61860	0.66868	0.66512	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00696	0.74025	0.99904	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27406	0.26474	0.99127	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74864	0.00134	0.99596	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69003	0.06945	0.32806	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94122	0.60079	0.33148	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40176	0.33208	0.32509	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34219	0.40551	0.65884	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60795	0.94371	0.66461	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07129	0.68158	0.66673	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20541	0.00541	0.33859	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21058	0.03902	0.27223	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23697	0.06690	0.39226	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04539	0.03799	0.32356	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02980	0.01075	0.41096	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.97890	0.92100	0.42934	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.07403	0.09262	0.48628	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00417	0.97442	0.27159	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09197	0.12655	0.30223	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12107	0.18021	0.46122	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.13515	0.07814	0.52431	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15446	0.88185	0.35372	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.07214	0.83993	0.31907	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.13867	0.86324	0.42472	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22133	0.82639	0.31781	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.30166	0.85826	0.35322	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.23835	0.84172	0.24666	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.16934	0.73474	0.32875	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.97844	0.07714	0.54934	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.01366	0.13626	0.60548	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.93257	0.99046	0.57622	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.91695	0.09385	0.51536	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 2-methyl-2-hexene:~; E= -977.571 eV; ZPVE= 5.698eV; frequencies =265.4i, 37.6, 56.6, 59.7, 74.4, 108.5, 115.9, 122.3, 142.4, 154.9, 167.3, 187.3, 204.7, 235.0, 279.9, 306.3, 336.0, 373.7, 386.0, 432.4, 438.8, 455.6, 574.1, 575.3, 603.5, 651.7, 693.0, 729.0, 755.2, 814.3, 878.0, 883.7, 886.5, 923.0, 937.4, 954.3, 962.2, 976.4, 990.7, 1045.4, 1046.8, 1061.0, 1089.5, 1152.7, 1219.0, 1278.6, 1309.7, 1345.7, 1350.7, 1357.2, 1377.9, 1402.2, 1405.7, 1415.0, 1425.6, 1430.9, 1439.1, 1449.0, 1450.3, 1598.8, 2947.9, 2953.4, 2962.3, 3001.3, 3005.9, 3011.8, 3054.2, 3057.1, 3058.4, 3058.6, 3091.8, 3107.6, 3112.0, 3150.7, 3229.4 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01233 0.23169 0.10149 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.78479 0.77683 0.10495 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.24502 0.00470 0.09620 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.23671 0.99891 0.88962 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.78203 0.77200 0.89677 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.00902 0.23079 0.89517 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.67768 0.56540 0.43442 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.44757 0.10837 0.43595 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.91192 0.33251 0.43504 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.90990 0.33711 0.22854 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.44733 0.10731 0.22740 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.68096 0.56713 0.23032 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.34233 0.89149 0.77007 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.11241 0.43411 0.76580 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.57537 0.66677 0.76844 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.58453 0.67380 0.56539 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.11174 0.43584 0.56452 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.34437 0.88975 0.56238 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.00791 0.76736 0.89730 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.23891 0.22938 0.89065 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.78250 0.00023 0.89450 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.78257 0.00318 0.10253 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.24430 0.23405 0.09728 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.01335 0.77650 0.10477 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.68127 0.10734 0.23114 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.90903 0.56566 0.23051 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.44850 0.33662 0.22726 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.44011 0.33576 0.43253 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.90555 0.56082 0.43779 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.68149 0.10716 0.43177 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.34793 0.44932 0.55995 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.57533 0.89929 0.56398 Biso 1.000 Si
Si32     1.0000 0.10663 0.66838 0.56745 Biso 1.000 Si
Si33     1.0000 0.11051 0.66633 0.76978 Biso 1.000 Si
Si34     1.0000 0.57265 0.89727 0.76862 Biso 1.000 Si
Si35     1.0000 0.34365 0.43837 0.76489 Biso 1.000 Si
O1       1.0000 0.91416 0.10084 0.11980 Biso 1.000 O
O2       1.0000 0.91680 0.81170 0.12302 Biso 1.000 O
O3       1.0000 0.21317 0.10335 0.11630 Biso 1.000 O
O4       1.0000 0.10639 0.89712 0.87611 Biso 1.000 O
O5       1.0000 0.81674 0.90299 0.87660 Biso 1.000 O
O6       1.0000 0.10827 0.19964 0.87835 Biso 1.000 O
O7       1.0000 0.57056 0.43913 0.44442 Biso 1.000 O
O8       1.0000 0.58907 0.14633 0.43435 Biso 1.000 O
O9       1.0000 0.88401 0.43383 0.45487 Biso 1.000 O
O10      1.0000 0.77835 0.23942 0.21339 Biso 1.000 O
O11      1.0000 0.48238 0.23927 0.20922 Biso 1.000 O
O12      1.0000 0.77814 0.53267 0.21299 Biso 1.000 O
O13      1.0000 0.24149 0.76204 0.78999 Biso 1.000 O
O14      1.0000 0.24429 0.46964 0.78287 Biso 1.000 O
O15      1.0000 0.54324 0.76623 0.77806 Biso 1.000 O
O16      1.0000 0.45270 0.57834 0.54878 Biso 1.000 O
O17      1.0000 0.12383 0.55976 0.55850 Biso 1.000 O
O18      1.0000 0.44079 0.85228 0.54836 Biso 1.000 O
O19      1.0000 0.99461 0.31728 0.16505 Biso 1.000 O
O20      1.0000 0.70001 0.66978 0.16540 Biso 1.000 O
O21      1.0000 0.35395 0.02597 0.15381 Biso 1.000 O
O22      1.0000 0.32319 0.98078 0.82811 Biso 1.000 O
O23      1.0000 0.67339 0.68519 0.83839 Biso 1.000 O
O24      1.0000 0.02868 0.33657 0.83420 Biso 1.000 O
O25      1.0000 0.66761 0.65473 0.49950 Biso 1.000 O

```


O26	1.0000	0.36387	0.99246	0.50120	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01773	0.34884	0.49534	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02627	0.67754	0.83981	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32351	0.33229	0.82643	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67591	0.97900	0.83393	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69606	0.02589	0.16025	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34927	0.32086	0.15884	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99480	0.67447	0.17065	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35634	0.36448	0.48998	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00581	0.65334	0.50112	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65466	0.00249	0.49832	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13448	0.24422	0.12404	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76977	0.88318	0.13315	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13638	0.88533	0.12727	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24576	0.11816	0.86310	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88713	0.75428	0.86985	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88907	0.12209	0.86775	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79158	0.56354	0.46188	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42620	0.21882	0.46523	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80550	0.21125	0.46112	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92429	0.45937	0.20271	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55816	0.09461	0.21457	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55855	0.45931	0.20798	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46208	0.90343	0.79972	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09769	0.54293	0.78257	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46428	0.54655	0.79184	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60191	0.79772	0.54394	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23219	0.44932	0.53743	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22196	0.77993	0.53781	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00815	0.26514	0.99852	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75175	0.74336	0.00143	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27373	0.00170	0.99260	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68823	0.61001	0.33232	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39119	0.06701	0.32550	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94721	0.33711	0.33108	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34328	0.92221	0.66655	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07561	0.38593	0.66497	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61969	0.66659	0.66786	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00874	0.73787	0.00215	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27809	0.26533	0.99343	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74969	0.99920	0.99840	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69317	0.06800	0.33057	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94214	0.59875	0.33462	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40267	0.33001	0.32787	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34420	0.40478	0.66120	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60855	0.94131	0.66695	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07355	0.68020	0.66950	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21131	0.00972	0.33756	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21642	0.03876	0.26975	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23999	0.07386	0.38922	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.05948	0.05456	0.31794	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01991	0.01861	0.40155	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06861	0.09543	0.48008	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.12224	0.14314	0.30521	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13902	0.17944	0.46218	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09845	0.05759	0.53047	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.00227	0.10670	0.51240	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15770	0.88713	0.35762	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.07349	0.84592	0.32574	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.14511	0.87334	0.42937	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.21891	0.82575	0.32207	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.30038	0.85652	0.35547	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.23318	0.83733	0.25038	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.16495	0.73501	0.33569	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.92509	0.90108	0.41903	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.95041	0.85694	0.46733	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.89420	0.84986	0.35839	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.85308	0.90428	0.44946	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.01984	0.00062	0.26015	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 4-methyl-3-heptene:>; E= -994.135 eV; ZPVE= 6.462eV; frequencies =235.0i, 31.5, 41.8, 48.7, 73.0, 78.5, 86.7, 107.7, 132.0, 142.2, 160.2, 186.2, 192.5, 204.4, 216.6, 259.9, 283.3, 300.9, 305.5, 334.4, 368.5, 408.0, 440.1, 482.5, 572.3, 581.0, 606.3, 653.3, 690.2, 732.3, 762.2, 817.1, 868.2, 873.6, 885.2, 899.1, 934.8, 948.4, 977.0, 995.8, 1000.4, 1022.9, 1042.9, 1071.5, 1087.1, 1117.8, 1144.2, 1151.4, 1237.1, 1238.9, 1276.3, 1296.5, 1303.1, 1326.0, 1343.2, 1352.8, 1360.5, 1402.6, 1420.7, 1426.9, 1429.3, 1432.8, 1437.8, 1439.7, 1451.0, 1452.8, 1622.3, 2939.3, 2958.7, 2962.5, 2968.1, 3007.6, 3011.0, 3016.9, 3031.0, 3038.6, 3042.2, 3044.8, 3055.1, 3067.0, 3088.5, 3099.5, 3112.6, 3223.6 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.00898	0.23074	0.09432	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77996	0.77494	0.09709	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23975	0.00369	0.09241	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23390	0.99826	0.88444	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77862	0.77054	0.88975	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00684	0.22927	0.88780	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67632	0.56597	0.42723	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44794	0.10878	0.42957	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90934	0.33119	0.42776	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90553	0.33574	0.22118	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44321	0.10575	0.22170	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67772	0.56642	0.22363	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33973	0.89101	0.76442	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10968	0.43319	0.75876	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57302	0.66577	0.76113	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58155	0.67252	0.55836	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11037	0.43573	0.55707	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34201	0.89053	0.55748	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00592	0.76686	0.89073	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23623	0.22780	0.88482	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77977	0.99893	0.88720	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77888	0.00191	0.09495	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24004	0.23249	0.09278	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00971	0.77486	0.09769	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67744	0.10580	0.22418	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90520	0.56417	0.22353	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44523	0.33509	0.22116	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43937	0.33503	0.42614	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90292	0.55913	0.43082	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68010	0.10572	0.42436	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34579	0.44665	0.55424	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57208	0.89792	0.55740	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10535	0.66741	0.56035	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10798	0.66496	0.76317	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57054	0.89643	0.76147	Biso	1.000	Si

Si35	1.0000	0.34122	0.43683	0.75864	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91054	0.09976	0.11178	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91183	0.80866	0.11298	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20831	0.10218	0.11442	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10374	0.89683	0.86913	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81366	0.90152	0.86899	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10572	0.19765	0.87062	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56935	0.43953	0.43632	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58917	0.14685	0.42604	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87976	0.43144	0.44778	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77378	0.23820	0.20663	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47905	0.23776	0.20239	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77440	0.53134	0.20616	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23889	0.76117	0.78280	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24147	0.46788	0.77494	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54139	0.76552	0.77138	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44983	0.57590	0.54299	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12682	0.56153	0.54979	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43710	0.85127	0.54436	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98955	0.31574	0.15709	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69577	0.66810	0.15796	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34917	0.02389	0.14878	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32141	0.97876	0.82529	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67141	0.68348	0.83034	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02610	0.33454	0.82643	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66513	0.65439	0.49246	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36415	0.99381	0.49588	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01633	0.34978	0.48750	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02356	0.67738	0.83217	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32156	0.33240	0.82212	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67353	0.97866	0.82670	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69267	0.02515	0.15265	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34627	0.32044	0.15282	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99072	0.67295	0.16375	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35533	0.36263	0.48422	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00413	0.65085	0.49390	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65022	0.00047	0.49095	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13078	0.24382	0.11911	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76619	0.88198	0.12581	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13131	0.88401	0.12270	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24453	0.11771	0.85583	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88450	0.75322	0.86501	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88670	0.12067	0.86098	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79011	0.56401	0.45513	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42799	0.21964	0.46018	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80448	0.20892	0.45414	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92010	0.45789	0.19515	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55371	0.09208	0.20887	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55508	0.45821	0.20271	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45966	0.90219	0.79215	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09569	0.54203	0.77790	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46166	0.54580	0.78461	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59672	0.79538	0.53666	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22945	0.44520	0.53160	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21899	0.78184	0.53223	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00712	0.26445	0.99107	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74502	0.74153	0.99385	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26772	0.00216	0.98832	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68716	0.61112	0.32529	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38818	0.06664	0.32021	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94378	0.33590	0.32351	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33967	0.92386	0.66139	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07195	0.38704	0.65760	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61755	0.66603	0.66065	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00912	0.73736	0.99524	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27255	0.26091	0.98836	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74601	0.99749	0.99087	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69156	0.06632	0.32309	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93922	0.59672	0.32757	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39958	0.32716	0.32198	Biso	1.000	O

O70	1.0000	0.34190	0.40139	0.65538	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60732	0.94063	0.65999	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07051	0.67624	0.66245	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20827	0.00433	0.34804	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20597	0.04735	0.28777	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24431	0.05709	0.40626	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04485	0.04637	0.37022	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05160	0.00824	0.45204	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.99455	0.91804	0.46664	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.12437	0.07897	0.52694	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.09939	0.13702	0.35607	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.18353	0.16550	0.50382	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.17664	0.04336	0.55128	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15285	0.87922	0.35161	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.07373	0.84494	0.31294	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.13142	0.85137	0.42062	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.21985	0.82471	0.31374	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.29784	0.85203	0.35155	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.24106	0.84569	0.24369	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.16580	0.73252	0.31997	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95961	0.97691	0.30128	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.89621	0.00435	0.29544	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.91370	0.88627	0.31820	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.99776	0.98800	0.23506	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.05314	0.08292	0.60471	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.99374	0.99743	0.62977	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.00361	0.12281	0.58460	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.10886	0.13216	0.65993	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 1-octene*; E= -993.986 eV; ZPVE= 6.472eV;
frequencies =243.1i, 18.2, 30.2, 49.2, 66.0, 69.7, 90.8, 114.4, 117.3, 135.4,
152.6, 167.1, 187.4, 225.6, 235.0, 273.3, 296.1, 308.5, 334.9, 371.8, 394.6, 429.6,
433.8, 570.7, 577.8, 608.0, 653.8, 690.0, 695.1, 733.5, 735.3, 852.9, 869.9, 880.6,
883.2, 892.5, 935.2, 956.5, 971.0, 989.5, 996.3, 1019.5, 1032.2, 1059.6, 1066.3,
1098.1, 1151.1, 1165.4, 1225.6, 1232.9, 1246.7, 1281.2, 1294.5, 1307.0, 1323.4,
1344.5, 1360.4, 1401.1, 1403.2, 1428.5, 1429.0, 1436.1, 1436.9, 1442.0, 1449.4,
1450.7, 1599.1, 2923.5, 2955.6, 2961.2, 2975.6, 2987.4, 3004.9, 3005.2, 3033.6,
3042.8, 3050.5, 3054.2, 3060.8, 3086.0, 3105.2, 3109.1, 3147.2, 3219.9 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.01296	0.23815	0.09759	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78551	0.78347	0.10063	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24504	0.01123	0.09280	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23708	0.00631	0.88556	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78263	0.77916	0.89230	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00969	0.23760	0.89085	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67778	0.57206	0.43012	Biso	1.000	Si

All	1.0000	0.44893	0.11591	0.43143	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91270	0.33906	0.43087	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91050	0.34379	0.22433	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44796	0.11401	0.22300	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68129	0.57369	0.22605	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34297	0.89923	0.76558	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11266	0.44130	0.76193	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57598	0.67419	0.76397	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58516	0.68057	0.56113	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11236	0.44334	0.56044	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34464	0.89726	0.55848	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00847	0.77493	0.89271	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23888	0.23591	0.88637	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78277	0.00706	0.89065	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78280	0.00952	0.09857	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24391	0.23980	0.09410	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01376	0.78300	0.10034	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68159	0.11423	0.22675	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90945	0.57218	0.22628	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44885	0.34338	0.22282	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43985	0.34240	0.42820	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90587	0.56724	0.43337	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68185	0.11455	0.42777	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34816	0.45522	0.55633	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57553	0.90604	0.55992	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10702	0.67547	0.56310	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11140	0.67366	0.76552	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57365	0.90477	0.76403	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34412	0.44519	0.76101	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91442	0.10737	0.11551	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91756	0.81856	0.11887	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21303	0.10944	0.11457	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10669	0.90483	0.87168	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81742	0.91023	0.87223	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10843	0.20613	0.87254	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57021	0.44606	0.44059	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59093	0.15564	0.43093	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88448	0.44026	0.45045	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77906	0.24614	0.20905	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48235	0.24578	0.20482	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77852	0.53910	0.20924	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24253	0.76944	0.78495	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24441	0.47610	0.77845	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54370	0.77357	0.77362	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45355	0.58396	0.54532	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12521	0.56752	0.55340	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44060	0.85891	0.54607	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99503	0.32405	0.16057	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70065	0.67602	0.16065	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35428	0.03218	0.14970	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32385	0.98745	0.82505	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67364	0.69242	0.83425	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02886	0.34348	0.83016	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66856	0.66187	0.49530	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36510	0.99948	0.49632	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01872	0.35599	0.49119	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02739	0.68548	0.83531	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32465	0.34030	0.82378	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67646	0.98615	0.82985	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69660	0.03225	0.15657	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34996	0.32789	0.15411	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99492	0.68065	0.16597	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35562	0.37034	0.48584	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00583	0.65982	0.49692	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65357	0.00919	0.49392	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13447	0.25017	0.12172	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77028	0.88962	0.12901	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13692	0.89127	0.12341	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24668	0.12548	0.85789	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88763	0.76145	0.86494	Biso	1.000	O

O42	1.0000	0.88910	0.12926	0.86432	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79158	0.56957	0.45698	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42595	0.22535	0.46060	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80670	0.21749	0.45708	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92486	0.46600	0.19852	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55900	0.10194	0.20890	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55905	0.46589	0.20338	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46309	0.91140	0.79425	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09862	0.55041	0.77936	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46472	0.55397	0.78704	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60099	0.80384	0.53951	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23280	0.45622	0.53441	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22193	0.78775	0.53379	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01056	0.27191	0.99444	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75291	0.75053	0.99699	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27314	0.00975	0.98885	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68799	0.61646	0.32799	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39317	0.07359	0.32122	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94789	0.34358	0.32684	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34288	0.93087	0.66235	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07526	0.39403	0.66096	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62112	0.67450	0.66363	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00920	0.74520	0.99751	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27566	0.26935	0.98980	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74956	0.00537	0.99450	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69252	0.07515	0.32647	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94324	0.60556	0.33030	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40312	0.33720	0.32340	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34415	0.41023	0.65756	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61086	0.94893	0.66256	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07370	0.68637	0.66524	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20831	0.00847	0.33689	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21505	0.04486	0.27145	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23837	0.06731	0.39238	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.05548	0.05175	0.32389	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02374	0.00065	0.40427	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.96500	0.90887	0.40613	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.05835	0.05761	0.49225	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.01994	0.00517	0.26224	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.11048	0.14360	0.31848	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12096	0.14836	0.48449	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.09981	0.01912	0.53069	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15676	0.88426	0.34877	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.07696	0.84377	0.31078	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.13645	0.86240	0.41896	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22636	0.83072	0.31493	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.30500	0.86226	0.35268	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.24671	0.84790	0.24432	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.17446	0.73875	0.32432	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95514	0.04268	0.54588	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.89013	0.95197	0.54777	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.91651	0.08588	0.51075	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.98710	0.08879	0.64025	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.91308	0.08092	0.67588	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.05218	0.17919	0.64002	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.02050	0.04300	0.67851	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 3-methyl-3-heptene:d; E= -994.240 eV; ZPVE= 6.457eV; frequencies =261.8i, 37.2i, 35.2, 45.2, 58.1, 83.4, 99.7, 108.6, 123.7, 150.4, 168.0, 180.4, 195.9, 225.2, 233.0, 273.5, 281.7, 307.5, 336.6, 372.0, 401.7, 427.8, 436.9, 539.7, 578.0, 578.8, 604.3, 656.5, 693.9, 734.2, 749.6, 769.8, 791.9, 880.4, 885.1, 892.2, 927.2, 935.7, 961.5, 971.1, 984.3, 994.6, 1004.6, 1052.6, 1063.4, 1071.7, 1095.9, 1151.1, 1225.7, 1229.5, 1284.3, 1300.9, 1307.9, 1345.1, 1347.1, 1360.6, 1386.1, 1403.8, 1410.7, 1425.6, 1427.1, 1438.4, 1439.6, 1446.7, 1450.6, 1452.6, 1589.7, 2926.4, 2954.3, 2966.2, 2973.4, 3001.0, 3008.7, 3009.9, 3045.6, 3051.4, 3053.7, 3055.4, 3056.6, 3089.9, 3107.9, 3108.5, 3144.0, 3224.4 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 13.625

_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01177 0.23335 0.09963 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78451 0.77868 0.10275 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24402 0.00637 0.09473 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23638 0.00097 0.88778 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78187 0.77424 0.89432 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00846 0.23252 0.89304 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67716 0.56742 0.43208 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44769 0.11056 0.43410 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91136 0.33471 0.43272 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90906 0.33886 0.22619 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44682 0.10899 0.22545 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68003 0.56898 0.22804 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34174 0.89344 0.76821 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11192 0.43602 0.76361 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57505 0.66853 0.76643 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58411 0.67561 0.56355 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11147 0.43802 0.56245 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34408 0.89196 0.56073 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00738 0.76933 0.89491 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23809 0.23080 0.88876 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78209 0.00233 0.89239 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78228 0.00494 0.10069 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24322 0.23516 0.09586 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01267 0.77807 0.10258 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68048 0.10871 0.22912 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90829 0.56722 0.22813 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44813 0.33824 0.22520 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44002 0.33766 0.43067 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90525 0.56276 0.43530 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68113 0.10909 0.42982 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34747 0.45090 0.55819 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57509 0.90127 0.56230 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10643 0.67052 0.56534 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10978 0.66821 0.76755 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57225 0.89905 0.76670 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34311 0.44008 0.76295 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91379 0.10254 0.11835 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91632 0.81336 0.12132 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21161 0.10446 0.11563 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10626 0.89894 0.87389 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81613 0.90506 0.87391 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10749 0.20108 0.87602 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57063 0.44087 0.44259 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58932 0.14904 0.43260 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88253 0.43538 0.45276 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77762 0.24074 0.21140 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48220 0.24101 0.20724 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77747 0.53474 0.21130 Biso 1.000 O

O13	1.0000	0.24067	0.76402	0.78782	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24389	0.47168	0.78045	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54302	0.76806	0.77609	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45218	0.58008	0.54746	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12434	0.56230	0.55677	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44040	0.85423	0.54729	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99388	0.31917	0.16275	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69921	0.67135	0.16276	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35311	0.02765	0.15210	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32329	0.98266	0.82696	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67295	0.68688	0.83645	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02859	0.33868	0.83233	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66689	0.65648	0.49738	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36402	0.99457	0.49925	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01757	0.35189	0.49286	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02547	0.67920	0.83761	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32285	0.33444	0.82513	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67495	0.98087	0.83242	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69548	0.02731	0.15833	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34868	0.32217	0.15690	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99406	0.67574	0.16809	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35631	0.36651	0.48804	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00568	0.65498	0.49870	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65400	0.00449	0.49654	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13392	0.24621	0.12252	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76932	0.88485	0.13114	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13586	0.88644	0.12523	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24529	0.11997	0.86047	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88696	0.75674	0.86698	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88841	0.12420	0.86524	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79181	0.56669	0.45901	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42593	0.22071	0.46356	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80562	0.21289	0.45881	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92283	0.46067	0.19985	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55741	0.09593	0.21230	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55790	0.46095	0.20542	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46135	0.90478	0.79735	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09712	0.54483	0.78018	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46387	0.54829	0.78962	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60146	0.79956	0.54205	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23171	0.45082	0.53562	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22161	0.78234	0.53587	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00750	0.26627	0.99652	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75221	0.74591	0.99907	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27285	0.00449	0.99097	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68657	0.61172	0.33000	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39124	0.06896	0.32373	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94669	0.33970	0.32875	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34249	0.92470	0.66481	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07485	0.38762	0.66281	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61978	0.66868	0.66591	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00768	0.73982	0.99980	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27653	0.26550	0.99180	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75006	0.00145	0.99646	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69210	0.06942	0.32864	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94231	0.60019	0.33215	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40284	0.33195	0.32594	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34349	0.40587	0.65937	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60889	0.94340	0.66519	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07282	0.68220	0.66727	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21193	0.01109	0.33819	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21606	0.04399	0.27179	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24114	0.07209	0.39217	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.06126	0.06009	0.33016	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01825	0.00881	0.40961	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06591	0.06979	0.49595	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.12487	0.15006	0.32669	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13483	0.15669	0.48256	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.10469	0.02627	0.53117	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15756	0.88744	0.35399	Biso	1.000	C

H6	1.0000	0.07534	0.84790	0.31917	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.14111	0.86973	0.42508	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22089	0.82786	0.31907	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.30091	0.85777	0.35455	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.23818	0.84201	0.24786	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.16665	0.73661	0.33058	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.92208	0.88956	0.41401	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.94035	0.83808	0.46036	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.90047	0.84848	0.34863	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.84557	0.88795	0.43988	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.02388	0.01729	0.26747	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.97717	0.07276	0.55725	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.91211	0.98728	0.57813	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.93452	0.11333	0.52451	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.01843	0.12163	0.61747	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 23-dimethyl-2-hexene:<; E= -994.322 eV; ZPVE= 6.436eV; frequencies =252.71, 39.9, 48.1, 55.7, 79.5, 90.0, 97.0, 107.5, 111.5, 137.2, 141.1, 158.0, 179.3, 197.9, 231.1, 272.2, 283.4, 302.4, 311.1, 335.1, 369.9, 386.0, 436.9, 464.2, 521.4, 575.1, 581.6, 602.1, 655.7, 691.8, 735.5, 771.4, 829.2, 871.7, 885.3, 908.9, 924.4, 941.0, 947.0, 959.4, 999.4, 1011.2, 1040.4, 1048.4, 1073.2, 1100.7, 1116.5, 1145.7, 1214.1, 1237.9, 1303.9, 1319.7, 1344.1, 1353.9, 1358.0, 1366.6, 1403.2, 1405.5, 1410.3, 1423.7, 1426.3, 1432.6, 1437.0, 1439.5, 1439.9, 1452.5, 1609.3, 2944.4, 2955.7, 2958.3, 2960.9, 2994.1, 3008.4, 3012.4, 3019.2, 3046.7, 3060.8, 3063.9, 3066.2, 3068.2, 3087.8, 3098.8, 3109.4, 3221.0 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00954	0.23114	0.09401	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78055	0.77523	0.09660	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24064	0.00374	0.09145	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23451	0.99826	0.88377	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77910	0.77073	0.88940	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00745	0.22979	0.88794	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67704	0.56612	0.42674	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44777	0.10877	0.42930	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90911	0.33176	0.42753	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90598	0.33599	0.22086	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44380	0.10612	0.22102	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67833	0.56679	0.22314	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34037	0.89095	0.76391	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11014	0.43326	0.75840	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57345	0.66583	0.76082	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58146	0.67274	0.55805	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11061	0.43546	0.55682	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34288	0.89041	0.55669	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00648	0.76700	0.89028	Biso	1.000	Si

Si19	1.0000	0.23697	0.22824	0.88453	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78020	0.99912	0.88697	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77916	0.00203	0.09449	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24098	0.23294	0.09202	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01043	0.77518	0.09714	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67806	0.10603	0.22381	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90590	0.56455	0.22300	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44601	0.33545	0.22072	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44085	0.33552	0.42583	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90378	0.55996	0.43030	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68036	0.10606	0.42389	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34641	0.44766	0.55369	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57287	0.89840	0.55689	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10631	0.66745	0.56004	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10835	0.66509	0.76263	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57101	0.89670	0.76119	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34173	0.43724	0.75825	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91075	0.10019	0.11081	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91237	0.80875	0.11219	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20948	0.10255	0.11284	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10432	0.89689	0.86849	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81408	0.90171	0.86869	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10631	0.19804	0.87122	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57153	0.43882	0.43560	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58880	0.14637	0.42520	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87918	0.43182	0.44730	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77432	0.23835	0.20585	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47985	0.23815	0.20172	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77509	0.53182	0.20575	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23926	0.76124	0.78241	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24200	0.46830	0.77471	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54226	0.76590	0.77087	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44917	0.57772	0.54274	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12804	0.56170	0.55038	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43798	0.85126	0.54289	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99051	0.31593	0.15740	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69640	0.66855	0.15763	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35001	0.02420	0.14808	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32181	0.97914	0.82400	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67211	0.68369	0.82976	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02666	0.33473	0.82616	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66404	0.65345	0.49195	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36430	0.99371	0.49543	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01605	0.35051	0.48727	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02384	0.67738	0.83161	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32180	0.33234	0.82123	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67441	0.97919	0.82601	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69292	0.02510	0.15237	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34660	0.32049	0.15278	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99142	0.67328	0.16321	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35809	0.36494	0.48371	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00545	0.65080	0.49332	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65121	0.00108	0.49063	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13123	0.24354	0.11818	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76694	0.88233	0.12536	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13203	0.88439	0.12204	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24501	0.11788	0.85601	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88505	0.75348	0.86478	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88734	0.12096	0.86130	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79196	0.56661	0.45492	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42812	0.21969	0.46019	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80423	0.20963	0.45401	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92057	0.45812	0.19463	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55416	0.09219	0.20899	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55573	0.45858	0.20206	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46007	0.90205	0.79241	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09584	0.54203	0.77704	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46208	0.54609	0.78473	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59892	0.79662	0.53665	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22912	0.44400	0.53058	Biso	1.000	O

O54	1.0000	0.21989	0.78171	0.53173	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00765	0.26572	0.99098	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74520	0.74158	0.99343	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26875	0.00145	0.98749	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68753	0.61132	0.32486	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38809	0.06722	0.31958	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94363	0.33637	0.32335	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34121	0.92348	0.66072	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07256	0.38655	0.65733	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61742	0.66549	0.66021	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.60997	0.73756	0.99473	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27436	0.26240	0.98782	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74566	0.99712	0.99050	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69245	0.06687	0.32275	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93996	0.59729	0.32702	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40092	0.32756	0.32172	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34296	0.40274	0.65483	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60708	0.94095	0.65962	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07112	0.67692	0.66192	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21257	0.00859	0.34423	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20880	0.04838	0.28259	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24535	0.06348	0.40172	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04862	0.04618	0.36894	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04457	0.00965	0.45411	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.12353	0.08723	0.52389	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.10874	0.13579	0.35553	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17965	0.17334	0.49915	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.17652	0.05421	0.55135	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.07444	0.09214	0.58022	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15686	0.88361	0.35140	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.07630	0.84853	0.31449	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.13763	0.85909	0.42125	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22093	0.82614	0.31371	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.29980	0.85339	0.35028	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.24043	0.84486	0.24318	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.16616	0.73428	0.32158	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96675	0.98228	0.29617	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.89893	0.00412	0.29470	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.92473	0.88988	0.30434	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.00753	0.00436	0.23064	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.95960	0.89318	0.48503	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.99743	0.85990	0.53226	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.91985	0.83182	0.43100	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.89072	0.89662	0.52094	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 4-methyl-4-octene:o; E= -1010.814 eV; ZPVE= 7.227eV; frequencies =249.3i, 25.9, 49.2, 55.3, 63.1, 74.7, 91.2, 97.3, 118.2, 123.8, 139.4, 154.3, 181.7, 187.5, 217.2, 228.2, 263.4, 284.5, 291.0, 302.1, 319.4, 337.0, 367.8, 404.1, 441.2, 527.6, 577.3, 586.4, 606.6, 655.0, 690.1, 732.6, 736.9, 795.6, 856.9, 875.6, 883.6, 889.0, 908.0, 913.8, 950.8, 977.9, 1001.4, 1015.1, 1027.2, 1039.4, 1065.1, 1070.4, 1092.0, 1117.5, 1144.4, 1153.2, 1212.0, 1242.5, 1249.8, 1276.1, 1300.5, 1307.2, 1310.1, 1327.7, 1344.1, 1360.5, 1363.1, 1399.6, 1417.7, 1426.0, 1429.9, 1432.5, 1437.6, 1438.4, 1442.0, 1451.4, 1452.9, 1630.4, 2936.8, 2950.1, 2965.7, 2966.7, 2974.9, 2980.1, 3001.7, 3004.2, 3026.4, 3034.4, 3036.6, 3044.9, 3056.2, 3061.0, 3068.3, 3083.7, 3102.1, 3108.6, 3220.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01129  0.23483  0.09561  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.78220  0.77729  0.09792  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24281  0.00636  0.09359  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.23648  0.00126  0.88586  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.78077  0.77332  0.89176  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.00958  0.23391  0.89180  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.67851  0.56831  0.42967  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.45075  0.11143  0.43112  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.91156  0.33425  0.43057  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.90895  0.33890  0.22338  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.44646  0.10887  0.22286  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.68016  0.56897  0.22542  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34255  0.89415  0.76588  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11254  0.43648  0.76055  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.57556  0.66889  0.76298  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58415  0.67527  0.55965  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11301  0.43864  0.55885  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.34502  0.89286  0.55876  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.00923  0.76991  0.89244  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.24074  0.23225  0.88836  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78252  0.00216  0.88915  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78111  0.00466  0.09617  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.24439  0.23614  0.09383  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01316  0.77740  0.09861  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68063  0.10878  0.22559  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.90815  0.56679  0.22525  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.44803  0.33847  0.22340  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.44195  0.33766  0.42921  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.90586  0.56210  0.43267  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68276  0.10898  0.42619  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.34860  0.44996  0.55572  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.57491  0.90076  0.55898  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.10817  0.67046  0.56166  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.11073  0.66813  0.76457  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.57374  0.90023  0.76300  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.34414  0.44092  0.76088  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.91243  0.10381  0.11207  Biso  1.000  O
O2       1.0000 0.91416  0.81012  0.11115  Biso  1.000  O
O3       1.0000 0.21197  0.10546  0.11484  Biso  1.000  O
O4       1.0000 0.10632  0.89997  0.87006  Biso  1.000  O
O5       1.0000 0.81612  0.90445  0.87122  Biso  1.000  O
O6       1.0000 0.10998  0.20337  0.88052  Biso  1.000  O
O7       1.0000 0.57180  0.44210  0.44140  Biso  1.000  O
O8       1.0000 0.59230  0.15070  0.42786  Biso  1.000  O
O9       1.0000 0.88232  0.43457  0.45127  Biso  1.000  O
O10      1.0000 0.77788  0.24062  0.20722  Biso  1.000  O
O11      1.0000 0.48092  0.24057  0.20413  Biso  1.000  O
O12      1.0000 0.77733  0.53436  0.20864  Biso  1.000  O
O13      1.0000 0.24156  0.76440  0.78476  Biso  1.000  O
O14      1.0000 0.24445  0.47206  0.77705  Biso  1.000  O
O15      1.0000 0.54513  0.76950  0.77318  Biso  1.000  O
O16      1.0000 0.45276  0.57885  0.54241  Biso  1.000  O
O17      1.0000 0.12885  0.56412  0.55114  Biso  1.000  O
O18      1.0000 0.43977  0.85312  0.54600  Biso  1.000  O
O19      1.0000 0.99515  0.31909  0.16178  Biso  1.000  O
O20      1.0000 0.69949  0.67177  0.16050  Biso  1.000  O
O21      1.0000 0.35236  0.02689  0.15000  Biso  1.000  O
O22      1.0000 0.32392  0.98243  0.82594  Biso  1.000  O
O23      1.0000 0.67521  0.68676  0.83082  Biso  1.000  O
O24      1.0000 0.02931  0.33701  0.82771  Biso  1.000  O

```

O25	1.0000	0.66898	0.65809	0.49448	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36752	0.99599	0.49697	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01881	0.35221	0.48962	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02558	0.68049	0.83277	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32310	0.33516	0.82322	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67752	0.98308	0.82750	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69478	0.02667	0.15486	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34702	0.32312	0.15711	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99334	0.67596	0.16557	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35665	0.36381	0.48701	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00700	0.65449	0.49543	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65239	0.00316	0.49226	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13329	0.24605	0.11599	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77036	0.88546	0.12672	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13397	0.88725	0.12464	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24650	0.12091	0.85877	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88725	0.75625	0.86908	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89079	0.12368	0.86422	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79314	0.56736	0.45621	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42967	0.22142	0.46184	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80701	0.21171	0.45672	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92287	0.46054	0.19615	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55752	0.09635	0.20964	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55793	0.46094	0.20279	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46267	0.90569	0.79390	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09788	0.54497	0.77957	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46424	0.54958	0.78816	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60033	0.79868	0.53872	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23224	0.44855	0.53334	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22204	0.78439	0.53326	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00559	0.27131	0.99377	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74403	0.74291	0.99529	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27032	0.00346	0.98957	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68706	0.61159	0.32739	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39193	0.06892	0.32147	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94539	0.33976	0.32620	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34251	0.92612	0.66265	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07503	0.39028	0.65944	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61807	0.66723	0.66221	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01541	0.74020	0.99649	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28331	0.26712	0.99067	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74678	0.99973	0.99240	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69440	0.07009	0.32483	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94263	0.59856	0.32930	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40475	0.33232	0.32467	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34612	0.40717	0.65744	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61006	0.94416	0.66143	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07390	0.67975	0.66377	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21340	0.00388	0.34657	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21161	0.04679	0.28615	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24575	0.05607	0.40554	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04941	0.04518	0.35948	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04524	0.99422	0.43786	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.98811	0.90223	0.44245	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.10027	0.05272	0.52228	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.10428	0.13748	0.35472	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.16552	0.14166	0.51006	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.14301	0.01099	0.55401	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16038	0.87862	0.34960	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.08179	0.84326	0.31022	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.13800	0.85020	0.41839	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22954	0.82622	0.31261	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.30729	0.85443	0.35103	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.25151	0.84757	0.24268	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.17676	0.73381	0.31853	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.97481	0.98609	0.28234	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.91042	0.01209	0.27636	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.92942	0.89357	0.29064	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.02104	0.00825	0.21903	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.00970	0.04797	0.58645	Biso	1.000	C

H15	1.0000	0.94153	0.95906	0.59422	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.97006	0.09326	0.55601	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.05851	0.09848	0.67703	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.12632	0.18750	0.67095	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.09470	0.05185	0.71023	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.99247	0.09560	0.72054	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 1-nonene:h; E= -1010.593 eV; ZPVE= 7.250eV;
frequencies =255.4i, 18.2, 55.4, 58.5, 76.2, 79.0, 95.6, 106.1, 117.2, 133.9,
144.5, 145.5, 156.8, 193.5, 224.7, 248.4, 255.0, 284.5, 302.3, 333.7, 365.7, 372.6,
397.2, 433.6, 455.9, 575.3, 579.3, 606.2, 654.5, 687.3, 701.7, 721.4, 730.6, 785.2,
878.7, 879.9, 885.6, 900.8, 905.6, 929.1, 963.3, 978.0, 993.3, 1003.4, 1012.1,
1028.5, 1052.7, 1063.9, 1088.6, 1101.0, 1150.2, 1162.6, 1211.6, 1229.6, 1241.0,
1267.6, 1278.6, 1294.6, 1303.3, 1317.7, 1340.5, 1345.5, 1365.8, 1400.5, 1403.9,
1426.9, 1429.7, 1433.5, 1436.0, 1442.3, 1447.3, 1450.7, 1455.0, 1601.1, 2934.2,
2943.4, 2949.7, 2973.4, 2980.1, 2987.4, 2991.7, 2997.9, 3004.6, 3046.4, 3055.3,
3058.6, 3070.1, 3078.4, 3087.7, 3100.1, 3117.9, 3152.3, 3231.1 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01485	0.24298	0.10034	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78780	0.78757	0.10398	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24693	0.01356	0.09410	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23738	0.00961	0.88772	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78262	0.78338	0.89535	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01064	0.24292	0.89639	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67692	0.57461	0.43295	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44778	0.11771	0.43369	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91159	0.34249	0.43465	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91117	0.34681	0.22800	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44895	0.11633	0.22552	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68141	0.57620	0.22839	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34308	0.90199	0.76885	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11167	0.44421	0.76554	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57562	0.67736	0.76780	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58409	0.68325	0.56455	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11250	0.44687	0.56309	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34458	0.90004	0.56069	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00794	0.77765	0.89533	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23729	0.23854	0.88948	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77993	0.00914	0.89555	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78128	0.01100	0.10077	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24312	0.24092	0.09746	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01508	0.78494	0.10231	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68239	0.11725	0.23017	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91030	0.57491	0.22920	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44938	0.34683	0.22549	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44030	0.34594	0.43069	Biso	1.000	Si

Si28	1.0000	0.90584	0.57066	0.43618	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68105	0.11753	0.43152	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34798	0.45787	0.55992	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57377	0.90824	0.56238	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10721	0.67805	0.56553	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11077	0.67602	0.76882	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57261	0.90814	0.76792	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34353	0.44814	0.76476	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91268	0.11235	0.11045	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91981	0.82164	0.12147	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21368	0.11069	0.11625	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10709	0.90741	0.87555	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81645	0.91413	0.87447	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10681	0.20867	0.87480	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57140	0.44759	0.44488	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59001	0.15837	0.43499	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88270	0.44322	0.45419	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78019	0.24878	0.21206	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48178	0.24803	0.20990	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77947	0.54241	0.21288	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24138	0.77290	0.78851	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24298	0.47778	0.78235	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54490	0.77774	0.77818	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45210	0.58737	0.54901	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12779	0.57186	0.55371	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43941	0.86086	0.54493	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99646	0.32626	0.16595	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70274	0.67979	0.16364	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35623	0.03537	0.15130	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32337	0.99186	0.82544	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67349	0.69528	0.83789	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02599	0.34428	0.83171	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66656	0.66373	0.49822	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36367	0.00284	0.49983	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01742	0.35922	0.49494	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02545	0.68820	0.83687	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32416	0.34325	0.82756	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67789	0.99220	0.83098	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69759	0.03417	0.16145	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34976	0.32931	0.15679	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99610	0.68326	0.16881	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35718	0.37386	0.48970	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00563	0.66269	0.50002	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65351	0.01235	0.49763	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13293	0.24882	0.12739	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77493	0.89464	0.13393	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13921	0.89270	0.12396	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24523	0.12823	0.86103	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88791	0.76624	0.86796	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88731	0.13394	0.87876	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79262	0.57535	0.45876	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42369	0.22695	0.46018	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80579	0.22075	0.46067	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92531	0.46860	0.20098	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56078	0.10608	0.21036	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56007	0.46828	0.20336	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46202	0.91347	0.80057	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09872	0.55350	0.78523	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46372	0.55757	0.79098	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60098	0.80699	0.54315	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23160	0.45656	0.53749	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22101	0.79157	0.53685	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02147	0.28598	0.99861	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75418	0.75579	0.00035	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27612	0.01333	0.99030	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68475	0.61720	0.33047	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39426	0.07256	0.32326	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94744	0.34755	0.33084	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34591	0.93243	0.66513	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07495	0.40012	0.66401	Biso	1.000	O

O63	1.0000	0.61987	0.67707	0.66717	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00817	0.74567	0.99972	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27294	0.27168	0.99310	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73881	0.99815	0.99832	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69180	0.07838	0.33023	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94459	0.60809	0.33317	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40539	0.34521	0.32593	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34431	0.41358	0.66134	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60441	0.94995	0.66556	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07344	0.68640	0.66794	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20927	0.99833	0.33323	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21654	0.03439	0.26771	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23403	0.05690	0.38867	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04767	0.02532	0.30882	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02679	0.98284	0.39237	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.97413	0.89089	0.40108	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.06433	0.05126	0.47522	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.01111	0.97144	0.25057	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09611	0.11677	0.29729	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12587	0.14064	0.46020	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.10723	0.01925	0.51902	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16456	0.87493	0.34521	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.08516	0.83056	0.30713	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.14431	0.85274	0.41530	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.23956	0.82741	0.31206	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.31812	0.86194	0.35044	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.26066	0.84587	0.24161	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.19155	0.73504	0.32082	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96218	0.04364	0.52501	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.89975	0.95403	0.53896	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.91891	0.07522	0.48148	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.99623	0.11156	0.61126	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.06211	0.19959	0.59666	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.03561	0.07763	0.65676	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.89494	0.11000	0.65537	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.91953	0.16404	0.71440	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.83162	0.02349	0.67567	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.85301	0.14028	0.60960	Biso	1.000	H

Cracking by reverse propylation of 4-methyl-4-octene:o; E= -1010.912 eV; ZPVE= 7.212eV; frequencies =272.6i, 19.1i, 24.0, 54.7, 56.6, 67.3, 83.8, 100.3, 113.1, 122.4, 138.1, 152.3, 175.6, 198.6, 214.7, 228.2, 246.5, 278.3, 305.4, 317.4, 337.2, 374.9, 403.9, 434.0, 442.3, 539.1, 575.4, 581.8, 605.4, 656.7, 692.8, 727.1, 732.4, 745.0, 818.7, 859.2, 875.4, 881.5, 887.6, 894.3, 930.0, 954.5, 967.6, 978.2, 989.7, 1001.2, 1033.0, 1068.6, 1074.6, 1084.3, 1090.9, 1143.5, 1207.9, 1252.9, 1256.0, 1282.3, 1292.3, 1303.8, 1322.8, 1342.9, 1353.0, 1358.7, 1386.4, 1403.6, 1415.3, 1427.1, 1432.3, 1436.2, 1438.2, 1442.2, 1446.0, 1453.0, 1454.3, 1594.0, 2928.9, 2957.7, 2963.7, 2966.0, 2985.5, 2994.7, 3006.0, 3014.0, 3019.0, 3030.8, 3037.2, 3059.0, 3062.2, 3070.3, 3076.6, 3101.0, 3116.8, 3155.9, 3228.9 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```


_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol				
Si1	1.0000	0.01388	0.23557	0.09776	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78679	0.78114	0.09969	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24580	0.00857	0.09202	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23790	0.00388	0.88467	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78359	0.77681	0.89183	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01072	0.23523	0.89113	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67966	0.57050	0.42964	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44723	0.11153	0.43057	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91204	0.33748	0.43070	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91088	0.34109	0.22413	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44850	0.11125	0.22265	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68211	0.57117	0.22525	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34393	0.89631	0.76536	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11334	0.43841	0.76172	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57673	0.67151	0.76368	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58469	0.67795	0.56096	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11254	0.43890	0.56045	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34596	0.89487	0.55801	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00965	0.77266	0.89175	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24039	0.23382	0.88658	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78417	0.00504	0.89032	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78412	0.00718	0.09830	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24489	0.23691	0.09408	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01525	0.78057	0.09916	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68231	0.11112	0.22656	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91053	0.56958	0.22537	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45083	0.34132	0.22283	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44421	0.34118	0.42838	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90825	0.56672	0.43243	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68215	0.11119	0.42706	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34957	0.45371	0.55631	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57768	0.90492	0.55988	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10907	0.67213	0.56282	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11206	0.67089	0.76472	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57475	0.90279	0.76388	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34526	0.44366	0.76145	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91568	0.10475	0.11594	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91900	0.81619	0.11671	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21266	0.10597	0.11375	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10754	0.90256	0.87026	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81849	0.90795	0.87223	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10981	0.20404	0.87351	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57557	0.44259	0.44121	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58845	0.14857	0.42957	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88424	0.43892	0.45023	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77949	0.24324	0.20888	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48455	0.24365	0.20585	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77955	0.53667	0.20939	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24317	0.76657	0.78449	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24530	0.47424	0.77851	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54568	0.77180	0.77227	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45207	0.58393	0.54489	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12673	0.56371	0.55410	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44342	0.85891	0.54416	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99591	0.32111	0.16118	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70260	0.67413	0.16028	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35616	0.03102	0.14807	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32466	0.98491	0.82423	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67524	0.69035	0.83317	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03017	0.34140	0.83070	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66694	0.65844	0.49449	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36282	0.99606	0.49609	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01742	0.35301	0.49132	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02793	0.68290	0.83421	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32543	0.33817	0.82365	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67753	0.98386	0.82980	Biso	1.000	O

O31	1.0000	0.69740	0.02957	0.15601	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35043	0.32380	0.15501	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99559	0.67787	0.16478	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36185	0.37087	0.48680	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00933	0.65791	0.49574	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65716	0.00731	0.49380	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13578	0.24812	0.12124	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77140	0.88711	0.12825	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13862	0.88813	0.12308	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24802	0.12345	0.85750	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88863	0.75910	0.86480	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89064	0.12692	0.86353	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79626	0.57335	0.45611	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42728	0.22269	0.45988	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80544	0.21644	0.45644	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92527	0.46307	0.19739	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55925	0.09828	0.20980	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56042	0.46350	0.20099	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46373	0.90821	0.79480	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09876	0.54737	0.77818	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46534	0.55228	0.78874	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60308	0.80245	0.54078	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23165	0.44920	0.53319	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22473	0.78345	0.53383	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01046	0.26906	0.99470	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75285	0.74748	0.99632	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27339	0.00669	0.98801	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68708	0.61305	0.32726	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39111	0.06948	0.32015	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94813	0.34210	0.32689	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34491	0.92805	0.66204	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07602	0.38961	0.66103	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61970	0.66890	0.66312	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01167	0.74307	0.99641	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27789	0.26720	0.98995	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75149	0.00408	0.99420	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69441	0.07217	0.32604	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94561	0.60340	0.32916	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40787	0.33833	0.32380	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34665	0.41014	0.65782	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61147	0.94803	0.66259	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07471	0.68378	0.66438	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20782	0.99013	0.33267	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20911	0.02859	0.26926	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.22939	0.04485	0.39039	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.01506	0.96934	0.32466	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04405	0.03155	0.40074	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.01765	0.97580	0.49044	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.96635	0.87699	0.32708	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.09635	0.01318	0.53031	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.98813	0.88468	0.48336	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16736	0.86731	0.34174	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.09121	0.82164	0.30049	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.14367	0.84244	0.41106	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.24734	0.82419	0.31134	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.32430	0.86021	0.35179	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.27094	0.84426	0.24138	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.20145	0.73164	0.31918	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.10274	0.15806	0.39812	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.04707	0.18780	0.42531	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.12700	0.19204	0.33060	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.17870	0.19623	0.44062	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.02694	0.00888	0.25950	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.92778	0.99006	0.54213	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.84950	0.95440	0.50236	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.95668	0.08085	0.55057	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.90272	0.93249	0.63286	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.97900	0.96856	0.67495	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.87079	0.84090	0.62664	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.83824	0.94347	0.66821	Biso	1.000	H

```

-----
# Cracking by reverse propylation of 233-trimethyl-1-hexene:p; E= -1011.081 eV;
ZPVE= 7.174eV; frequencies =250.7i, 44.3, 48.8, 57.6, 85.6, 94.0, 101.2, 105.0,
112.6, 126.6, 140.0, 146.5, 154.0, 158.6, 177.9, 188.7, 228.4, 275.9, 296.8, 333.9,
336.9, 341.4, 373.2, 411.9, 416.2, 438.4, 486.9, 506.4, 578.4, 582.0, 600.7, 654.3,
689.3, 693.5, 735.7, 861.0, 881.4, 885.0, 896.3, 906.9, 914.7, 938.6, 953.2, 966.2,
999.0, 1006.6, 1035.6, 1043.8, 1076.5, 1110.9, 1142.8, 1153.8, 1160.7, 1236.1,
1260.5, 1302.9, 1344.9, 1347.2, 1355.6, 1357.2, 1369.8, 1403.7, 1407.3, 1412.8,
1419.0, 1426.7, 1431.9, 1434.0, 1435.2, 1439.9, 1440.9, 1451.3, 1454.0, 1601.7,
2947.4, 2952.3, 2955.8, 2960.0, 2967.0, 2991.8, 3005.9, 3017.3, 3019.7, 3024.3,
3060.6, 3067.8, 3071.6, 3084.7, 3085.1, 3096.0, 3097.9, 3107.7, 3218.0 cm^-1
-----

```

```
data_image0
```

```

_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

```

```
loop_
```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

```

```
loop_
```

```

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00937  0.23198  0.09179  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.78113  0.77613  0.09452  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.24045  0.00470  0.08946  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.23453  0.99901  0.88150  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.77933  0.77109  0.88753  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.00731  0.23026  0.88622  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.67765  0.56709  0.42517  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.44785  0.10922  0.42688  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.90863  0.33277  0.42557  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.90610  0.33666  0.21878  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.44382  0.10679  0.21894  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.67830  0.56717  0.22072  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.34076  0.89183  0.76190  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.11059  0.43397  0.75630  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.57383  0.66653  0.75885  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58157  0.67355  0.55601  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.11111  0.43591  0.55490  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.34369  0.89133  0.55504  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.00702  0.76789  0.88794  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.23842  0.22946  0.88298  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.78119  0.00016  0.88497  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78048  0.00346  0.09301  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.24219  0.23410  0.08931  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01110  0.77620  0.09493  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.67827  0.10655  0.22191  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.90650  0.56536  0.22069  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.44732  0.33670  0.21854  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.44321  0.33695  0.42465  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.90465  0.56113  0.42779  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68055  0.10667  0.42171  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.34714  0.44852  0.55155  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.57378  0.89963  0.55555  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.10755  0.66796  0.55807  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.10875  0.66574  0.76044  Biso  1.000  Si

```

Si34	1.0000	0.57176	0.89778	0.75940	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34239	0.43847	0.75624	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91206	0.10096	0.11094	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91305	0.80982	0.10971	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20874	0.10322	0.11052	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10448	0.89772	0.86554	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81415	0.90204	0.86712	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10760	0.19987	0.87262	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57394	0.43921	0.43693	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58890	0.14688	0.42205	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87773	0.43218	0.44487	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77445	0.23893	0.20377	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48065	0.23900	0.19978	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77570	0.53289	0.20421	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23969	0.76199	0.78006	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24262	0.46955	0.77221	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54319	0.76700	0.76854	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44913	0.57894	0.54008	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13052	0.56294	0.54893	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43872	0.85199	0.54215	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99139	0.31675	0.15608	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69749	0.67009	0.15620	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35038	0.02566	0.14557	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32229	0.97977	0.82242	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67263	0.68427	0.82758	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02776	0.33545	0.82428	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66432	0.65476	0.48973	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36536	0.99413	0.49314	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01591	0.35223	0.48518	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02427	0.67812	0.82938	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32178	0.33304	0.81877	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67442	0.97971	0.82502	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69332	0.02592	0.15026	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34576	0.32024	0.15237	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99171	0.67379	0.16056	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35949	0.36589	0.48184	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00697	0.65049	0.49086	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65123	0.00197	0.48873	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13266	0.24640	0.11244	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76724	0.88312	0.12298	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13249	0.88521	0.12063	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24508	0.11863	0.85350	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88529	0.75388	0.86294	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88859	0.12103	0.85737	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79431	0.57045	0.45216	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42844	0.22004	0.45818	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80426	0.21038	0.45212	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92066	0.45863	0.19215	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55403	0.09230	0.20766	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55653	0.45922	0.19701	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46045	0.90272	0.79017	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09607	0.54259	0.77501	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46238	0.54718	0.78356	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59976	0.79784	0.53537	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22876	0.44264	0.52835	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22084	0.78255	0.52998	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00283	0.26472	0.98901	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74519	0.74166	0.99152	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26790	0.00197	0.98540	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68464	0.60937	0.32280	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38710	0.06783	0.31731	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94345	0.33713	0.32145	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34152	0.92499	0.65886	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07263	0.38691	0.65533	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61684	0.66503	0.65813	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01146	0.73922	0.99244	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27921	0.26399	0.98572	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74888	0.00052	0.98875	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69336	0.06749	0.32074	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94146	0.59811	0.32457	Biso	1.000	O

O69	1.0000	0.40603	0.33197	0.32022	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34457	0.40456	0.65284	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60868	0.94286	0.65807	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07146	0.67726	0.65969	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21256	0.00592	0.34351	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20508	0.04639	0.28352	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24347	0.05923	0.40200	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.04011	0.04497	0.37131	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04640	0.00531	0.45384	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.12299	0.07884	0.52680	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.18005	0.16714	0.50797	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17516	0.04401	0.55253	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.07110	0.07830	0.58326	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15903	0.88109	0.34869	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07863	0.84578	0.31152	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.13966	0.85512	0.41823	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.22457	0.82546	0.31046	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.30337	0.85314	0.34730	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.24436	0.84523	0.24008	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.17071	0.73336	0.31763	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95385	0.97133	0.30319	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.88035	0.98467	0.30590	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.92066	0.88025	0.31252	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.98846	0.99438	0.23563	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.96777	0.88536	0.48253	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.00779	0.85732	0.53207	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.93656	0.82379	0.42808	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.89230	0.87992	0.51457	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.10367	0.16839	0.34646	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.13699	0.18022	0.27845	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.17379	0.22229	0.39080	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.04469	0.20175	0.34636	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of n-butene: ^; E= -927.021 eV; ZPVE= 3.430eV;
frequencies =240.2i, 55.9, 68.5, 75.3, 91.2, 108.0, 136.5, 146.8, 165.6, 213.2,
256.2, 296.3, 327.7, 359.4, 378.4, 572.5, 577.8, 607.5, 652.4, 690.7, 791.7, 808.5,
841.9, 898.1, 964.4, 990.8, 1000.2, 1003.4, 1053.2, 1088.6, 1162.4, 1199.1, 1304.4,
1334.0, 1386.9, 1404.7, 1426.7, 1444.5, 1596.8, 2959.8, 3017.4, 3062.2, 3071.9,
3093.0, 3104.5, 3143.4, 3170.1, 3221.6 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01541	0.22822	0.10739	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78796	0.77390	0.11052	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24767	0.00033	0.10341	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24004	0.99602	0.89573	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78547	0.76941	0.90249	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01315	0.22756	0.90062	Biso	1.000	Si

Si7	1.0000	0.68112	0.56267	0.44007	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45081	0.10552	0.44105	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91553	0.32987	0.44048	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91279	0.33372	0.23409	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44922	0.10336	0.23395	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68405	0.56379	0.23599	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34573	0.88882	0.77571	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11607	0.43176	0.77138	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57890	0.66449	0.77389	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58840	0.67131	0.57096	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11536	0.43362	0.56996	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34749	0.88687	0.56808	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01195	0.76583	0.90233	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24224	0.22639	0.89679	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78581	0.99736	0.90041	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78448	0.99968	0.10833	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24686	0.23030	0.10416	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01677	0.77394	0.11037	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68421	0.10463	0.23710	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91288	0.56310	0.23645	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45197	0.33370	0.23279	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44418	0.33350	0.43874	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91031	0.55944	0.44262	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68495	0.10530	0.43748	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35132	0.44610	0.56609	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57874	0.89646	0.56949	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11067	0.66636	0.57247	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11484	0.66405	0.77552	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57653	0.89470	0.77378	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34714	0.43576	0.77068	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91620	0.09767	0.12542	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92017	0.80924	0.12801	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21706	0.10007	0.12400	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10946	0.89574	0.88018	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82085	0.90069	0.88271	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11126	0.19494	0.88297	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57452	0.43613	0.45158	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59247	0.14452	0.43875	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88896	0.43234	0.45892	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78121	0.23648	0.21811	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48397	0.23515	0.21460	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78152	0.52939	0.22033	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24593	0.75906	0.79628	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24821	0.46783	0.78787	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54589	0.76332	0.78381	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45664	0.57480	0.55523	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12753	0.55752	0.56329	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44386	0.84924	0.55568	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99759	0.31434	0.17018	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70381	0.66650	0.17088	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35707	0.02141	0.15995	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32683	0.97744	0.83497	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67679	0.68304	0.84403	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03326	0.33366	0.83988	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67154	0.65201	0.50536	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36786	0.98964	0.50653	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02177	0.34653	0.50048	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03049	0.67602	0.84499	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32683	0.33059	0.83357	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67952	0.97599	0.83949	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69815	0.02250	0.16619	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35172	0.31809	0.16538	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99697	0.67039	0.17477	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35940	0.36144	0.49558	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00901	0.65128	0.50722	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65657	0.00012	0.50381	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13617	0.23848	0.13237	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77258	0.88004	0.13910	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13908	0.88194	0.13601	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25185	0.11663	0.86972	Biso	1.000	O

O41	1.0000	0.89030	0.75119	0.87579	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89218	0.11966	0.87431	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79555	0.56108	0.46575	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42887	0.21571	0.47088	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80840	0.20962	0.46776	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92770	0.45636	0.20928	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56071	0.09147	0.22201	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56218	0.45575	0.21229	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46638	0.90207	0.80400	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10072	0.54012	0.78885	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46815	0.54382	0.79689	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60426	0.79441	0.54863	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23596	0.44689	0.54358	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22552	0.77765	0.54130	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01431	0.26224	0.00422	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75460	0.74058	0.00707	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27395	0.99655	0.99932	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68884	0.60593	0.33787	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39157	0.06380	0.33154	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94985	0.33190	0.33644	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34418	0.91872	0.67220	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07876	0.38410	0.67050	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62409	0.66531	0.67351	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01474	0.73808	0.00733	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27893	0.26141	0.00018	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75192	0.99569	0.00418	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69815	0.06664	0.33646	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94851	0.59877	0.33985	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40747	0.32840	0.33379	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34707	0.40077	0.66722	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61356	0.93855	0.67230	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07929	0.67858	0.67495	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21035	0.02773	0.34856	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22051	0.05830	0.28081	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24834	0.09187	0.40037	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.02722	0.02892	0.31932	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08832	0.11730	0.37402	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.07680	0.10967	0.44595	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.96396	0.94617	0.34498	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.03506	0.03758	0.24724	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.15246	0.90676	0.37096	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.10629	0.85098	0.31540	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.09765	0.88759	0.42951	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.21875	0.88825	0.39334	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.14937	0.20116	0.34855	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 2-pentene:~; E= -944.007 eV; ZPVE= 4.190eV;
frequencies =290.7i, 39.2, 56.4, 76.6, 83.3, 112.3, 123.9, 150.5, 163.4, 176.9,
218.4, 253.7, 272.4, 304.9, 339.9, 389.9, 418.4, 576.5, 580.9, 602.9, 652.8, 657.2,
692.4, 793.2, 886.1, 893.4, 908.8, 923.7, 948.4, 967.9, 977.6, 1031.6, 1056.4,
1100.3, 1148.6, 1166.3, 1289.7, 1326.3, 1350.4, 1387.9, 1400.2, 1405.7, 1410.2,
1433.8, 1440.8, 1608.6, 2954.9, 2983.5, 3005.2, 3050.3, 3059.7, 3061.8, 3069.1,
3105.5, 3118.6, 3158.3, 3222.8 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01576	0.23385	0.10655	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78847	0.77903	0.10923	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24873	0.00659	0.10171	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24089	0.00230	0.89473	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78598	0.77517	0.90099	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01273	0.23351	0.90030	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68142	0.56799	0.43880	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45182	0.11192	0.44090	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91553	0.33521	0.44016	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91383	0.33930	0.23353	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45055	0.10937	0.23202	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68468	0.56915	0.23447	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34596	0.89470	0.77447	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11642	0.43727	0.77072	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57922	0.66994	0.77273	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58838	0.67682	0.56980	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11556	0.43861	0.56960	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34784	0.89258	0.56712	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01151	0.77051	0.90134	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24268	0.23197	0.89586	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78618	0.00347	0.89950	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78583	0.00554	0.10768	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24786	0.23564	0.10278	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01642	0.77832	0.10855	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68500	0.11021	0.23603	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91328	0.56839	0.23523	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45229	0.33906	0.23149	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44427	0.33861	0.43753	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90998	0.56436	0.44191	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68516	0.11087	0.43704	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35181	0.45183	0.56503	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57907	0.90210	0.56893	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11080	0.67125	0.57199	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11475	0.66946	0.77439	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57672	0.90034	0.77312	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34760	0.44124	0.76960	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91740	0.10325	0.12593	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92045	0.81400	0.12775	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21757	0.10549	0.12369	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11055	0.90042	0.88179	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82047	0.90628	0.88183	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11189	0.20205	0.88431	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57506	0.44127	0.44960	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59356	0.15117	0.43908	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88820	0.43716	0.45830	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78254	0.24189	0.21709	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48422	0.24056	0.21232	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78235	0.53512	0.21774	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24570	0.76505	0.79469	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24853	0.47311	0.78686	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54662	0.76907	0.78276	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45632	0.58102	0.55428	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12808	0.56270	0.56319	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44418	0.85481	0.55497	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99940	0.31997	0.17057	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70366	0.67167	0.16940	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35648	0.02549	0.15984	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32715	0.98346	0.83357	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67720	0.68852	0.84279	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03360	0.33993	0.83967	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67078	0.65703	0.50373	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36806	0.99472	0.50493	Biso	1.000	O

O27	1.0000	0.02180	0.35217	0.50001	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03024	0.68106	0.84382	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32698	0.33588	0.83233	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67916	0.98167	0.83929	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69922	0.02761	0.16587	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35207	0.32394	0.16432	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99869	0.67649	0.17448	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36060	0.36804	0.49425	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00997	0.65625	0.50569	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65666	0.00552	0.50304	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13736	0.24500	0.12879	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77321	0.88531	0.13726	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13969	0.88668	0.13100	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24983	0.12125	0.86720	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89123	0.75807	0.87325	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89269	0.12529	0.87241	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79599	0.56707	0.46570	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42917	0.22132	0.47056	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80907	0.21453	0.46709	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92871	0.46188	0.20848	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56208	0.09781	0.21926	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56278	0.46102	0.21125	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46615	0.90711	0.80312	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10156	0.54598	0.78778	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46840	0.54945	0.79612	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60485	0.80026	0.54807	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23585	0.45159	0.54290	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22584	0.78267	0.54156	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01088	0.26718	0.00378	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75612	0.74574	0.00564	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27822	0.00651	0.99788	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69075	0.61143	0.33644	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39541	0.07025	0.33048	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95025	0.33738	0.33611	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34514	0.92538	0.67109	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07867	0.38893	0.67004	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62405	0.67028	0.67230	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01080	0.73942	0.00603	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28180	0.26606	0.99893	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75396	0.00319	0.00352	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69746	0.07230	0.33574	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94739	0.60325	0.33894	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40808	0.33331	0.33248	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34808	0.40662	0.66614	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61393	0.94447	0.67170	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07809	0.68325	0.67401	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21267	0.99623	0.34533	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21542	0.03784	0.28320	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23265	0.04759	0.40512	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.01807	0.95263	0.37668	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04599	0.04647	0.32779	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.02838	0.03591	0.25633	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.09972	0.16398	0.36270	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.97386	0.86843	0.34690	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.02840	0.95702	0.44878	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.11398	0.16847	0.43468	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.04612	0.20134	0.34753	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.18128	0.21947	0.32946	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.17981	0.87549	0.34874	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.12774	0.82780	0.29196	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.13927	0.83562	0.41160	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.25836	0.87111	0.34540	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 3-hexene:o; E= -960.628 eV; ZPVE= 4.966eV;
frequencies =292.1i, 52.9, 61.6, 72.5, 75.9, 89.0, 92.4, 130.3, 151.2, 161.0,
170.3, 219.1, 253.7, 266.1, 306.5, 341.5, 361.3, 389.0, 437.0, 573.1, 583.8, 608.1,
660.3, 687.8, 695.0, 783.9, 790.6, 864.4, 898.3, 930.7, 951.1, 966.6, 973.0,
1006.5, 1018.7, 1044.1, 1056.8, 1101.0, 1160.1, 1170.4, 1245.3, 1278.7, 1295.5,
1323.9, 1361.9, 1392.6, 1405.4, 1407.8, 1426.7, 1434.2, 1440.3, 1455.3, 1607.4,

2934.4, 2980.1, 2982.3, 2996.1, 3050.5, 3054.7, 3056.6, 3069.2, 3075.9, 3120.8,
3128.0, 3170.3, 3251.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01625	0.24470	0.10495	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78795	0.78831	0.10809	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24758	0.01682	0.10061	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23976	0.01136	0.89387	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78501	0.78420	0.90005	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01162	0.24325	0.89927	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67978	0.57715	0.43756	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45352	0.12145	0.43931	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91445	0.34592	0.43874	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91439	0.35053	0.23193	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45133	0.11732	0.23106	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68319	0.57817	0.23265	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34507	0.90323	0.77465	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11553	0.44661	0.76958	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57831	0.67855	0.77173	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58688	0.68570	0.56885	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11619	0.44968	0.56819	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34787	0.90293	0.56703	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01038	0.77856	0.90092	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24127	0.24038	0.89442	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78543	0.01225	0.89854	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78698	0.01530	0.10636	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24707	0.24460	0.10134	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01606	0.78689	0.10744	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68438	0.11928	0.23401	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91248	0.57669	0.23318	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45152	0.34921	0.23093	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44370	0.34905	0.43533	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90770	0.57143	0.44122	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68434	0.12004	0.43588	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35087	0.46081	0.56421	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57792	0.91143	0.56819	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11109	0.68163	0.57059	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11329	0.67838	0.77305	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57559	0.90918	0.77249	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34640	0.45059	0.76930	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91847	0.11359	0.12309	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91970	0.82203	0.12592	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21424	0.11386	0.12290	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10972	0.90848	0.88204	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81992	0.91531	0.88025	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11082	0.21177	0.88366	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57522	0.44974	0.45030	Biso	1.000	O

O8	1.0000	0.59636	0.16470	0.44177	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88158	0.44339	0.46087	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78378	0.25071	0.21834	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48159	0.24847	0.21804	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78255	0.54643	0.21663	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24404	0.77377	0.79421	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24737	0.48242	0.78719	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54627	0.77812	0.78124	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45477	0.59034	0.55309	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13226	0.57542	0.56242	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44286	0.86357	0.55342	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99972	0.32973	0.17008	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70255	0.68151	0.16843	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35529	0.03618	0.15896	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32630	0.99228	0.83327	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67665	0.69745	0.84152	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03159	0.34843	0.83745	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66900	0.66641	0.50212	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37034	0.00714	0.50651	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02091	0.36479	0.49908	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02826	0.68949	0.84216	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32578	0.34452	0.83112	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67847	0.99058	0.83826	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70085	0.03712	0.16515	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35253	0.33219	0.16194	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99943	0.68685	0.17494	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36092	0.37628	0.49522	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01003	0.66390	0.50328	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65594	0.01489	0.50234	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13832	0.25706	0.12666	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77505	0.89567	0.13670	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13935	0.89569	0.12898	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24712	0.12917	0.86482	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89032	0.76682	0.87334	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89168	0.13445	0.87208	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79666	0.58009	0.46339	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42672	0.22935	0.46258	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81127	0.22159	0.46185	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92639	0.47068	0.20222	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56411	0.11006	0.21119	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56322	0.46900	0.20711	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46480	0.91488	0.80374	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10004	0.55495	0.78646	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46735	0.55854	0.79599	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60397	0.80964	0.54812	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23481	0.45962	0.54040	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22456	0.79515	0.54028	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01050	0.27871	0.00240	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75446	0.75523	0.00464	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27818	0.01786	0.99692	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68634	0.61836	0.33485	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40117	0.07031	0.32952	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95243	0.35664	0.33493	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34521	0.93403	0.67124	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07935	0.39964	0.66847	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62238	0.67791	0.67118	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00994	0.74622	0.00534	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28133	0.27357	0.99733	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75291	0.01106	0.00255	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68946	0.07804	0.33422	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94612	0.60636	0.33771	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40881	0.35147	0.33103	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34653	0.41678	0.66571	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61158	0.95400	0.67104	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07725	0.69267	0.67249	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21775	0.95863	0.34265	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21492	0.00855	0.28789	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.22878	0.99380	0.40902	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.01931	0.88723	0.38060	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04072	0.98238	0.33632	Biso	1.000	C

H3	1.0000	0.01823	0.97514	0.26570	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.09313	0.09823	0.37498	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.97807	0.80486	0.34795	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.03416	0.88793	0.45194	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.11879	0.09825	0.44432	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.17116	0.15471	0.33747	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.21022	0.84802	0.32865	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.18695	0.81694	0.26070	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.15287	0.78482	0.37657	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.29465	0.85975	0.34362	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.01310	0.14669	0.36872	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.05695	0.23506	0.39124	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.93727	0.09817	0.40996	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.98516	0.14444	0.29994	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 3-methyl-2-pentene:>; E= -960.930 eV; ZPVE= 4.926eV; frequencies =255.1i, 39.0, 60.1, 79.4, 82.1, 93.5, 118.2, 150.8, 152.0, 165.8, 208.4, 228.3, 257.0, 261.9, 279.4, 294.8, 301.8, 336.5, 385.7, 499.8, 574.0, 580.8, 605.6, 658.2, 693.0, 766.8, 790.8, 832.8, 859.7, 896.0, 954.2, 954.6, 966.1, 1013.4, 1019.8, 1049.9, 1079.3, 1090.9, 1145.6, 1161.2, 1287.4, 1294.6, 1312.6, 1351.5, 1366.7, 1394.1, 1408.9, 1417.8, 1418.3, 1422.5, 1437.7, 1445.7, 1629.7, 2952.1, 2967.4, 2980.7, 3005.8, 3024.6, 3025.6, 3037.9, 3044.9, 3057.7, 3066.3, 3095.8, 3111.9, 3209.9 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01654	0.22952	0.10440	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79017	0.77462	0.10721	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24905	0.00136	0.09965	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24171	0.99721	0.89241	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78695	0.76982	0.89947	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01402	0.22887	0.89896	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68164	0.56239	0.43725	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45069	0.10558	0.43787	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91464	0.33094	0.43833	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91285	0.33384	0.23105	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45021	0.10340	0.23053	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68448	0.56364	0.23226	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34710	0.88937	0.77299	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11761	0.43227	0.76820	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58031	0.66503	0.77098	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58910	0.67240	0.56809	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11638	0.43351	0.56679	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34923	0.88718	0.56514	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01312	0.76572	0.89890	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24477	0.22758	0.89484	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78790	0.99839	0.89766	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78728	0.00090	0.10578	Biso	1.000	Si

Si22	1.0000	0.24913	0.23080	0.10097	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01835	0.77354	0.10620	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68510	0.10411	0.23433	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91560	0.56378	0.23333	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45630	0.33500	0.22852	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44924	0.33519	0.43680	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91296	0.56105	0.43896	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68522	0.10587	0.43442	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35326	0.44760	0.56283	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58027	0.89748	0.56724	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11306	0.66666	0.56932	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11637	0.66447	0.77235	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57797	0.89548	0.77153	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34876	0.43632	0.76734	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91878	0.09869	0.12373	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92224	0.80936	0.12428	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21716	0.09996	0.12101	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11144	0.89564	0.87817	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82202	0.90106	0.88016	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11377	0.19774	0.88530	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58051	0.43422	0.45427	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59246	0.14471	0.43384	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88722	0.43279	0.45732	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78162	0.23605	0.21455	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48661	0.23526	0.21028	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78457	0.53229	0.22020	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24708	0.75977	0.79398	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24989	0.46858	0.78403	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54763	0.76410	0.78117	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45637	0.57789	0.55321	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13087	0.55841	0.56009	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44522	0.84887	0.55333	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99955	0.31431	0.16956	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70670	0.66859	0.16896	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35763	0.02115	0.15697	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32841	0.97873	0.83144	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67843	0.68351	0.84084	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03534	0.33430	0.83692	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67076	0.65176	0.50174	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36996	0.99014	0.50396	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02147	0.34779	0.49751	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03102	0.67605	0.84091	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32762	0.33089	0.83021	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68097	0.97665	0.83732	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69991	0.02227	0.16370	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35170	0.31674	0.16498	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99929	0.67088	0.17141	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36527	0.36611	0.49164	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01147	0.65173	0.50412	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65693	0.00133	0.50138	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13894	0.24167	0.12498	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77529	0.88100	0.13561	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14105	0.88156	0.13012	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25125	0.11667	0.86557	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89208	0.75242	0.87220	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89464	0.12005	0.87059	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80092	0.56893	0.45912	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42835	0.21516	0.46817	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80803	0.21048	0.46556	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92763	0.45590	0.20432	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56083	0.08959	0.21981	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56566	0.45543	0.20236	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46760	0.90248	0.80174	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10237	0.54064	0.78588	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46964	0.54430	0.79412	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60777	0.79672	0.54603	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23576	0.44407	0.53997	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22741	0.77812	0.53808	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01009	0.26332	0.00195	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75600	0.74027	0.00400	Biso	1.000	O

O57	1.0000	0.27764	0.00013	0.99574	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68058	0.60007	0.33453	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39158	0.06500	0.32808	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94855	0.33359	0.33408	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34554	0.91849	0.66935	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07964	0.38447	0.66741	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62508	0.66572	0.67042	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01444	0.73566	0.00354	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28613	0.26240	0.99757	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75532	0.99813	0.00159	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70011	0.06713	0.33382	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95432	0.59820	0.33642	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41990	0.33605	0.33088	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34955	0.40186	0.66381	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61492	0.93961	0.67005	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08138	0.67887	0.67161	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21124	0.01233	0.34406	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21430	0.05288	0.28111	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.23778	0.06647	0.40254	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.01095	0.99045	0.39839	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05669	0.07352	0.33609	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.03040	0.05015	0.26680	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.13003	0.19643	0.35566	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03458	0.01441	0.46797	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.15425	0.21266	0.42594	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.08426	0.24161	0.33883	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.20758	0.23618	0.31521	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16544	0.88942	0.34873	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.08249	0.84382	0.31562	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.15970	0.85842	0.41652	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.22010	0.86774	0.30935	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.92131	0.87132	0.38117	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.90797	0.85225	0.30985	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.84028	0.85651	0.40946	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.93960	0.81012	0.41421	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 2-methyl-2-pentene:s; E= -961.004 eV; ZPVE= 4.917eV; frequencies =301.5i, 39.0, 43.4, 60.0, 65.3, 69.3, 106.9, 123.4, 136.7, 154.0, 169.1, 203.8, 253.3, 265.3, 304.4, 340.9, 384.3, 388.1, 437.9, 453.6, 575.4, 578.7, 601.6, 655.9, 693.2, 753.9, 789.1, 815.0, 884.6, 921.5, 925.0, 934.6, 954.9, 957.6, 976.2, 1042.9, 1045.8, 1051.1, 1097.8, 1157.8, 1277.7, 1321.0, 1349.3, 1356.7, 1377.9, 1399.4, 1407.4, 1408.8, 1417.6, 1430.4, 1438.4, 1449.5, 1600.3, 2947.5, 2953.2, 2986.1, 3000.7, 3006.0, 3034.5, 3053.0, 3054.4, 3057.9, 3104.5, 3108.3, 3148.1, 3222.0 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01177  0.22979  0.10185  Biso  1.000  Si

```

Si2	1.0000	0.78461	0.77542	0.10482	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24458	0.00235	0.09667	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23659	0.99771	0.88979	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78173	0.77101	0.89647	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00877	0.22916	0.89530	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67754	0.56484	0.43410	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44637	0.10626	0.43602	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91125	0.33128	0.43492	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90908	0.33514	0.22850	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44589	0.10494	0.22796	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68056	0.56565	0.23029	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34142	0.88963	0.77012	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11163	0.43267	0.76579	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57474	0.66562	0.76854	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58399	0.67235	0.56541	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11108	0.43424	0.56461	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34337	0.88800	0.56183	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00762	0.76665	0.89665	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23840	0.22801	0.89092	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78186	0.99898	0.89465	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78152	0.00134	0.10282	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24364	0.23214	0.09779	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01301	0.77496	0.10438	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68079	0.10576	0.23142	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90968	0.56483	0.23076	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44835	0.33513	0.22720	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44069	0.33501	0.43285	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90648	0.56085	0.43690	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68127	0.10578	0.43176	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34751	0.44772	0.56010	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57536	0.89834	0.56400	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10707	0.66747	0.56687	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11074	0.66539	0.76980	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57249	0.89643	0.76846	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34308	0.43730	0.76509	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91300	0.09921	0.12027	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91656	0.81023	0.12310	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21365	0.10175	0.11688	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10612	0.89649	0.87575	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81618	0.90192	0.87627	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10757	0.19745	0.87802	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57092	0.43839	0.44526	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58738	0.14299	0.43332	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88427	0.43348	0.45344	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77749	0.23771	0.21254	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48078	0.23670	0.20924	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77849	0.53184	0.21473	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24158	0.76019	0.79168	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24372	0.46869	0.78253	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54290	0.76532	0.77798	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45225	0.57670	0.54851	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12352	0.55830	0.55867	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44104	0.85217	0.54840	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99414	0.31582	0.16495	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69975	0.66778	0.16472	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35318	0.02281	0.15441	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32275	0.97939	0.82798	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67280	0.68402	0.83843	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02864	0.33524	0.83458	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66770	0.65388	0.49973	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36241	0.99153	0.50194	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01703	0.34761	0.49528	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02581	0.67682	0.83900	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32280	0.33142	0.82699	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67530	0.97801	0.83417	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69463	0.02383	0.16034	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34857	0.31933	0.15930	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99436	0.67216	0.16930	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35612	0.36277	0.49024	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00513	0.65215	0.50185	Biso	1.000	O

O36	1.0000	0.65511	0.00126	0.49826	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13341	0.24136	0.12504	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76916	0.88147	0.13340	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13600	0.88319	0.12773	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24647	0.11743	0.86359	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88682	0.75349	0.86914	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88840	0.12095	0.86811	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79219	0.56360	0.45981	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42699	0.21803	0.46519	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80417	0.21091	0.46202	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92372	0.45765	0.20347	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55702	0.09241	0.21676	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55884	0.45715	0.20712	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46197	0.90294	0.79889	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09642	0.54128	0.78230	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46357	0.54556	0.79219	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60108	0.79616	0.54405	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23142	0.44713	0.53770	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22199	0.77806	0.53494	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00857	0.26332	0.99878	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75196	0.74259	0.00119	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27310	0.99976	0.99287	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68569	0.60865	0.33200	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38792	0.06479	0.32582	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94579	0.33371	0.33099	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33986	0.91796	0.66636	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07465	0.38415	0.66503	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61879	0.66496	0.66795	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00845	0.73728	0.00150	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27675	0.26369	0.99390	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74900	0.99745	0.99861	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69479	0.06751	0.33070	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94521	0.60009	0.33425	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40359	0.32956	0.32806	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34409	0.40358	0.66147	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60904	0.94051	0.66688	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07627	0.68115	0.66919	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21463	0.02370	0.33764	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22140	0.06090	0.27258	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24319	0.08140	0.39387	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.06433	0.07177	0.32519	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02096	0.02477	0.40570	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06544	0.09068	0.48996	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.12740	0.16166	0.31939	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13734	0.17621	0.47864	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09158	0.04579	0.53679	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99761	0.09853	0.52333	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15986	0.89970	0.34817	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.07442	0.85754	0.31904	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.15601	0.87381	0.41737	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.92552	0.90545	0.41405	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.94864	0.85537	0.45799	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.89785	0.86249	0.34965	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.85189	0.90442	0.44553	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.02727	0.02565	0.26361	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.20719	0.86854	0.30940	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 3-methyl-2-hexene:h; E= -977.680 eV; ZPVE= 5.677eV; frequencies =300.2i, 12.5, 29.4, 36.5, 54.3, 65.2, 91.3, 99.0, 123.8, 146.2, 167.4, 188.5, 218.2, 249.9, 266.8, 274.8, 304.1, 340.8, 387.7, 402.1, 429.2, 540.1, 575.8, 580.5, 602.4, 653.6, 693.0, 750.6, 769.0, 792.6, 794.1, 889.2, 921.8, 926.8, 934.2, 956.2, 971.3, 986.6, 1004.6, 1046.0, 1053.7, 1072.0, 1103.7, 1160.7, 1229.1, 1283.5, 1301.4, 1323.2, 1346.9, 1359.3, 1387.3, 1399.6, 1409.8, 1412.4, 1427.0, 1437.4, 1440.6, 1446.4, 1452.4, 1592.3, 2928.9, 2952.9, 2972.5, 2986.8, 3001.1, 3007.0, 3035.1, 3045.4, 3050.3, 3051.5, 3053.9, 3103.1, 3108.0, 3143.1, 3220.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625

_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01091 0.23078 0.10013 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78373 0.77653 0.10258 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24352 0.00365 0.09512 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23621 0.99921 0.88803 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78134 0.77266 0.89405 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00814 0.23039 0.89319 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67701 0.56660 0.43177 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44631 0.10791 0.43434 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91048 0.33276 0.43275 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90787 0.33624 0.22629 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44494 0.10604 0.22627 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67961 0.56692 0.22804 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34067 0.89076 0.76832 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11109 0.43408 0.76364 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57439 0.66688 0.76630 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58339 0.67354 0.56334 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11055 0.43560 0.56261 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34276 0.88968 0.56007 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00695 0.76795 0.89451 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23747 0.22902 0.88894 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78138 0.00053 0.89249 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78089 0.00248 0.10098 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24250 0.23307 0.09624 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01197 0.77588 0.10225 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67979 0.10664 0.22945 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90857 0.56583 0.22858 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44742 0.33614 0.22535 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44014 0.33636 0.43098 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90563 0.56203 0.43483 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68098 0.10679 0.42975 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34669 0.44861 0.55824 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57491 0.89977 0.56215 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10657 0.66894 0.56483 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10991 0.66672 0.76762 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57200 0.89763 0.76642 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34241 0.43868 0.76315 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91231 0.10022 0.11897 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91549 0.81105 0.12119 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21233 0.10275 0.11585 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10583 0.89775 0.87397 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81557 0.90346 0.87363 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10661 0.19827 0.87551 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57021 0.44030 0.44294 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58711 0.14404 0.43143 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88285 0.43447 0.45158 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77630 0.23865 0.21055 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48002 0.23781 0.20733 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77748 0.53307 0.21251 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24071 0.76134 0.78978 Biso 1.000 O

O14	1.0000	0.24333	0.47057	0.78030	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54258	0.76658	0.77579	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45170	0.57751	0.54682	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12320	0.55981	0.55715	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44065	0.85412	0.54678	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99291	0.31697	0.16271	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69841	0.66851	0.16199	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35191	0.02372	0.15300	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32249	0.98052	0.82666	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67243	0.68528	0.83618	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02854	0.33698	0.83286	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66721	0.65570	0.49735	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36187	0.99333	0.50030	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01659	0.34964	0.49293	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02495	0.67801	0.83684	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32194	0.33308	0.82551	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67435	0.97926	0.83249	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69367	0.02488	0.15819	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34789	0.32051	0.15727	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99344	0.67312	0.16716	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35528	0.36361	0.48845	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00469	0.65329	0.49955	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65492	0.00244	0.49634	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13261	0.24279	0.12367	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76814	0.88242	0.13143	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13500	0.88406	0.12540	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24599	0.11877	0.86117	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88649	0.75531	0.86664	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88764	0.12256	0.86559	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79163	0.56539	0.45774	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42753	0.21996	0.46367	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80395	0.21199	0.45995	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92231	0.45857	0.20104	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55589	0.09314	0.21511	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55783	0.45825	0.20543	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46118	0.90370	0.79666	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09543	0.54248	0.77973	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46316	0.54683	0.78986	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59998	0.79718	0.54215	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23085	0.44844	0.53568	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22149	0.77965	0.53294	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00779	0.26372	0.99686	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75166	0.74444	0.99878	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27255	0.00208	0.99126	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68527	0.61045	0.32966	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38734	0.06634	0.32429	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94482	0.33534	0.32879	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33883	0.91936	0.66463	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07403	0.38504	0.66296	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61869	0.66636	0.66577	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00712	0.73816	0.99933	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27498	0.26388	0.99214	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74925	0.99913	0.99661	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69424	0.06848	0.32865	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94416	0.60080	0.33210	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40259	0.33027	0.32624	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34293	0.40424	0.65963	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60900	0.94203	0.66498	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07560	0.68291	0.66704	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21459	0.02498	0.33809	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22033	0.06505	0.27443	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24360	0.07998	0.39590	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.06549	0.07680	0.33691	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02010	0.01748	0.41312	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06571	0.06919	0.50268	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.12976	0.16664	0.33879	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13701	0.15612	0.49415	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.10062	0.02011	0.53475	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15941	0.90057	0.34503	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07464	0.85992	0.31478	Biso	1.000	H

H7	1.0000	0.15415	0.87147	0.41344	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.92305	0.89846	0.41078	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.93990	0.84188	0.45237	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.90229	0.86448	0.34301	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.84644	0.89479	0.43868	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.02947	0.04072	0.27210	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.20750	0.87112	0.30533	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.97638	0.06986	0.56470	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.01618	0.11182	0.62758	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.90833	0.98356	0.58053	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.93771	0.11612	0.53496	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 11-methyl-isopropyl-propylene:>; E= -977.771 eV; ZPVE= 5.667eV; frequencies =281.9i, 40.9, 53.4, 63.9, 83.9, 98.7, 106.2, 122.2, 140.6, 162.9, 165.9, 176.2, 201.6, 222.6, 244.0, 277.9, 297.9, 304.4, 340.9, 381.6, 384.1, 455.1, 520.1, 577.6, 586.1, 606.2, 655.2, 690.4, 766.6, 777.2, 835.7, 891.0, 899.2, 924.3, 940.0, 945.6, 965.3, 1011.8, 1042.3, 1044.3, 1053.8, 1104.3, 1113.3, 1158.2, 1213.9, 1319.2, 1325.2, 1355.4, 1364.4, 1366.6, 1395.6, 1404.0, 1412.2, 1416.4, 1420.3, 1426.4, 1436.2, 1440.8, 1442.8, 1619.2, 2957.0, 2958.8, 2969.2, 2977.2, 3015.5, 3016.0, 3022.9, 3031.7, 3044.5, 3057.9, 3065.8, 3068.7, 3102.8, 3115.2, 3223.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01502	0.23040	0.09535	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78705	0.77432	0.09853	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24738	0.00323	0.09327	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24110	0.99826	0.88606	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78565	0.77033	0.89081	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01288	0.22958	0.89027	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68294	0.56649	0.42868	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45496	0.10842	0.43120	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91430	0.33166	0.42988	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91191	0.33502	0.22275	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44876	0.10375	0.22365	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68434	0.56554	0.22452	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34608	0.88997	0.76624	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11648	0.43314	0.75999	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57938	0.66545	0.76270	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58802	0.67230	0.55979	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11768	0.43623	0.55858	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34878	0.88949	0.55831	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01200	0.76597	0.89202	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24403	0.22823	0.88695	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78678	0.99904	0.88859	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78581	0.00161	0.09655	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24859	0.23268	0.09304	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01611	0.77379	0.09871	Biso	1.000	Si

Si24	1.0000	0.68436	0.10524	0.22588	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91401	0.56474	0.22539	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45288	0.33455	0.22228	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44818	0.33561	0.42868	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91050	0.56010	0.43177	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68711	0.10566	0.42586	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35257	0.44674	0.55499	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57865	0.89780	0.55912	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11370	0.66825	0.56168	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11547	0.66530	0.76484	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57734	0.89677	0.76297	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34777	0.43734	0.75999	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91754	0.09924	0.11408	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91865	0.80784	0.11579	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21652	0.10230	0.11511	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11097	0.89605	0.87264	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81996	0.90116	0.87068	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11330	0.19923	0.87758	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57811	0.43944	0.44145	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59605	0.14662	0.42570	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88310	0.43090	0.44861	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78028	0.23754	0.20689	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48374	0.23519	0.20309	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78332	0.53316	0.20942	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24610	0.76033	0.78698	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24848	0.46898	0.77654	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54850	0.76584	0.77217	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45636	0.57615	0.54302	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13651	0.56306	0.55320	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44355	0.84978	0.54572	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99749	0.31470	0.16063	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70226	0.66736	0.15908	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35448	0.02041	0.15159	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32766	0.97896	0.82543	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67794	0.68334	0.83179	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03344	0.33436	0.82777	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67222	0.65548	0.49360	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37270	0.99448	0.49839	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02244	0.35248	0.48891	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02991	0.67698	0.83307	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32699	0.33171	0.82244	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68037	0.97872	0.82828	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69908	0.02424	0.15430	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35159	0.31970	0.15630	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99931	0.67284	0.16498	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36259	0.36221	0.48568	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01075	0.64898	0.49651	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65625	0.00004	0.49222	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13810	0.24380	0.11538	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77274	0.88126	0.12662	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13818	0.88327	0.12144	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24970	0.11687	0.85742	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89156	0.75368	0.86472	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89417	0.12018	0.86159	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79930	0.56861	0.45429	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43563	0.21952	0.46200	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81069	0.20899	0.45717	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92698	0.45732	0.19657	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55977	0.09052	0.21235	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56355	0.45604	0.20088	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46660	0.90256	0.79404	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10110	0.54132	0.77827	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46802	0.54587	0.78710	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60444	0.79589	0.53929	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23561	0.44383	0.53161	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22584	0.78233	0.53014	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00814	0.26436	0.99298	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75348	0.74096	0.99509	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27796	0.00387	0.98944	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68886	0.60823	0.32623	Biso	1.000	O

O59	1.0000	0.39280	0.06566	0.32230	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94815	0.33467	0.32561	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34409	0.91938	0.66269	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07942	0.38645	0.65886	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62288	0.66407	0.66210	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01225	0.73435	0.99639	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28585	0.26264	0.98954	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75380	0.99855	0.99238	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70084	0.06725	0.32475	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94992	0.59801	0.32905	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41153	0.33010	0.32394	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34925	0.40326	0.65656	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61367	0.94152	0.66153	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08131	0.68008	0.66386	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.22023	0.01532	0.34999	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.21695	0.06727	0.29639	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.25235	0.05765	0.41309	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.06596	0.01925	0.45175	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04385	0.05230	0.37220	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.10319	0.17529	0.34706	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.12982	0.08667	0.49380	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.16895	0.22941	0.39484	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.04121	0.20469	0.34329	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.14139	0.18981	0.28056	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16868	0.89203	0.33936	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.07741	0.85417	0.32538	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.18074	0.85143	0.39762	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.20322	0.87302	0.28009	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.00451	0.90484	0.49368	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.94906	0.83693	0.44793	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.95043	0.90548	0.54795	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.06378	0.88204	0.52413	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95431	0.97334	0.30892	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.98603	0.98912	0.24023	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.88239	0.98916	0.31023	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.92011	0.88334	0.32444	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 4-methyl-3-heptene:>; E= -994.419 eV; ZPVE= 6.438eV; frequencies =302.0i, 37.5, 43.2, 53.5, 54.6, 70.2, 88.9, 97.3, 109.5, 124.8, 154.3, 172.4, 188.6, 204.9, 238.6, 253.3, 267.5, 305.6, 323.3, 339.0, 385.0, 404.6, 450.7, 542.6, 577.8, 581.7, 600.5, 657.3, 694.2, 730.9, 759.1, 794.3, 821.7, 859.8, 887.6, 896.7, 922.4, 935.3, 956.2, 971.9, 981.7, 995.3, 1035.7, 1047.5, 1075.7, 1085.5, 1103.3, 1159.1, 1209.1, 1259.8, 1283.4, 1292.8, 1322.7, 1325.1, 1348.2, 1362.0, 1387.1, 1401.8, 1408.3, 1412.7, 1425.8, 1436.1, 1437.7, 1441.7, 1444.4, 1451.0, 1594.6, 2925.2, 2952.7, 2957.7, 2964.7, 2983.6, 2987.1, 3003.8, 3006.8, 3029.2, 3036.4, 3045.7, 3050.7, 3052.7, 3102.2, 3106.8, 3143.8, 3221.5 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv							
	_atom_site_type	symbol					
Si1	1.0000	0.01152	0.23411	0.09965	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78454	0.77936	0.10235	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24409	0.00632	0.09477	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23663	0.00206	0.88765	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78207	0.77575	0.89384	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00862	0.23368	0.89347	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67746	0.56927	0.43155	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44727	0.11089	0.43396	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91103	0.33564	0.43287	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90832	0.33904	0.22621	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44566	0.10863	0.22586	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67997	0.56972	0.22773	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34136	0.89382	0.76809	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11192	0.43720	0.76328	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57484	0.66965	0.76606	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58423	0.67650	0.56317	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11150	0.43899	0.56202	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34349	0.89250	0.55987	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00744	0.77064	0.89413	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23782	0.23163	0.88907	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78179	0.00320	0.89257	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78143	0.00514	0.10066	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24318	0.23561	0.09600	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01266	0.77837	0.10181	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68039	0.10918	0.22938	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90933	0.56855	0.22828	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44837	0.33882	0.22496	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44119	0.33922	0.43091	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90646	0.56480	0.43457	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68155	0.10984	0.42960	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34746	0.45129	0.55797	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57523	0.90232	0.56194	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10733	0.67200	0.56429	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11063	0.66954	0.76741	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57242	0.90025	0.76614	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34294	0.44114	0.76274	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91289	0.10333	0.11768	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91618	0.81348	0.12084	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21260	0.10517	0.11577	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10631	0.90045	0.87361	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81684	0.90678	0.87356	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10683	0.20096	0.87712	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57128	0.44278	0.44365	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58830	0.14791	0.43082	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88338	0.43728	0.45221	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77688	0.24115	0.21041	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48082	0.24040	0.20685	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77840	0.53655	0.21276	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24133	0.76445	0.78959	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24413	0.47348	0.77964	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54243	0.76899	0.77550	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45256	0.58024	0.54690	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12448	0.56327	0.55567	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44079	0.85604	0.54691	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99375	0.31958	0.16326	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69900	0.67152	0.16183	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35249	0.02637	0.15264	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32311	0.98359	0.82634	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67291	0.68862	0.83610	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02927	0.33938	0.83197	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66800	0.65853	0.49720	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36349	0.99625	0.49992	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01739	0.35242	0.49269	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02533	0.68084	0.83623	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32178	0.33553	0.82530	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67517	0.98178	0.83196	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69447	0.02739	0.15830	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34811	0.32279	0.15750	Biso	1.000	O

O33	1.0000	0.99426	0.67575	0.16683	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35607	0.36654	0.48795	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00524	0.65641	0.49927	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65469	0.00531	0.49622	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13315	0.24554	0.12251	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76955	0.88554	0.13140	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13571	0.88655	0.12482	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24586	0.12131	0.86066	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88698	0.75808	0.86632	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88777	0.12580	0.86649	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79266	0.56882	0.45668	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42787	0.22249	0.46348	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80465	0.21471	0.45993	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92233	0.46099	0.20023	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55650	0.09555	0.21471	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55868	0.46078	0.20426	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46193	0.90687	0.79647	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09641	0.54553	0.78028	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46390	0.54920	0.78935	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60073	0.80007	0.54169	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23172	0.45137	0.53554	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22193	0.78308	0.53259	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00817	0.26845	0.99677	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75234	0.74744	0.99856	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27314	0.00515	0.99087	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68423	0.61243	0.32941	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38826	0.06910	0.32395	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94515	0.33885	0.32881	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33956	0.92237	0.66438	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07463	0.38921	0.66246	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61968	0.66970	0.66563	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00764	0.74060	0.99888	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27679	0.26653	0.99205	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74849	0.00075	0.99650	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69480	0.07114	0.32863	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94547	0.60291	0.33180	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40451	0.33370	0.32603	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34341	0.40647	0.65928	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60961	0.94464	0.66473	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07634	0.68509	0.66668	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21582	0.02800	0.33774	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22200	0.06863	0.27428	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24469	0.08234	0.39592	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.07112	0.08651	0.33823	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.01668	0.01473	0.40696	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.05308	0.04856	0.50146	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.13739	0.17414	0.34999	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.13191	0.13137	0.50328	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.07268	0.98610	0.53131	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15972	0.90349	0.34418	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07673	0.86335	0.31108	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.15095	0.87366	0.41270	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.91754	0.89913	0.39096	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.92779	0.83384	0.42617	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.90329	0.87812	0.32004	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.83959	0.89348	0.41785	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.04114	0.06305	0.27003	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.20980	0.87425	0.30691	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.96296	0.05437	0.55962	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.88429	0.97142	0.55966	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.94142	0.11513	0.52998	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.00406	0.08923	0.65483	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.94056	0.09694	0.69449	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.08297	0.17180	0.65669	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.02097	0.02701	0.68775	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 233-trimethyl-1-pentene:v; E= -994.538 eV;
ZPVE= 6.394eV; frequencies =291.5i, 41.4, 55.0, 64.2, 71.4, 77.3, 85.4, 97.6,
103.6, 142.1, 145.7, 146.7, 157.0, 166.2, 183.1, 230.7, 252.5, 292.4, 337.4, 341.4,
350.0, 383.2, 414.3, 416.0, 487.1, 505.2, 580.6, 587.6, 599.9, 654.8, 693.0, 695.2,

781.0, 883.8, 884.9, 895.8, 901.6, 912.6, 940.1, 952.3, 965.6, 1007.8, 1035.1,
1044.7, 1055.8, 1114.4, 1153.1, 1158.1, 1161.3, 1258.7, 1321.2, 1348.4, 1356.2,
1358.1, 1371.1, 1396.2, 1402.4, 1412.7, 1415.6, 1419.5, 1427.4, 1433.7, 1435.0,
1439.2, 1442.4, 1451.7, 1603.3, 2948.6, 2953.5, 2957.5, 2970.6, 2976.1, 2994.9,
3016.7, 3021.7, 3022.8, 3029.8, 3060.4, 3071.7, 3085.1, 3095.9, 3100.7, 3115.6,
3222.9 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01285	0.22742	0.09490	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78507	0.77180	0.09747	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24557	0.00042	0.09241	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23960	0.99618	0.88522	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78392	0.76813	0.88980	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01138	0.22722	0.88937	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68171	0.56435	0.42757	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45278	0.10620	0.43052	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91182	0.32927	0.42873	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90973	0.33229	0.22174	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44660	0.10133	0.22281	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68247	0.56312	0.22339	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34443	0.88789	0.76513	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11444	0.43064	0.75928	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57763	0.66342	0.76164	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58558	0.67010	0.55894	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11564	0.43321	0.55796	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34716	0.88714	0.55737	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01043	0.76408	0.89087	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24224	0.22609	0.88620	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78496	0.99677	0.88776	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78302	0.99867	0.09558	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24613	0.22983	0.09281	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01417	0.77129	0.09756	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68213	0.10242	0.22483	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91202	0.56221	0.22414	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45104	0.33226	0.22131	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44783	0.33385	0.42771	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90881	0.55781	0.43055	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68502	0.10329	0.42456	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35096	0.44485	0.55448	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57723	0.89581	0.55812	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11275	0.66543	0.56070	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11396	0.66314	0.76377	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57581	0.89475	0.76184	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34610	0.43505	0.75929	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91451	0.09662	0.11319	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91659	0.80514	0.11470	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21514	0.09971	0.11435	Biso	1.000	O

O4	1.0000	0.10933	0.89427	0.87163	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81841	0.89907	0.86985	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11153	0.19673	0.87527	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57837	0.43640	0.43991	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59369	0.14395	0.42409	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87974	0.42800	0.44697	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77821	0.23461	0.20565	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48155	0.23264	0.20199	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78136	0.53071	0.20816	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24464	0.75816	0.78578	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24644	0.46624	0.77558	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54665	0.76374	0.77104	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45314	0.57521	0.54327	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13668	0.56089	0.55297	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44206	0.84762	0.54500	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99546	0.31234	0.15954	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70018	0.66485	0.15797	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35256	0.01746	0.15086	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32595	0.97674	0.82445	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67623	0.68138	0.83067	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03150	0.33230	0.82740	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66846	0.65179	0.49243	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37074	0.99212	0.49754	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01979	0.35068	0.48824	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02850	0.67525	0.83180	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32583	0.32990	0.82215	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67879	0.97658	0.82720	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69590	0.02096	0.15316	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34946	0.31727	0.15564	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99728	0.67003	0.16351	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36376	0.36241	0.48482	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00993	0.64531	0.49519	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65436	0.99798	0.49115	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13528	0.23985	0.11614	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77048	0.87855	0.12554	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13625	0.88060	0.12048	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24875	0.11512	0.85689	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88989	0.75160	0.86359	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89234	0.11805	0.86106	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79888	0.56841	0.45370	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43380	0.21737	0.46155	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80841	0.20659	0.45614	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92465	0.45454	0.19561	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55759	0.08812	0.21202	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56168	0.45363	0.19967	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46513	0.90078	0.79269	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09957	0.53916	0.77743	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46626	0.54389	0.78611	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60341	0.79417	0.53815	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23253	0.43862	0.53071	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22453	0.77974	0.52915	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00778	0.26174	0.99230	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75155	0.73848	0.99400	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27629	0.00117	0.98858	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68730	0.60592	0.32512	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39010	0.06362	0.32153	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94601	0.33208	0.32461	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34217	0.91740	0.66162	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07704	0.38352	0.65825	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62113	0.66196	0.66105	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01058	0.73222	0.99515	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28239	0.26011	0.98912	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75120	0.99576	0.99138	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69892	0.06464	0.32365	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94794	0.59572	0.32779	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41053	0.32814	0.32318	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34771	0.40077	0.65587	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61250	0.93958	0.66047	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07978	0.67751	0.66267	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21936	0.01157	0.34635	Biso	1.000	C

H1	1.0000	0.21466	0.06126	0.29156	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24776	0.05502	0.40946	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.05354	0.00381	0.45632	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.04486	0.04603	0.37562	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.10528	0.17041	0.35384	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.17480	0.22395	0.39879	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.04426	0.20118	0.35576	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.13867	0.18601	0.28568	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16930	0.88817	0.33765	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07860	0.84965	0.32121	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.17905	0.84897	0.39777	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.20639	0.86811	0.28057	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97932	0.88192	0.48230	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.94434	0.82313	0.42623	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.90609	0.87260	0.52070	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.02474	0.85297	0.52557	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95984	0.97388	0.30625	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.99496	0.99953	0.23905	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.88558	0.98595	0.30969	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.92741	0.88267	0.31349	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.12822	0.07605	0.53077	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.17979	0.04096	0.55716	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.07473	0.07456	0.58637	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.18560	0.16471	0.51305	Biso	1.000	H

Cracking by reverse ethylation of 4-methyl-4-octene:o; E= -1011.058 eV; ZPVE= 7.187eV; frequencies =297.6i, 39.6, 44.9, 52.7, 59.3, 63.8, 67.3, 80.5, 98.2, 112.5, 124.6, 133.6, 152.9, 170.1, 181.6, 242.7, 263.3, 272.1, 298.0, 303.3, 338.0, 360.1, 380.9, 416.6, 469.3, 534.0, 576.9, 579.6, 604.1, 654.4, 694.4, 720.2, 762.8, 783.4, 787.4, 832.7, 845.5, 896.8, 906.1, 914.3, 931.1, 958.5, 966.3, 989.3, 998.9, 1021.2, 1053.2, 1055.1, 1075.0, 1092.9, 1096.7, 1158.3, 1194.6, 1236.4, 1262.5, 1288.7, 1292.5, 1308.8, 1317.9, 1343.8, 1347.7, 1364.8, 1385.0, 1398.3, 1406.6, 1411.6, 1420.7, 1430.7, 1437.3, 1441.3, 1444.6, 1447.4, 1453.8, 1591.3, 2926.3, 2935.1, 2943.8, 2948.4, 2962.0, 2963.9, 2980.9, 2983.6, 3001.2, 3004.0, 3024.8, 3029.3, 3055.1, 3067.3, 3070.0, 3103.0, 3110.0, 3152.7, 3230.2 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01912	0.23154	0.10498	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79153	0.77584	0.10756	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25315	0.00380	0.09941	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24565	0.99903	0.89443	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78893	0.77146	0.90006	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01642	0.23097	0.89927	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68453	0.56607	0.43791	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45265	0.10760	0.44040	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91818	0.33312	0.43885	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91625	0.33646	0.23200	Biso	1.000	Si

Si10	1.0000	0.45272	0.10550	0.23254	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68767	0.56653	0.23349	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34871	0.89003	0.77386	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11927	0.43372	0.76892	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58260	0.66678	0.77168	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59175	0.67430	0.56846	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11838	0.43567	0.56792	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35052	0.88882	0.56509	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01501	0.76644	0.90136	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24727	0.22999	0.89487	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78940	0.00040	0.89840	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78909	0.00295	0.10612	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25214	0.23404	0.10037	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02007	0.77495	0.10739	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68799	0.10673	0.23531	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91750	0.56623	0.23460	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45622	0.33614	0.23069	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44825	0.33673	0.43709	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91381	0.56237	0.44098	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68815	0.10747	0.43570	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35463	0.44957	0.56301	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58279	0.89994	0.56740	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11454	0.66926	0.57025	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11835	0.66667	0.77315	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58006	0.89758	0.77224	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35050	0.43844	0.76812	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92065	0.10074	0.12333	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92356	0.81047	0.12527	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22156	0.10314	0.11813	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11522	0.89647	0.88441	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82235	0.90225	0.88109	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11640	0.20039	0.88406	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57839	0.43980	0.45121	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59373	0.14390	0.43736	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89098	0.43494	0.45836	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78475	0.23859	0.21591	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48781	0.23713	0.21270	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78666	0.53419	0.21827	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24897	0.76089	0.79649	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25131	0.46990	0.78646	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55117	0.76670	0.78219	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46008	0.57833	0.55182	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12944	0.55914	0.56282	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44875	0.85396	0.55092	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00196	0.31679	0.16944	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70708	0.66956	0.16884	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35923	0.02271	0.15972	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32980	0.98071	0.83026	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68122	0.68464	0.84084	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03603	0.33617	0.83757	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67572	0.65651	0.50261	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36896	0.99316	0.50660	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02426	0.34911	0.49860	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03278	0.67773	0.84189	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33027	0.33181	0.82915	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68349	0.97999	0.83724	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70229	0.02452	0.16473	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35515	0.31977	0.16398	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00307	0.67460	0.17441	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36276	0.36451	0.49308	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01238	0.65407	0.50563	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66322	0.00343	0.50235	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14125	0.24303	0.12581	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77708	0.88277	0.13534	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14310	0.88449	0.12810	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25321	0.11793	0.86862	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89539	0.75589	0.87347	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89719	0.12145	0.87151	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79985	0.56602	0.46307	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43375	0.21956	0.46967	Biso	1.000	O

O45	1.0000	0.81108	0.21270	0.46582	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93072	0.45878	0.20628	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56388	0.09285	0.22106	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56677	0.45762	0.20889	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46941	0.90379	0.80299	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10350	0.54218	0.78469	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47130	0.54659	0.79502	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60865	0.79799	0.54708	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23922	0.45025	0.54041	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22969	0.77882	0.53730	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01386	0.26559	0.00231	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75746	0.74123	0.00439	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28662	0.00328	0.99654	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69065	0.60773	0.33542	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39460	0.06642	0.33034	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95232	0.33596	0.33480	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34661	0.91688	0.66995	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08295	0.38482	0.66822	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62669	0.66706	0.67097	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01306	0.73284	0.00554	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28840	0.26777	0.99715	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75609	0.00021	0.00211	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70220	0.06908	0.33480	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95277	0.60026	0.33821	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41346	0.33234	0.33186	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35062	0.40500	0.66434	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61571	0.94122	0.67052	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08522	0.68439	0.67265	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.21888	0.02622	0.33857	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23051	0.06300	0.27290	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24419	0.08437	0.39452	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.07356	0.07958	0.31179	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.00198	0.02032	0.37941	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.01353	0.07199	0.46938	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.13724	0.16896	0.31986	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.93823	0.08139	0.48002	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08756	0.15826	0.47069	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.16426	0.90262	0.35043	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.07586	0.86074	0.32708	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.16599	0.87854	0.41944	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.90749	0.90165	0.36562	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.92033	0.84129	0.40592	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.89893	0.87593	0.29580	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.82633	0.89233	0.38833	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.05766	0.04522	0.24456	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.20605	0.86902	0.30765	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.02019	0.00132	0.54602	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.09440	0.99008	0.53642	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.94504	0.91559	0.54512	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.02809	0.05421	0.63698	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.95455	0.06650	0.64633	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.10389	0.13959	0.63945	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.03282	0.98080	0.71130	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.03582	0.01683	0.77700	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.10833	0.97164	0.70448	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.95808	0.89505	0.70968	Biso	1.000	H

Adsorption as alkoxides of ethene: ^; E= -895.567 eV; ZPVE= 2.113eV; frequencies
=19.2i, 95.3, 192.7, 221.5, 253.8, 291.7, 351.5, 416.4, 535.0, 600.6, 619.1, 691.0,
714.6, 728.6, 788.3, 851.8, 966.9, 1084.0, 1142.3, 1272.8, 1350.0, 1369.3, 1427.7,
1439.2, 1458.6, 2977.5, 3034.1, 3055.5, 3059.4, 3093.2 cm^-1

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01588 0.24433 0.10203 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78644 0.78621 0.10432 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24402 0.01593 0.09700 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23979 0.01182 0.88974 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78409 0.78336 0.89697 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01294 0.24338 0.89635 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67809 0.57563 0.43363 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45104 0.12052 0.43835 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91135 0.34561 0.43611 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.91077 0.34790 0.22903 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44832 0.11336 0.22756 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68237 0.57602 0.22892 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34523 0.90208 0.77421 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11521 0.44704 0.76686 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57909 0.67935 0.76796 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58561 0.68610 0.56443 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11553 0.45036 0.56417 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34712 0.90099 0.56604 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01205 0.78077 0.89669 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24301 0.24218 0.89196 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78557 0.01227 0.89533 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78645 0.01405 0.10254 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24636 0.24475 0.09886 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01718 0.78683 0.10417 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68482 0.11802 0.23120 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91662 0.57947 0.23163 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45327 0.35003 0.22967 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44556 0.35238 0.43176 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91091 0.57592 0.43632 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68276 0.12056 0.43093 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35036 0.46176 0.56142 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57611 0.91065 0.56493 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11269 0.68299 0.56680 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11491 0.67895 0.77164 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57712 0.91061 0.76925 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34673 0.45211 0.76684 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91794 0.11276 0.11822 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91769 0.81793 0.12049 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21137 0.11310 0.11787 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.11002 0.91032 0.87386 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81834 0.91421 0.87704 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.11229 0.21218 0.88023 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57821 0.44649 0.45216 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59178 0.16239 0.42600 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88152 0.44611 0.45379 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77904 0.25034 0.21224 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.47804 0.24370 0.22937 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.78671 0.55093 0.21889 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24483 0.77345 0.79695 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.24695 0.48270 0.78474 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.54926 0.78027 0.77880 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.45257 0.59225 0.54941 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.13514 0.57754 0.55660 Biso 1.000 O
O18 1.0000 0.43999 0.85900 0.55237 Biso 1.000 O

O19	1.0000	0.99591	0.32758	0.16662	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70095	0.67937	0.16494	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35638	0.03966	0.15248	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32864	0.99376	0.83120	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67806	0.69653	0.83639	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03125	0.34724	0.83362	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66633	0.66453	0.49795	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37698	0.01069	0.50939	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01789	0.36524	0.49656	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02730	0.69019	0.83778	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32744	0.34652	0.82877	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68057	0.99370	0.83381	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69971	0.03634	0.16100	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35389	0.32784	0.15983	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00117	0.68462	0.16850	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36402	0.37751	0.49439	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00787	0.66361	0.50386	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64843	0.01542	0.49847	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13902	0.25923	0.12503	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77425	0.89426	0.13282	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13903	0.89586	0.12984	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25079	0.13182	0.86292	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89065	0.76741	0.87228	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89313	0.13394	0.87031	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79899	0.58496	0.45365	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42207	0.22761	0.44953	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80506	0.22418	0.46328	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92531	0.46977	0.20245	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55970	0.10316	0.21521	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56793	0.46251	0.19785	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46613	0.91537	0.80139	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09974	0.55493	0.78602	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46733	0.56058	0.79331	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60514	0.81121	0.54336	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23271	0.45659	0.53651	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22430	0.79742	0.53401	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01289	0.27977	0.99933	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75067	0.75311	0.00104	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27316	0.01336	0.99365	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67310	0.61040	0.33066	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.94540	0.34726	0.33210	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.34133	0.92845	0.67033	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.07941	0.40292	0.66519	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.62085	0.67810	0.66678	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.01757	0.75225	0.00108	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.28176	0.27590	0.99515	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.75093	0.00966	0.99901	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.69703	0.08010	0.33092	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.95675	0.61380	0.33454	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.41662	0.36692	0.32816	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.34707	0.41897	0.66316	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.61129	0.95434	0.66730	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.08422	0.69493	0.67001	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.38625	0.05367	0.32636	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.26980	0.95087	0.32973	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23960	0.95042	0.39717	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.21701	0.96520	0.28261	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.27359	0.84444	0.30996	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.30318	0.84457	0.24213	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.32782	0.83250	0.35753	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.18709	0.77182	0.31620	Biso	1.000	H

Adsorption as alkoxides of propene: ^; E= -912.071 eV; ZPVE= 2.882eV; frequencies =19.3, 120.6, 135.7, 177.1, 225.5, 253.4, 271.3, 323.0, 349.8, 494.2, 540.8, 604.3, 614.4, 682.3, 719.7, 739.0, 755.1, 830.2, 878.6, 896.4, 1037.0, 1079.8, 1140.0, 1248.3, 1270.6, 1338.0, 1351.2, 1368.7, 1433.1, 1446.7, 1451.9, 1468.4, 2977.9, 2985.4, 3009.7, 3051.7, 3056.3, 3066.4, 3082.5 cm^-1

data_image0
_cell_length_a 13.625

_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.00983 0.23102 0.10248 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78294 0.77680 0.10505 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24199 0.00339 0.09542 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23500 0.99929 0.88935 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78031 0.77266 0.89696 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00751 0.23139 0.89605 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67608 0.56630 0.43425 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44832 0.10936 0.43997 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.90868 0.33354 0.43583 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90560 0.33611 0.22862 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44488 0.10565 0.22567 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67839 0.56702 0.23032 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34076 0.89131 0.77121 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11007 0.43425 0.76639 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57327 0.66697 0.76922 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58244 0.67389 0.56612 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.10996 0.43587 0.56483 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34362 0.88788 0.56357 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00621 0.76821 0.89683 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23679 0.23000 0.89153 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78032 0.00050 0.89516 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.77903 0.00206 0.10260 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24101 0.23286 0.09834 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01138 0.77613 0.10449 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67983 0.10567 0.23274 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90832 0.56604 0.23068 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44721 0.33751 0.22818 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44093 0.33822 0.43342 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90591 0.56299 0.43677 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68073 0.10707 0.43114 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34660 0.45015 0.56107 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57357 0.89894 0.56499 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10594 0.66870 0.56751 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10895 0.66669 0.77022 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57095 0.89801 0.76928 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34189 0.43929 0.76627 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91021 0.10048 0.11931 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91488 0.81125 0.12242 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21121 0.10228 0.11568 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10474 0.89796 0.87542 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81494 0.90367 0.87700 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10615 0.19961 0.87815 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57234 0.43816 0.44710 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58701 0.14528 0.42601 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88049 0.43472 0.45516 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77348 0.23814 0.21308 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.47943 0.23717 0.21504 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77742 0.53460 0.21643 Biso 1.000 O

O13	1.0000	0.23972	0.76226	0.79169	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24184	0.46963	0.78374	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54213	0.76721	0.77820	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44987	0.58007	0.54926	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12466	0.56098	0.55893	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43838	0.84865	0.54937	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99058	0.31571	0.16598	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69782	0.66918	0.16490	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35332	0.02597	0.15209	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32171	0.98181	0.82763	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67172	0.68569	0.83872	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02640	0.33675	0.83491	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66461	0.65370	0.50029	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36709	0.99292	0.50318	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01507	0.35060	0.49544	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02396	0.67811	0.83926	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32190	0.33314	0.82775	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67466	0.98026	0.83390	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69152	0.02458	0.15992	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34725	0.31817	0.15970	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99278	0.67314	0.16903	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35823	0.36602	0.49236	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00519	0.65340	0.50146	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64952	0.00333	0.49921	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13138	0.24257	0.12633	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76691	0.88255	0.13344	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13513	0.88411	0.12751	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24491	0.11930	0.86464	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88543	0.75518	0.86986	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88694	0.12286	0.87002	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79301	0.56890	0.45780	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42558	0.21917	0.46239	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80166	0.21282	0.46311	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91974	0.45776	0.20155	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55341	0.08973	0.22271	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55835	0.45711	0.20442	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46043	0.90366	0.80155	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09557	0.54316	0.78355	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46188	0.54769	0.79419	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60228	0.79899	0.54548	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22950	0.44697	0.53788	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22103	0.78047	0.53736	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00860	0.26633	0.99955	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74973	0.74373	0.00149	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27193	0.00030	0.99229	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67879	0.60736	0.33199	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38009	0.05996	0.32607	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94159	0.33624	0.33145	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34231	0.92080	0.66735	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07330	0.38662	0.66546	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61627	0.66485	0.66862	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00787	0.73902	0.00156	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27447	0.26582	0.99466	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74522	0.99762	0.99872	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69657	0.06766	0.33117	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94591	0.59933	0.33395	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40493	0.33618	0.32884	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34391	0.40683	0.66258	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60581	0.94247	0.66762	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07364	0.68103	0.66962	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.25398	0.01325	0.33114	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22941	0.03693	0.26898	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.24227	0.06119	0.38472	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.18778	0.88595	0.34807	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.10256	0.85580	0.32028	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17694	0.87114	0.41975	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.23802	0.81704	0.30932	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.32089	0.84206	0.33914	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.24824	0.82574	0.23700	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.18155	0.72696	0.32432	Biso	1.000	H


```

-----
# Adsorption as alkoxides of 1-butene:>; E= -928.893 eV; ZPVE= 3.617eV; frequencies
=38.1i, 53.0, 76.8, 93.8, 161.0, 209.5, 245.4, 268.6, 299.5, 341.5, 373.6, 487.6,
522.8, 593.0, 622.3, 686.2, 704.7, 722.3, 745.8, 814.5, 836.2, 866.3, 944.4, 993.7,
1042.8, 1106.0, 1132.6, 1223.3, 1236.4, 1285.6, 1294.9, 1348.4, 1357.4, 1363.3,
1419.0, 1437.2, 1442.6, 1451.2, 1453.4, 2951.3, 2957.4, 2964.0, 2992.9, 3011.6,
3031.7, 3036.2, 3045.3, 3105.1 cm^-1
-----

```

```
data_image0
```

```

_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

```

```

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

```

```
loop_
```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```
loop_
```

```

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01548 0.23597 0.10144 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.78632 0.77926 0.10312 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.24434 0.00750 0.09258 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.24091 0.00478 0.88876 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.78455 0.77763 0.89526 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.01343 0.23688 0.89454 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.67775 0.56820 0.43246 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.45134 0.11430 0.43711 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.91158 0.33794 0.43465 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.90907 0.33966 0.22765 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.44679 0.10587 0.22763 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.68154 0.56847 0.22753 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.34502 0.89595 0.77144 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.11503 0.44060 0.76531 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.57835 0.67336 0.76673 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.58671 0.67997 0.56287 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.11468 0.44310 0.56275 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.34799 0.89168 0.56332 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.01193 0.77530 0.89431 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.24330 0.23792 0.89087 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.78551 0.00627 0.89404 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.78529 0.00665 0.10132 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.24541 0.23811 0.09547 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.01627 0.77990 0.10237 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.68318 0.11009 0.23023 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.91569 0.57223 0.23010 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.45288 0.34149 0.22882 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.44423 0.34479 0.43127 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.91096 0.56912 0.43472 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.68221 0.11426 0.42917 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.35054 0.45662 0.55915 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.57656 0.90351 0.56336 Biso 1.000 Si
Si32     1.0000 0.11252 0.67689 0.56444 Biso 1.000 Si
Si33     1.0000 0.11584 0.67375 0.76954 Biso 1.000 Si
Si34     1.0000 0.57701 0.90472 0.76744 Biso 1.000 Si
Si35     1.0000 0.34673 0.44592 0.76478 Biso 1.000 Si
O1       1.0000 0.91696 0.10460 0.11749 Biso 1.000 O
O2       1.0000 0.91777 0.81210 0.12052 Biso 1.000 O

```

03	1.0000	0.20999	0.10497	0.10371	Biso	1.000	0
04	1.0000	0.11011	0.90528	0.87257	Biso	1.000	0
05	1.0000	0.81901	0.90870	0.87610	Biso	1.000	0
06	1.0000	0.11212	0.20527	0.87584	Biso	1.000	0
07	1.0000	0.57655	0.43979	0.45115	Biso	1.000	0
08	1.0000	0.59215	0.15726	0.42220	Biso	1.000	0
09	1.0000	0.88424	0.44019	0.45201	Biso	1.000	0
010	1.0000	0.77680	0.24279	0.21099	Biso	1.000	0
011	1.0000	0.48155	0.23780	0.22945	Biso	1.000	0
012	1.0000	0.78522	0.54237	0.21712	Biso	1.000	0
013	1.0000	0.24552	0.76762	0.79637	Biso	1.000	0
014	1.0000	0.24669	0.47597	0.78345	Biso	1.000	0
015	1.0000	0.54766	0.77381	0.77704	Biso	1.000	0
016	1.0000	0.45381	0.58649	0.54640	Biso	1.000	0
017	1.0000	0.13109	0.56897	0.55541	Biso	1.000	0
018	1.0000	0.43978	0.84803	0.55191	Biso	1.000	0
019	1.0000	0.99376	0.31923	0.16467	Biso	1.000	0
020	1.0000	0.70076	0.67185	0.16327	Biso	1.000	0
021	1.0000	0.35500	0.03508	0.15177	Biso	1.000	0
022	1.0000	0.32751	0.98917	0.82531	Biso	1.000	0
023	1.0000	0.67737	0.69139	0.83541	Biso	1.000	0
024	1.0000	0.03140	0.34201	0.83326	Biso	1.000	0
025	1.0000	0.66781	0.65793	0.49710	Biso	1.000	0
026	1.0000	0.38191	0.00265	0.50728	Biso	1.000	0
027	1.0000	0.01801	0.35660	0.49498	Biso	1.000	0
028	1.0000	0.02805	0.68504	0.83553	Biso	1.000	0
029	1.0000	0.32740	0.33886	0.82489	Biso	1.000	0
030	1.0000	0.68038	0.98696	0.83238	Biso	1.000	0
031	1.0000	0.69857	0.02903	0.15969	Biso	1.000	0
032	1.0000	0.35240	0.31514	0.15894	Biso	1.000	0
033	1.0000	0.99956	0.67678	0.16604	Biso	1.000	0
034	1.0000	0.36185	0.37060	0.49236	Biso	1.000	0
035	1.0000	0.00728	0.65825	0.50220	Biso	1.000	0
036	1.0000	0.64607	0.00889	0.49685	Biso	1.000	0
037	1.0000	0.13779	0.24984	0.12677	Biso	1.000	0
038	1.0000	0.77240	0.88642	0.13122	Biso	1.000	0
039	1.0000	0.13886	0.88866	0.12748	Biso	1.000	0
040	1.0000	0.25335	0.12702	0.86894	Biso	1.000	0
041	1.0000	0.89064	0.76167	0.86870	Biso	1.000	0
042	1.0000	0.89273	0.12824	0.86893	Biso	1.000	0
043	1.0000	0.79752	0.57520	0.45260	Biso	1.000	0
044	1.0000	0.42161	0.22070	0.45163	Biso	1.000	0
045	1.0000	0.80425	0.21750	0.46260	Biso	1.000	0
046	1.0000	0.92475	0.46231	0.20209	Biso	1.000	0
047	1.0000	0.55661	0.09249	0.21570	Biso	1.000	0
048	1.0000	0.56580	0.45577	0.19703	Biso	1.000	0
049	1.0000	0.46668	0.91123	0.79894	Biso	1.000	0
050	1.0000	0.09973	0.54906	0.78273	Biso	1.000	0
051	1.0000	0.46702	0.55424	0.79218	Biso	1.000	0
052	1.0000	0.60811	0.80580	0.54160	Biso	1.000	0
053	1.0000	0.23336	0.45277	0.53492	Biso	1.000	0
054	1.0000	0.22516	0.78926	0.52961	Biso	1.000	0
055	1.0000	0.01527	0.27145	0.99831	Biso	1.000	0
056	1.0000	0.75265	0.74672	0.99947	Biso	1.000	0
057	1.0000	0.27633	0.99807	0.99094	Biso	1.000	0
058	1.0000	0.67333	0.60325	0.32944	Biso	1.000	0
059	1.0000	0.38252	0.04765	0.32594	Biso	1.000	0
060	1.0000	0.94424	0.33780	0.33049	Biso	1.000	0
061	1.0000	0.33951	0.91866	0.66713	Biso	1.000	0
062	1.0000	0.07940	0.39511	0.66382	Biso	1.000	0
063	1.0000	0.62020	0.67154	0.66565	Biso	1.000	0
064	1.0000	0.01525	0.74597	0.99889	Biso	1.000	0
065	1.0000	0.28061	0.27957	0.99321	Biso	1.000	0
066	1.0000	0.75064	0.00347	0.99769	Biso	1.000	0
067	1.0000	0.69776	0.07324	0.32975	Biso	1.000	0
068	1.0000	0.95565	0.60800	0.33287	Biso	1.000	0
069	1.0000	0.41480	0.35690	0.32725	Biso	1.000	0
070	1.0000	0.34772	0.41433	0.66086	Biso	1.000	0
071	1.0000	0.61218	0.94817	0.66553	Biso	1.000	0
072	1.0000	0.08688	0.69183	0.66781	Biso	1.000	0

C1	1.0000	0.26609	0.94369	0.33239	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.24155	0.91137	0.26476	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.18147	0.97003	0.37553	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.20982	0.00217	0.44327	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10375	0.88687	0.38414	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.15452	0.05046	0.32413	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.07797	0.08218	0.37595	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.11444	0.01170	0.26036	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.23423	0.12880	0.30828	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99672	0.00653	0.39297	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.11859	0.12598	0.43820	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.05924	0.13921	0.33709	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.27800	0.88285	0.37172	Biso	1.000	H

Adsorption as alkoxides of 1-pentene:>; E= -945.610 eV; ZPVE= 4.377eV;
frequencies =22.9, 66.0, 68.0, 80.8, 119.0, 152.2, 197.0, 242.9, 264.3, 284.8,
319.1, 362.0, 395.3, 481.4, 519.7, 590.7, 620.7, 688.9, 706.8, 720.9, 736.4, 774.5,
841.7, 850.1, 908.2, 915.6, 997.9, 1039.8, 1061.3, 1108.7, 1137.9, 1207.4, 1224.0,
1265.4, 1278.8, 1292.8, 1332.6, 1351.8, 1359.3, 1367.0, 1420.1, 1432.2, 1443.3,
1444.4, 1453.1, 1455.4, 2937.9, 2948.4, 2959.8, 2961.7, 2969.6, 2997.1, 3018.8,
3032.2, 3037.7, 3039.6, 3102.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01766	0.24114	0.09871	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78900	0.78374	0.10133	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24615	0.01228	0.09096	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24218	0.00858	0.88605	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78680	0.78146	0.89333	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01499	0.24129	0.89281	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67979	0.57236	0.43023	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45306	0.11799	0.43467	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91309	0.34243	0.43284	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91122	0.34429	0.22559	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44915	0.11017	0.22511	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68377	0.57289	0.22561	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34700	0.89931	0.76968	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11705	0.44424	0.76281	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58035	0.67681	0.76493	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58875	0.68391	0.56120	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11706	0.44723	0.56032	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35040	0.89573	0.56146	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01364	0.77814	0.89259	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24486	0.24088	0.88833	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78746	0.00966	0.89205	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78767	0.01078	0.09900	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24753	0.24184	0.09352	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01872	0.78390	0.10056	Biso	1.000	Si

Si24	1.0000	0.68550	0.11444	0.22798	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91777	0.57619	0.22815	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45459	0.34570	0.22688	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44622	0.34873	0.42883	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91278	0.57302	0.43303	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68407	0.11812	0.42712	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35265	0.46085	0.55703	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57871	0.90746	0.56139	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11471	0.68097	0.56259	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11747	0.67719	0.76740	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57885	0.90815	0.76549	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34851	0.44980	0.76284	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91947	0.10932	0.11362	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92041	0.81638	0.11862	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21078	0.10864	0.10520	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11180	0.90792	0.87060	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82158	0.91255	0.87372	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11384	0.20963	0.87540	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57892	0.44348	0.44800	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59413	0.16128	0.42048	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88490	0.44386	0.45132	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77909	0.24714	0.20909	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48295	0.24175	0.22805	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78744	0.54676	0.21536	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24723	0.77091	0.79415	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24869	0.48012	0.78173	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54959	0.77724	0.77478	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45566	0.59093	0.54479	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13364	0.57324	0.55375	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44195	0.85182	0.54955	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99602	0.32322	0.16335	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70306	0.67609	0.16112	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35780	0.03979	0.14886	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32938	0.99221	0.82395	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67929	0.69509	0.83380	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03286	0.34528	0.83021	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66927	0.66139	0.49523	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38455	0.00683	0.50548	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01989	0.36116	0.49273	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02973	0.68782	0.83388	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32871	0.34247	0.82276	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68255	0.99039	0.83015	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70147	0.03356	0.15764	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35474	0.31997	0.15653	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00212	0.68139	0.16485	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36486	0.37504	0.49067	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00966	0.66224	0.50008	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64831	0.01284	0.49486	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14055	0.25570	0.12254	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77573	0.89120	0.12981	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14168	0.89236	0.12506	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25320	0.12965	0.86358	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89241	0.76465	0.86690	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89451	0.13202	0.86772	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79990	0.58020	0.45053	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42326	0.22440	0.44860	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80648	0.22116	0.46019	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92670	0.46657	0.19891	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55920	0.09723	0.21267	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56800	0.45990	0.19555	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46848	0.91433	0.79744	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10125	0.55242	0.77991	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46902	0.55770	0.79044	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61071	0.80997	0.54006	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23547	0.45661	0.53190	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22745	0.79336	0.52800	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01644	0.27776	0.99602	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75518	0.75145	0.99768	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27775	0.00545	0.98877	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67575	0.60825	0.32738	Biso	1.000	O

O59	1.0000	0.38498	0.05086	0.32326	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94604	0.34400	0.32864	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34224	0.92267	0.66537	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08223	0.39876	0.66127	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62229	0.67492	0.66387	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01696	0.74900	0.99722	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28387	0.28008	0.99081	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75159	0.00574	0.99556	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69913	0.07705	0.32758	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95759	0.61073	0.33107	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41576	0.36096	0.32509	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34918	0.41849	0.65882	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61371	0.95201	0.66363	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08848	0.69589	0.66583	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.27350	0.94070	0.32792	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.25072	0.91105	0.25951	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.18239	0.95464	0.37378	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.20683	0.97942	0.44334	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10822	0.86809	0.37671	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.14903	0.03520	0.33059	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.06189	0.04742	0.38650	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.11441	0.00514	0.26363	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.22482	0.11975	0.32232	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.98662	0.96281	0.39625	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.02598	0.12712	0.34558	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.09759	0.07801	0.45322	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.98823	0.09711	0.27954	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.09867	0.21345	0.33792	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.96270	0.13278	0.38719	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.29194	0.88217	0.36439	Biso	1.000	H

Adsorption as alkoxides of 1-hexene:*; E= -962.201 eV; ZPVE= 5.147eV; frequencies
=44.2, 59.5, 71.8, 86.0, 113.6, 142.4, 162.6, 170.7, 247.9, 251.8, 268.4, 282.5,
340.9, 370.8, 412.4, 509.4, 521.4, 586.1, 620.8, 697.9, 710.0, 715.3, 735.1, 767.6,
800.0, 837.2, 878.0, 887.9, 945.5, 995.8, 1015.8, 1061.4, 1076.2, 1111.4, 1145.6,
1196.7, 1213.5, 1255.1, 1262.7, 1290.8, 1295.0, 1307.0, 1350.8, 1358.1, 1368.8,
1372.2, 1423.2, 1429.7, 1437.4, 1448.1, 1450.7, 1452.8, 1457.6, 2924.6, 2943.2,
2953.4, 2961.2, 2967.4, 2973.6, 2983.6, 3015.7, 3028.0, 3030.2, 3071.0, 3073.7,
3088.9 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02341	0.25715	0.10170	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79615	0.80048	0.10419	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25162	0.02946	0.09278	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24638	0.02424	0.88763	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79199	0.79667	0.89655	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01902	0.25644	0.89568	Biso	1.000	Si

Si7	1.0000	0.68400	0.58606	0.43365	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45370	0.13141	0.43680	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91914	0.35804	0.43570	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91955	0.36184	0.22882	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45707	0.12947	0.22581	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68977	0.58819	0.22827	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35219	0.91482	0.77200	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12215	0.45915	0.76629	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58510	0.69201	0.76754	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59291	0.69870	0.56417	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12064	0.46008	0.56440	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35476	0.91155	0.56375	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01765	0.79209	0.89583	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24911	0.25509	0.89021	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79279	0.02532	0.89509	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79442	0.02774	0.10223	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25228	0.25614	0.09594	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02462	0.79999	0.10313	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69165	0.13310	0.22936	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.92279	0.59193	0.23128	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45980	0.36340	0.22960	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44971	0.36436	0.43016	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91742	0.58848	0.43680	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68745	0.13455	0.43124	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35702	0.47593	0.56023	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58505	0.92421	0.56379	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11803	0.69412	0.56688	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12191	0.69201	0.77031	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58322	0.92301	0.76826	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35346	0.46503	0.76601	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92621	0.12542	0.11847	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92848	0.83565	0.12103	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21186	0.12220	0.10984	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11637	0.92183	0.87471	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82737	0.92823	0.87845	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11862	0.22589	0.87878	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58287	0.45699	0.45079	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59585	0.17555	0.43028	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89195	0.46003	0.45427	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78751	0.26513	0.21191	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48875	0.25987	0.23422	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.79178	0.55965	0.21704	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25213	0.78619	0.79533	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25386	0.49551	0.78541	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55329	0.79180	0.77637	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45957	0.60630	0.54822	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13418	0.58477	0.55882	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44932	0.87215	0.54914	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00385	0.34064	0.16625	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71194	0.69375	0.16549	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36524	0.06125	0.14936	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33350	0.00691	0.82629	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68402	0.71159	0.83691	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03764	0.36159	0.83437	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67230	0.67529	0.49762	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38015	0.01955	0.50639	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02389	0.37365	0.49673	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03479	0.70198	0.83784	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33379	0.35791	0.82603	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68691	0.00385	0.83349	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70885	0.05055	0.16169	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.36029	0.33439	0.15817	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00695	0.69851	0.16907	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36969	0.39047	0.49382	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01498	0.67811	0.50314	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65756	0.02904	0.49745	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14727	0.27352	0.12394	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78097	0.90711	0.13128	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.15000	0.90658	0.12459	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25499	0.14348	0.86203	Biso	1.000	O

O41	1.0000	0.89703	0.77939	0.86887	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89930	0.14725	0.86874	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80373	0.59375	0.45569	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42372	0.23822	0.44596	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81083	0.23769	0.46153	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93543	0.48433	0.20248	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56768	0.11882	0.20874	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57298	0.47710	0.19690	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47321	0.92942	0.80094	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10663	0.56762	0.78205	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47420	0.57273	0.79340	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61497	0.82495	0.54366	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23986	0.47186	0.53524	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23325	0.80437	0.53395	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01854	0.29135	0.99899	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76126	0.76561	0.00095	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28450	0.02687	0.99031	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68190	0.62197	0.33050	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39531	0.06444	0.32312	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95405	0.36049	0.33182	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35019	0.94018	0.66778	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08711	0.41125	0.66533	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62722	0.68952	0.66663	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01906	0.76158	0.00033	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28923	0.29112	0.99291	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75895	0.02474	0.99879	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69786	0.09466	0.33006	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.96044	0.62621	0.33452	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42122	0.38171	0.32698	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35367	0.43354	0.66199	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61800	0.96771	0.66652	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.09045	0.71014	0.66944	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.30518	0.94076	0.32048	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.29597	0.91619	0.25046	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.19359	0.91808	0.35980	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.19772	0.91702	0.43232	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.13304	0.83002	0.33995	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.14701	0.99497	0.33264	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.02351	0.94253	0.36210	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.15142	0.00811	0.26044	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.19820	0.07944	0.36300	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.97466	0.85717	0.33226	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.96653	0.01064	0.33715	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.01782	0.92852	0.43461	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.97430	0.02581	0.26487	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.01196	0.09509	0.36864	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.34059	0.89567	0.35675	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.84187	0.94968	0.36417	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.83217	0.93762	0.43655	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.79526	0.86505	0.33361	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.79954	0.99659	0.34403	Biso	1.000	H

Adsorption as alkoxides of 1-heptene:*; E= -978.958 eV; ZPVE= 5.880eV;
frequencies =32.4, 49.5, 55.5, 63.0, 78.8, 97.6, 133.3, 152.9, 197.8, 222.2, 242.3,
263.6, 286.8, 306.9, 351.1, 393.0, 418.4, 510.6, 534.9, 593.5, 624.5, 689.4, 708.8,
711.6, 727.5, 747.4, 779.1, 828.0, 838.0, 870.8, 892.6, 936.9, 970.1, 1022.3,
1035.4, 1055.5, 1071.6, 1112.5, 1125.8, 1181.7, 1207.7, 1242.2, 1247.8, 1276.9,
1283.3, 1289.6, 1306.1, 1326.2, 1346.6, 1355.4, 1359.2, 1365.0, 1418.9, 1425.9,
1431.4, 1441.1, 1443.0, 1443.9, 1453.3, 1453.4, 2925.5, 2933.7, 2946.3, 2948.4,
2952.6, 2956.1, 2961.0, 2976.5, 2992.5, 3008.9, 3021.1, 3029.9, 3033.5, 3038.8,
3103.7 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01744 0.24027 0.10634 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78887 0.78359 0.10790 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24596 0.01199 0.09745 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.24220 0.00887 0.89281 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78683 0.78212 0.89981 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01479 0.24076 0.89929 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67981 0.57277 0.43686 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45216 0.11788 0.44140 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91321 0.34249 0.43941 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.91089 0.34379 0.23263 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44900 0.11023 0.23193 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68357 0.57289 0.23222 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34666 0.89984 0.77606 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11710 0.44467 0.77010 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58022 0.67722 0.77138 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58854 0.68420 0.56787 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11640 0.44673 0.56759 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35005 0.89584 0.56824 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01358 0.77891 0.89883 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24452 0.24120 0.89524 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78776 0.01036 0.89883 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78818 0.01093 0.10658 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24699 0.24169 0.10055 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01856 0.78383 0.10695 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68524 0.11421 0.23510 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91756 0.57654 0.23488 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45466 0.34544 0.23364 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44620 0.34892 0.43574 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91313 0.57410 0.43936 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68376 0.11844 0.43402 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35242 0.46088 0.56407 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.57932 0.90834 0.56864 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11465 0.68078 0.56922 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11757 0.67760 0.77410 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57888 0.90857 0.77227 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34849 0.45001 0.76965 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91978 0.10878 0.12317 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.92024 0.81621 0.12534 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21033 0.10832 0.11087 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.11166 0.90879 0.87684 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.82181 0.91326 0.88033 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.11341 0.20902 0.88094 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57887 0.44397 0.45462 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59297 0.16040 0.42678 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88636 0.44508 0.45632 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.77857 0.24705 0.21605 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48403 0.24217 0.23455 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.78707 0.54649 0.22184 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24729 0.77141 0.80087 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.24889 0.48068 0.78825 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.54906 0.77743 0.78089 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.45530 0.59114 0.55184 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.13272 0.57255 0.56044 Biso 1.000 O
O18 1.0000 0.44253 0.85296 0.55753 Biso 1.000 O

O19	1.0000	0.99544	0.32352	0.16939	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70278	0.67577	0.16743	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35780	0.04031	0.15542	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32936	0.99277	0.83048	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67912	0.69592	0.84041	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03362	0.34636	0.83823	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66901	0.66188	0.50164	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38336	0.00626	0.51168	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01922	0.36045	0.50003	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02975	0.68855	0.84027	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32874	0.34306	0.83002	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68147	0.98990	0.83814	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70129	0.03345	0.16465	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35474	0.31913	0.16323	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00160	0.68058	0.17053	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36480	0.37561	0.49724	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00975	0.66278	0.50683	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64870	0.01356	0.50201	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14043	0.25554	0.13113	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77500	0.89062	0.13655	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14154	0.89215	0.13186	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25413	0.13052	0.87135	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89230	0.76521	0.87305	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89410	0.13256	0.87293	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79977	0.58029	0.45752	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42350	0.22489	0.45634	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80537	0.22245	0.46742	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92665	0.46652	0.20743	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55853	0.09620	0.22017	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56758	0.46008	0.20238	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46835	0.91500	0.80321	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10141	0.55292	0.78706	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46906	0.55803	0.79696	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61061	0.81038	0.54701	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23484	0.45606	0.53938	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22776	0.79263	0.53453	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01587	0.27477	0.00311	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75542	0.75184	0.00414	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27741	0.00427	0.99540	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67613	0.60869	0.33398	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38368	0.05171	0.32992	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94615	0.34171	0.33543	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34085	0.92308	0.67188	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08158	0.39873	0.66868	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62240	0.67515	0.67044	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01701	0.74983	0.00343	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28209	0.28090	0.99786	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75422	0.00791	0.00278	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69973	0.07745	0.33472	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95770	0.61317	0.33752	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41559	0.36020	0.33188	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34917	0.41822	0.66573	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61544	0.95330	0.67073	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08863	0.69597	0.67245	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.27289	0.94069	0.33418	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.25077	0.91147	0.26563	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.18010	0.95203	0.37984	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.20235	0.97344	0.45001	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10657	0.86490	0.37988	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.14630	0.03296	0.33773	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.04073	0.02571	0.38083	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.12921	0.01395	0.26653	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.21754	0.12082	0.34270	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01696	0.08009	0.34298	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.05357	0.05957	0.47892	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.96888	0.93829	0.37340	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.12492	0.14717	0.48645	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.07651	0.00563	0.51829	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.29219	0.88261	0.37043	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.94592	0.05091	0.51825	Biso	1.000	C

H11	1.0000	0.87454	0.96378	0.50896	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.92361	0.10621	0.48028	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.95696	0.08264	0.61651	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.02668	0.16985	0.62754	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.97451	0.02590	0.65714	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.87909	0.07800	0.64209	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of n-butene: E= -928.972 eV; ZPVE= 3.489eV;
frequencies =45.9, 58.0, 66.9, 74.9, 100.8, 123.3, 183.6, 246.7, 265.6, 272.7,
280.5, 310.9, 352.0, 461.6, 492.0, 605.2, 647.5, 675.7, 707.4, 749.0, 759.4, 853.9,
955.0, 993.6, 1021.5, 1035.9, 1064.9, 1068.8, 1138.3, 1216.5, 1282.6, 1295.6,
1358.1, 1361.2, 1421.2, 1423.4, 1430.0, 1441.7, 1652.1, 2678.3, 2953.4, 2955.5,
3005.0, 3006.7, 3028.3, 3043.2, 3057.0, 3061.8 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.03749 0.22667 0.09650 Biso 1.000 Si
Si2      1.0000 0.80825 0.76931 0.09837 Biso 1.000 Si
Si3      1.0000 0.26746 0.99781 0.09356 Biso 1.000 Si
Si4      1.0000 0.26111 0.99489 0.88614 Biso 1.000 Si
Si5      1.0000 0.80601 0.76674 0.89156 Biso 1.000 Si
Si6      1.0000 0.03444 0.22636 0.89062 Biso 1.000 Si
Si7      1.0000 0.70233 0.56190 0.42945 Biso 1.000 Si
Al1      1.0000 0.47583 0.10430 0.42676 Biso 1.000 Al
Si8      1.0000 0.93663 0.33024 0.42862 Biso 1.000 Si
Si9      1.0000 0.93623 0.33297 0.22403 Biso 1.000 Si
Si10     1.0000 0.47360 0.09953 0.22110 Biso 1.000 Si
Si11     1.0000 0.70382 0.56040 0.22417 Biso 1.000 Si
Si12     1.0000 0.36766 0.88780 0.76618 Biso 1.000 Si
Si13     1.0000 0.13698 0.42960 0.76134 Biso 1.000 Si
Si14     1.0000 0.59969 0.66261 0.76206 Biso 1.000 Si
Si15     1.0000 0.60502 0.66578 0.55940 Biso 1.000 Si
Si16     1.0000 0.13574 0.42861 0.55954 Biso 1.000 Si
Si17     1.0000 0.36795 0.88408 0.55828 Biso 1.000 Si
Si18     1.0000 0.03312 0.76457 0.89083 Biso 1.000 Si
Si19     1.0000 0.26400 0.22541 0.88763 Biso 1.000 Si
Si20     1.0000 0.80669 0.99596 0.89065 Biso 1.000 Si
Si21     1.0000 0.80738 0.99758 0.09717 Biso 1.000 Si
Si22     1.0000 0.26752 0.22738 0.09447 Biso 1.000 Si
Si23     1.0000 0.03789 0.77027 0.09846 Biso 1.000 Si
Si24     1.0000 0.70376 0.10207 0.22478 Biso 1.000 Si
Si25     1.0000 0.93414 0.56069 0.22435 Biso 1.000 Si
Si26     1.0000 0.47334 0.33109 0.22273 Biso 1.000 Si
Si27     1.0000 0.46817 0.33216 0.42843 Biso 1.000 Si
Si28     1.0000 0.93190 0.55869 0.43058 Biso 1.000 Si
Si29     1.0000 0.70520 0.09845 0.43071 Biso 1.000 Si
Si30     1.0000 0.36967 0.43795 0.55606 Biso 1.000 Si
Si31     1.0000 0.60478 0.89845 0.55645 Biso 1.000 Si
```

Si32	1.0000	0.13296	0.66174	0.56061	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.13622	0.66246	0.76369	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.59782	0.89316	0.76288	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.36760	0.43321	0.76102	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.93916	0.09543	0.11206	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.93974	0.80327	0.11519	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.23558	0.09659	0.11128	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.13091	0.89455	0.86902	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.84076	0.89836	0.87430	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13339	0.19495	0.87251	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59789	0.43482	0.44607	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60545	0.12296	0.45598	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.90749	0.43077	0.44887	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.80538	0.23307	0.21275	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50350	0.23112	0.20820	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80316	0.52853	0.20960	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.26783	0.75777	0.78358	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.26900	0.46574	0.77850	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56671	0.76172	0.77179	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47455	0.56651	0.54426	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15272	0.55499	0.55259	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47622	0.87280	0.53160	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.01907	0.31205	0.15960	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72338	0.66395	0.16016	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37639	0.01884	0.15009	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34692	0.97651	0.82279	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.69852	0.68203	0.83117	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05321	0.33192	0.82945	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69078	0.65206	0.49288	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36955	0.98861	0.49804	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03841	0.34329	0.49223	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05193	0.67588	0.83170	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.34929	0.32941	0.82436	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70206	0.97473	0.82709	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72408	0.01908	0.15974	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37239	0.31407	0.15599	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.01851	0.66611	0.16176	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38035	0.35229	0.48850	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03344	0.64908	0.49472	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69730	0.99634	0.49303	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15874	0.23915	0.12089	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79448	0.87682	0.12442	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.15960	0.87800	0.12358	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27282	0.11528	0.85946	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91187	0.75059	0.86371	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91397	0.11753	0.86422	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81986	0.56547	0.45444	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45549	0.21390	0.45670	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82789	0.20914	0.45008	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94676	0.45287	0.19658	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58683	0.09485	0.19470	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58393	0.45150	0.19801	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.48816	0.90131	0.79421	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12229	0.53883	0.77733	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48880	0.54231	0.78522	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61098	0.78497	0.53893	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25398	0.43739	0.53171	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25048	0.77356	0.53070	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03563	0.26215	0.99361	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77334	0.73352	0.99517	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29575	0.99426	0.98894	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70499	0.59960	0.32652	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.43213	0.05577	0.32023	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97780	0.33839	0.32614	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.36895	0.91825	0.66107	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.10028	0.38153	0.66058	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64371	0.66259	0.66141	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03586	0.73458	0.99493	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30126	0.26041	0.99047	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77094	0.99553	0.99372	Biso	1.000	O

O67	1.0000	0.69996	0.06097	0.32672	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97035	0.59556	0.32791	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43450	0.33406	0.32433	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36501	0.39530	0.65807	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63036	0.93593	0.66048	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10241	0.67728	0.66235	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.16662	0.00789	0.45068	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.12162	0.92690	0.37440	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.06555	0.94462	0.33296	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.07391	0.83833	0.39661	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.19084	0.93668	0.33068	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.15018	0.97974	0.53752	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.19259	0.06213	0.61318	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.24541	0.14983	0.59010	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.24302	0.04345	0.66025	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.12093	0.05626	0.65154	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.29410	0.98806	0.49809	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.09866	0.88957	0.55481	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.21610	0.09825	0.43382	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of iso-butene:o; E= -928.961 eV; ZPVE= 3.486eV;
frequencies =43.2, 62.0, 68.9, 87.3, 109.0, 148.0, 168.4, 220.2, 268.3, 313.6,
354.4, 387.1, 426.2, 458.2, 461.5, 606.4, 653.5, 675.5, 679.6, 713.2, 756.1, 817.2,
891.6, 927.6, 958.2, 977.1, 1048.2, 1061.6, 1068.8, 1211.3, 1274.2, 1353.5, 1353.9,
1374.1, 1411.7, 1420.1, 1437.4, 1444.4, 1620.6, 2638.4, 2957.4, 2962.5, 3011.3,
3015.9, 3045.9, 3070.3, 3087.7, 3136.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.03845	0.22321	0.09561	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.81018	0.76603	0.09687	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.26941	0.99411	0.09173	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.26203	0.99186	0.88447	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.80711	0.76328	0.89004	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.03529	0.22367	0.89014	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.70299	0.55874	0.42821	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.47605	0.10029	0.42449	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.93619	0.32639	0.42793	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.93784	0.32950	0.22265	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.47458	0.09577	0.21929	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.70489	0.55660	0.22245	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.36887	0.88563	0.76432	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.13767	0.42604	0.76063	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.60032	0.65968	0.76083	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.60460	0.66211	0.55810	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.13653	0.42469	0.55848	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.36797	0.88165	0.55655	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.03363	0.76009	0.88947	Biso	1.000	Si

Si19	1.0000	0.26527	0.22197	0.88691	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.80782	0.99252	0.88914	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.80780	0.99371	0.09560	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.26853	0.22261	0.09382	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.03899	0.76577	0.09657	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.70508	0.09830	0.22286	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.93546	0.55654	0.22308	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.47502	0.32847	0.22093	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.47056	0.32960	0.42705	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.93197	0.55411	0.42956	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.70565	0.09431	0.42888	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.37041	0.43315	0.55566	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.60449	0.89475	0.55470	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.13451	0.65740	0.55908	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.13787	0.65910	0.76244	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.59889	0.89031	0.76123	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.36880	0.42925	0.76037	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.93902	0.09248	0.11123	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.94178	0.80006	0.11378	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.23727	0.09224	0.11217	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.13207	0.89015	0.86924	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.84192	0.89494	0.87302	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13532	0.19378	0.87272	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.60033	0.43121	0.44634	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60562	0.11863	0.45350	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.90517	0.42555	0.44878	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.80778	0.22856	0.20990	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50295	0.22692	0.20681	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80468	0.52521	0.20888	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.26914	0.75554	0.78186	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.26920	0.46041	0.77737	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56734	0.75878	0.77084	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47403	0.56242	0.54406	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15684	0.55231	0.55024	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47645	0.87066	0.52987	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.02267	0.30925	0.16002	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72560	0.66103	0.15906	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37820	0.01419	0.14804	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34822	0.97401	0.82135	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.69924	0.67887	0.82983	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05319	0.32859	0.82859	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69011	0.64857	0.49107	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36890	0.98559	0.49585	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03851	0.34020	0.49124	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05275	0.67220	0.82971	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35167	0.32667	0.82467	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70371	0.97183	0.82509	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72333	0.01374	0.15803	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37242	0.31054	0.15567	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.02005	0.66286	0.16126	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38263	0.34925	0.48728	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03424	0.64353	0.49356	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69736	0.99197	0.49102	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15894	0.23345	0.11898	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79659	0.87366	0.12285	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16156	0.87335	0.11994	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27170	0.11112	0.85702	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91283	0.74700	0.86199	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91543	0.11419	0.86364	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82188	0.56471	0.45249	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45670	0.21051	0.45352	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82830	0.20465	0.44909	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94760	0.44878	0.19402	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58883	0.09293	0.19334	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58589	0.44774	0.19419	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.48954	0.89924	0.79222	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12514	0.53628	0.77765	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48944	0.53942	0.78403	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60926	0.78055	0.53704	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25333	0.42991	0.53137	Biso	1.000	O

O54	1.0000	0.25070	0.77067	0.52918	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03580	0.25951	0.99310	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77495	0.72999	0.99377	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29861	0.99377	0.98708	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70368	0.59430	0.32488	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.43219	0.05108	0.31808	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97753	0.33563	0.32539	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.36955	0.91601	0.65930	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.09994	0.37906	0.65972	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64424	0.65998	0.66002	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03476	0.72806	0.99338	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30320	0.25473	0.98994	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77140	0.99149	0.99215	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70166	0.05762	0.32483	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97158	0.58944	0.32685	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43923	0.33480	0.32281	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36643	0.39070	0.65763	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63094	0.93226	0.65864	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10346	0.67169	0.66083	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.15028	0.97406	0.50528	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.14752	0.98548	0.41621	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.11527	0.88831	0.35392	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.09209	0.80908	0.38873	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18606	0.90738	0.30852	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.04379	0.87572	0.31169	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.17655	0.09611	0.37362	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.20251	0.16515	0.42173	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.10254	0.08660	0.33642	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.24465	0.12069	0.32440	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.29304	0.98446	0.49371	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.17196	0.04532	0.54984	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.11903	0.89059	0.53545	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of trimethyl_ethylene: ^; E= -945.748 eV; ZPVE=
4.223eV; frequencies =45.5, 56.2, 66.2, 86.0, 95.4, 101.6, 118.3, 152.7, 183.8,
267.9, 286.6, 292.2, 313.0, 353.7, 389.0, 461.3, 464.6, 516.2, 605.4, 648.7, 677.3,
709.9, 764.6, 769.6, 813.2, 926.7, 940.5, 970.1, 1014.6, 1037.9, 1058.8, 1068.7,
1099.4, 1204.9, 1214.3, 1317.5, 1355.7, 1360.8, 1365.3, 1412.9, 1419.5, 1422.9,
1435.1, 1438.9, 1442.8, 1639.9, 2582.3, 2953.3, 2955.2, 2960.2, 3002.3, 3004.8,
3011.1, 3029.4, 3066.1, 3082.5, 3087.1 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.03915	0.22818	0.09823	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.81082	0.77133	0.09952	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.26956	0.99936	0.09445	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.26226	0.99668	0.88658	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.80793	0.76832	0.89255	Biso	1.000	Si

Si6	1.0000	0.03613	0.22822	0.89257	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.70429	0.56360	0.43065	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.47559	0.10465	0.42674	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.93685	0.33144	0.43031	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.93835	0.33446	0.22528	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.47506	0.10119	0.22146	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.70589	0.56193	0.22515	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.36956	0.89052	0.76672	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.13883	0.43105	0.76301	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.60123	0.66467	0.76328	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.60530	0.66723	0.56060	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.13684	0.42862	0.56121	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.36902	0.88634	0.55915	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.03490	0.76584	0.89179	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.26647	0.22723	0.88942	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.80916	0.99763	0.89132	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.80933	0.99911	0.09833	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.26982	0.22853	0.09612	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.04019	0.77181	0.09952	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.70599	0.10338	0.22551	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.93638	0.56200	0.22554	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.47604	0.33328	0.22346	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.47199	0.33404	0.42980	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.93364	0.56004	0.43178	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.70632	0.09917	0.43103	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.37156	0.43887	0.55796	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.60610	0.90025	0.55748	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.13555	0.66189	0.56198	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.13860	0.66401	0.76500	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.59976	0.89524	0.76386	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.36990	0.43459	0.76250	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.94065	0.09725	0.11477	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.94240	0.80535	0.11615	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.23797	0.09798	0.11428	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.13232	0.89580	0.86958	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.84320	0.90003	0.87486	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13611	0.19806	0.87583	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.60223	0.43545	0.44778	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60518	0.12219	0.45447	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.90693	0.43143	0.45049	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.80796	0.23407	0.21267	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50520	0.23278	0.20796	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80541	0.53017	0.21133	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.27007	0.76031	0.78411	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.27075	0.46647	0.77914	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56805	0.76364	0.77325	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47416	0.56869	0.54670	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15701	0.55620	0.55367	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47793	0.87584	0.53306	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.02278	0.31419	0.16218	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72635	0.66599	0.16144	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37964	0.02030	0.14935	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34890	0.97878	0.82396	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.70016	0.68394	0.83227	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05526	0.33396	0.83153	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69012	0.65240	0.49378	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36888	0.98908	0.49763	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03863	0.34445	0.49397	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05401	0.67730	0.83275	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35197	0.33168	0.82667	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70410	0.97641	0.82823	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72453	0.01979	0.15977	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37354	0.31592	0.15832	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.02050	0.66771	0.16307	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38525	0.35592	0.48965	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03596	0.64868	0.49604	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69875	0.99767	0.49384	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.16053	0.24009	0.12087	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79688	0.87864	0.12591	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16218	0.87925	0.12457	Biso	1.000	O

O40	1.0000	0.27353	0.11672	0.85941	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91334	0.75131	0.86490	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91649	0.11914	0.86478	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82349	0.57041	0.45525	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45734	0.21505	0.45795	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82810	0.21043	0.45175	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94869	0.45413	0.19720	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58891	0.09680	0.19716	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58643	0.45331	0.19758	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.49029	0.90421	0.79440	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12559	0.54096	0.77962	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.49061	0.54429	0.78660	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61143	0.78636	0.53960	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25356	0.43375	0.53370	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25249	0.77434	0.53226	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03502	0.26307	0.99554	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77559	0.73575	0.99633	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29650	0.99677	0.98952	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70547	0.60019	0.32755	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.43084	0.05740	0.32009	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97832	0.33980	0.32787	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.37009	0.92140	0.66175	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.10063	0.38275	0.66244	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64494	0.66476	0.66247	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03805	0.73614	0.99597	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30506	0.26066	0.99225	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77425	0.99732	0.99460	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70392	0.06231	0.32722	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97290	0.59602	0.32912	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43959	0.33732	0.32557	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36786	0.39610	0.65978	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63274	0.93766	0.66144	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10407	0.67687	0.66347	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.14825	0.99377	0.43493	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.17285	0.10406	0.39394	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.23725	0.12933	0.34143	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20122	0.17409	0.44121	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.09553	0.09275	0.36097	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.11462	0.89882	0.36964	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03866	0.88399	0.33246	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09692	0.81942	0.40165	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.18197	0.92136	0.31994	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.15234	0.97702	0.52348	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.18078	0.06091	0.59742	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.21880	0.14857	0.57380	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.24077	0.05754	0.64468	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.10415	0.04093	0.63591	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.29261	0.98764	0.49627	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.12244	0.88937	0.54459	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-pentene:o; E= -945.688 eV; ZPVE= 4.241eV;
frequencies =34.3i, 22.5, 45.5, 62.2, 77.3, 102.5, 138.2, 189.3, 210.7, 239.4,
271.3, 304.6, 311.4, 353.3, 419.0, 456.5, 481.0, 603.4, 649.3, 667.9, 673.1, 715.0,
760.3, 819.6, 866.1, 933.3, 994.8, 1010.1, 1031.3, 1051.6, 1071.8, 1079.3, 1146.1,
1232.7, 1237.8, 1276.8, 1302.9, 1321.6, 1354.6, 1358.7, 1423.4, 1428.2, 1434.3,
1441.9, 1449.7, 1649.3, 2680.3, 2947.7, 2952.3, 2961.1, 2990.2, 3007.5, 3028.9,
3033.0, 3035.9, 3047.9, 3056.8 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01003	0.21013	0.10193	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77985	0.75229	0.10316	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23954	0.98121	0.09915	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23321	0.97826	0.89150	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77770	0.74985	0.89685	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00663	0.20977	0.89584	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67399	0.54488	0.43472	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44763	0.08698	0.43144	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90844	0.31373	0.43380	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90919	0.31672	0.22953	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44623	0.08258	0.22613	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67624	0.54344	0.22920	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34003	0.87176	0.77155	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10913	0.41322	0.76716	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57184	0.64606	0.76699	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57608	0.64894	0.56413	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10766	0.41208	0.56496	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33989	0.86826	0.56361	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00581	0.74800	0.89623	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23619	0.20892	0.89291	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77889	0.97915	0.89582	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77998	0.98091	0.10254	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23980	0.21085	0.09989	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01050	0.75357	0.10337	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67618	0.08593	0.22959	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90654	0.54436	0.22965	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44537	0.31462	0.22811	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43967	0.31543	0.43312	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90365	0.54237	0.43587	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67667	0.08187	0.43570	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34128	0.42072	0.56148	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57639	0.88198	0.56133	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10524	0.64513	0.56570	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10839	0.64595	0.76894	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56995	0.87661	0.76806	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33985	0.41665	0.76668	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91174	0.07887	0.11741	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91144	0.78566	0.11807	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20788	0.08014	0.11701	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10317	0.87791	0.87368	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81292	0.88156	0.87923	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10578	0.17879	0.87707	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56958	0.41771	0.45116	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57726	0.10651	0.46196	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87910	0.41425	0.45349	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77839	0.21676	0.21820	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47473	0.21395	0.21495	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77551	0.51161	0.21415	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23974	0.74190	0.78876	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24089	0.44856	0.78454	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53912	0.74529	0.77719	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44565	0.54945	0.54912	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12594	0.53895	0.55725	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44814	0.85722	0.53632	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99177	0.29576	0.16485	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69579	0.64728	0.16554	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34893	0.00236	0.15500	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31974	0.96055	0.82849	Biso	1.000	O

O23	1.0000	0.67137	0.66536	0.83534	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02477	0.31528	0.83486	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66172	0.63516	0.49748	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34092	0.97276	0.50364	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00948	0.32669	0.49825	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02349	0.65919	0.83635	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32211	0.31296	0.82993	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67437	0.95824	0.83218	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69685	0.00264	0.16514	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34513	0.29785	0.16077	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99094	0.64976	0.16710	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35226	0.33484	0.49434	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00555	0.63232	0.49994	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66915	0.97968	0.49784	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13110	0.22251	0.12676	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76740	0.86036	0.13006	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13140	0.86182	0.12964	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24495	0.09871	0.86499	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88401	0.73368	0.87079	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88620	0.10080	0.86961	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79166	0.54903	0.46044	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42651	0.19652	0.45967	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79955	0.19252	0.45463	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91987	0.43679	0.20242	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56009	0.07975	0.19818	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55647	0.43447	0.20306	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46030	0.88465	0.79960	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09517	0.52278	0.78352	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46097	0.52596	0.79069	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58179	0.76803	0.54368	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22512	0.41917	0.53699	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22242	0.75760	0.53631	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00842	0.24543	0.99894	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74289	0.71656	0.00020	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26699	0.97715	0.99442	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67770	0.58245	0.33163	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40608	0.03708	0.32503	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95078	0.32196	0.33163	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34180	0.90244	0.66648	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07249	0.36593	0.66623	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61494	0.64579	0.66608	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01083	0.71824	0.00006	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27279	0.24363	0.99582	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74341	0.97849	0.99904	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67063	0.04441	0.33163	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94183	0.57977	0.33324	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40607	0.31909	0.32929	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33701	0.37886	0.66367	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60196	0.91900	0.66549	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07425	0.65971	0.66750	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.13311	0.99018	0.63615	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.08574	0.89821	0.64804	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.21432	0.02712	0.67208	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.08529	0.02711	0.66663	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10905	0.94304	0.47206	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.15101	0.01846	0.53932	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.05774	0.85246	0.48822	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.11981	0.97226	0.37513	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.20054	0.10889	0.52275	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.15696	0.92763	0.33966	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.17874	0.06372	0.36612	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.00439	0.93905	0.33342	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.94464	0.84756	0.34046	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.01361	0.95935	0.26223	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.26629	0.97380	0.50506	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.96599	0.98432	0.36548	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of tetra-methyl-ethylene: ^; E= -962.354 eV; ZPVE= 4.972eV; frequencies =39.3, 64.9, 72.8, 79.4, 89.7, 102.7, 111.5, 117.6, 170.1, 185.7, 208.7, 268.4, 312.5, 316.3, 345.4, 356.5, 399.1, 417.4, 462.9, 488.5, 493.0,

605.3, 646.9, 677.1, 688.8, 705.1, 725.3, 888.4, 915.8, 921.7, 947.8, 978.9,
1018.1, 1044.5, 1062.5, 1069.7, 1150.7, 1153.1, 1210.3, 1253.5, 1351.6, 1354.2,
1359.0, 1369.5, 1414.5, 1415.7, 1420.1, 1433.4, 1439.7, 1441.8, 1449.6, 1452.5,
1637.0, 2689.6, 2946.8, 2949.9, 2954.2, 2956.4, 2995.0, 2998.0, 2998.7, 3003.2,
3089.1, 3097.5, 3110.0, 3112.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.03839 0.22581 0.09716 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.80948 0.76884 0.09694 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.26813 0.99667 0.09462 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.26248 0.99486 0.88632 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.80729 0.76595 0.89038 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.03635 0.22571 0.89159 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.70590 0.56454 0.42851 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.47452 0.10362 0.42631 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.93312 0.32984 0.42871 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.93644 0.33182 0.22368 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.47386 0.09896 0.22055 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.70550 0.56036 0.22333 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.36999 0.89012 0.76635 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.13839 0.42916 0.76260 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.60096 0.66250 0.76155 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.60081 0.66494 0.55907 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.13757 0.42799 0.55994 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.36759 0.88750 0.55925 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.03545 0.76486 0.88980 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.26695 0.22564 0.88930 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.80817 0.99547 0.88988 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.80794 0.99668 0.09647 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.26911 0.22661 0.09618 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.03945 0.77006 0.09780 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.70524 0.10100 0.22429 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.93603 0.56023 0.22395 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.47680 0.33120 0.22160 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.47761 0.33477 0.42844 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.93267 0.55819 0.42941 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.70567 0.09690 0.42994 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.37155 0.43622 0.55769 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.60352 0.89885 0.55618 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.13807 0.65777 0.56096 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.13844 0.66033 0.76515 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.59946 0.89364 0.76271 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.37089 0.43159 0.76121 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.93937 0.09479 0.11243 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.94105 0.80293 0.11317 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.23789 0.09626 0.11401 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.13316 0.89434 0.86646 Biso 1.000 O

O5	1.0000	0.84104	0.89720	0.87290	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13665	0.19608	0.87457	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.60917	0.43386	0.44481	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60330	0.11828	0.45257	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89713	0.42637	0.44531	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.80591	0.23202	0.20992	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50535	0.23057	0.20421	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80495	0.52836	0.21072	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.26889	0.76036	0.78174	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.26960	0.46074	0.77515	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56977	0.76275	0.77227	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46797	0.56901	0.54753	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.17136	0.56006	0.54964	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47597	0.87668	0.53148	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.02109	0.31130	0.16105	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72548	0.66366	0.15903	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37827	0.01691	0.14903	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.35098	0.97832	0.82502	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.70100	0.68097	0.82905	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05442	0.33010	0.82949	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.68371	0.64853	0.49117	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36554	0.98983	0.49800	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03665	0.34913	0.49283	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05291	0.67538	0.83062	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35327	0.32990	0.82668	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70436	0.97627	0.82608	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72356	0.01733	0.15848	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37266	0.31413	0.15852	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.01901	0.66491	0.16030	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.39323	0.36115	0.48695	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03666	0.63907	0.49513	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69739	0.99503	0.49255	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15935	0.23740	0.12100	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79555	0.87610	0.12347	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16035	0.87727	0.12542	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27455	0.11534	0.85976	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91400	0.75085	0.86353	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91677	0.11639	0.86445	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82835	0.57855	0.45367	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.46068	0.21591	0.45957	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82705	0.20786	0.45247	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94792	0.45204	0.19593	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58683	0.09241	0.19764	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58651	0.45150	0.19528	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.48938	0.90085	0.79419	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12959	0.54022	0.78602	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48988	0.54307	0.78620	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60804	0.78455	0.53844	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24812	0.41951	0.53510	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25002	0.77623	0.53387	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03615	0.26166	0.99438	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77371	0.73272	0.99388	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29379	0.99272	0.98962	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70512	0.59998	0.32536	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.42901	0.05812	0.31958	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97491	0.33605	0.32660	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.37195	0.92378	0.66188	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.09675	0.38625	0.66141	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64248	0.66173	0.66012	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.04005	0.73643	0.99404	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30424	0.25921	0.99231	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77214	0.99472	0.99289	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70583	0.06155	0.32608	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97394	0.59544	0.32723	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.44353	0.33536	0.32448	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.37264	0.39354	0.65886	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63037	0.93601	0.66013	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10155	0.66404	0.66267	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.14474	0.99610	0.44912	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.18893	0.10081	0.39247	Biso	1.000	C

H1	1.0000	0.25229	0.10597	0.34445	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.22514	0.18024	0.42968	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.11813	0.09454	0.35248	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.08732	0.88922	0.39448	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00893	0.87942	0.36462	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.06567	0.81237	0.43191	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.14210	0.89454	0.33867	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.14737	0.99782	0.53978	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.20307	0.10525	0.59403	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.26590	0.17918	0.55716	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.24595	0.09503	0.65237	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.13850	0.12400	0.62023	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.08319	0.89385	0.59686	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.03666	0.81434	0.56002	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.02082	0.90361	0.63701	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.13920	0.88555	0.64530	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.29080	0.99053	0.49867	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 11-methyl-isopropyl-ethylene:o; E= -962.254 eV;
ZPVE= 4.982eV; frequencies =23.2i, 16.9, 46.0, 51.1, 72.3, 84.8, 128.1, 200.6,
217.4, 257.5, 261.0, 295.6, 301.5, 322.6, 355.1, 378.0, 425.6, 472.8, 538.6, 566.8,
594.6, 609.0, 655.3, 693.8, 708.8, 719.3, 768.0, 801.8, 877.8, 885.6, 901.3, 937.1,
949.0, 980.4, 1011.3, 1077.1, 1107.8, 1143.9, 1174.7, 1230.8, 1261.8, 1320.1,
1346.8, 1354.5, 1365.3, 1387.9, 1423.4, 1431.9, 1439.6, 1442.2, 1451.6, 1465.1,
1607.9, 2912.0, 2960.4, 2962.5, 2963.7, 2985.2, 3013.2, 3026.2, 3034.1, 3045.4,
3050.0, 3070.8, 3082.1, 3146.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01634	0.23215	0.09340	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78835	0.77691	0.09558	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24709	0.00308	0.08744	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24257	0.00034	0.88215	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78700	0.77420	0.88771	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01449	0.23248	0.88676	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68246	0.56749	0.42522	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45831	0.11345	0.43261	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91582	0.33395	0.42688	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91179	0.33665	0.21958	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45136	0.10683	0.21711	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68444	0.56788	0.22170	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34686	0.89304	0.76156	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11743	0.43622	0.75687	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57967	0.66894	0.75996	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59048	0.67620	0.55618	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11759	0.43866	0.55545	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34991	0.88730	0.55419	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01349	0.77029	0.88778	Biso	1.000	Si

Si19	1.0000	0.24436	0.23249	0.88326	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78746	0.00232	0.88613	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78609	0.00331	0.09384	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24816	0.23513	0.08862	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01693	0.77629	0.09548	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68581	0.10645	0.22342	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91481	0.56687	0.22228	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45362	0.33751	0.21958	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44676	0.33845	0.42556	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91225	0.56317	0.42769	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68738	0.10970	0.42227	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35382	0.45234	0.55115	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57933	0.89909	0.55620	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11301	0.67153	0.55752	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11695	0.66924	0.76094	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57811	0.89975	0.75991	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34879	0.44094	0.75656	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91721	0.10157	0.11133	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91993	0.81075	0.11284	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21807	0.10405	0.10237	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11177	0.90045	0.86715	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82204	0.90543	0.86826	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11306	0.20024	0.86973	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57733	0.44028	0.43907	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59817	0.15380	0.41685	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88705	0.43474	0.44597	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77980	0.23868	0.20363	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48689	0.23824	0.20449	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78379	0.53578	0.20885	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24764	0.76372	0.78414	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24942	0.47225	0.77418	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54742	0.76837	0.76991	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45848	0.58130	0.53841	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13135	0.56336	0.55009	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44277	0.84464	0.54506	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99717	0.31698	0.15675	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70328	0.66925	0.15548	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35477	0.02431	0.14811	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32829	0.98358	0.81852	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67886	0.68792	0.82878	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03461	0.33845	0.82567	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67413	0.65638	0.49177	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38101	0.99387	0.49329	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02335	0.35269	0.48589	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03148	0.68082	0.82944	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32767	0.33366	0.81715	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68100	0.98127	0.82550	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69832	0.02496	0.15149	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35307	0.31839	0.15187	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99844	0.67303	0.15957	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36240	0.36618	0.48256	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00949	0.65347	0.49374	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65053	0.00418	0.48976	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13813	0.24412	0.11686	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77333	0.88330	0.12404	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13929	0.88507	0.12022	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25386	0.12162	0.85991	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89241	0.75691	0.86113	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89389	0.12441	0.85979	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79828	0.56747	0.44750	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43253	0.22073	0.45745	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81038	0.21211	0.45480	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92539	0.45811	0.19302	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55946	0.09021	0.21161	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56427	0.45773	0.19636	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46808	0.90759	0.78981	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10198	0.54479	0.77335	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46911	0.54880	0.78472	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61025	0.80111	0.53425	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23767	0.45119	0.52832	Biso	1.000	O

O54	1.0000	0.22678	0.78308	0.52417	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01409	0.26649	0.99032	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75505	0.74427	0.99197	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27891	0.99708	0.98489	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68426	0.60875	0.32316	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39173	0.06462	0.31900	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94765	0.33556	0.32231	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34399	0.91998	0.65752	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08105	0.38832	0.65589	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62287	0.66810	0.65924	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01527	0.74048	0.99238	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28301	0.27258	0.98564	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75343	0.00052	0.98985	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70182	0.06898	0.32235	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95365	0.60021	0.32526	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41133	0.33378	0.32058	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35093	0.40915	0.65271	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61544	0.94349	0.65833	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08420	0.68626	0.66017	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30650	0.02730	0.32404	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10519	0.01143	0.37268	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.14335	0.93779	0.36044	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.06275	0.04963	0.29549	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.08066	0.02330	0.23169	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10004	0.14244	0.29535	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.97027	0.01346	0.29987	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.09968	0.05891	0.46260	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.13965	0.01629	0.54075	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.22744	0.03527	0.53271	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.08509	0.92407	0.54950	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.13551	0.05731	0.60240	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97985	0.03954	0.48115	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.95214	0.07959	0.43149	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.97859	0.07589	0.54602	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.91711	0.94831	0.48303	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.13696	0.90010	0.29497	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.16771	0.90279	0.41574	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.15686	0.15181	0.45735	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-methyl-2-pentene:>; E= -962.098 eV; ZPVE= 4.999eV; frequencies =42.3, 57.1, 75.0, 80.7, 90.2, 101.7, 120.5, 135.6, 177.8, 198.2, 202.5, 256.6, 293.2, 312.7, 346.4, 381.0, 412.7, 479.2, 528.3, 538.2, 594.7, 613.2, 668.4, 698.9, 725.4, 742.9, 790.9, 813.8, 839.4, 896.3, 926.2, 965.4, 984.3, 1035.4, 1049.7, 1059.5, 1104.6, 1198.9, 1206.3, 1247.8, 1287.4, 1329.5, 1347.3, 1359.7, 1361.6, 1407.7, 1419.2, 1429.0, 1434.0, 1440.2, 1447.8, 1454.3, 1629.4, 2955.9, 2960.5, 2974.4, 2981.8, 3010.5, 3012.4, 3014.9, 3041.5, 3044.9, 3050.6, 3065.0, 3095.0, 3098.7 cm⁻¹

data_image0

```
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

loop_

```
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

loop_

```
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
```

_atom_site_B_iso_or_equiv						
_atom_site_type_symbol						
Si1	1.0000	0.00800	0.21773	0.09919	Biso	1.000 Si
Si2	1.0000	0.78220	0.76398	0.10071	Biso	1.000 Si
Si3	1.0000	0.23963	0.98885	0.09345	Biso	1.000 Si
Si4	1.0000	0.23506	0.98541	0.88826	Biso	1.000 Si
Si5	1.0000	0.77923	0.75886	0.89395	Biso	1.000 Si
Si6	1.0000	0.00695	0.21799	0.89367	Biso	1.000 Si
Si7	1.0000	0.67679	0.55373	0.43129	Biso	1.000 Si
Al1	1.0000	0.44727	0.09825	0.43886	Biso	1.000 Al
Si8	1.0000	0.90615	0.32041	0.43326	Biso	1.000 Si
Si9	1.0000	0.90338	0.32243	0.22489	Biso	1.000 Si
Si10	1.0000	0.44484	0.09582	0.22182	Biso	1.000 Si
Si11	1.0000	0.67691	0.55369	0.22746	Biso	1.000 Si
Si12	1.0000	0.33982	0.87865	0.76729	Biso	1.000 Si
Si13	1.0000	0.11034	0.42095	0.76252	Biso	1.000 Si
Si14	1.0000	0.57295	0.65399	0.76590	Biso	1.000 Si
Si15	1.0000	0.58172	0.66250	0.56287	Biso	1.000 Si
Si16	1.0000	0.10985	0.42196	0.56075	Biso	1.000 Si
Si17	1.0000	0.34222	0.87475	0.55965	Biso	1.000 Si
Si18	1.0000	0.00648	0.75444	0.89420	Biso	1.000 Si
Si19	1.0000	0.23836	0.21810	0.89026	Biso	1.000 Si
Si20	1.0000	0.78049	0.98740	0.89179	Biso	1.000 Si
Si21	1.0000	0.77843	0.98912	0.09977	Biso	1.000 Si
Si22	1.0000	0.24134	0.22069	0.09440	Biso	1.000 Si
Si23	1.0000	0.01028	0.76189	0.10064	Biso	1.000 Si
Si24	1.0000	0.67737	0.09129	0.22948	Biso	1.000 Si
Si25	1.0000	0.90669	0.55048	0.22761	Biso	1.000 Si
Si26	1.0000	0.44958	0.32557	0.22335	Biso	1.000 Si
Si27	1.0000	0.44753	0.32712	0.43236	Biso	1.000 Si
Si28	1.0000	0.90625	0.54857	0.43349	Biso	1.000 Si
Si29	1.0000	0.67858	0.09402	0.42785	Biso	1.000 Si
Si30	1.0000	0.34802	0.43945	0.55767	Biso	1.000 Si
Si31	1.0000	0.57306	0.88642	0.56232	Biso	1.000 Si
Si32	1.0000	0.10714	0.65497	0.56328	Biso	1.000 Si
Si33	1.0000	0.10916	0.65327	0.76652	Biso	1.000 Si
Si34	1.0000	0.57065	0.88481	0.76644	Biso	1.000 Si
Si35	1.0000	0.34209	0.42559	0.76208	Biso	1.000 Si
O1	1.0000	0.90944	0.08723	0.11779	Biso	1.000 O
O2	1.0000	0.91477	0.79929	0.11397	Biso	1.000 O
O3	1.0000	0.20924	0.08903	0.10849	Biso	1.000 O
O4	1.0000	0.10446	0.88480	0.87367	Biso	1.000 O
O5	1.0000	0.81417	0.88989	0.87364	Biso	1.000 O
O6	1.0000	0.10710	0.18724	0.88020	Biso	1.000 O
O7	1.0000	0.57969	0.42339	0.44769	Biso	1.000 O
O8	1.0000	0.58573	0.13337	0.42293	Biso	1.000 O
O9	1.0000	0.87566	0.41934	0.45569	Biso	1.000 O
O10	1.0000	0.77156	0.22349	0.20962	Biso	1.000 O
O11	1.0000	0.48331	0.22730	0.20428	Biso	1.000 O
O12	1.0000	0.77537	0.51982	0.21802	Biso	1.000 O
O13	1.0000	0.23968	0.74926	0.78829	Biso	1.000 O
O14	1.0000	0.24245	0.45669	0.77865	Biso	1.000 O
O15	1.0000	0.54126	0.75378	0.77642	Biso	1.000 O
O16	1.0000	0.44759	0.57134	0.54846	Biso	1.000 O
O17	1.0000	0.12794	0.54835	0.55465	Biso	1.000 O
O18	1.0000	0.43767	0.83574	0.54830	Biso	1.000 O
O19	1.0000	0.99016	0.30158	0.16480	Biso	1.000 O
O20	1.0000	0.70083	0.65778	0.16292	Biso	1.000 O
O21	1.0000	0.34813	0.01165	0.15364	Biso	1.000 O
O22	1.0000	0.32088	0.96860	0.82476	Biso	1.000 O
O23	1.0000	0.67218	0.67207	0.83428	Biso	1.000 O
O24	1.0000	0.02785	0.32302	0.83123	Biso	1.000 O
O25	1.0000	0.66174	0.63900	0.49721	Biso	1.000 O
O26	1.0000	0.36521	0.97842	0.49788	Biso	1.000 O
O27	1.0000	0.01385	0.33771	0.49146	Biso	1.000 O
O28	1.0000	0.02355	0.66542	0.83447	Biso	1.000 O
O29	1.0000	0.32047	0.31854	0.82313	Biso	1.000 O
O30	1.0000	0.67392	0.96699	0.83154	Biso	1.000 O
O31	1.0000	0.68964	0.01049	0.15661	Biso	1.000 O
O32	1.0000	0.34312	0.30283	0.16087	Biso	1.000 O

O33	1.0000	0.98854	0.65914	0.16657	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36677	0.36192	0.48690	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00547	0.63837	0.49809	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64743	0.99117	0.49662	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13078	0.23031	0.11929	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76624	0.86946	0.13012	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13287	0.86992	0.12566	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24533	0.10619	0.86545	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88514	0.74156	0.86937	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88777	0.10891	0.86529	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79737	0.56277	0.45130	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42582	0.20763	0.46669	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80062	0.19841	0.45950	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91624	0.44247	0.19411	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55054	0.07512	0.22017	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55740	0.44623	0.19645	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46003	0.89143	0.79670	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09580	0.52971	0.78065	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46211	0.53381	0.79024	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60344	0.78794	0.54092	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22772	0.42897	0.53347	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22052	0.76739	0.53221	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00256	0.25236	0.99664	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74481	0.72927	0.99794	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27209	0.98376	0.99092	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67100	0.59045	0.32914	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38218	0.06074	0.32359	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93843	0.32565	0.32844	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33946	0.90802	0.66345	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07281	0.37347	0.66156	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61636	0.65387	0.66512	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00999	0.72359	0.99836	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28084	0.25855	0.99212	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74679	0.98622	0.99553	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69378	0.05353	0.32810	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94811	0.57879	0.33049	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41620	0.32378	0.32660	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34490	0.39333	0.65828	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60718	0.92906	0.66494	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07471	0.66671	0.66548	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30369	0.05098	0.32617	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.13921	0.09549	0.39047	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.13485	0.01628	0.33343	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.14355	0.20115	0.35663	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.05958	0.19299	0.36725	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.08925	0.89298	0.35548	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.13587	0.03496	0.26249	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.16217	0.21433	0.28549	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.11676	0.88103	0.42125	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.11954	0.85315	0.30744	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.95924	0.83412	0.35182	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.93114	0.85120	0.28816	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.92689	0.86594	0.40475	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.20420	0.27748	0.39279	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.12709	0.07937	0.48921	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.12148	0.00015	0.51165	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.05067	0.08056	0.51185	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.19956	0.15019	0.52297	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.91973	0.74222	0.35950	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 4-methyl-2-pentene:s; E= -962.380 eV; ZPVE= 4.991eV; frequencies =25.5, 42.7, 47.2, 52.4, 57.2, 90.2, 120.9, 163.4, 202.2, 235.9, 246.7, 266.3, 270.6, 314.4, 340.3, 352.1, 396.8, 443.3, 458.2, 560.7, 606.6, 648.6, 676.7, 710.2, 735.6, 790.5, 814.9, 894.5, 908.3, 949.1, 971.2, 1005.1, 1028.6, 1046.6, 1067.0, 1095.2, 1124.3, 1168.1, 1192.1, 1264.0, 1278.2, 1310.1, 1321.1, 1347.3, 1361.0, 1368.3, 1421.1, 1430.7, 1432.8, 1438.0, 1449.9, 1456.3, 1647.0, 2757.7, 2913.4, 2955.7, 2958.0, 2960.7, 3015.4, 3028.2, 3031.5, 3039.5, 3040.7, 3050.2, 3053.0, 3060.6 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.03638 0.21991 0.09580 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.80731 0.76232 0.09716 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.26644 0.99070 0.09312 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.26021 0.98803 0.88576 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.80501 0.75983 0.89022 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.03337 0.21958 0.89029 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.70084 0.55618 0.42807 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.47349 0.09686 0.42601 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.93411 0.32361 0.42831 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.93473 0.32576 0.22314 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.47168 0.09147 0.22116 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.70255 0.55318 0.22281 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.36656 0.88015 0.76658 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.13595 0.42262 0.76053 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.59876 0.65573 0.76083 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.60289 0.65928 0.55814 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.13470 0.42239 0.55848 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.36564 0.87839 0.55793 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.03190 0.75694 0.89016 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.26296 0.21803 0.88713 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.80580 0.98884 0.88951 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.80626 0.99034 0.09629 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.26645 0.21972 0.09387 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.03673 0.76243 0.09723 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.70273 0.09484 0.22381 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.93326 0.55353 0.22370 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.47218 0.32395 0.22199 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.46746 0.32620 0.42724 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.93023 0.55214 0.42988 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.70374 0.09145 0.42991 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.36778 0.43012 0.55539 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.60191 0.89171 0.55525 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.13204 0.65535 0.55974 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.13521 0.65521 0.76322 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.59648 0.88591 0.76228 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.36625 0.42585 0.76017 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.93789 0.08865 0.11117 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.93873 0.79578 0.11363 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.23398 0.08895 0.11189 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.13011 0.88702 0.86939 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.83991 0.89140 0.87242 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.13237 0.18805 0.87306 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.59680 0.42914 0.44553 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.60304 0.11478 0.45445 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.90432 0.42369 0.44861 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.80415 0.22570 0.21057 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.50136 0.22311 0.20886 Biso 1.000 O

O12	1.0000	0.80237	0.52185	0.20921	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.26661	0.75028	0.78418	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.26804	0.45891	0.77777	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.56560	0.75459	0.77163	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47282	0.55858	0.54415	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15338	0.54950	0.55154	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47438	0.86875	0.52959	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.01873	0.30499	0.15989	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72219	0.65644	0.15842	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37523	0.01126	0.14953	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34604	0.96923	0.82283	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.69768	0.67472	0.82974	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05228	0.32458	0.82840	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.68884	0.64660	0.49101	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36664	0.98461	0.50000	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03672	0.33764	0.49139	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05023	0.66843	0.83052	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.34799	0.32248	0.82405	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70155	0.96810	0.82562	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72244	0.01150	0.15861	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37114	0.30673	0.15533	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.01767	0.65904	0.16123	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37891	0.34491	0.48762	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03154	0.64152	0.49461	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69576	0.98928	0.49232	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15763	0.23187	0.11927	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79416	0.87001	0.12398	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.15846	0.87038	0.12174	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27111	0.10781	0.85806	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91098	0.74366	0.86293	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91308	0.11064	0.86379	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81887	0.56068	0.45286	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45567	0.20820	0.45470	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82582	0.20242	0.45051	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94543	0.44560	0.19524	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58526	0.08728	0.19497	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58323	0.44363	0.19637	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.48712	0.89396	0.79469	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12092	0.53152	0.77704	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48799	0.53495	0.78324	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60599	0.77711	0.53743	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25221	0.42956	0.53045	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.24856	0.76811	0.52937	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.03392	0.25591	0.99310	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77210	0.72733	0.99388	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29564	0.98909	0.98850	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70261	0.59265	0.32492	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.42927	0.04674	0.31996	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97464	0.33107	0.32571	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.36747	0.90990	0.66139	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.09933	0.37543	0.65958	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64305	0.65739	0.65993	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03405	0.72559	0.99399	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30105	0.25209	0.98994	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.76982	0.98744	0.99268	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70052	0.05482	0.32590	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.96964	0.58767	0.32724	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43371	0.32890	0.32334	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36227	0.38679	0.65733	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.62707	0.92792	0.65955	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10242	0.67069	0.66178	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.17360	0.03933	0.47352	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.14196	0.00966	0.37747	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.22212	0.04137	0.33992	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.13969	0.96828	0.54367	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.16510	0.00594	0.63853	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.22290	0.09783	0.64412	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.20327	0.96270	0.67408	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.08632	0.98436	0.67443	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.29398	0.98853	0.50407	Biso	1.000	H

H6	1.0000	0.08482	0.87705	0.53239	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.22627	0.13035	0.48700	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.08485	0.07560	0.34327	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.00397	0.04787	0.37794	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.06710	0.06043	0.27182	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.13889	0.16746	0.35355	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.06860	0.88286	0.35920	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.11107	0.83546	0.37835	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.04908	0.86854	0.28804	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.98746	0.84653	0.39524	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 3-methyl-2-pentene:h; E= -962.263 eV; ZPVE= 4.995eV; frequencies =38.8, 60.2, 64.1, 73.7, 95.1, 99.9, 112.6, 156.1, 183.1, 205.6, 243.5, 260.4, 277.8, 299.2, 306.3, 358.1, 392.5, 514.8, 546.7, 572.9, 596.8, 612.7, 686.0, 708.5, 728.8, 743.1, 775.7, 805.4, 830.7, 903.3, 979.5, 983.2, 1004.7, 1016.5, 1048.8, 1060.7, 1102.8, 1191.2, 1225.1, 1257.4, 1287.6, 1330.7, 1356.0, 1359.2, 1370.0, 1418.5, 1422.9, 1429.9, 1439.2, 1444.1, 1444.6, 1458.6, 1632.2, 2852.5, 2955.7, 2962.2, 2971.3, 2974.1, 3015.5, 3019.6, 3022.2, 3036.1, 3040.8, 3054.8, 3064.1, 3085.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00523	0.21422	0.09392	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77984	0.76084	0.09552	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23773	0.98592	0.08760	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23313	0.98323	0.88286	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77741	0.75706	0.88743	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00391	0.21496	0.88767	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67336	0.55165	0.42516	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44580	0.09590	0.43338	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90416	0.31686	0.42724	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90090	0.31903	0.21944	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44240	0.09274	0.21644	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67401	0.55115	0.22135	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33684	0.87607	0.76119	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10722	0.41826	0.75705	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56980	0.65099	0.76033	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57902	0.65870	0.55703	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10645	0.41948	0.55576	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33902	0.87158	0.55397	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00270	0.75171	0.88837	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23388	0.21418	0.88410	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77674	0.98488	0.88614	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77477	0.98565	0.09396	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23712	0.21627	0.08956	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00638	0.75811	0.09524	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67469	0.08806	0.22403	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90280	0.54746	0.22143	Biso	1.000	Si

Si26	1.0000	0.44466	0.32108	0.21848	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44028	0.32226	0.42632	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90151	0.54497	0.42792	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67633	0.09092	0.42269	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34371	0.43430	0.55197	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56907	0.88233	0.55650	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10250	0.65200	0.55803	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10584	0.65061	0.76084	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56710	0.88144	0.76065	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33884	0.42230	0.75648	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90563	0.08404	0.11189	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91166	0.79565	0.11322	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20610	0.08499	0.10435	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10253	0.88190	0.87034	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81104	0.88787	0.86784	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10270	0.18280	0.87180	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57115	0.42313	0.43926	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58457	0.13166	0.41849	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87370	0.41618	0.44821	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76923	0.22006	0.20409	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47997	0.22405	0.19884	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77174	0.51666	0.20881	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23657	0.74665	0.78162	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23939	0.45385	0.77258	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53754	0.75040	0.77080	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44616	0.56469	0.54129	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12310	0.54534	0.54972	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43356	0.83152	0.54263	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98727	0.29914	0.15813	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69502	0.65320	0.15537	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34494	0.00754	0.14901	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31799	0.96588	0.81878	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66877	0.66975	0.82931	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02502	0.32095	0.82630	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66129	0.63843	0.49144	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36310	0.97514	0.49161	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01170	0.33488	0.48592	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02116	0.66285	0.82966	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31726	0.31598	0.81844	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67026	0.96404	0.82563	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68623	0.00655	0.15146	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34077	0.30010	0.15374	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98676	0.65532	0.16041	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35637	0.35283	0.48104	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00098	0.63506	0.49243	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64393	0.98722	0.49098	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12684	0.22541	0.11653	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76275	0.86593	0.12374	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13060	0.86558	0.11674	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24205	0.10309	0.85881	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88321	0.74085	0.85977	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88351	0.10696	0.86011	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79105	0.55561	0.44788	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42458	0.20532	0.46160	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79891	0.19477	0.45410	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91347	0.43939	0.19031	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54858	0.07293	0.21373	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55282	0.44297	0.19506	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45666	0.88834	0.79087	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09294	0.52726	0.77481	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45912	0.53052	0.78428	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59828	0.78319	0.53507	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22541	0.42882	0.52933	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21631	0.76471	0.52741	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00242	0.24910	0.99107	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74704	0.72764	0.99191	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27280	0.98450	0.98518	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67408	0.59182	0.32294	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38184	0.05751	0.31844	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93664	0.32107	0.32262	Biso	1.000	O

O61	1.0000	0.33697	0.90617	0.65746	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06876	0.37022	0.65632	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61342	0.65098	0.65957	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00060	0.71869	0.99260	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27344	0.25279	0.98662	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74262	0.98305	0.98985	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69057	0.05023	0.32276	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94118	0.57787	0.32477	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40602	0.31501	0.32086	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34135	0.38916	0.65286	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60338	0.92519	0.65903	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06998	0.66393	0.66017	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.29952	0.03862	0.32126	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.12465	0.02120	0.48493	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.16947	0.97528	0.50150	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.16959	0.10308	0.51993	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.13413	0.97234	0.32473	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.12979	0.04289	0.38632	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11874	0.14282	0.35872	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.12729	0.99193	0.25521	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.12216	0.15395	0.28641	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.18404	0.22193	0.38947	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.03666	0.13100	0.38196	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.00178	0.95361	0.51891	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.95604	0.86943	0.48768	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.95426	0.99763	0.50503	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.12334	0.85875	0.34178	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.03488	0.79154	0.33140	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.14674	0.84947	0.40953	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.17424	0.84000	0.29547	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.00053	0.94120	0.59114	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 3-hexene:p; E= -962.408 eV; ZPVE= 5.005eV;
frequencies =13.0, 39.2, 44.4, 69.6, 75.5, 76.0, 89.7, 147.1, 170.6, 199.2, 246.6,
270.5, 292.1, 311.7, 351.4, 403.2, 423.2, 458.2, 491.2, 604.6, 647.2, 664.6, 673.2,
713.7, 764.8, 777.7, 853.9, 884.2, 896.5, 987.5, 1010.8, 1016.1, 1051.6, 1059.9,
1071.0, 1091.1, 1151.9, 1223.5, 1237.1, 1244.9, 1276.4, 1290.3, 1305.8, 1334.1,
1354.7, 1355.3, 1429.5, 1431.0, 1442.6, 1443.2, 1449.8, 1450.6, 1645.7, 2687.1,
2946.0, 2950.1, 2960.7, 2962.9, 2987.0, 2991.5, 3029.0, 3032.2, 3034.2, 3044.2,
3048.3, 3051.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.00784	0.20863	0.10082	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77846	0.75099	0.10202	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23782	0.98002	0.09830	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23139	0.97691	0.89041	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77612	0.74819	0.89576	Biso	1.000	Si

Si6	1.0000	0.00477	0.20867	0.89543	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67229	0.54338	0.43401	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44588	0.08562	0.43052	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90663	0.31237	0.43334	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90785	0.31540	0.22884	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44471	0.08137	0.22507	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67471	0.54163	0.22823	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33868	0.87078	0.77073	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10798	0.41202	0.76633	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57031	0.64477	0.76595	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57442	0.64763	0.56301	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10606	0.41084	0.56419	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33826	0.86735	0.56299	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00424	0.74628	0.89537	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23571	0.20786	0.89247	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77817	0.97803	0.89442	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77887	0.97975	0.10156	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23896	0.20960	0.09858	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00901	0.75239	0.10246	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67488	0.08474	0.22851	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90505	0.54276	0.22891	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44399	0.31343	0.22710	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43831	0.31415	0.43254	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90216	0.54106	0.43515	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67513	0.08047	0.43477	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33935	0.41904	0.56035	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57472	0.88050	0.56035	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10373	0.64399	0.56500	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10718	0.64476	0.76818	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56863	0.87522	0.76724	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33828	0.41497	0.76538	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91067	0.07715	0.11750	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91038	0.78523	0.11650	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20584	0.07867	0.11668	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10151	0.87617	0.87256	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81156	0.87993	0.87802	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10540	0.17918	0.87973	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56803	0.41639	0.45144	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57544	0.10478	0.46077	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87738	0.41293	0.45314	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77703	0.21563	0.21700	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47318	0.21270	0.21361	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77377	0.50936	0.21374	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23851	0.74084	0.78795	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23971	0.44730	0.78366	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53737	0.74377	0.77697	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44417	0.54757	0.54847	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12418	0.53764	0.55661	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44664	0.85650	0.53580	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99091	0.29408	0.16498	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69532	0.64601	0.16478	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34746	0.00117	0.15386	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31848	0.95935	0.82805	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66978	0.66368	0.83426	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02371	0.31411	0.83407	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66029	0.63413	0.49643	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.33906	0.97159	0.50282	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00775	0.32530	0.49767	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02209	0.65747	0.83571	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32060	0.31139	0.82872	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67315	0.95694	0.83129	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69542	0.00158	0.16376	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34273	0.29636	0.16081	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98878	0.64854	0.16640	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35012	0.33326	0.49301	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00409	0.63117	0.49915	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66754	0.97822	0.49689	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13007	0.22214	0.12258	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76522	0.85865	0.12878	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13007	0.86035	0.12878	Biso	1.000	O

O40	1.0000	0.24218	0.09676	0.86313	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88245	0.73196	0.86982	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88581	0.09899	0.86719	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79025	0.54799	0.45945	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42501	0.19521	0.45907	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79778	0.19117	0.45424	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91905	0.43564	0.20141	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55857	0.07836	0.19741	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55490	0.43314	0.20128	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45916	0.88382	0.79837	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09418	0.52165	0.78263	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45962	0.52423	0.78894	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.57930	0.76625	0.54205	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22353	0.41818	0.53591	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22097	0.75641	0.53571	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00227	0.24323	0.99826	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74121	0.71496	0.99913	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26493	0.97649	0.99346	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67515	0.57995	0.33072	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40439	0.03605	0.32399	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94873	0.32062	0.33113	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34000	0.90166	0.66578	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07120	0.36454	0.66546	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61382	0.64562	0.66499	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00944	0.71678	0.99922	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27545	0.24209	0.99495	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74375	0.97847	0.99779	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.66978	0.04347	0.33061	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94049	0.57811	0.33249	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40589	0.31845	0.32853	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33450	0.37657	0.66245	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60088	0.91704	0.66458	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07279	0.65854	0.66683	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.11865	0.97910	0.63371	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.19809	0.01830	0.67243	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.08014	0.88646	0.64049	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10759	0.94113	0.46828	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.14459	0.01292	0.53801	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.05720	0.84968	0.48158	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.12202	0.97505	0.37230	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.19284	0.10442	0.52472	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.16375	0.93503	0.33666	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.17832	0.06743	0.36634	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.00749	0.93936	0.32786	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.95068	0.84695	0.33176	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.01906	0.96334	0.25737	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.26442	0.97255	0.50443	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.03895	0.01714	0.67307	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.07638	0.10969	0.66823	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.02200	0.99364	0.74349	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.95761	0.97777	0.63741	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.96443	0.97976	0.36038	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-hexene:d; E= -962.157 eV; ZPVE= 5.028eV;
frequencies =43.8, 60.5, 70.7, 91.7, 104.9, 118.2, 137.2, 157.8, 184.0, 237.6,
248.6, 269.0, 272.1, 308.4, 336.3, 350.0, 445.7, 456.0, 479.0, 606.2, 613.5, 654.9,
679.1, 708.0, 737.2, 777.9, 859.7, 872.8, 905.9, 983.1, 991.2, 1027.0, 1037.3,
1063.7, 1085.4, 1089.0, 1143.7, 1171.0, 1211.9, 1231.5, 1274.8, 1289.6, 1322.1,
1336.4, 1360.4, 1367.1, 1415.0, 1424.4, 1435.0, 1444.0, 1450.9, 1459.9, 1651.4,
2931.4, 2936.2, 2947.5, 2974.6, 2978.2, 2983.6, 2994.4, 3019.0, 3026.6, 3032.7,
3047.4, 3087.3, 3088.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.02210 0.22124 0.10731 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79173 0.76381 0.10721 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.25394 0.99207 0.10281 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.24847 0.99069 0.89871 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.79149 0.76369 0.90061 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.02020 0.22248 0.90107 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.68692 0.55906 0.43853 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.46430 0.10304 0.43837 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.92063 0.32545 0.43820 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.92153 0.32869 0.23372 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.46021 0.09638 0.23032 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68817 0.55668 0.23364 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.35316 0.88582 0.77493 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.12190 0.42606 0.77235 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58371 0.65895 0.77185 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58782 0.66102 0.56868 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.12009 0.42456 0.57001 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35139 0.88043 0.56691 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01818 0.76117 0.90094 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24907 0.22320 0.89960 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.79060 0.99263 0.90072 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78968 0.99230 0.10634 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25200 0.22376 0.10459 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.02113 0.76461 0.10789 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68727 0.09689 0.23406 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91791 0.55527 0.23349 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45701 0.32605 0.23264 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45277 0.32790 0.43832 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91390 0.55149 0.44050 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68917 0.09346 0.44082 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35412 0.43314 0.56621 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.58752 0.89370 0.56535 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11703 0.65643 0.57022 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.12165 0.65892 0.77359 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.58214 0.88984 0.77206 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.35313 0.42901 0.77156 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.92089 0.09104 0.12104 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.92264 0.79682 0.12582 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.22517 0.09377 0.11546 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.11744 0.89161 0.88269 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.82536 0.89539 0.88549 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.11832 0.19036 0.88078 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.58210 0.43204 0.45367 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59232 0.12032 0.47097 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.88714 0.42281 0.45933 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.79151 0.22672 0.22338 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48698 0.22650 0.21514 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.78763 0.52520 0.21794 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.25307 0.75580 0.79180 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.25346 0.46008 0.78846 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.55098 0.75834 0.78133 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.45749 0.56206 0.55253 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.14120 0.55246 0.56134 Biso 1.000 O
O18 1.0000 0.45944 0.86903 0.53924 Biso 1.000 O

O19	1.0000	0.00506	0.30803	0.16989	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70538	0.65858	0.16860	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35830	0.01088	0.16444	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33179	0.97464	0.83079	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68441	0.67982	0.83949	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03806	0.32815	0.84030	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67448	0.64833	0.50240	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35260	0.98423	0.50518	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02194	0.33984	0.50298	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03772	0.67359	0.84108	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33463	0.32425	0.83400	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68777	0.97176	0.83508	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70669	0.01169	0.17101	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35586	0.31033	0.16687	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00397	0.66202	0.17244	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36515	0.34812	0.49828	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01636	0.64084	0.50447	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.68134	0.99037	0.50178	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14040	0.22865	0.13445	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77826	0.87177	0.13198	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14259	0.87392	0.13083	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26032	0.11271	0.87903	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89831	0.74941	0.87206	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89857	0.11447	0.87604	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80371	0.56151	0.46447	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.44284	0.21153	0.46863	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81405	0.20209	0.45736	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92931	0.44699	0.20450	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57295	0.09286	0.20016	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56784	0.44696	0.20987	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47316	0.89879	0.80424	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10948	0.53638	0.78985	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47342	0.53888	0.79697	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59311	0.77986	0.54860	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23659	0.42922	0.54298	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23267	0.77072	0.54062	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02465	0.25871	0.00435	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75848	0.72787	0.00382	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28676	0.98523	0.99978	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69174	0.59802	0.33570	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.42590	0.05665	0.33102	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.96398	0.33732	0.33598	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35597	0.91587	0.66960	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08362	0.37939	0.67139	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62557	0.65703	0.67079	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01689	0.72709	0.00463	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28414	0.26447	0.00168	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75203	0.99123	0.00324	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67807	0.05558	0.33650	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95248	0.58691	0.33766	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41698	0.32565	0.33436	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35258	0.39291	0.66843	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61276	0.93159	0.66927	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08565	0.66979	0.67209	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.13935	0.88108	0.35930	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.09279	0.80177	0.39660	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.09146	0.87318	0.29827	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.22096	0.89124	0.33744	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10050	0.97625	0.48807	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.15382	0.98087	0.41146	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.04625	0.89287	0.51872	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.10098	0.07581	0.53095	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.20586	0.06446	0.38069	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.01643	0.06667	0.52043	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.16210	0.15396	0.49615	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.12729	0.08916	0.63081	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.24080	0.09769	0.65186	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.30797	0.15766	0.60727	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.23549	0.01486	0.64454	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.05862	0.01776	0.66760	Biso	1.000	H

H11	1.0000	0.12701	0.16582	0.65391	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.26823	0.12569	0.72007	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.27729	0.98047	0.49684	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-tert-butyl-propylene: ^; E= -978.891 eV; ZPVE= 5.727eV; frequencies =34.5, 49.2, 56.9, 64.3, 72.0, 86.1, 131.7, 195.3, 204.7, 253.3, 255.4, 273.0, 296.6, 297.1, 310.1, 347.7, 352.1, 371.6, 389.2, 460.9, 477.8, 539.5, 566.4, 593.1, 613.1, 645.7, 671.4, 694.7, 718.1, 759.8, 796.7, 834.1, 874.5, 911.6, 919.5, 930.9, 932.9, 977.6, 999.7, 1023.2, 1028.1, 1160.1, 1172.3, 1183.3, 1197.1, 1274.0, 1338.6, 1345.0, 1354.0, 1371.5, 1386.5, 1417.2, 1427.5, 1430.5, 1439.8, 1439.9, 1450.9, 1456.5, 1471.8, 1604.3, 2961.9, 2965.4, 2967.1, 2971.3, 3019.6, 3025.5, 3032.7, 3035.6, 3039.8, 3045.5, 3046.5, 3054.8, 3061.4, 3079.3, 3148.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.02227	0.23918	0.09364	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79442	0.78407	0.09491	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25349	0.01056	0.08637	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24891	0.00779	0.88140	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79330	0.78192	0.88674	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02028	0.23967	0.88697	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68899	0.57398	0.42353	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.46171	0.11975	0.43262	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91994	0.34231	0.42638	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91776	0.34420	0.21916	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45701	0.11371	0.21647	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69061	0.57551	0.22079	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35269	0.89960	0.76117	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12305	0.44298	0.75672	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58570	0.67599	0.75969	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59366	0.68326	0.55665	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12264	0.44343	0.55549	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35650	0.89425	0.55356	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01922	0.77715	0.88678	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24990	0.23930	0.88280	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79335	0.00968	0.88587	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79217	0.01023	0.09390	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25417	0.24226	0.08826	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02267	0.78277	0.09415	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69156	0.11347	0.22295	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.92127	0.57441	0.22120	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45971	0.34477	0.21889	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45650	0.34685	0.42408	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91914	0.57206	0.42673	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69221	0.11693	0.42184	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.36038	0.46153	0.55176	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58753	0.90775	0.55614	Biso	1.000	Si

Si32	1.0000	0.12126	0.67743	0.55692	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12308	0.67613	0.76022	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58440	0.90714	0.75985	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35474	0.44823	0.75636	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92310	0.10870	0.11178	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92574	0.81710	0.11233	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22444	0.11132	0.10230	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11812	0.90743	0.86747	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82781	0.91293	0.86683	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11851	0.20698	0.86978	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59042	0.44266	0.43323	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60131	0.15885	0.41700	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88970	0.44226	0.44506	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78599	0.24557	0.20329	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49227	0.24499	0.20374	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.79049	0.54415	0.20800	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25352	0.77045	0.78434	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25531	0.47960	0.77337	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55409	0.77589	0.76965	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45893	0.59414	0.54291	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14052	0.56983	0.55082	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45133	0.85424	0.54410	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00356	0.32422	0.15713	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70846	0.67595	0.15396	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36030	0.03063	0.14773	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33416	0.99059	0.81754	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68500	0.69491	0.82831	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04089	0.34602	0.82625	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67043	0.65566	0.49082	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38405	0.00035	0.49324	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02651	0.36046	0.48611	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03698	0.68805	0.82781	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33320	0.34098	0.81711	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68647	0.98889	0.82596	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70401	0.03168	0.15126	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35924	0.32604	0.15122	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00545	0.68027	0.15852	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38050	0.38408	0.48206	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01845	0.65972	0.49250	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65908	0.01278	0.48991	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14410	0.25103	0.11672	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77972	0.89040	0.12417	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14526	0.89199	0.11750	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25938	0.12861	0.85870	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89879	0.76500	0.85976	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89958	0.13197	0.85970	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80897	0.58329	0.44738	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43573	0.22707	0.45729	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81452	0.22057	0.45375	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93086	0.46517	0.19165	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56542	0.09763	0.21080	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57074	0.46473	0.19588	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47395	0.91437	0.78941	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10744	0.55147	0.77296	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47493	0.55614	0.78475	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61917	0.81012	0.53428	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.24016	0.45072	0.52715	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23500	0.78824	0.52303	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01970	0.27337	0.99058	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76182	0.75265	0.99109	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28677	0.00625	0.98396	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69075	0.61723	0.32207	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39700	0.07132	0.31833	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95342	0.34456	0.32215	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34963	0.92568	0.65704	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08589	0.39380	0.65611	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62869	0.67484	0.65890	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01954	0.74578	0.99119	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28872	0.27908	0.98520	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75996	0.00730	0.98981	Biso	1.000	O

O67	1.0000	0.70677	0.07596	0.32207	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.96039	0.60753	0.32414	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41745	0.34108	0.31992	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35743	0.41621	0.65261	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.62274	0.95148	0.65851	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.09157	0.69313	0.65906	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.31172	0.03096	0.32243	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.09721	0.99923	0.37028	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.14595	0.93572	0.35304	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.07090	0.05546	0.29539	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.08032	0.02478	0.23052	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.12778	0.14805	0.29730	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.98413	0.04122	0.29991	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.06173	0.01420	0.46351	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.10925	0.97135	0.53673	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.20235	0.01563	0.53556	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.07685	0.87980	0.53089	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.08273	0.98617	0.60199	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.93067	0.94464	0.46819	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.88994	0.97405	0.42043	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.90266	0.95287	0.53493	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.89933	0.85419	0.45593	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.15498	0.91537	0.28424	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.16402	0.89115	0.40486	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.10101	0.13993	0.48143	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.19379	0.19221	0.47848	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.07378	0.14876	0.54830	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.06467	0.17463	0.43433	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 11-methyl-isopropyl-propylene:o; E= -978.724 eV;
 ZPVE= 5.755eV; frequencies =33.6, 52.5, 60.4, 73.4, 82.8, 111.4, 114.2, 165.1,
 174.8, 208.2, 228.6, 256.9, 263.6, 271.7, 291.0, 306.2, 320.4, 339.1, 362.1, 459.7,
 522.5, 542.2, 565.6, 570.9, 596.0, 629.4, 693.5, 722.2, 723.6, 798.7, 835.5, 874.4,
 903.3, 937.9, 942.0, 989.3, 1012.2, 1020.0, 1035.8, 1105.1, 1116.6, 1138.0, 1192.8,
 1199.8, 1279.5, 1305.6, 1339.2, 1348.7, 1362.8, 1367.5, 1378.6, 1421.2, 1425.7,
 1429.2, 1436.0, 1440.3, 1448.1, 1453.4, 1455.4, 1641.8, 2931.4, 2952.7, 2963.2,
 2971.5, 2993.4, 3000.2, 3032.3, 3041.6, 3044.7, 3048.0, 3055.9, 3074.6, 3103.6,
 3116.5, 3124.7 cm⁻¹

 data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label						
_atom_site_occupancy						
_atom_site_fract_x						
_atom_site_fract_y						
_atom_site_fract_z						
_atom_site_thermal_displace_type						
_atom_site_B_iso_or_equiv						
_atom_site_type_symbol						
Si1	1.0000	0.01463	0.22645	0.09267	Biso	1.000 Si
Si2	1.0000	0.78948	0.77149	0.09485	Biso	1.000 Si
Si3	1.0000	0.24649	0.99681	0.08695	Biso	1.000 Si
Si4	1.0000	0.24308	0.99536	0.88274	Biso	1.000 Si
Si5	1.0000	0.78671	0.76827	0.88716	Biso	1.000 Si
Si6	1.0000	0.01378	0.22793	0.88825	Biso	1.000 Si
Si7	1.0000	0.68273	0.55920	0.42474	Biso	1.000 Si

All	1.0000	0.45616	0.10776	0.43336	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91145	0.32750	0.42782	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90913	0.32922	0.21923	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45172	0.10387	0.21562	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68279	0.56126	0.22008	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34696	0.88771	0.76042	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11607	0.42937	0.75663	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57971	0.66249	0.75983	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58631	0.66918	0.55718	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11637	0.42983	0.55474	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35183	0.88151	0.55481	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01166	0.76186	0.88804	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24271	0.22461	0.88382	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78477	0.99564	0.88682	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78237	0.99554	0.09240	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24433	0.22444	0.09030	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01484	0.76631	0.09328	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68340	0.09858	0.22336	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90913	0.55616	0.21950	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45296	0.33153	0.21851	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45127	0.33240	0.42587	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90947	0.55528	0.42829	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68448	0.10315	0.42218	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35387	0.44717	0.55309	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57972	0.89283	0.55637	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11393	0.66231	0.55630	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11515	0.66167	0.75894	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57793	0.89377	0.75964	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34810	0.43387	0.75730	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91319	0.09611	0.10519	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92134	0.80546	0.11138	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21184	0.09297	0.10727	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11277	0.89235	0.87389	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81952	0.89900	0.86818	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11219	0.19541	0.87165	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58550	0.42747	0.43439	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59602	0.14818	0.41659	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88007	0.42610	0.44932	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77779	0.23032	0.20274	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48967	0.23533	0.19873	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77852	0.52481	0.20333	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24608	0.75797	0.77885	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24781	0.46421	0.77341	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54899	0.76298	0.77008	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45099	0.58055	0.54582	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13689	0.55717	0.54800	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44292	0.83677	0.54635	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99622	0.30865	0.15961	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70433	0.66503	0.15577	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35276	0.01787	0.14956	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32711	0.97615	0.81901	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67866	0.68067	0.82863	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03213	0.33100	0.82446	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66077	0.64051	0.48980	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38068	0.98432	0.49005	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01988	0.34655	0.48556	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03064	0.67528	0.82692	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32752	0.32836	0.82006	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68110	0.97748	0.82402	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69542	0.01603	0.15229	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34856	0.30900	0.15383	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99553	0.66549	0.16063	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37633	0.37253	0.48217	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01435	0.64566	0.48864	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64809	0.99776	0.48951	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13471	0.23493	0.11622	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77406	0.87765	0.12273	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14039	0.87358	0.11118	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24947	0.11337	0.85559	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89342	0.75368	0.85927	Biso	1.000	O

O42	1.0000	0.89268	0.11846	0.86483	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80242	0.57024	0.45270	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42896	0.21320	0.46238	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80761	0.20467	0.45509	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92234	0.44944	0.18894	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55741	0.08338	0.21187	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55996	0.45442	0.19519	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46675	0.89953	0.78971	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10231	0.53862	0.77481	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46819	0.54291	0.78438	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61265	0.79624	0.53422	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23287	0.43410	0.52781	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22834	0.77601	0.52833	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01640	0.26727	0.99082	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75568	0.73747	0.99144	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28602	0.00251	0.98485	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68741	0.60133	0.32252	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39223	0.06862	0.31819	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94299	0.33194	0.32295	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34877	0.92002	0.65692	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07859	0.38234	0.65562	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62315	0.66164	0.65907	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00617	0.72344	0.99131	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28128	0.25878	0.98710	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74462	0.98914	0.98937	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69906	0.06199	0.32257	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94265	0.58457	0.32377	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41445	0.32466	0.32098	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35048	0.40050	0.65368	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61565	0.93781	0.65823	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07839	0.67238	0.65791	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30774	0.03463	0.32004	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10102	0.97704	0.39216	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.12934	0.93174	0.32358	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.11905	0.96093	0.48800	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.17076	0.92119	0.49783	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.03623	0.90724	0.52020	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.15951	0.04271	0.52338	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.04146	0.04532	0.37758	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.95600	0.00214	0.30123	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.89473	0.91110	0.30789	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.99760	0.01592	0.23626	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.90798	0.04736	0.30080	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.12713	0.17220	0.36729	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.18638	0.20503	0.42342	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.08377	0.22186	0.36348	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.17707	0.18785	0.30625	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.17095	0.84807	0.32789	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.10605	0.94573	0.25724	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.99340	0.03565	0.43922	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.21659	0.85366	0.38913	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.22529	0.85639	0.27112	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.09861	0.76143	0.32412	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 3-methyl-2-hexene:>; E= -978.990 eV; ZPVE= 5.740eV;
frequencies =30.1, 37.3, 46.6, 64.1, 75.9, 91.5, 98.0, 105.2, 146.6, 174.9, 203.5,
230.9, 257.7, 269.8, 272.8, 297.5, 346.7, 356.2, 412.2, 513.9, 543.9, 560.0, 596.3,
610.2, 684.5, 703.2, 726.0, 727.9, 777.0, 803.7, 827.8, 855.1, 884.6, 943.8, 995.2,
1007.1, 1020.1, 1027.6, 1053.4, 1076.0, 1107.1, 1188.4, 1218.2, 1237.1, 1261.2,
1284.6, 1318.1, 1336.2, 1355.6, 1359.0, 1368.7, 1417.7, 1423.6, 1429.2, 1435.5,
1439.9, 1441.6, 1443.8, 1457.0, 1631.0, 2888.6, 2949.1, 2952.6, 2957.5, 2964.0,
2971.3, 2982.8, 3017.4, 3018.7, 3022.2, 3026.9, 3029.0, 3048.3, 3064.4, 3084.9 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.00566 0.21788 0.09403 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78007 0.76451 0.09553 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.23781 0.98988 0.08794 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23343 0.98749 0.88278 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.77770 0.76103 0.88716 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.00421 0.21870 0.88754 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67429 0.55615 0.42493 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.44705 0.09995 0.43333 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.90455 0.32033 0.42717 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.90112 0.32266 0.21943 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.44253 0.09610 0.21656 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67469 0.55500 0.22143 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.33685 0.87986 0.76115 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.10707 0.42198 0.75715 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57025 0.65512 0.76048 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.57952 0.66248 0.55717 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.10705 0.42324 0.55588 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.33949 0.87530 0.55419 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00313 0.75582 0.88817 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23425 0.21808 0.88400 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.77717 0.98867 0.88595 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.77547 0.98922 0.09416 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.23741 0.21996 0.08998 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.00678 0.76177 0.09508 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67502 0.09170 0.22378 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.90328 0.55122 0.22139 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44482 0.32445 0.21881 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44097 0.32605 0.42630 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90176 0.54837 0.42786 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.67696 0.09454 0.42227 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34431 0.43800 0.55226 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.56966 0.88629 0.55682 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10333 0.65586 0.55780 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.10616 0.65464 0.76061 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.56797 0.88605 0.76060 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.33901 0.42659 0.75688 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.90631 0.08760 0.11218 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91181 0.79899 0.11309 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.20624 0.08880 0.10563 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10289 0.88605 0.87028 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81091 0.89150 0.86644 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10322 0.18696 0.87123 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57161 0.42771 0.43812 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58576 0.13600 0.41763 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87366 0.41942 0.44794 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.76933 0.22387 0.20407 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48010 0.22743 0.19896 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.77220 0.52028 0.20865 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.23693 0.75033 0.78181 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.23919 0.45759 0.77296 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.53898 0.75521 0.77079 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.44670 0.56839 0.54127 Biso 1.000 O

O17	1.0000	0.12435	0.54940	0.55017	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43384	0.83478	0.54418	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98729	0.30276	0.15791	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69499	0.65617	0.15467	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34508	0.01097	0.14911	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31842	0.96959	0.81923	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66896	0.67303	0.82943	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02484	0.32483	0.82650	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66198	0.64256	0.49149	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36514	0.97908	0.49158	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01230	0.33901	0.48588	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02142	0.66704	0.82923	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31802	0.32059	0.81903	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67036	0.96865	0.82619	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68672	0.01055	0.15096	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34154	0.30422	0.15363	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98722	0.65897	0.16023	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35731	0.35631	0.48176	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00146	0.63813	0.49235	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64342	0.99059	0.49054	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12742	0.22960	0.11693	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76313	0.86951	0.12453	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13084	0.86933	0.11683	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24253	0.10724	0.85792	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88352	0.74480	0.85981	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88397	0.11066	0.85988	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79144	0.55919	0.44810	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42666	0.20978	0.46191	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79966	0.19799	0.45405	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91396	0.44313	0.19046	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54868	0.07621	0.21382	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55323	0.44650	0.19629	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45701	0.89237	0.79004	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09267	0.53100	0.77446	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45900	0.53520	0.78459	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59885	0.78708	0.53548	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22584	0.43214	0.52940	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21689	0.76868	0.52680	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00281	0.25238	0.99107	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74751	0.73261	0.99174	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27273	0.98944	0.98533	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67611	0.59715	0.32278	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38199	0.06117	0.31865	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93705	0.32455	0.32254	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33593	0.90983	0.65748	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06904	0.37376	0.65638	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61371	0.65454	0.65974	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00122	0.72268	0.99239	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27313	0.25542	0.98681	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74385	0.98621	0.98990	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69130	0.05377	0.32239	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94151	0.58170	0.32475	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40527	0.31750	0.32108	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34173	0.39330	0.65333	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60515	0.93006	0.65909	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07098	0.66854	0.65985	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30001	0.04284	0.32167	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.13535	0.03317	0.48805	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.17030	0.97743	0.50203	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.19396	0.11549	0.51900	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.13237	0.97765	0.32759	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.13211	0.05015	0.38942	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.11947	0.14920	0.36169	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.12227	0.99589	0.25837	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.12293	0.16004	0.28935	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.18384	0.22883	0.39234	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.03673	0.13606	0.38442	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.01867	0.98370	0.53355	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.95856	0.90274	0.50150	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.98433	0.04096	0.52340	Biso	1.000	H

C6	1.0000	0.02553	0.96502	0.63292	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.08478	0.04475	0.66670	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.05545	0.90451	0.64482	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.94239	0.93106	0.66528	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.12176	0.86404	0.34414	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.03292	0.79701	0.33506	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.14688	0.85487	0.41130	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.17115	0.84479	0.29663	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-methyl-2-hexene:s; E= -979.144 eV; ZPVE= 5.742eV;
frequencies =38.0, 51.8, 52.9, 67.0, 71.0, 95.2, 102.3, 113.7, 133.4, 165.3, 216.3,
243.8, 270.1, 293.6, 311.8, 313.3, 351.7, 374.4, 415.5, 461.3, 476.5, 558.1, 604.1,
650.1, 674.7, 705.8, 725.6, 758.5, 780.0, 825.1, 873.2, 883.1, 928.8, 970.2, 983.0,
1036.2, 1055.8, 1063.9, 1073.9, 1077.1, 1108.5, 1188.4, 1208.1, 1235.6, 1254.1,
1281.9, 1320.0, 1327.5, 1358.3, 1359.8, 1362.1, 1410.7, 1420.9, 1431.2, 1434.1,
1442.8, 1444.6, 1446.2, 1454.8, 1637.3, 2604.2, 2942.5, 2951.3, 2958.0, 2960.8,
2962.6, 2975.7, 2999.8, 3015.5, 3018.2, 3031.4, 3038.1, 3045.8, 3074.3, 3078.4 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.04646	0.23548	0.10272	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.81840	0.77791	0.10401	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.27739	0.00578	0.09804	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.27029	0.00440	0.89146	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.81488	0.77620	0.89688	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.04291	0.23628	0.89818	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.71007	0.56944	0.43515	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.48288	0.11127	0.43221	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.94333	0.33768	0.43546	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.94558	0.34079	0.23061	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.48311	0.10775	0.22574	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.71249	0.56796	0.22908	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.37606	0.89752	0.77050	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.14562	0.43856	0.76803	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.60814	0.67183	0.76763	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.61171	0.67345	0.56488	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.14331	0.43542	0.56546	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.37519	0.89288	0.56308	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.04084	0.77225	0.89610	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.27206	0.23365	0.89401	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.81417	0.00463	0.89713	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.81501	0.00503	0.10287	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.27579	0.23376	0.10078	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.04642	0.77644	0.10271	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.71207	0.10988	0.23011	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.94292	0.56792	0.22971	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.48246	0.33984	0.22782	Biso	1.000	Si

Si27	1.0000	0.47731	0.34047	0.43402	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.93950	0.56607	0.43635	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.71157	0.10580	0.43669	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.37716	0.44426	0.56263	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.61239	0.90630	0.56149	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.14186	0.66838	0.56536	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.14516	0.67105	0.76888	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.60659	0.90226	0.76808	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.37604	0.44131	0.76725	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.94634	0.10459	0.11609	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.94980	0.81128	0.12098	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.24424	0.10317	0.11850	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.14007	0.90253	0.87772	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.84912	0.90779	0.88007	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.14165	0.20452	0.88064	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.60729	0.44190	0.45314	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.61161	0.12920	0.46390	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.91373	0.43788	0.45590	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.81541	0.24000	0.21819	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.51094	0.23871	0.21345	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.81219	0.53652	0.21478	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.27649	0.76741	0.78825	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.27744	0.47388	0.78460	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.57490	0.77073	0.77829	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.48103	0.57357	0.55170	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.16257	0.56239	0.55598	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.48452	0.88295	0.53731	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.03023	0.32030	0.16811	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.73329	0.67261	0.16582	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.38498	0.02547	0.15587	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.35536	0.98588	0.82752	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.70699	0.69126	0.83682	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.06120	0.34042	0.83551	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69678	0.65922	0.49782	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37386	0.99495	0.50136	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.04419	0.34932	0.49960	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.06001	0.68514	0.83538	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35798	0.33872	0.83189	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.71102	0.98445	0.83208	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.73187	0.02510	0.16680	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37982	0.32153	0.16254	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.02805	0.67393	0.16774	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38967	0.36058	0.49425	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.04216	0.65597	0.49983	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.70544	0.00357	0.49788	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.16628	0.24446	0.12650	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.80534	0.88573	0.13040	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16962	0.88402	0.12410	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27899	0.12317	0.86364	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.92092	0.76084	0.86800	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.92165	0.12732	0.87397	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82890	0.57553	0.45997	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.46276	0.22115	0.46064	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.83428	0.21650	0.45574	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.95532	0.45999	0.20175	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.59687	0.10491	0.19781	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.59311	0.45936	0.20110	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.49692	0.91127	0.79791	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.13199	0.54817	0.78506	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.49742	0.55105	0.79015	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61631	0.79174	0.54316	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.26009	0.44085	0.53787	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25911	0.78053	0.53588	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.04591	0.27472	0.00075	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.78350	0.74274	0.00068	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.30905	0.00764	0.99364	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.71159	0.60514	0.33174	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.44337	0.06364	0.32498	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.98571	0.34712	0.33323	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.37614	0.92789	0.66556	Biso	1.000	O

O62	1.0000	0.10821	0.39144	0.66715	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.65236	0.67289	0.66679	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03997	0.73752	0.99957	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.31041	0.26646	0.99695	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77565	0.00085	0.99995	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70532	0.06920	0.33244	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97823	0.60130	0.33354	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.44633	0.34568	0.32969	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.37235	0.40161	0.66466	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63988	0.94364	0.66545	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.11090	0.68281	0.66707	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.15837	0.98856	0.41878	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.18267	0.10004	0.38024	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.25488	0.13270	0.33415	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.20009	0.16539	0.43006	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10931	0.08735	0.34033	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.14654	0.90165	0.35186	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.07869	0.88607	0.30436	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.12645	0.82075	0.38251	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.22477	0.93256	0.31272	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.14323	0.96406	0.50683	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.13891	0.03705	0.57980	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.19556	0.12778	0.56580	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.16937	0.01949	0.64244	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.29600	0.98938	0.49578	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.11527	0.87605	0.52538	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.01696	0.01382	0.59351	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.95988	0.92191	0.60282	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.98876	0.03617	0.53197	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.00611	0.07851	0.67192	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.06237	0.17055	0.66416	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.02837	0.05310	0.73468	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.91916	0.06334	0.67813	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 24-dimethyl-2-pentene:h; E= -979.024 eV; ZPVE= 5.735eV; frequencies =28.5, 39.2, 48.1, 50.2, 66.4, 97.2, 110.2, 126.3, 164.2, 213.0, 227.2, 265.7, 266.9, 301.8, 311.6, 317.0, 351.7, 364.4, 402.4, 429.6, 458.9, 502.9, 603.2, 604.2, 648.8, 672.0, 705.6, 754.6, 770.9, 833.7, 852.5, 905.9, 929.1, 936.8, 952.0, 983.5, 1042.0, 1054.3, 1073.2, 1075.3, 1112.1, 1175.6, 1197.3, 1208.0, 1269.8, 1325.7, 1339.1, 1348.1, 1356.8, 1364.6, 1376.1, 1412.6, 1424.5, 1430.9, 1435.2, 1440.4, 1445.3, 1455.0, 1462.8, 1634.9, 2623.4, 2899.6, 2952.8, 2953.3, 2958.3, 2966.8, 3009.6, 3012.8, 3027.7, 3034.0, 3036.5, 3050.3, 3050.8, 3063.6, 3121.1 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.02075	0.22598	0.08770	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79256	0.76936	0.08813	Biso	1.000	Si

Si3	1.0000	0.25176	0.99774	0.08294	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24485	0.99513	0.87575	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79029	0.76700	0.88127	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01757	0.22648	0.88187	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68636	0.56138	0.41956	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45515	0.10234	0.41710	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91795	0.33007	0.41961	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.92020	0.33271	0.21484	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45724	0.10012	0.21043	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68795	0.56023	0.21405	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35149	0.88881	0.75551	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12050	0.42909	0.75237	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58276	0.66267	0.75235	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58601	0.66556	0.54948	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11685	0.42456	0.55080	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35121	0.88364	0.54797	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01672	0.76391	0.88044	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24803	0.22563	0.87845	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79104	0.99627	0.88076	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79115	0.99742	0.08774	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25169	0.22702	0.08485	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02163	0.76982	0.08780	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68737	0.10181	0.21479	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91785	0.56032	0.21408	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45756	0.33135	0.21259	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45377	0.33216	0.41894	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91603	0.55982	0.42068	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68635	0.09782	0.42069	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35327	0.43905	0.54675	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58937	0.89983	0.54681	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11751	0.65931	0.55074	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12029	0.66242	0.75333	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58163	0.89363	0.75302	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35197	0.43361	0.75194	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92261	0.09496	0.10449	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92431	0.80397	0.10488	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21979	0.09627	0.10201	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11489	0.89390	0.85937	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82551	0.89891	0.86475	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11755	0.19630	0.86491	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58535	0.43214	0.43482	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58399	0.11836	0.44579	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89017	0.43154	0.43950	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78962	0.23251	0.20240	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48762	0.23164	0.19604	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78670	0.52754	0.19911	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25160	0.75873	0.77293	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25247	0.46496	0.76886	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54998	0.76199	0.76154	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45369	0.57005	0.53512	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13565	0.55158	0.54340	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.46125	0.87522	0.52172	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00424	0.31190	0.15171	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70823	0.66411	0.15018	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36052	0.01828	0.13949	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33090	0.97749	0.81223	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68287	0.68323	0.82050	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03711	0.33300	0.82165	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66920	0.64833	0.48260	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34711	0.98456	0.48624	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01795	0.34009	0.48407	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03554	0.67545	0.82109	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33308	0.32921	0.81479	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68559	0.97421	0.81786	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70685	0.01811	0.14985	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35523	0.31410	0.14730	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00214	0.66600	0.15164	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36975	0.35788	0.47857	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01971	0.64865	0.48385	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.68200	0.99754	0.48331	Biso	1.000	O

O37	1.0000	0.14236	0.23832	0.10999	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77792	0.87632	0.11423	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14392	0.87731	0.11170	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25476	0.11473	0.84914	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89587	0.75065	0.85295	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89808	0.11763	0.85345	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80609	0.57002	0.44572	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43685	0.21266	0.44875	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80724	0.21045	0.44036	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93106	0.45264	0.18679	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57053	0.09504	0.18518	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56759	0.45207	0.18768	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47194	0.90213	0.78368	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10709	0.53919	0.76745	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47240	0.54289	0.77772	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59620	0.78667	0.52916	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23360	0.43026	0.52243	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23638	0.76967	0.52157	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01600	0.26043	0.98500	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75775	0.73331	0.98490	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28074	0.99581	0.97834	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68945	0.59918	0.31654	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41413	0.05767	0.30946	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.96020	0.33803	0.31744	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35249	0.91919	0.65041	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08211	0.37897	0.65224	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62459	0.66069	0.65127	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01821	0.73284	0.98446	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28700	0.26014	0.98108	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75647	0.99688	0.98402	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68329	0.06089	0.31681	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95350	0.59531	0.31770	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42007	0.33342	0.31472	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35164	0.39791	0.64875	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61508	0.93708	0.65086	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08588	0.67582	0.65186	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.12550	0.98551	0.42044	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.11162	0.94189	0.50368	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.11428	0.91234	0.34166	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.04821	0.90697	0.29630	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.10536	0.98394	0.59546	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.08671	0.85187	0.50501	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.09276	0.82607	0.36053	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.15571	0.11132	0.60959	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.10552	0.14342	0.57621	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.24382	0.16020	0.58636	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.19363	0.95032	0.30315	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.14622	0.10100	0.39500	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.17676	0.16277	0.44891	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.06633	0.09286	0.36992	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.20714	0.13584	0.33983	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.15524	0.12817	0.68091	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.98110	0.91804	0.62729	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.92812	0.94096	0.58694	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.97516	0.93841	0.69708	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.94553	0.82580	0.62211	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.15318	0.95730	0.63928	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.26887	0.97838	0.48355	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-heptene;p; E= -978.446 eV; ZPVE= 5.796eV;
frequencies =35.2, 71.0, 80.7, 90.9, 96.7, 123.3, 142.7, 162.0, 165.8, 209.1,
232.9, 242.1, 256.0, 271.0, 290.4, 319.1, 332.6, 353.7, 457.5, 469.9, 488.8, 600.6,
651.5, 678.1, 702.6, 721.0, 743.8, 753.1, 816.3, 842.2, 894.7, 920.6, 968.0, 995.0,
1029.3, 1032.0, 1053.7, 1067.9, 1085.4, 1090.2, 1144.6, 1196.2, 1221.1, 1231.9,
1269.7, 1282.9, 1297.0, 1303.1, 1335.3, 1344.9, 1358.1, 1358.6, 1417.6, 1420.0,
1426.1, 1432.7, 1437.4, 1443.6, 1461.1, 1640.4, 2600.1, 2933.4, 2956.7, 2976.8,
2979.6, 3006.0, 3006.2, 3023.5, 3043.3, 3046.5, 3050.7, 3062.1, 3072.1, 3076.2,
3107.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01316 0.21750 0.10187 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.78250 0.76075 0.10301 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24395 0.98783 0.09722 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.23610 0.98473 0.89321 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78082 0.75831 0.89620 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01063 0.21530 0.89554 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.67628 0.55110 0.43301 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45228 0.09466 0.42713 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91190 0.32230 0.43194 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.91458 0.32621 0.22765 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.45007 0.09062 0.22492 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.67864 0.55086 0.22713 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34175 0.87675 0.76916 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11161 0.42146 0.76633 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.57412 0.65394 0.76631 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.57963 0.65731 0.56311 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11085 0.41972 0.56401 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.34316 0.87435 0.56138 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.00949 0.76017 0.89555 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.23899 0.21836 0.89490 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78092 0.98708 0.89540 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78008 0.98863 0.10170 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.24314 0.22082 0.09842 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01388 0.76387 0.10379 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.67893 0.09550 0.22745 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91164 0.55338 0.22808 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.44874 0.32555 0.22675 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.44463 0.32660 0.42894 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.90730 0.54979 0.43373 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.67921 0.09170 0.43411 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.34561 0.43188 0.55972 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.58037 0.89024 0.55996 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.10792 0.65221 0.56523 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11110 0.65310 0.76812 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.57301 0.88519 0.76616 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.34189 0.42743 0.76591 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.91083 0.08815 0.11715 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.91357 0.79376 0.12050 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21726 0.09109 0.10730 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.10335 0.89199 0.87402 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.81611 0.89020 0.87963 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.10608 0.17865 0.87722 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.57580 0.42243 0.45208 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.58270 0.12015 0.46225 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87984 0.42084 0.45219 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.78505 0.22409 0.21635 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.47134 0.21986 0.22024 Biso 1.000 O

O12	1.0000	0.78129	0.52355	0.21459	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24484	0.74493	0.78460	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24517	0.46277	0.78235	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54147	0.75349	0.77443	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44768	0.56170	0.54706	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13040	0.54711	0.55736	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45046	0.86083	0.53556	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99853	0.30659	0.16347	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69745	0.65577	0.16506	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35308	0.01052	0.15387	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31594	0.96125	0.82687	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67390	0.67475	0.83487	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03171	0.32138	0.83409	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66330	0.64032	0.49656	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34696	0.97822	0.49875	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01210	0.33535	0.49735	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03210	0.67390	0.83657	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31885	0.32111	0.82832	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67731	0.96587	0.83064	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69569	0.00836	0.16448	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34719	0.30693	0.16048	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99593	0.65876	0.16539	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36051	0.34744	0.49337	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00788	0.63801	0.49942	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.67050	0.98861	0.49562	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13086	0.22372	0.12933	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76931	0.86869	0.12869	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13355	0.87276	0.13194	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25727	0.11127	0.87711	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88621	0.74118	0.86865	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88807	0.10916	0.87000	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79675	0.55995	0.45554	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42494	0.20272	0.44440	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80416	0.19987	0.45130	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92224	0.44466	0.19927	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56704	0.09639	0.19343	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56253	0.44018	0.19616	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46367	0.89398	0.79775	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09138	0.52726	0.78380	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46384	0.53413	0.79214	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59096	0.77899	0.54318	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22727	0.42532	0.53456	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22428	0.76492	0.53483	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01514	0.25300	0.99843	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74768	0.72471	0.99975	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26931	0.97220	0.99415	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67327	0.58526	0.32987	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41301	0.03775	0.32230	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95611	0.33340	0.33003	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34424	0.90890	0.66420	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07588	0.37362	0.66536	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61592	0.65095	0.66536	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01442	0.73149	0.99971	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27482	0.26366	0.99599	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74359	0.98597	0.99813	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.66927	0.05378	0.32983	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94908	0.58689	0.33164	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41479	0.34286	0.32672	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34151	0.39199	0.66255	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60574	0.92865	0.66388	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07621	0.66674	0.66682	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.10820	0.89826	0.37833	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.07191	0.81640	0.41253	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.04336	0.89660	0.33353	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.17793	0.90783	0.33535	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.13974	0.98893	0.53113	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.14761	0.99518	0.44166	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.10017	0.90477	0.56259	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.16915	0.08777	0.59133	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.18559	0.07986	0.41181	Biso	1.000	H

H6	1.0000	0.08794	0.07289	0.61965	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.20224	0.16534	0.55114	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.24981	0.10762	0.66985	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.37640	0.16949	0.64706	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.39426	0.24324	0.60651	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.39477	0.11568	0.60452	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.22431	0.02589	0.70235	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.23474	0.15848	0.71849	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.27339	0.98200	0.49927	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.46112	0.21018	0.72380	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.45212	0.14056	0.76597	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.54788	0.25321	0.69695	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.45295	0.27071	0.76676	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 44-dimethyl-2-pentene:d; E= -979.008 eV; ZPVE= 5.723eV; frequencies =30.8i, 20.5i, 29.4, 46.5, 61.1, 85.5, 113.4, 163.1, 188.8, 229.0, 235.3, 269.3, 279.9, 291.6, 309.2, 328.3, 335.2, 345.6, 352.3, 425.8, 450.3, 457.5, 530.7, 603.9, 649.9, 655.9, 676.8, 715.8, 755.8, 803.8, 875.3, 913.5, 922.1, 929.3, 959.2, 998.4, 1009.3, 1013.8, 1028.5, 1078.7, 1086.5, 1169.1, 1180.1, 1188.6, 1253.2, 1280.4, 1309.0, 1342.5, 1345.4, 1362.0, 1375.8, 1424.3, 1424.8, 1426.1, 1432.2, 1440.1, 1451.0, 1451.8, 1466.0, 1647.3, 2930.6, 2950.4, 2958.6, 2962.5, 2964.0, 3023.4, 3025.4, 3030.0, 3032.3, 3033.1, 3040.6, 3042.0, 3045.1, 3049.9, 3063.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.04211	0.21727	0.09272	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.81275	0.76015	0.09332	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.27296	0.98784	0.08784	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.26691	0.98567	0.88269	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.81046	0.75791	0.88660	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.03954	0.21712	0.88617	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.70602	0.55338	0.42462	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.47968	0.09563	0.42275	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.93998	0.32100	0.42380	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.94118	0.32389	0.21947	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.47889	0.09087	0.21664	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.70783	0.55148	0.21904	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.37214	0.87868	0.76165	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.14103	0.42059	0.75744	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.60368	0.65386	0.75698	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.60747	0.65682	0.55405	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.13894	0.41945	0.55536	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.37048	0.87553	0.55304	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.03733	0.75607	0.88605	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.26870	0.21748	0.88362	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.81045	0.98734	0.88632	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.81042	0.98844	0.09238	Biso	1.000	Si

Si22	1.0000	0.27129	0.21822	0.08941	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.04176	0.76064	0.09340	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.70754	0.09308	0.21979	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.93796	0.55161	0.21952	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.47726	0.32213	0.21817	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.47196	0.32378	0.42335	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.93484	0.54945	0.42575	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.70791	0.08958	0.42652	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.37279	0.42850	0.55134	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.60698	0.88958	0.55080	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.13658	0.65252	0.55578	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.14072	0.65353	0.75929	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.60179	0.88436	0.75786	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.37193	0.42395	0.75636	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.94176	0.08682	0.10772	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.94412	0.79422	0.11127	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.24119	0.08735	0.10136	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.13608	0.88632	0.86614	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.84446	0.88959	0.87113	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.13790	0.18532	0.86588	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.60147	0.42636	0.44113	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60845	0.11360	0.45439	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.91011	0.42119	0.44306	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.81084	0.22318	0.20760	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.50769	0.22226	0.20471	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.80709	0.51960	0.20380	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.27235	0.74882	0.77939	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.27293	0.45584	0.77417	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.57066	0.75294	0.76699	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47709	0.55725	0.53923	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15767	0.54651	0.54769	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47940	0.86633	0.52437	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.02472	0.30413	0.15489	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72730	0.65533	0.15538	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.38002	0.00969	0.14708	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.35105	0.96827	0.81661	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.70306	0.67379	0.82577	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05741	0.32294	0.82565	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.69338	0.64354	0.48734	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37041	0.98142	0.49480	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.04088	0.33421	0.48851	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05649	0.66778	0.82675	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35422	0.31983	0.81910	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70722	0.96631	0.82105	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72705	0.00806	0.15641	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37601	0.30375	0.15145	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.02295	0.65684	0.15695	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38400	0.34330	0.48366	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03636	0.63863	0.49039	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.70099	0.98700	0.48783	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.16155	0.22670	0.11904	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79892	0.86789	0.11825	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16401	0.86839	0.11681	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27930	0.10727	0.85990	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91689	0.74324	0.85762	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91834	0.10878	0.86064	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82301	0.55633	0.45043	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45930	0.20545	0.45132	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.83110	0.19989	0.44505	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.95064	0.44352	0.19260	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.59213	0.08764	0.18744	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58767	0.44262	0.19317	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.49266	0.89281	0.79044	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12689	0.53009	0.77386	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.49304	0.53341	0.78041	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61194	0.77535	0.53356	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25638	0.42655	0.52739	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25331	0.76506	0.52530	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.04311	0.25292	0.98945	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77853	0.72321	0.99014	Biso	1.000	O

O57	1.0000	0.30412	0.98190	0.98423	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70963	0.59074	0.32148	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.44068	0.04673	0.31604	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.98235	0.32880	0.32168	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.37355	0.90802	0.65632	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.10363	0.37320	0.65660	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64690	0.65408	0.65596	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03742	0.72382	0.98993	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30397	0.25667	0.98610	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.77338	0.98723	0.98910	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70091	0.05272	0.32225	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97311	0.58679	0.32315	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43799	0.32585	0.31947	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36927	0.38639	0.65332	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.63176	0.92623	0.65504	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10709	0.66791	0.65784	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.16455	0.03850	0.47683	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.08415	0.98226	0.39995	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.15953	0.99758	0.55918	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.23292	0.06643	0.63508	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.29883	0.15128	0.61388	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.27445	0.02524	0.66868	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.18031	0.07648	0.68584	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.29903	0.98616	0.50022	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.09238	0.91114	0.57502	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.23132	0.12609	0.46373	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.04495	0.06522	0.36847	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.99839	0.08077	0.42113	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.98855	0.02959	0.31061	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.11748	0.14741	0.34869	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.98047	0.86870	0.42512	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.00506	0.80750	0.44830	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.92494	0.83167	0.36702	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.93015	0.87883	0.47768	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.14861	0.96422	0.32358	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.22581	0.04378	0.30605	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.09477	0.93359	0.26410	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.17390	0.90158	0.34119	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 3-heptene:<; E= -979.142 eV; ZPVE= 5.755eV;
frequencies =25.9, 30.2, 43.0, 50.5, 57.9, 64.6, 85.2, 95.7, 150.0, 156.2, 213.4,
248.3, 269.9, 272.8, 310.5, 344.3, 353.4, 408.3, 432.8, 458.2, 496.3, 604.9, 648.6,
660.7, 671.8, 714.4, 755.1, 778.7, 808.6, 860.1, 878.4, 901.5, 951.6, 1006.9,
1011.2, 1042.1, 1052.5, 1060.9, 1072.1, 1091.8, 1147.8, 1199.9, 1234.9, 1236.1,
1246.3, 1277.2, 1298.1, 1300.9, 1325.0, 1333.6, 1354.7, 1361.8, 1426.9, 1430.9,
1434.3, 1442.5, 1444.1, 1448.9, 1450.3, 1644.6, 2698.7, 2944.0, 2944.6, 2946.0,
2957.4, 2963.4, 2986.0, 2989.9, 3000.2, 3026.8, 3028.6, 3033.2, 3034.5, 3044.0,
3050.8 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'
```

```
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
```

_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol					
Si1	1.0000	0.01050	0.20992	0.10308	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78077	0.75210	0.10438	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24049	0.98106	0.10002	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23355	0.97802	0.89226	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77841	0.74972	0.89781	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00695	0.20983	0.89760	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67432	0.54431	0.43588	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44738	0.08629	0.43247	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90861	0.31317	0.43542	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91019	0.31643	0.23099	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44686	0.08219	0.22703	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67710	0.54289	0.23010	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34055	0.87153	0.77250	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10975	0.41290	0.76834	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57248	0.64595	0.76791	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57656	0.64868	0.56514	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10777	0.41140	0.56630	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34001	0.86782	0.56464	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00611	0.74740	0.89730	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23715	0.20873	0.89417	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77969	0.97902	0.89687	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78078	0.98068	0.10374	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24106	0.21062	0.10067	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01122	0.75326	0.10452	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67716	0.08610	0.23062	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90754	0.54426	0.23090	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44602	0.31438	0.22909	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43992	0.31505	0.43425	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90414	0.54229	0.43715	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67687	0.08164	0.43710	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34143	0.42029	0.56250	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57676	0.88167	0.56234	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10535	0.64469	0.56707	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10900	0.64570	0.77011	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57062	0.87646	0.76905	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34026	0.41633	0.76755	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91254	0.07856	0.11877	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91231	0.78547	0.11962	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20897	0.07998	0.11855	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10351	0.87736	0.87487	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81381	0.88148	0.88012	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10672	0.17941	0.88054	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56980	0.41730	0.45266	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57668	0.10513	0.46330	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88016	0.41438	0.45466	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77941	0.21681	0.21861	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47486	0.21339	0.21572	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77650	0.51125	0.21492	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24039	0.74161	0.78988	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24161	0.44858	0.78569	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53958	0.74505	0.77821	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44614	0.54894	0.55066	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12517	0.53793	0.55884	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44858	0.85723	0.53748	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99338	0.29546	0.16699	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69661	0.64688	0.16658	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34992	0.00181	0.15566	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32014	0.96022	0.82945	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67172	0.66522	0.83659	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02557	0.31514	0.83620	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66203	0.63498	0.49822	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34023	0.97182	0.50442	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00957	0.32570	0.49976	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02410	0.65859	0.83776	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32238	0.31263	0.83084	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67501	0.95794	0.83332	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69768	0.00239	0.16647	Biso	1.000	O

O32	1.0000	0.34553	0.29791	0.16214	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99202	0.64959	0.16830	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35232	0.33459	0.49512	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00586	0.63236	0.50130	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66964	0.97922	0.49879	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13201	0.22233	0.12607	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76811	0.86007	0.13134	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13236	0.86152	0.13026	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24444	0.09798	0.86520	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88450	0.73331	0.87137	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88712	0.10053	0.87058	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79190	0.54845	0.46186	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42655	0.19602	0.46063	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79915	0.19265	0.45683	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92147	0.43687	0.20416	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56098	0.07975	0.19928	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55739	0.43392	0.20377	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46098	0.88466	0.80045	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09571	0.52244	0.78435	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46163	0.52558	0.79112	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58188	0.76759	0.54461	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22553	0.41933	0.53800	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22289	0.75664	0.53756	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00681	0.24543	0.00048	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74422	0.71672	0.00130	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26771	0.97766	0.99517	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67826	0.58149	0.33263	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40651	0.03668	0.32589	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95062	0.32060	0.33327	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34201	0.90214	0.66747	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07311	0.36499	0.66756	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61604	0.64613	0.66704	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01071	0.71765	0.00118	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27582	0.24307	0.99681	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74438	0.97831	0.00018	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67195	0.04524	0.33284	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94221	0.57992	0.33454	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40708	0.31919	0.33030	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33665	0.37793	0.66462	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60277	0.91877	0.66648	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07459	0.65966	0.66883	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.11847	0.97629	0.63366	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.19774	0.01300	0.67253	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.07801	0.88333	0.63908	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10730	0.94203	0.46760	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.14521	0.01212	0.53836	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.05564	0.85041	0.47981	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.12227	0.97775	0.37207	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.19469	0.10384	0.52635	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.15991	0.93458	0.33523	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.18202	0.06964	0.36669	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.00895	0.94890	0.32734	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.95583	0.01640	0.36367	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.01306	0.10816	0.35465	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.93695	0.00122	0.43501	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.94889	0.85720	0.33457	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.02427	0.96448	0.25560	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.26530	0.97214	0.50530	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.04076	0.01607	0.67423	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.07984	0.10884	0.67009	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.02380	0.99198	0.74455	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.95929	0.97850	0.63884	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.87578	0.99308	0.32943	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 344-3methyl-2-pentene:^; E= -995.606 eV; ZPVE= 6.469eV; frequencies =13.0i, 42.0, 48.9, 51.8, 58.7, 70.1, 80.7, 106.4, 163.8, 189.7, 234.0, 254.6, 271.0, 273.4, 302.2, 308.3, 312.0, 328.0, 348.5, 361.8, 375.2, 389.0, 451.1, 463.5, 529.8, 555.9, 603.8, 616.4, 649.9, 676.7, 698.8, 707.1, 823.1, 831.4, 912.1, 922.2, 929.4, 938.7, 984.4, 994.4, 1006.1, 1019.4, 1026.9, 1059.5, 1092.1, 1136.7, 1149.5, 1180.2, 1198.5, 1246.3, 1312.9, 1341.3, 1348.0, 1356.2,

1365.4, 1377.0, 1413.3, 1427.5, 1428.0, 1429.8, 1433.5, 1437.6, 1443.1, 1453.4,
1457.2, 1466.5, 1621.4, 2949.5, 2958.2, 2959.6, 2961.5, 2966.9, 2994.4, 3005.9,
3029.8, 3031.3, 3033.6, 3036.9, 3040.7, 3046.2, 3048.8, 3061.6, 3068.7, 3077.1 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.05530 0.23603 0.10152 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.82498 0.77842 0.10210 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.28641 0.00835 0.09888 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.28121 0.00599 0.89369 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.82405 0.77719 0.89536 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.05244 0.23607 0.89519 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.71898 0.57167 0.43356 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.49565 0.11684 0.43331 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.95301 0.33852 0.43308 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.95418 0.34311 0.22881 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.49399 0.11135 0.22428 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.72207 0.57116 0.22874 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.38562 0.90060 0.76937 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.15405 0.43992 0.76708 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.61697 0.67303 0.76653 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.61895 0.67446 0.56316 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.15154 0.43816 0.56492 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.38281 0.89553 0.56300 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.05062 0.77353 0.89768 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.28148 0.23534 0.89236 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.82346 0.00630 0.89507 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.82457 0.00721 0.10141 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.28496 0.23761 0.09950 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.05409 0.77859 0.10321 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.72053 0.11238 0.22837 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.95092 0.57028 0.22942 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.49022 0.34028 0.22659 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.48373 0.34074 0.43212 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.94589 0.56536 0.43633 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.72062 0.10753 0.43566 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.38659 0.44612 0.56143 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.61936 0.90750 0.56008 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.14870 0.66901 0.56528 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.15389 0.67175 0.76897 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.61538 0.90404 0.76668 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.38673 0.44247 0.76557 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.95648 0.10477 0.11594 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.95619 0.81199 0.11981 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.25482 0.10740 0.11627 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.15073 0.90404 0.88229 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.85718 0.90849 0.87879 Biso 1.000 O

O6	1.0000	0.15120	0.20498	0.87499	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.61342	0.44468	0.44637	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.62319	0.13327	0.46659	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.92085	0.43693	0.45340	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.82336	0.24303	0.21801	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.52142	0.24165	0.20833	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.82039	0.53832	0.21179	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.28528	0.77038	0.78406	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.28539	0.47167	0.78003	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.58532	0.77304	0.77696	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.48843	0.57591	0.54774	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.17467	0.56648	0.55294	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.49096	0.88385	0.53598	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.03627	0.32158	0.16398	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.73941	0.67317	0.16380	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.39100	0.02557	0.15946	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.36493	0.98741	0.82827	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.71778	0.69258	0.83371	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.07024	0.34165	0.83467	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.70491	0.66045	0.49693	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38216	0.99743	0.49952	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.05427	0.35240	0.49767	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.07053	0.68756	0.83621	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.36839	0.33922	0.82963	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.71986	0.98634	0.83060	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.74272	0.02855	0.16588	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.39074	0.32605	0.15946	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.03754	0.67792	0.16958	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.39698	0.36298	0.49123	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.04845	0.65474	0.49987	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.71237	0.00342	0.49556	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.17572	0.24774	0.12766	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.81138	0.88612	0.12771	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.17634	0.88781	0.12376	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.28967	0.12456	0.86577	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.93157	0.76341	0.86827	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.93160	0.12752	0.86924	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.83428	0.57238	0.46186	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.47308	0.22451	0.46424	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.84538	0.21600	0.45318	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.96468	0.46311	0.20146	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.60568	0.10626	0.19336	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.60085	0.46220	0.20611	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.50541	0.91208	0.79719	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.14456	0.55110	0.78850	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.50595	0.55350	0.79156	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.62440	0.79337	0.54253	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.26777	0.44065	0.54134	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.26430	0.78489	0.53851	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.05554	0.27179	0.99841	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.79054	0.74272	0.99875	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.32200	0.00990	0.99537	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.72792	0.61306	0.33096	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.46091	0.07296	0.32531	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.99603	0.34870	0.33090	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.38804	0.93473	0.66488	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.11203	0.39544	0.66632	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.65813	0.67162	0.66509	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.04745	0.73672	0.00084	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.31646	0.27086	0.99535	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.78723	0.00585	0.99815	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.71065	0.07134	0.33098	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.98332	0.60294	0.33368	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.44781	0.33668	0.32800	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.38917	0.40593	0.66302	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.64693	0.94544	0.66387	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.11487	0.67718	0.66746	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.18011	0.02979	0.44777	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.18144	0.99894	0.35184	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.12660	0.01912	0.31099	Biso	1.000	H

H2	1.0000	0.15161	0.90824	0.34198	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.26716	0.04624	0.32406	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.09271	0.97165	0.50473	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.08937	0.01285	0.59871	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.98844	0.86550	0.47458	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.00718	0.82294	0.42092	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.92541	0.88640	0.44846	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.94687	0.80425	0.52845	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.30703	0.99437	0.49479	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.97992	0.01951	0.60988	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.90313	0.93625	0.60196	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.97623	0.07797	0.56137	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.97776	0.05082	0.67681	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.08839	0.92859	0.66757	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.01762	0.84189	0.65773	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.08055	0.95540	0.73475	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.16788	0.92610	0.66475	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.19064	0.13034	0.61880	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.18266	0.15565	0.68651	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.19385	0.19433	0.57262	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.27233	0.13243	0.61512	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.24955	0.11260	0.46850	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 1-octene:o; E= -995.546 eV; ZPVE= 6.534eV;
frequencies =37.2, 41.1, 45.9, 64.0, 65.5, 73.6, 102.2, 121.8, 154.0, 181.0, 189.1,
226.3, 246.9, 255.9, 296.9, 307.7, 333.2, 372.2, 391.3, 429.8, 486.7, 555.3, 596.1,
613.6, 661.4, 675.9, 698.9, 721.1, 726.0, 744.3, 775.9, 820.3, 842.1, 870.8, 899.6,
931.1, 950.7, 969.7, 982.7, 1017.5, 1027.0, 1054.5, 1077.9, 1095.3, 1137.5, 1175.5,
1215.0, 1217.2, 1234.5, 1249.4, 1274.0, 1285.1, 1296.7, 1315.9, 1325.1, 1339.2,
1343.8, 1361.0, 1403.1, 1421.7, 1429.2, 1432.9, 1439.5, 1443.4, 1448.9, 1455.2,
1623.8, 2832.1, 2929.5, 2935.9, 2943.5, 2948.8, 2952.0, 2957.5, 2969.3, 2977.3,
2981.7, 3000.0, 3023.0, 3026.5, 3040.7, 3047.5, 3072.0, 3165.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00130	0.24740	0.10519	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77446	0.79219	0.10685	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23194	0.01913	0.09860	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.22673	0.01600	0.89305	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77184	0.78949	0.89844	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.99800	0.24764	0.89874	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66544	0.58194	0.43641	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.43725	0.12514	0.44319	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.89942	0.34914	0.43865	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.89786	0.35241	0.23138	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.43685	0.12137	0.22778	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.66891	0.58219	0.23222	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33065	0.90745	0.77326	Biso	1.000	Si

Si13	1.0000	0.10117	0.45039	0.76877	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56403	0.68346	0.77121	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57308	0.69001	0.56777	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.09992	0.45129	0.56782	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33186	0.90376	0.56567	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.99633	0.78314	0.89941	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.22738	0.24542	0.89385	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77167	0.01734	0.89732	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77183	0.01834	0.10530	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23169	0.24746	0.10066	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00102	0.78955	0.10596	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67106	0.12181	0.23402	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.89985	0.58161	0.23385	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.43829	0.35361	0.23054	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43005	0.35468	0.43550	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.89585	0.57791	0.43942	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67003	0.12343	0.43433	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33672	0.46559	0.56350	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56375	0.91512	0.56747	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.09552	0.68436	0.56984	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10031	0.68319	0.77254	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56212	0.91437	0.77139	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33290	0.45532	0.76862	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90282	0.11660	0.12317	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90610	0.82641	0.12501	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.19874	0.11619	0.11943	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.09665	0.91318	0.88188	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80609	0.92046	0.87878	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.09687	0.21601	0.88188	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56106	0.45469	0.45205	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57727	0.16286	0.43345	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87062	0.44978	0.45880	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.76647	0.25369	0.21535	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46975	0.25247	0.22029	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.76913	0.55113	0.22043	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23092	0.77823	0.79517	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23311	0.48616	0.78569	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53223	0.78324	0.78078	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44117	0.59469	0.55069	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.11271	0.57564	0.56214	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.42872	0.86699	0.55331	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98351	0.33253	0.16920	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.68901	0.68444	0.16648	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34011	0.03978	0.15835	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31249	0.99778	0.83072	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66301	0.70262	0.84035	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.01815	0.35386	0.83817	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65681	0.67147	0.50225	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35310	0.00783	0.50493	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00558	0.36544	0.49833	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.01460	0.69408	0.84101	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31233	0.34915	0.83039	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.66470	0.99608	0.83718	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.68419	0.03956	0.16334	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.33841	0.33260	0.16156	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98420	0.68831	0.17178	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34556	0.38016	0.49442	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.99336	0.66857	0.50528	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64005	0.01889	0.50137	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12357	0.26017	0.12755	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75905	0.89828	0.13516	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12565	0.89732	0.12596	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23417	0.13428	0.86570	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.87731	0.77295	0.87038	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.87788	0.13949	0.87082	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78244	0.58378	0.45823	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41368	0.23478	0.46242	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79269	0.22778	0.46478	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91062	0.47326	0.20372	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.54662	0.10820	0.21811	Biso	1.000	O

O48	1.0000	0.55005	0.47185	0.20452	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45148	0.92106	0.80143	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.08649	0.55938	0.78486	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45315	0.56373	0.79629	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59047	0.81408	0.54666	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22041	0.46453	0.54128	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21058	0.79513	0.53757	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.99694	0.28122	0.00231	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74206	0.75999	0.00303	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26686	0.02168	0.99574	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.66586	0.62109	0.33386	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.37838	0.07294	0.32866	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.93341	0.35316	0.33440	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.32809	0.93559	0.66947	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06349	0.40127	0.66829	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.60703	0.68206	0.67046	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99342	0.74929	0.00352	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26617	0.27943	0.99697	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73890	0.01567	0.00135	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68247	0.08341	0.33369	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93813	0.61373	0.33703	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.39719	0.35694	0.33070	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33506	0.42279	0.66499	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59882	0.95857	0.66987	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.06615	0.69947	0.67209	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.29336	0.01717	0.32953	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.95485	0.95866	0.43377	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.91716	0.96274	0.36997	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.91878	0.86761	0.44841	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.10764	0.96217	0.34028	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08411	0.01255	0.41995	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.08619	0.98431	0.27591	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.14607	0.88837	0.34241	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.12488	0.00096	0.47884	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.15317	0.84812	0.28205	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.16417	0.86101	0.40536	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.12071	0.10470	0.41028	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.91839	0.01389	0.50585	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.97127	0.10700	0.50132	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.83166	0.99475	0.48997	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.91640	0.97453	0.60180	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.87660	0.01186	0.64346	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.85918	0.88183	0.60477	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.03021	0.00337	0.64431	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.01339	0.97112	0.71306	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.06609	0.95639	0.61068	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.11764	0.12987	0.64559	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.19513	0.14649	0.68081	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.08323	0.17817	0.67903	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.14330	0.16505	0.57838	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 234-trimethyl-2-pentene:>; E= -995.263 eV; ZPVE= 6.470eV; frequencies =25.5, 36.6, 47.2, 59.0, 66.5, 83.4, 98.4, 111.4, 125.0, 135.7, 154.6, 193.1, 223.7, 241.9, 255.7, 271.4, 288.9, 302.7, 308.5, 359.6, 378.7, 394.8, 423.4, 479.6, 494.7, 518.0, 580.4, 598.0, 628.4, 672.3, 699.6, 719.4, 778.2, 830.0, 890.2, 897.8, 926.9, 940.0, 941.2, 960.2, 1006.1, 1038.2, 1045.8, 1053.5, 1096.3, 1106.3, 1145.0, 1178.3, 1246.6, 1282.0, 1309.1, 1339.0, 1339.8, 1346.4, 1359.6, 1367.3, 1420.7, 1421.7, 1427.7, 1431.9, 1433.9, 1441.4, 1444.9, 1454.1, 1456.7, 1458.9, 1669.1, 2946.9, 2958.4, 2961.9, 2975.6, 2976.3, 2997.5, 3003.6, 3011.8, 3016.4, 3023.9, 3046.2, 3058.3, 3060.6, 3069.7, 3074.2, 3089.2, 3634.0 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.01863 0.22696 0.08497 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79075 0.76954 0.08885 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.24678 0.99687 0.08234 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.24343 0.99345 0.87520 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78843 0.76559 0.88111 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01646 0.22616 0.88154 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.68378 0.55886 0.41814 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45587 0.10402 0.42654 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91238 0.32903 0.41982 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.91547 0.33120 0.21347 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.45410 0.09905 0.20894 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68595 0.55918 0.21346 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.34882 0.88486 0.75632 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11865 0.42785 0.75120 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58199 0.66151 0.75322 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58640 0.66761 0.55033 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11980 0.43035 0.55008 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35055 0.88118 0.54836 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01547 0.76227 0.88157 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24739 0.22454 0.87764 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78887 0.99372 0.87942 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78870 0.99572 0.08552 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25007 0.22699 0.08338 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.01958 0.76881 0.08921 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68807 0.10036 0.21496 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91813 0.55978 0.21541 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45645 0.33367 0.21368 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45495 0.33577 0.41784 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91225 0.55541 0.42067 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68608 0.10196 0.41582 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35425 0.44506 0.54690 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.58159 0.89330 0.54918 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11809 0.66146 0.55267 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.11863 0.66057 0.75520 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.58074 0.89311 0.75319 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.35007 0.43393 0.75209 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.92044 0.09504 0.09817 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.92202 0.80245 0.10575 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.21641 0.09580 0.10270 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.11330 0.89233 0.86028 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.82272 0.89644 0.86089 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.11673 0.19567 0.86779 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.58968 0.42655 0.43339 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.59666 0.14581 0.41652 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.87258 0.42236 0.43677 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.78400 0.23231 0.19850 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.48316 0.22877 0.20714 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.78766 0.53023 0.20271 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.24943 0.75532 0.77789 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.25025 0.46425 0.77072 Biso 1.000 O
O15 1.0000 0.55194 0.76243 0.76352 Biso 1.000 O
O16 1.0000 0.45117 0.57842 0.53849 Biso 1.000 O
O17 1.0000 0.14741 0.56030 0.54869 Biso 1.000 O
O18 1.0000 0.44600 0.84271 0.53589 Biso 1.000 O

O19	1.0000	0.00004	0.30855	0.15240	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70568	0.66273	0.14947	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35627	0.01757	0.14076	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33037	0.97461	0.81463	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68109	0.67891	0.82158	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03375	0.32857	0.81773	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66222	0.64074	0.48291	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37401	0.98604	0.48756	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01867	0.35366	0.48228	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03314	0.67275	0.82317	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33102	0.32792	0.81340	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68484	0.97613	0.81721	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70360	0.01911	0.14504	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35424	0.31126	0.14684	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00220	0.66630	0.15350	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37901	0.36858	0.47989	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01340	0.63562	0.48778	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65542	0.99768	0.48302	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14113	0.23986	0.10621	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77719	0.87680	0.11701	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14166	0.87722	0.11460	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25374	0.11331	0.84874	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89424	0.74864	0.85539	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89723	0.11558	0.85627	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80772	0.57639	0.44056	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42730	0.21076	0.44046	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81097	0.20392	0.44470	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92815	0.45141	0.18391	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56471	0.08850	0.19580	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56927	0.44803	0.18252	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47006	0.89920	0.78421	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10293	0.53604	0.76845	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47052	0.54251	0.77868	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61075	0.79398	0.52810	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23285	0.42983	0.51885	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22904	0.77479	0.51868	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01553	0.26573	0.98345	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75627	0.73617	0.98542	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27822	0.99533	0.97909	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67921	0.59471	0.31540	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39813	0.04570	0.31095	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95132	0.33530	0.31672	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34643	0.91290	0.65228	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08358	0.37993	0.65027	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62363	0.65965	0.65206	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01864	0.73315	0.98614	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28880	0.25902	0.98031	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75091	0.98892	0.98244	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69320	0.05954	0.31496	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95686	0.59135	0.31867	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42265	0.34564	0.31426	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34973	0.40083	0.64831	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61612	0.93689	0.65150	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08560	0.67606	0.65415	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.32025	0.98204	0.31199	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.06051	0.04480	0.44613	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.07838	0.95716	0.46140	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.03951	0.10758	0.51944	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.01185	0.06003	0.58181	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.97447	0.12899	0.50055	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.11718	0.18847	0.53401	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.05567	0.08524	0.35306	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.12502	0.21437	0.34364	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.21367	0.24684	0.36263	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.09191	0.25714	0.38535	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.12406	0.24013	0.27474	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.93145	0.03893	0.32617	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.88402	0.94571	0.32567	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.92614	0.06868	0.25956	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.88835	0.06726	0.37242	Biso	1.000	H

C7	1.0000	0.07512	0.91000	0.55246	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.09139	0.04995	0.30568	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.04578	0.94542	0.60447	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.15987	0.92638	0.57221	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.01856	0.81738	0.55295	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.10081	0.89463	0.38845	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.02335	0.81522	0.37034	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.16198	0.86954	0.41106	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.13208	0.94394	0.32674	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 233-trimethyl-1-pentene:s; E= -995.173 eV; ZPVE= 6.530eV; frequencies =38.7, 52.8, 77.5, 84.8, 98.9, 118.7, 128.3, 145.3, 235.3, 236.9, 265.9, 267.1, 283.3, 302.4, 312.0, 321.8, 350.5, 355.7, 370.7, 393.1, 424.2, 462.2, 470.2, 490.0, 558.0, 606.3, 653.8, 677.3, 679.4, 695.0, 716.1, 753.3, 766.8, 825.5, 878.2, 909.9, 919.8, 930.1, 970.5, 982.0, 1008.2, 1018.5, 1035.6, 1057.9, 1071.4, 1144.9, 1169.4, 1196.8, 1200.2, 1264.3, 1281.2, 1315.4, 1338.7, 1352.3, 1361.1, 1374.4, 1376.5, 1422.7, 1427.9, 1430.1, 1435.2, 1439.8, 1449.6, 1452.0, 1467.7, 1473.6, 1605.8, 2703.9, 2954.8, 2957.8, 2979.2, 2986.4, 2993.1, 3012.5, 3025.5, 3030.9, 3042.3, 3061.5, 3062.5, 3077.1, 3095.6, 3102.1, 3129.8, 3146.6 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02396	0.20911	0.10930	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79518	0.75170	0.10877	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25598	0.97931	0.10054	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24855	0.97656	0.89747	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79302	0.74979	0.90219	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02056	0.21011	0.90441	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68956	0.54457	0.43972	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.46104	0.08657	0.43788	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91769	0.31426	0.44091	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.92263	0.31629	0.23549	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.46086	0.08255	0.23205	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69002	0.54296	0.23460	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35467	0.87159	0.77658	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12328	0.41174	0.77427	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58477	0.64501	0.77391	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58601	0.64740	0.57106	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12134	0.40904	0.57362	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35495	0.86589	0.56816	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01942	0.74587	0.90240	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.25227	0.21056	0.90052	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79440	0.97925	0.90177	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79469	0.98008	0.10878	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25626	0.21126	0.10243	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02460	0.75164	0.10890	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68987	0.08335	0.23561	Biso	1.000	Si

Si25	1.0000	0.92004	0.54149	0.23483	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.46114	0.31349	0.23413	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.46025	0.31638	0.43944	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91561	0.53874	0.44250	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69038	0.08008	0.44128	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35656	0.42286	0.56791	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.59181	0.88210	0.56793	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.12276	0.64137	0.57331	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12392	0.64555	0.77534	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58414	0.87673	0.77465	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35494	0.41618	0.77287	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92590	0.07801	0.12602	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92659	0.78500	0.12526	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22405	0.07925	0.10886	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11777	0.87616	0.88254	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82838	0.88164	0.88539	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.12135	0.18077	0.88880	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59386	0.41268	0.45323	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59102	0.10520	0.46658	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87786	0.40694	0.46164	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.79281	0.21394	0.22422	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49331	0.21495	0.21968	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78959	0.51130	0.22040	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25493	0.74195	0.79584	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25505	0.44676	0.79041	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55298	0.74514	0.78286	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45186	0.55632	0.55778	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15160	0.54027	0.57027	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.46350	0.85550	0.54069	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00839	0.29383	0.17565	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71019	0.64669	0.17069	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36209	0.00306	0.16180	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33242	0.96194	0.82920	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68599	0.66605	0.84103	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03984	0.31621	0.84379	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66566	0.62636	0.50326	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35446	0.97025	0.50863	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01990	0.33283	0.50623	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03819	0.65797	0.84230	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33541	0.30931	0.83269	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68924	0.95767	0.83853	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70988	0.99998	0.17084	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35670	0.29179	0.16971	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00600	0.65017	0.17536	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38097	0.34727	0.49993	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02142	0.62032	0.50665	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.68430	0.97983	0.50461	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14585	0.22044	0.12866	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78226	0.85946	0.13548	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14678	0.86057	0.13124	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25794	0.09746	0.87756	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89872	0.73308	0.87510	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90176	0.10076	0.87527	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81257	0.56099	0.46601	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43968	0.19531	0.46857	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81421	0.18931	0.45964	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93164	0.43415	0.20292	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57325	0.07656	0.20490	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57009	0.43442	0.20753	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47499	0.88568	0.80663	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11066	0.52229	0.78923	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47450	0.52561	0.80044	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.60165	0.77066	0.55096	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23352	0.40628	0.54344	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23764	0.75470	0.54096	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01692	0.24435	0.00725	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75947	0.71615	0.00568	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28835	0.97028	0.99788	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69100	0.58253	0.33688	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41890	0.03862	0.33102	Biso	1.000	O

O60	1.0000	0.96196	0.32856	0.33884	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35686	0.89925	0.67097	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08425	0.36108	0.67427	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62463	0.64098	0.67250	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.02038	0.71257	0.00609	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.29581	0.25504	0.00099	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75975	0.97938	0.00512	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68438	0.04146	0.33752	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95475	0.57055	0.33926	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42455	0.31828	0.33593	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35603	0.38199	0.66960	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61524	0.91948	0.67205	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.09072	0.65982	0.67365	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.10558	0.92820	0.43710	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.12415	0.93439	0.52573	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.11512	0.84241	0.38127	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.13296	0.78602	0.42076	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.18342	0.88470	0.33203	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.03690	0.79028	0.34340	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.07032	0.00504	0.38959	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.10147	0.01589	0.29105	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.06346	0.93357	0.25769	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.19390	0.05828	0.28229	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.07070	0.06568	0.25613	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.12628	0.12453	0.43250	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.21423	0.14997	0.45000	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.08309	0.11984	0.49561	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.13019	0.86719	0.56049	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.11893	0.99698	0.56751	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.93958	0.94632	0.39748	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.89771	0.86168	0.36669	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.90844	0.99678	0.36315	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.91269	0.93681	0.46725	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.27857	0.96849	0.50952	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.12621	0.21568	0.37381	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.04070	0.19090	0.34992	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.18131	0.23454	0.31569	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.15742	0.29494	0.41065	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-octene:h; E= -995.634 eV; ZPVE= 6.536eV;
frequencies =19.8, 51.9, 56.9, 65.3, 85.9, 87.9, 94.7, 101.1, 150.3, 161.7, 193.0,
217.9, 235.4, 270.0, 271.2, 296.0, 307.3, 324.8, 355.2, 409.8, 458.4, 483.0, 520.4,
605.2, 649.1, 675.5, 682.5, 711.3, 725.5, 767.3, 792.0, 849.6, 874.1, 907.4, 922.7,
964.7, 995.7, 1008.7, 1035.2, 1043.7, 1072.6, 1078.2, 1087.0, 1099.9, 1137.1,
1181.8, 1202.3, 1253.9, 1259.2, 1268.2, 1290.7, 1293.2, 1309.0, 1326.6, 1328.4,
1354.1, 1358.8, 1364.6, 1423.0, 1427.3, 1430.5, 1435.2, 1436.6, 1444.1, 1448.6,
1452.3, 1650.6, 2593.8, 2936.3, 2950.6, 2952.8, 2954.1, 2969.0, 2979.2, 2988.7,
2994.6, 3003.3, 3010.7, 3023.3, 3034.3, 3039.0, 3052.7, 3054.0, 3059.1 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
```

```
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
```

_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol					
Si1	1.0000	0.00587	0.20830	0.09688	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.77596	0.75074	0.09969	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23717	0.97884	0.09584	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23251	0.97734	0.88995	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77488	0.74907	0.89408	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00490	0.20919	0.89256	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.66999	0.54151	0.43157	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44709	0.08766	0.43032	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90659	0.31316	0.42950	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90584	0.31562	0.22578	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44353	0.08172	0.22338	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67148	0.54113	0.22538	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33729	0.86938	0.76921	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10568	0.41208	0.76343	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56867	0.64507	0.76387	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57387	0.64783	0.56109	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10500	0.41173	0.56099	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33805	0.86550	0.56034	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00223	0.74807	0.89273	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23277	0.20812	0.89035	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77310	0.97846	0.89380	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77145	0.97893	0.09652	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23452	0.20876	0.09697	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00517	0.75254	0.10012	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67072	0.08568	0.22606	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90241	0.54250	0.22568	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44056	0.31375	0.22468	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43611	0.31439	0.43010	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90077	0.54085	0.43217	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67241	0.08295	0.43320	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33863	0.42099	0.55844	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57352	0.88039	0.55689	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10248	0.64474	0.56209	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10546	0.64499	0.76617	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56693	0.87583	0.76374	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33648	0.41580	0.76379	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90401	0.07744	0.10492	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90785	0.78663	0.11754	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20652	0.07885	0.11074	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10179	0.87800	0.87322	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80782	0.88082	0.88102	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10195	0.17556	0.87176	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56677	0.41409	0.44946	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57745	0.11187	0.46439	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87627	0.41277	0.45028	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77485	0.21569	0.21662	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46778	0.21161	0.21215	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77123	0.50982	0.21068	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23688	0.73981	0.78753	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23743	0.44770	0.78153	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53617	0.74455	0.77302	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44262	0.55007	0.54638	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12282	0.53836	0.55326	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44424	0.85180	0.53131	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98636	0.29223	0.16074	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69224	0.64698	0.16347	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34274	0.99820	0.15594	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31669	0.95944	0.82420	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66825	0.66546	0.83248	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02078	0.31235	0.82965	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65807	0.63177	0.49457	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34311	0.97376	0.50363	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00716	0.32572	0.49430	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02074	0.65954	0.83303	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31849	0.31162	0.82669	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67385	0.95899	0.82498	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69311	0.00113	0.16436	Biso	1.000	O

O32	1.0000	0.33876	0.29614	0.15870	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98620	0.64856	0.16346	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.34987	0.33523	0.49146	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00213	0.63113	0.49660	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66498	0.97950	0.49370	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12316	0.21466	0.12605	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76039	0.85827	0.12139	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12724	0.86000	0.12446	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24478	0.09876	0.86593	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88243	0.73670	0.86419	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88251	0.10016	0.87152	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78866	0.54743	0.45622	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41955	0.19384	0.45566	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79820	0.19087	0.44847	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.91593	0.43520	0.19750	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55725	0.08176	0.18999	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55203	0.43252	0.19741	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45795	0.88354	0.79789	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09061	0.52098	0.78047	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45766	0.52513	0.78801	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58314	0.76853	0.54023	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22269	0.41935	0.53327	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21927	0.75713	0.53176	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01366	0.25079	0.99480	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74195	0.71074	0.99696	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.26875	0.97437	0.99202	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67072	0.57706	0.32835	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41095	0.03764	0.32339	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94990	0.32344	0.32741	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.33939	0.89734	0.66367	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06996	0.36576	0.66223	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61199	0.64400	0.66316	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00180	0.71577	0.99669	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26662	0.24562	0.99330	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.72870	0.97589	0.99469	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.65781	0.04447	0.32879	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93851	0.57723	0.32931	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40427	0.32093	0.32630	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33396	0.37872	0.66059	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59666	0.91770	0.66100	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07314	0.65994	0.66433	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.13016	0.99410	0.64896	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20828	0.03027	0.68884	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.08030	0.90241	0.66155	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.11972	0.94329	0.48663	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.15665	0.02048	0.55270	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.06490	0.85349	0.50371	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.14066	0.96923	0.38938	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.20947	0.11033	0.53530	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.17464	0.91841	0.35948	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.20503	0.05913	0.37979	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.03120	0.94355	0.34111	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.98411	0.01800	0.37349	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.04868	0.10784	0.36280	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.96978	0.00780	0.44584	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.96792	0.85315	0.35025	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.04805	0.95592	0.26921	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.27011	0.97775	0.51159	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.87393	0.99224	0.32767	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.88973	0.00422	0.25580	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.85150	0.05576	0.34893	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.77513	0.87352	0.34616	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.76137	0.85814	0.41791	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.78977	0.80736	0.31844	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.08166	0.03316	0.67422	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.69594	0.86152	0.31705	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 23-dimethyl-2-hexene:p; E= -995.403 eV; ZPVE= 6.498eV; frequencies =30.1, 50.1, 53.2, 72.7, 89.9, 91.5, 94.5, 110.9, 146.5, 170.6, 191.2, 234.7, 236.3, 248.1, 271.9, 296.5, 328.7, 342.9, 365.2, 399.2, 423.1,

440.9, 486.7, 488.4, 537.1, 571.7, 592.1, 626.0, 683.5, 699.4, 721.2, 763.7, 799.4,
843.5, 855.8, 896.3, 922.5, 940.6, 967.4, 1000.4, 1025.9, 1035.0, 1041.7, 1063.9,
1105.7, 1140.9, 1151.4, 1208.8, 1234.2, 1250.3, 1296.7, 1318.7, 1334.6, 1351.1,
1356.6, 1361.5, 1411.1, 1423.4, 1424.2, 1430.7, 1437.8, 1444.3, 1450.4, 1456.3,
1458.6, 1475.9, 1672.4, 2915.8, 2942.2, 2946.6, 2948.0, 2953.6, 2968.5, 2982.3,
2983.6, 2996.0, 2998.5, 3013.3, 3032.3, 3038.8, 3073.9, 3076.5, 3105.3, 3390.7 cm^-
1

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

Si1	1.0000	0.01965	0.22955	0.08727	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79079	0.77385	0.08857	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24859	0.00090	0.07860	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24490	0.99757	0.87517	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78899	0.77138	0.88089	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01643	0.22968	0.87980	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68231	0.56266	0.41893	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.45604	0.10980	0.42628	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91752	0.33106	0.41981	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91628	0.33509	0.21346	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45579	0.10573	0.20866	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68657	0.56467	0.21430	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34832	0.89089	0.75381	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11917	0.43326	0.75108	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58144	0.66673	0.75296	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59102	0.67445	0.54871	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11668	0.43305	0.55014	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35017	0.88333	0.54703	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01543	0.76746	0.88108	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24638	0.23061	0.87540	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78972	0.00020	0.87983	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79034	0.00141	0.08769	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25028	0.23303	0.07970	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01948	0.77365	0.08864	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68812	0.10501	0.21546	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91721	0.56486	0.21568	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45597	0.33662	0.21292	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44588	0.33670	0.41738	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91290	0.56038	0.42136	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68526	0.10871	0.41628	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35445	0.45124	0.54411	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58140	0.89784	0.55016	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11314	0.66678	0.55144	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11871	0.66683	0.75409	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58008	0.89732	0.75369	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35078	0.43869	0.74956	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92144	0.09893	0.10626	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92235	0.80781	0.10612	Biso	1.000	O

03	1.0000	0.21734	0.10067	0.08870	Biso	1.000	0
04	1.0000	0.11402	0.89758	0.86058	Biso	1.000	0
05	1.0000	0.82361	0.90272	0.86246	Biso	1.000	0
06	1.0000	0.11520	0.19826	0.86069	Biso	1.000	0
07	1.0000	0.57779	0.43516	0.43347	Biso	1.000	0
08	1.0000	0.59764	0.15482	0.41503	Biso	1.000	0
09	1.0000	0.88945	0.43246	0.43816	Biso	1.000	0
010	1.0000	0.78441	0.23690	0.19813	Biso	1.000	0
011	1.0000	0.48985	0.23697	0.20460	Biso	1.000	0
012	1.0000	0.78630	0.53315	0.20066	Biso	1.000	0
013	1.0000	0.24938	0.76169	0.77712	Biso	1.000	0
014	1.0000	0.25113	0.46922	0.76872	Biso	1.000	0
015	1.0000	0.54878	0.76580	0.76405	Biso	1.000	0
016	1.0000	0.45837	0.58082	0.53163	Biso	1.000	0
017	1.0000	0.12721	0.55629	0.54538	Biso	1.000	0
018	1.0000	0.44488	0.84314	0.53955	Biso	1.000	0
019	1.0000	0.00059	0.31546	0.14948	Biso	1.000	0
020	1.0000	0.70590	0.66735	0.14946	Biso	1.000	0
021	1.0000	0.35592	0.02566	0.14123	Biso	1.000	0
022	1.0000	0.33016	0.98213	0.81006	Biso	1.000	0
023	1.0000	0.68136	0.68584	0.82112	Biso	1.000	0
024	1.0000	0.03611	0.33722	0.82089	Biso	1.000	0
025	1.0000	0.67297	0.65226	0.48409	Biso	1.000	0
026	1.0000	0.37728	0.98772	0.48436	Biso	1.000	0
027	1.0000	0.02207	0.34660	0.48111	Biso	1.000	0
028	1.0000	0.03320	0.67771	0.82294	Biso	1.000	0
029	1.0000	0.33026	0.33027	0.80843	Biso	1.000	0
030	1.0000	0.68208	0.97829	0.82022	Biso	1.000	0
031	1.0000	0.70319	0.02260	0.14640	Biso	1.000	0
032	1.0000	0.35657	0.31285	0.14281	Biso	1.000	0
033	1.0000	0.00172	0.67108	0.15333	Biso	1.000	0
034	1.0000	0.36361	0.36563	0.47563	Biso	1.000	0
035	1.0000	0.01068	0.65072	0.48711	Biso	1.000	0
036	1.0000	0.65000	0.00399	0.48433	Biso	1.000	0
037	1.0000	0.14208	0.24339	0.11094	Biso	1.000	0
038	1.0000	0.77614	0.88050	0.11623	Biso	1.000	0
039	1.0000	0.14209	0.88267	0.11239	Biso	1.000	0
040	1.0000	0.25578	0.11906	0.85492	Biso	1.000	0
041	1.0000	0.89477	0.75482	0.85398	Biso	1.000	0
042	1.0000	0.89595	0.12183	0.85202	Biso	1.000	0
043	1.0000	0.79868	0.56385	0.44220	Biso	1.000	0
044	1.0000	0.42701	0.21584	0.44493	Biso	1.000	0
045	1.0000	0.81008	0.21004	0.44577	Biso	1.000	0
046	1.0000	0.92929	0.45659	0.18782	Biso	1.000	0
047	1.0000	0.56431	0.09149	0.19553	Biso	1.000	0
048	1.0000	0.56702	0.45513	0.18673	Biso	1.000	0
049	1.0000	0.46974	0.90571	0.78167	Biso	1.000	0
050	1.0000	0.10431	0.54252	0.76556	Biso	1.000	0
051	1.0000	0.47123	0.54635	0.77788	Biso	1.000	0
052	1.0000	0.61228	0.80006	0.52660	Biso	1.000	0
053	1.0000	0.23770	0.44906	0.52169	Biso	1.000	0
054	1.0000	0.22907	0.77551	0.51746	Biso	1.000	0
055	1.0000	0.01625	0.26166	0.98383	Biso	1.000	0
056	1.0000	0.75705	0.74013	0.98507	Biso	1.000	0
057	1.0000	0.28276	0.99243	0.97715	Biso	1.000	0
058	1.0000	0.68490	0.60268	0.31634	Biso	1.000	0
059	1.0000	0.39958	0.05532	0.31051	Biso	1.000	0
060	1.0000	0.95290	0.33391	0.31598	Biso	1.000	0
061	1.0000	0.34400	0.91745	0.64981	Biso	1.000	0
062	1.0000	0.08238	0.38283	0.65074	Biso	1.000	0
063	1.0000	0.62377	0.66663	0.65178	Biso	1.000	0
064	1.0000	0.01678	0.73708	0.98561	Biso	1.000	0
065	1.0000	0.28463	0.27386	0.97727	Biso	1.000	0
066	1.0000	0.75793	0.00070	0.98384	Biso	1.000	0
067	1.0000	0.69397	0.06572	0.31593	Biso	1.000	0
068	1.0000	0.95393	0.59917	0.31899	Biso	1.000	0
069	1.0000	0.41351	0.33953	0.31254	Biso	1.000	0
070	1.0000	0.35245	0.40818	0.64547	Biso	1.000	0
071	1.0000	0.61890	0.94112	0.65230	Biso	1.000	0
072	1.0000	0.08548	0.68449	0.65363	Biso	1.000	0

H1	1.0000	0.31873	0.99555	0.31143	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.10102	0.01712	0.46039	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.12092	0.99984	0.37548	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.10689	0.95009	0.53750	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.11590	0.87794	0.51746	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.03011	0.91686	0.57890	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17915	0.00512	0.58080	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.06063	0.09808	0.48638	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.92994	0.03574	0.49371	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.90209	0.96970	0.54540	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.90442	0.09631	0.51704	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.14328	0.90561	0.34897	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.08873	0.16886	0.43936	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.19634	0.89115	0.39611	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.17939	0.91939	0.28122	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.06417	0.82346	0.34281	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.11746	0.06716	0.29768	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.05418	0.01228	0.24800	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.19997	0.10794	0.26319	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.09916	0.13429	0.31542	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.09753	0.13654	0.55124	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.86986	0.98139	0.40657	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.89536	0.92153	0.38174	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.89012	0.04561	0.35466	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.77757	0.93412	0.41472	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 244-trimethyl-2-pentene:*; E= -995.710 eV; ZPVE= 6.470eV; frequencies =14.9i, 37.9, 50.9, 64.1, 75.3, 94.9, 116.1, 154.3, 167.6, 209.0, 221.6, 241.9, 263.4, 270.8, 292.1, 305.6, 310.6, 323.3, 350.5, 357.1, 369.8, 421.6, 439.9, 462.9, 503.7, 556.1, 605.9, 651.3, 676.6, 691.2, 714.0, 755.4, 816.1, 830.9, 907.9, 913.4, 922.7, 925.5, 930.5, 978.8, 1011.7, 1015.5, 1057.1, 1062.8, 1079.8, 1146.7, 1185.7, 1189.2, 1215.1, 1232.6, 1331.8, 1342.2, 1346.2, 1358.2, 1364.3, 1380.5, 1411.1, 1424.5, 1425.4, 1430.0, 1433.0, 1434.5, 1445.0, 1451.7, 1456.3, 1466.1, 1630.8, 2794.3, 2953.7, 2955.3, 2958.6, 2959.8, 2965.3, 3014.1, 3017.5, 3023.1, 3025.7, 3027.9, 3037.7, 3048.5, 3054.1, 3066.7, 3073.6, 3089.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02671	0.21289	0.08816	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79808	0.75585	0.08838	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25877	0.98498	0.08382	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.25191	0.98285	0.87803	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79574	0.75389	0.88175	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02350	0.21328	0.88232	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.69202	0.54929	0.42041	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.46389	0.09064	0.41842	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.92409	0.31682	0.42002	Biso	1.000	Si

Si9	1.0000	0.92669	0.32020	0.21533	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.46409	0.08683	0.21109	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69379	0.54712	0.21445	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35704	0.87619	0.75590	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12598	0.41620	0.75332	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58849	0.64989	0.75276	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.59166	0.65238	0.54974	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12351	0.41288	0.55107	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35600	0.87170	0.54877	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.02200	0.75040	0.88225	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.25370	0.21247	0.87923	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79571	0.98317	0.88163	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.79628	0.98419	0.08811	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25731	0.21370	0.08606	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02668	0.75550	0.08805	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69297	0.08913	0.21517	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.92408	0.54730	0.21507	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.46340	0.31870	0.21296	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45974	0.32001	0.41938	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.92064	0.54515	0.42176	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.69221	0.08463	0.42183	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35886	0.42438	0.54752	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.59355	0.88617	0.54703	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.12293	0.64607	0.55128	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12602	0.64895	0.75446	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58722	0.88085	0.75329	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35772	0.42010	0.75265	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92775	0.08207	0.10405	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92972	0.79012	0.10542	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22693	0.08347	0.10362	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.12159	0.88088	0.86583	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82965	0.88548	0.86581	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.12343	0.18329	0.86444	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59003	0.42110	0.43757	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.59202	0.10726	0.45019	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89378	0.41648	0.44069	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.79633	0.21935	0.20370	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49109	0.21726	0.19717	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.79331	0.51553	0.19976	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25747	0.74588	0.77248	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25766	0.45067	0.76929	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55602	0.74940	0.76240	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.46041	0.55457	0.53485	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14459	0.54065	0.54188	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.46566	0.86272	0.52221	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.01041	0.29904	0.15209	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.71363	0.65116	0.15091	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.36479	0.00266	0.14282	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33595	0.96403	0.81312	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68867	0.66991	0.82070	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04189	0.31889	0.82149	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.67691	0.63811	0.48288	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35294	0.97298	0.48652	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02457	0.32826	0.48449	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.04178	0.66388	0.82131	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33958	0.31641	0.81610	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.69126	0.96210	0.81787	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.71292	0.00453	0.15167	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.36101	0.30188	0.14794	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00930	0.65413	0.15395	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.37298	0.34185	0.47903	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02402	0.63396	0.48510	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.68675	0.98277	0.48308	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14741	0.22378	0.11170	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78393	0.86328	0.11386	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14951	0.86386	0.10876	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.26056	0.10157	0.85046	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.90239	0.73928	0.85348	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90361	0.10426	0.85500	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81113	0.55638	0.44603	Biso	1.000	O

O44	1.0000	0.44467	0.20086	0.44756	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81492	0.19563	0.43990	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93677	0.43962	0.18662	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57778	0.08413	0.18269	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57434	0.43829	0.18711	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47746	0.88931	0.78383	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.11360	0.52646	0.77094	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47789	0.53015	0.77781	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59841	0.77195	0.52961	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23966	0.41680	0.52385	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.24015	0.75881	0.52264	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02372	0.24829	0.98543	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76306	0.71925	0.98526	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29234	0.98702	0.97984	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69403	0.58518	0.31701	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.42571	0.04456	0.31086	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.96728	0.32682	0.31792	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35823	0.90800	0.65107	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08743	0.36864	0.65265	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.63044	0.64836	0.65161	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01975	0.71437	0.98552	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.29142	0.24670	0.98212	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.76019	0.98369	0.98472	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.68521	0.04794	0.31750	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95899	0.58033	0.31894	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42758	0.32328	0.31512	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35752	0.38378	0.64963	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.62015	0.92374	0.65096	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.09045	0.65917	0.65278	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.13390	0.96609	0.40893	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.10410	0.93036	0.49391	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.13032	0.88542	0.33890	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.06808	0.87472	0.28748	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.08613	0.98882	0.57389	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.07826	0.84117	0.50546	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10632	0.80155	0.36570	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.03060	0.89946	0.64778	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.08464	0.86387	0.66630	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.94815	0.82859	0.62642	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.21248	0.91928	0.30488	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.16439	0.08105	0.37349	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.18563	0.14561	0.42463	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.09304	0.07454	0.33413	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.23662	0.11162	0.32759	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.01684	0.93721	0.70767	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.19936	0.08614	0.60901	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.25506	0.05465	0.63262	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.18405	0.12786	0.66557	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.24599	0.15066	0.55823	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.00495	0.03362	0.55147	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.98502	0.06526	0.61221	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.92470	0.96596	0.52377	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.04118	0.10366	0.50353	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.27546	0.96658	0.48196	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-methyl-2-heptene:d; E= -995.844 eV; ZPVE= 6.499eV; frequencies =24.3, 50.2, 58.1, 65.0, 76.0, 87.2, 105.9, 106.9, 116.2, 157.5, 175.3, 201.9, 240.1, 257.6, 267.5, 308.4, 309.6, 346.9, 356.7, 389.1, 453.2, 461.9, 504.9, 523.3, 604.2, 648.7, 675.1, 708.1, 727.4, 756.8, 777.7, 822.4, 843.2, 856.2, 920.8, 925.6, 958.1, 969.8, 1008.0, 1050.8, 1055.3, 1067.0, 1071.4, 1087.1, 1114.7, 1175.8, 1221.0, 1223.5, 1231.0, 1279.3, 1288.5, 1301.7, 1330.6, 1346.3, 1358.3, 1359.2, 1360.8, 1411.5, 1418.2, 1426.4, 1433.1, 1438.3, 1441.0, 1444.0, 1447.8, 1453.4, 1631.8, 2495.2, 2936.4, 2950.4, 2951.5, 2954.4, 2961.5, 2964.5, 2973.7, 2993.6, 3006.1, 3011.5, 3012.4, 3029.8, 3040.9, 3070.0, 3087.9, 3089.5 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067

_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.03905 0.23006 0.09674 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.81090 0.77285 0.09865 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.26968 0.99957 0.09244 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.26173 0.99756 0.88518 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.80729 0.77005 0.89119 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.03593 0.23077 0.89253 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.70325 0.56432 0.42923 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.47561 0.10582 0.42552 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.93555 0.33166 0.42955 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.93724 0.33502 0.22395 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.47457 0.10217 0.21992 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.70487 0.56271 0.22353 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.36885 0.89140 0.76488 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.13722 0.43163 0.76157 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.60056 0.66561 0.76227 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.60523 0.66764 0.55997 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.13668 0.43031 0.55963 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.36833 0.88637 0.55692 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.03358 0.76654 0.89055 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.26455 0.22804 0.88835 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.80639 0.99780 0.89087 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.80647 0.99877 0.09630 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.26797 0.22830 0.09536 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.03936 0.77200 0.09807 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.70507 0.10427 0.22397 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.93532 0.56230 0.22404 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.47499 0.33421 0.22191 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.47110 0.33493 0.42840 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.93202 0.55968 0.43051 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.70545 0.10002 0.43007 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.37073 0.43933 0.55691 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.60388 0.89970 0.55572 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.13403 0.66265 0.56061 Biso 1.000 Si
Si33 1.0000 0.13717 0.66473 0.76349 Biso 1.000 Si
Si34 1.0000 0.59852 0.89660 0.76235 Biso 1.000 Si
Si35 1.0000 0.36842 0.43519 0.76153 Biso 1.000 Si
O1 1.0000 0.93752 0.09952 0.10822 Biso 1.000 O
O2 1.0000 0.94219 0.80611 0.11566 Biso 1.000 O
O3 1.0000 0.23804 0.09813 0.11217 Biso 1.000 O
O4 1.0000 0.13156 0.89655 0.86942 Biso 1.000 O
O5 1.0000 0.84183 0.90146 0.87273 Biso 1.000 O
O6 1.0000 0.13431 0.19888 0.87320 Biso 1.000 O
O7 1.0000 0.60105 0.43646 0.44689 Biso 1.000 O
O8 1.0000 0.60542 0.12441 0.45415 Biso 1.000 O
O9 1.0000 0.90462 0.43093 0.44993 Biso 1.000 O
O10 1.0000 0.80726 0.23454 0.21015 Biso 1.000 O
O11 1.0000 0.50374 0.23344 0.20627 Biso 1.000 O
O12 1.0000 0.80451 0.53104 0.20983 Biso 1.000 O
O13 1.0000 0.26864 0.76137 0.78193 Biso 1.000 O
O14 1.0000 0.26877 0.46627 0.77862 Biso 1.000 O

O15	1.0000	0.56854	0.76548	0.77161	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.47416	0.56886	0.54614	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.15679	0.55780	0.55220	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.47554	0.87337	0.52975	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.02263	0.31479	0.16209	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.72568	0.66703	0.15994	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.37889	0.02025	0.14838	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.34725	0.97994	0.82095	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.69873	0.68449	0.83198	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.05219	0.33351	0.82894	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.68994	0.65346	0.49258	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.36896	0.98884	0.49489	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.03861	0.34621	0.49227	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.05278	0.67824	0.83129	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.35101	0.33254	0.82591	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.70427	0.97918	0.82519	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.72306	0.01941	0.15940	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.37200	0.31630	0.15709	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.02004	0.66835	0.16206	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38398	0.35617	0.48846	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.03431	0.64866	0.49454	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.69616	0.99685	0.49165	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.15765	0.23711	0.12211	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.79811	0.88061	0.12583	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.16198	0.87928	0.12183	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.27211	0.11756	0.85918	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.91263	0.75313	0.86305	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.91428	0.12124	0.87055	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.82223	0.57072	0.45356	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.45674	0.21600	0.45621	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.82808	0.20988	0.45188	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.94752	0.45447	0.19532	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.58851	0.09831	0.19500	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.58543	0.45412	0.19565	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.48881	0.90438	0.79454	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.12443	0.54178	0.77850	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.48899	0.54560	0.78506	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61155	0.78688	0.53942	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.25341	0.43543	0.53222	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.25037	0.77553	0.53102	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.04189	0.27119	0.99482	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.77624	0.73848	0.99525	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29786	0.99755	0.98767	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.70403	0.60050	0.32605	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.43155	0.05868	0.31876	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.97578	0.34001	0.32684	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.37168	0.92213	0.65964	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.10007	0.38425	0.66072	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.64503	0.66514	0.66179	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.03529	0.73531	0.99457	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.30144	0.26171	0.99142	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.76591	0.99136	0.99342	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70301	0.06446	0.32600	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.97149	0.59505	0.32782	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.43927	0.33893	0.32412	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.36596	0.39630	0.65883	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.62806	0.93820	0.65953	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.10186	0.67683	0.66205	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.14844	0.99094	0.42519	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.17870	0.10249	0.38360	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.24192	0.12385	0.33065	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.21063	0.17305	0.43063	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.10276	0.09518	0.35107	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.10685	0.89404	0.36090	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.03114	0.88318	0.32555	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.08594	0.81404	0.39345	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.17127	0.91183	0.30956	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.15499	0.97493	0.51361	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.19122	0.06062	0.58740	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.24199	0.14739	0.56150	Biso	1.000	H

H8	1.0000	0.24755	0.04837	0.63312	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.29096	0.98419	0.49011	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.11969	0.88661	0.53538	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.09036	0.05041	0.64081	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.04014	0.96374	0.66794	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.01350	0.07969	0.58691	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.97800	0.02138	0.52994	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.06492	0.16511	0.55812	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.12344	0.10702	0.69891	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.91771	0.07533	0.64205	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.95072	0.13508	0.69789	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.86386	0.98998	0.66994	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.86357	0.09673	0.60230	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2344-4methyl-2-pentene: ^; E= -1011.480 eV; ZPVE= 7.258eV; frequencies =23.5, 64.9, 74.3, 80.0, 87.3, 92.7, 108.7, 154.1, 177.8, 202.1, 227.6, 234.4, 242.5, 248.0, 271.1, 283.1, 298.2, 307.2, 327.2, 350.2, 361.3, 374.5, 392.2, 424.7, 448.4, 472.2, 480.4, 538.5, 548.0, 585.6, 595.0, 628.3, 640.8, 695.6, 717.9, 787.7, 793.4, 872.2, 907.6, 917.5, 921.3, 927.3, 936.4, 976.9, 994.2, 1009.0, 1018.7, 1037.0, 1095.6, 1104.9, 1117.5, 1182.0, 1192.6, 1208.8, 1263.9, 1330.6, 1337.9, 1343.3, 1349.2, 1356.3, 1375.0, 1413.5, 1423.2, 1424.2, 1431.4, 1435.1, 1439.8, 1445.9, 1456.2, 1460.5, 1464.8, 1475.3, 1479.7, 1665.0, 2936.4, 2962.2, 2975.1, 2977.6, 2981.2, 2995.9, 3016.1, 3028.2, 3029.2, 3030.4, 3046.2, 3054.1, 3066.8, 3072.6, 3079.1, 3080.8, 3104.5, 3108.8, 3397.0 cm^-1

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.02336	0.21836	0.09255	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.79311	0.76024	0.09048	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.25249	0.98875	0.08467	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.24925	0.98593	0.87946	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.79214	0.75860	0.88477	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.02025	0.21845	0.88674	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68884	0.55050	0.42149	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.46129	0.09704	0.43031	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91478	0.32117	0.42600	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91903	0.32341	0.21788	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45869	0.09137	0.21321	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.69073	0.55194	0.21727	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.35259	0.87758	0.75845	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.12359	0.42070	0.75597	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.58670	0.65370	0.75640	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58926	0.66023	0.55309	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.12275	0.41977	0.55527	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.35747	0.87127	0.55288	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.02069	0.75329	0.88602	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.25113	0.21717	0.88109	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.79448	0.98751	0.88400	Biso	1.000	Si

Si21	1.0000	0.79521	0.98840	0.09222	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.25525	0.21983	0.08609	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.02386	0.75832	0.09036	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.69245	0.09137	0.21944	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91922	0.54997	0.21801	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45965	0.32313	0.21812	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.45864	0.32552	0.42217	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.91482	0.54689	0.42635	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68961	0.09501	0.41920	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.35910	0.43977	0.55007	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58892	0.88632	0.55521	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.12413	0.65291	0.55500	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.12286	0.65373	0.75681	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58679	0.88586	0.75759	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35493	0.42712	0.75552	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92558	0.08742	0.11087	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92442	0.79045	0.10094	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22224	0.08828	0.10233	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11889	0.88395	0.86699	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82733	0.88971	0.86404	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.12020	0.18769	0.87185	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.59460	0.41699	0.42991	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.60200	0.14103	0.41486	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87664	0.41505	0.44556	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78825	0.22324	0.20132	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.49172	0.22235	0.20666	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78899	0.51902	0.20128	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25338	0.74813	0.78110	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25585	0.45854	0.77442	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.55707	0.75482	0.76814	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45303	0.57445	0.54204	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.14899	0.54901	0.55423	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45207	0.83093	0.54845	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00632	0.30224	0.15884	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70944	0.65427	0.15232	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35955	0.00880	0.14602	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.33518	0.96778	0.81703	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68852	0.67205	0.82210	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.04082	0.32459	0.82577	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66102	0.62829	0.48559	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.38685	0.97552	0.48945	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02116	0.34324	0.48764	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03580	0.66562	0.82316	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33375	0.31918	0.81533	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68652	0.96752	0.82560	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70654	0.00883	0.14975	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35942	0.30264	0.14992	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00568	0.65966	0.15957	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38834	0.36686	0.48270	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.02162	0.62966	0.48823	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65404	0.99070	0.48744	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14652	0.23188	0.11180	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.78357	0.86882	0.12204	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14517	0.86891	0.11418	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25752	0.10531	0.85419	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89943	0.74212	0.86441	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90125	0.10946	0.85771	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.81134	0.56816	0.45021	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43221	0.20266	0.45255	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81286	0.19677	0.45105	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93203	0.44327	0.18645	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56787	0.07749	0.20213	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.57031	0.44209	0.19231	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47459	0.89196	0.78362	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10695	0.52898	0.76975	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47582	0.53467	0.78330	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61959	0.78867	0.53058	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23613	0.42091	0.52235	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23819	0.76328	0.52109	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01623	0.25201	0.99001	Biso	1.000	O

O56	1.0000	0.75268	0.72812	0.98788	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28792	0.98819	0.98230	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69337	0.59229	0.31922	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40107	0.04332	0.31528	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95175	0.32931	0.32215	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34677	0.90538	0.65483	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08790	0.36924	0.65574	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62593	0.65109	0.65464	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.02600	0.71853	0.98893	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.29339	0.25476	0.98327	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.76290	0.98579	0.98827	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70184	0.05261	0.31948	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95211	0.57820	0.32250	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41888	0.32413	0.31878	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35578	0.39582	0.65140	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.62908	0.93088	0.65683	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.09145	0.67077	0.65556	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.32173	0.98008	0.31649	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.06345	0.98534	0.37380	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.10766	0.92683	0.41287	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.02946	0.96449	0.27729	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.01652	0.88256	0.25460	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.08997	0.02989	0.23175	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.94824	0.96200	0.26749	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.03912	0.07115	0.42004	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.07003	0.16882	0.35358	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.01391	0.14179	0.29549	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.15777	0.20413	0.32990	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.06462	0.23785	0.38575	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.11071	0.12735	0.50381	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.07895	0.07460	0.56342	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.10794	0.20490	0.51771	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.19985	0.15112	0.49444	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.14782	0.86124	0.35718	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.17379	0.89683	0.28978	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.08302	0.77205	0.34633	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.21739	0.85731	0.39106	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.11506	0.91490	0.51178	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.19887	0.97364	0.54010	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.09742	0.82886	0.52603	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.05119	0.92512	0.54793	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.91269	0.01345	0.44500	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.88936	0.94063	0.48910	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.85733	0.98206	0.38632	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.89437	0.07315	0.48006	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2334-4-methyl-1-pentene:o; E= -1012.121 eV; ZPVE= 7.237eV; frequencies =19.5, 42.7, 56.9, 65.4, 73.5, 84.7, 92.3, 138.0, 169.6, 207.8, 224.8, 240.5, 252.5, 255.1, 281.6, 293.6, 298.0, 313.9, 343.0, 356.2, 362.9, 381.8, 399.9, 446.9, 482.5, 506.1, 546.2, 572.2, 595.8, 610.7, 654.5, 659.7, 696.5, 722.4, 749.6, 789.5, 800.7, 869.2, 884.3, 907.8, 909.5, 931.1, 937.3, 946.4, 977.7, 994.0, 1020.4, 1053.0, 1095.1, 1129.9, 1155.0, 1163.9, 1171.2, 1185.5, 1264.4, 1303.4, 1306.8, 1342.6, 1349.7, 1355.7, 1363.3, 1371.5, 1385.6, 1422.9, 1428.5, 1433.4, 1437.2, 1442.1, 1448.8, 1451.1, 1459.8, 1461.4, 1470.5, 1601.4, 2939.3, 2968.5, 2971.8, 2972.4, 2977.0, 2983.3, 2994.2, 3027.5, 3035.5, 3038.2, 3041.7, 3046.4, 3052.0, 3054.1, 3060.6, 3063.4, 3069.6, 3072.5, 3148.2 cm⁻¹

```
data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120
```

```
_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
```

'x, y, z'

```
loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.01952  0.23092  0.08935  Biso  1.000  Si
Si2      1.0000 0.79180  0.77612  0.09039  Biso  1.000  Si
Si3      1.0000 0.25008  0.00237  0.08302  Biso  1.000  Si
Si4      1.0000 0.24726  0.99929  0.87807  Biso  1.000  Si
Si5      1.0000 0.79128  0.77337  0.88224  Biso  1.000  Si
Si6      1.0000 0.01850  0.23100  0.88261  Biso  1.000  Si
Si7      1.0000 0.68685  0.56573  0.41842  Biso  1.000  Si
Al1      1.0000 0.45889  0.11203  0.42955  Biso  1.000  Al
Si8      1.0000 0.91514  0.33372  0.42218  Biso  1.000  Si
Si9      1.0000 0.91421  0.33565  0.21518  Biso  1.000  Si
Si10     1.0000 0.45443  0.10610  0.21349  Biso  1.000  Si
Si11     1.0000 0.68815  0.56791  0.21647  Biso  1.000  Si
Si12     1.0000 0.35051  0.89091  0.75778  Biso  1.000  Si
Si13     1.0000 0.12174  0.43473  0.75279  Biso  1.000  Si
Si14     1.0000 0.58420  0.66753  0.75503  Biso  1.000  Si
Si15     1.0000 0.58730  0.67367  0.55318  Biso  1.000  Si
Si16     1.0000 0.12087  0.43500  0.55117  Biso  1.000  Si
Si17     1.0000 0.35253  0.88673  0.54961  Biso  1.000  Si
Si18     1.0000 0.01732  0.76878  0.88310  Biso  1.000  Si
Si19     1.0000 0.24823  0.23083  0.87914  Biso  1.000  Si
Si20     1.0000 0.79136  0.00127  0.88073  Biso  1.000  Si
Si21     1.0000 0.78954  0.00228  0.08883  Biso  1.000  Si
Si22     1.0000 0.25112  0.23385  0.08435  Biso  1.000  Si
Si23     1.0000 0.01995  0.77482  0.09069  Biso  1.000  Si
Si24     1.0000 0.68838  0.10510  0.21844  Biso  1.000  Si
Si25     1.0000 0.91765  0.56586  0.21732  Biso  1.000  Si
Si26     1.0000 0.45737  0.33667  0.21515  Biso  1.000  Si
Si27     1.0000 0.45796  0.34060  0.41906  Biso  1.000  Si
Si28     1.0000 0.91475  0.56297  0.42309  Biso  1.000  Si
Si29     1.0000 0.68896  0.10777  0.41743  Biso  1.000  Si
Si30     1.0000 0.35726  0.45277  0.54869  Biso  1.000  Si
Si31     1.0000 0.58239  0.89792  0.55077  Biso  1.000  Si
Si32     1.0000 0.11985  0.66806  0.55330  Biso  1.000  Si
Si33     1.0000 0.12087  0.66714  0.75691  Biso  1.000  Si
Si34     1.0000 0.58157  0.89758  0.75542  Biso  1.000  Si
Si35     1.0000 0.35250  0.43852  0.75176  Biso  1.000  Si
O1       1.0000 0.92071  0.10013  0.10699  Biso  1.000  O
O2       1.0000 0.92311  0.80945  0.10831  Biso  1.000  O
O3       1.0000 0.21923  0.10213  0.09791  Biso  1.000  O
O4       1.0000 0.11663  0.89885  0.86356  Biso  1.000  O
O5       1.0000 0.82548  0.90420  0.86212  Biso  1.000  O
O6       1.0000 0.11685  0.19840  0.86573  Biso  1.000  O
O7       1.0000 0.59362  0.43194  0.42313  Biso  1.000  O
O8       1.0000 0.59791  0.14941  0.41343  Biso  1.000  O
O9       1.0000 0.88117  0.43145  0.43934  Biso  1.000  O
O10      1.0000 0.78218  0.23762  0.19933  Biso  1.000  O
O11      1.0000 0.49156  0.23793  0.20079  Biso  1.000  O
O12      1.0000 0.78677  0.53485  0.20311  Biso  1.000  O
O13      1.0000 0.25107  0.76200  0.78101  Biso  1.000  O
O14      1.0000 0.25398  0.47108  0.76934  Biso  1.000  O
O15      1.0000 0.55149  0.76652  0.76651  Biso  1.000  O
O16      1.0000 0.45090  0.58759  0.54608  Biso  1.000  O
O17      1.0000 0.14465  0.56375  0.54722  Biso  1.000  O
O18      1.0000 0.44689  0.84660  0.53778  Biso  1.000  O
O19      1.0000 0.99948  0.31514  0.15286  Biso  1.000  O
O20      1.0000 0.70571  0.66781  0.14920  Biso  1.000  O
O21      1.0000 0.35684  0.02408  0.14502  Biso  1.000  O
O22      1.0000 0.33284  0.98224  0.81450  Biso  1.000  O
O23      1.0000 0.68312  0.68577  0.82383  Biso  1.000  O
```

O24	1.0000	0.03934	0.33725	0.82178	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65731	0.63929	0.48589	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.37904	0.99378	0.49086	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.02205	0.35458	0.48267	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03467	0.67923	0.82427	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33192	0.33256	0.81370	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68508	0.98060	0.81999	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70172	0.02449	0.14610	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35666	0.31645	0.14730	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00199	0.67199	0.15499	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38902	0.38550	0.47759	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01592	0.64658	0.48896	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65577	0.00330	0.48519	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14184	0.24408	0.11280	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77623	0.88209	0.11908	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14259	0.88357	0.11452	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25786	0.12018	0.85527	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89713	0.75689	0.85558	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89802	0.12337	0.85479	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80838	0.58036	0.44574	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43514	0.22086	0.45420	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81138	0.21098	0.44975	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92824	0.45710	0.18807	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56172	0.08823	0.20690	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56740	0.45754	0.19264	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47164	0.90525	0.78580	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10600	0.54289	0.77026	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47373	0.54651	0.77788	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61281	0.79970	0.52783	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23509	0.43578	0.52114	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23102	0.78099	0.51908	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01732	0.26485	0.98613	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75965	0.74430	0.98655	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28430	0.99779	0.98089	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69096	0.61164	0.31753	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39447	0.06404	0.31539	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94980	0.33576	0.31823	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34709	0.91679	0.65366	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08447	0.38627	0.65201	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62887	0.66974	0.65418	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01744	0.73799	0.98768	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28657	0.27093	0.98150	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.75764	0.99946	0.98459	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70366	0.06742	0.31749	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95558	0.59913	0.32050	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41411	0.33227	0.31603	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35172	0.40310	0.64836	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61732	0.94011	0.65341	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08917	0.68262	0.65542	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.30917	0.02511	0.32014	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.07888	0.02163	0.47485	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.11585	0.01870	0.37928	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.08244	0.93119	0.53311	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.16817	0.94279	0.53339	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.02317	0.84450	0.51073	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.06101	0.93897	0.60206	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.95559	0.00476	0.47231	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.90488	0.99342	0.56524	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.96419	0.05783	0.61189	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.87713	0.90938	0.59422	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.83054	0.00443	0.56108	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.87379	0.90510	0.41391	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.90127	0.91534	0.34424	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.78875	0.89535	0.41529	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.86589	0.82528	0.43810	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.14296	0.94149	0.34956	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.14099	0.87549	0.39167	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.15385	0.93427	0.27820	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.11888	0.10541	0.31573	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.04112	0.11088	0.31900	Biso	1.000	H

H14	1.0000	0.12883	0.08485	0.24717	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.18947	0.19077	0.33109	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.16013	0.13867	0.51544	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.15868	0.20744	0.47848	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.24735	0.15437	0.51634	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.13610	0.14279	0.58440	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.96424	0.08313	0.44323	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 1-nonene:>; E= -1011.736 eV; ZPVE= 7.319eV;
frequencies =8.4i, 33.3, 47.9, 68.0, 92.6, 106.4, 115.4, 123.2, 143.0, 157.1,
167.5, 181.4, 211.0, 233.8, 254.8, 266.4, 268.1, 309.8, 352.3, 353.6, 388.9, 426.0,
454.1, 514.0, 602.3, 649.1, 653.2, 670.0, 676.5, 698.9, 712.5, 742.5, 761.7, 831.8,
842.8, 879.5, 896.3, 935.6, 950.8, 974.3, 994.9, 1020.1, 1037.4, 1047.5, 1062.9,
1067.8, 1082.9, 1101.8, 1135.4, 1177.9, 1197.4, 1226.8, 1232.1, 1246.0, 1274.2,
1281.4, 1290.4, 1298.9, 1304.5, 1307.3, 1325.0, 1348.4, 1351.8, 1353.7, 1404.8,
1423.7, 1430.1, 1433.0, 1437.0, 1442.2, 1443.3, 1444.7, 1457.1, 1623.8, 2727.9,
2931.4, 2939.9, 2952.4, 2963.3, 2974.7, 2985.3, 2995.8, 3002.3, 3008.8, 3020.6,
3035.2, 3042.3, 3049.1, 3050.0, 3055.8, 3063.1, 3075.8, 3143.0 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01532	0.21457	0.09584	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78389	0.75624	0.09883	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24472	0.98709	0.09366	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23903	0.98314	0.88624	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78109	0.75220	0.89472	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01210	0.21413	0.89065	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67686	0.53973	0.43267	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44903	0.09016	0.42651	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91295	0.31703	0.42933	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.91504	0.32243	0.22411	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.45120	0.08665	0.22088	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68326	0.54366	0.22284	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34566	0.87535	0.76728	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11311	0.41695	0.76188	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57738	0.65074	0.76157	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58157	0.65277	0.56034	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11152	0.41569	0.55993	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34587	0.87015	0.55916	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.01014	0.75329	0.89112	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24262	0.21426	0.88756	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78272	0.98467	0.89266	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78427	0.98860	0.09609	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24593	0.21713	0.09412	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01468	0.76083	0.09855	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68255	0.10027	0.22196	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.91437	0.55201	0.22525	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.45157	0.32153	0.22225	Biso	1.000	Si

Si27	1.0000	0.44289	0.31928	0.42716	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90986	0.54934	0.43154	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67875	0.09403	0.43374	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34652	0.42788	0.55696	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.58289	0.88715	0.55526	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11031	0.64965	0.56150	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11364	0.65052	0.76500	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57655	0.88245	0.76121	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34468	0.42145	0.76124	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91821	0.08204	0.10895	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91697	0.79488	0.11429	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21390	0.08653	0.11111	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10884	0.88279	0.86871	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81403	0.88419	0.88374	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11232	0.18462	0.87250	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57517	0.41146	0.45101	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57912	0.11658	0.46374	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.89056	0.42269	0.44428	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78253	0.23116	0.20562	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47607	0.21715	0.21400	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78261	0.51277	0.20394	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24521	0.74569	0.78566	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24490	0.45222	0.77911	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54575	0.75101	0.76850	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44849	0.55866	0.54805	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12754	0.54155	0.55271	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45247	0.85659	0.53136	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99586	0.29861	0.15974	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70525	0.65456	0.16649	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35235	0.00666	0.15099	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32536	0.96472	0.82346	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67521	0.67048	0.83180	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02860	0.31864	0.82920	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65986	0.62967	0.49231	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34695	0.97587	0.50068	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01538	0.33011	0.49199	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02852	0.66400	0.83225	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32825	0.31813	0.82433	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68130	0.96302	0.82532	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70831	0.01527	0.16345	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35024	0.30385	0.15593	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99694	0.65788	0.16256	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36007	0.34513	0.48833	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01172	0.63922	0.49555	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66960	0.98562	0.48894	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13699	0.22851	0.12052	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76661	0.86382	0.11702	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13599	0.86845	0.12389	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25080	0.10365	0.85964	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88900	0.74034	0.86473	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89272	0.10354	0.86491	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79647	0.55037	0.46168	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41623	0.19379	0.44821	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80182	0.20117	0.45820	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93711	0.44873	0.20369	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56493	0.08734	0.18662	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56385	0.43775	0.19143	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46666	0.88919	0.79442	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09926	0.52664	0.77856	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46527	0.53163	0.78517	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59494	0.77595	0.54070	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22979	0.42470	0.53230	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22839	0.76015	0.53117	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01365	0.25133	0.99331	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74689	0.71140	0.99724	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27316	0.98264	0.98922	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68168	0.57011	0.32788	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41642	0.03810	0.31978	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94786	0.31360	0.32659	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34668	0.90412	0.66188	Biso	1.000	O

O62	1.0000	0.07606	0.36931	0.66106	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62218	0.64853	0.66154	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01300	0.72398	0.99540	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28020	0.24995	0.99025	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74474	0.99123	0.99411	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67507	0.07016	0.32696	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94326	0.59095	0.32901	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41792	0.33501	0.32333	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34204	0.38349	0.65831	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60851	0.92697	0.65898	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08083	0.66568	0.66340	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.10887	0.93485	0.48881	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.16068	0.01823	0.54914	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.05542	0.84758	0.51236	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.11535	0.94918	0.39005	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.21298	0.10689	0.52921	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.15141	0.89954	0.36110	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.17317	0.03878	0.37276	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.99803	0.90872	0.34847	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.94254	0.97537	0.38194	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.00474	0.06681	0.37631	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.92354	0.95919	0.45346	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.94295	0.81740	0.36177	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.00827	0.91756	0.27579	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.27533	0.98043	0.51157	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.83477	0.95083	0.33220	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.85591	0.96867	0.26136	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.81019	0.01203	0.35473	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.73501	0.83032	0.34427	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.72669	0.81074	0.41551	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.75588	0.77028	0.31298	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.62076	0.80964	0.30831	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.62980	0.83237	0.23775	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.59924	0.86824	0.34138	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.14972	0.00041	0.62029	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.52004	0.68943	0.31778	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.44245	0.68552	0.29228	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.50318	0.66097	0.38718	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.53208	0.62715	0.28029	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 233-trimethyl-1-hexene:s; E= -1012.133 eV; ZPVE= 7.266eV; frequencies =40.6, 44.5, 64.1, 71.6, 73.2, 103.9, 112.2, 130.6, 172.6, 201.0, 212.8, 233.8, 249.5, 256.5, 267.1, 298.9, 302.7, 308.9, 325.7, 352.2, 356.1, 393.3, 434.8, 462.5, 473.5, 544.6, 579.1, 592.9, 618.0, 661.1, 680.6, 697.6, 721.5, 729.8, 766.7, 802.1, 833.1, 856.0, 858.8, 903.8, 928.6, 936.5, 957.5, 982.6, 992.3, 1014.7, 1042.1, 1063.7, 1085.1, 1155.7, 1165.4, 1172.3, 1187.7, 1231.2, 1257.4, 1284.0, 1301.7, 1336.3, 1341.2, 1352.7, 1362.9, 1370.2, 1378.4, 1414.0, 1418.9, 1425.2, 1437.9, 1441.1, 1443.9, 1449.8, 1457.5, 1458.7, 1469.3, 1594.6, 2927.1, 2931.9, 2951.1, 2966.5, 2969.2, 2979.5, 2983.1, 2995.4, 3018.7, 3022.1, 3048.4, 3049.6, 3055.9, 3065.2, 3088.7, 3095.0, 3100.4, 3120.8, 3137.5 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x

```


_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000 0.02131 0.23135 0.09415	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000 0.79522 0.77684 0.09532	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000 0.25351 0.00356 0.08755	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000 0.24896 0.99976 0.88340	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000 0.79299 0.77268 0.88734	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000 0.01932 0.23079 0.88878	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000 0.68921 0.56708 0.42503	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000 0.46240 0.11255 0.43464	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000 0.91597 0.33281 0.42691	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000 0.91813 0.33661 0.22050	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000 0.45892 0.10890 0.21683	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000 0.69097 0.56820 0.22198	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000 0.35192 0.89123 0.76217	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000 0.12275 0.43414 0.75812	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000 0.58499 0.66717 0.76077	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000 0.58975 0.67374 0.55754	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000 0.12361 0.43637 0.55801	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000 0.35288 0.88691 0.55402	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000 0.01847 0.76755 0.88965	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000 0.25058 0.23086 0.88509	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000 0.79346 0.00120 0.88568	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000 0.79265 0.00298 0.09399	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000 0.25450 0.23433 0.08908	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000 0.02233 0.77493 0.09595	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000 0.69156 0.10586 0.22320	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000 0.91997 0.56588 0.22336	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000 0.46029 0.33780 0.21983	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000 0.45829 0.33908 0.42550	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000 0.91368 0.55814 0.42880	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000 0.69153 0.10705 0.42288	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000 0.35883 0.45090 0.55300	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000 0.58327 0.89799 0.55647	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000 0.12215 0.66654 0.56034	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000 0.12264 0.66678 0.76271	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000 0.58317 0.89824 0.76088	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000 0.35453 0.43903 0.75721	Biso	1.000	Si
O1	1.0000 0.92367 0.10044 0.11333	Biso	1.000	O
O2	1.0000 0.92705 0.81188 0.11301	Biso	1.000	O
O3	1.0000 0.22144 0.10241 0.10386	Biso	1.000	O
O4	1.0000 0.11826 0.89799 0.87244	Biso	1.000	O
O5	1.0000 0.82647 0.90333 0.86740	Biso	1.000	O
O6	1.0000 0.11920 0.19968 0.87645	Biso	1.000	O
O7	1.0000 0.59231 0.43518 0.43353	Biso	1.000	O
O8	1.0000 0.60204 0.15074 0.42028	Biso	1.000	O
O9	1.0000 0.87370 0.42458 0.44168	Biso	1.000	O
O10	1.0000 0.78633 0.23814 0.20467	Biso	1.000	O
O11	1.0000 0.49552 0.24033 0.20227	Biso	1.000	O
O12	1.0000 0.78872 0.53376 0.20892	Biso	1.000	O
O13	1.0000 0.25328 0.76184 0.78517	Biso	1.000	O
O14	1.0000 0.25523 0.47077 0.77301	Biso	1.000	O
O15	1.0000 0.55378 0.76730 0.77166	Biso	1.000	O
O16	1.0000 0.45475 0.58457 0.54473	Biso	1.000	O
O17	1.0000 0.15523 0.56776 0.55752	Biso	1.000	O
O18	1.0000 0.44756 0.84668 0.54315	Biso	1.000	O
O19	1.0000 0.00385 0.31620 0.15885	Biso	1.000	O
O20	1.0000 0.71055 0.66926 0.15534	Biso	1.000	O
O21	1.0000 0.35994 0.02504 0.14998	Biso	1.000	O
O22	1.0000 0.33298 0.98169 0.81882	Biso	1.000	O
O23	1.0000 0.68502 0.68555 0.82851	Biso	1.000	O
O24	1.0000 0.04135 0.33688 0.82743	Biso	1.000	O
O25	1.0000 0.66677 0.64724 0.49106	Biso	1.000	O
O26	1.0000 0.37955 0.99261 0.49347	Biso	1.000	O
O27	1.0000 0.02423 0.36119 0.48835	Biso	1.000	O
O28	1.0000 0.03725 0.67926 0.83053	Biso	1.000	O
O29	1.0000 0.33218 0.33192 0.81832	Biso	1.000	O

O30	1.0000	0.68658	0.98085	0.82575	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70455	0.02481	0.15117	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35767	0.31714	0.15390	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00424	0.67388	0.16257	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.38220	0.37691	0.48237	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01529	0.63488	0.49648	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.65725	0.00227	0.49028	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.14462	0.24513	0.11391	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77858	0.88229	0.12345	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14661	0.88287	0.11593	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25751	0.11932	0.85888	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89913	0.75669	0.86048	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.90057	0.12250	0.85859	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80987	0.57921	0.45190	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43836	0.22060	0.46074	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.81604	0.20787	0.45432	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.93183	0.45802	0.19331	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.56582	0.09065	0.21048	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56940	0.45945	0.19734	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47303	0.90582	0.79087	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10760	0.54253	0.77624	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47445	0.54713	0.78592	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.61390	0.79978	0.53465	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23576	0.43343	0.52826	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22991	0.78174	0.52482	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01355	0.26429	0.99165	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.76193	0.74342	0.99178	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.29023	0.00274	0.98552	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.69347	0.61082	0.32339	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40044	0.06911	0.31935	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.95347	0.33665	0.32359	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34867	0.91801	0.65813	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08341	0.38496	0.65774	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62649	0.66616	0.65940	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01554	0.73348	0.99374	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.29399	0.27087	0.98669	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.76145	0.00118	0.98974	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.70429	0.06683	0.32236	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.95699	0.59763	0.32699	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41890	0.33154	0.32136	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.35806	0.40638	0.65374	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61856	0.94113	0.65890	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08945	0.68199	0.66159	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.31582	0.03812	0.32176	Biso	1.000	H
C1	1.0000	0.08618	0.97027	0.37982	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.15548	0.98740	0.31028	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.05340	0.87060	0.43919	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.08832	0.81876	0.41476	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.96072	0.81715	0.44457	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.08503	0.89756	0.50719	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.03001	0.04163	0.39581	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.91077	0.97516	0.35304	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.85841	0.89147	0.38379	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.91735	0.96293	0.28162	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.86577	0.02271	0.36136	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.09464	0.15840	0.35120	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.18367	0.20626	0.37228	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.05483	0.20900	0.36803	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.09299	0.15108	0.27851	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.17537	0.92111	0.29289	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.17589	0.05448	0.26202	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.01440	0.05490	0.49608	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.96021	0.97024	0.52533	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.96531	0.09902	0.50222	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.12338	0.11850	0.55034	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.17099	0.20714	0.52793	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.17973	0.08360	0.53745	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.10057	0.11503	0.64986	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.18027	0.16154	0.68712	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.05565	0.02744	0.67522	Biso	1.000	H

H19 1.0000 0.04781 0.15315 0.66524 Biso 1.000 H

Adsorption as pi-complexes of 345-methyl-2-hexene:h; E= -1012.016 eV; ZPVE=
7.257eV; frequencies =42.9, 54.1, 59.3, 66.5, 77.5, 95.5, 110.1, 113.5, 177.7,
200.1, 208.9, 214.4, 240.5, 269.5, 270.4, 277.6, 285.8, 308.3, 313.5, 327.0, 351.9,
361.0, 384.2, 425.2, 459.5, 466.2, 566.7, 594.3, 601.0, 650.2, 674.8, 708.3, 753.0,
779.3, 804.4, 838.5, 901.2, 908.4, 926.7, 956.6, 969.6, 996.2, 1006.7, 1019.9,
1044.7, 1068.1, 1075.4, 1085.9, 1129.1, 1141.2, 1162.9, 1173.9, 1211.3, 1247.6,
1301.1, 1304.7, 1315.2, 1339.9, 1348.8, 1352.5, 1364.4, 1364.6, 1372.6, 1415.7,
1426.0, 1429.0, 1432.8, 1437.3, 1440.5, 1450.1, 1454.1, 1459.3, 1465.6, 1638.2,
2476.8, 2938.7, 2948.1, 2960.5, 2966.1, 2979.4, 2982.5, 2983.6, 3007.8, 3031.9,
3033.4, 3037.3, 3047.1, 3050.5, 3054.1, 3057.3, 3071.9, 3079.1, 3089.1 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1 1.0000 0.02116 0.22468 0.09692 Biso 1.000 Si
Si2 1.0000 0.79232 0.76749 0.10035 Biso 1.000 Si
Si3 1.0000 0.25155 0.99414 0.09390 Biso 1.000 Si
Si4 1.0000 0.24419 0.99125 0.88753 Biso 1.000 Si
Si5 1.0000 0.78906 0.76390 0.89376 Biso 1.000 Si
Si6 1.0000 0.01827 0.22506 0.89364 Biso 1.000 Si
Si7 1.0000 0.68477 0.55634 0.43146 Biso 1.000 Si
Al1 1.0000 0.45809 0.10034 0.42737 Biso 1.000 Al
Si8 1.0000 0.91787 0.32758 0.43038 Biso 1.000 Si
Si9 1.0000 0.92024 0.33097 0.22609 Biso 1.000 Si
Si10 1.0000 0.45788 0.09712 0.22135 Biso 1.000 Si
Si11 1.0000 0.68652 0.55637 0.22473 Biso 1.000 Si
Si12 1.0000 0.35109 0.88571 0.76647 Biso 1.000 Si
Si13 1.0000 0.11958 0.42560 0.76296 Biso 1.000 Si
Si14 1.0000 0.58236 0.65990 0.76383 Biso 1.000 Si
Si15 1.0000 0.58622 0.66226 0.56092 Biso 1.000 Si
Si16 1.0000 0.11752 0.42218 0.56107 Biso 1.000 Si
Si17 1.0000 0.35132 0.88000 0.55889 Biso 1.000 Si
Si18 1.0000 0.01619 0.76085 0.89269 Biso 1.000 Si
Si19 1.0000 0.24716 0.22298 0.89008 Biso 1.000 Si
Si20 1.0000 0.78837 0.99217 0.89321 Biso 1.000 Si
Si21 1.0000 0.78853 0.99409 0.09720 Biso 1.000 Si
Si22 1.0000 0.25060 0.22424 0.09607 Biso 1.000 Si
Si23 1.0000 0.02148 0.76726 0.10003 Biso 1.000 Si
Si24 1.0000 0.68559 0.09993 0.22573 Biso 1.000 Si
Si25 1.0000 0.91749 0.55618 0.22518 Biso 1.000 Si
Si26 1.0000 0.45816 0.33068 0.22330 Biso 1.000 Si
Si27 1.0000 0.45459 0.33090 0.42964 Biso 1.000 Si
Si28 1.0000 0.91464 0.55387 0.43256 Biso 1.000 Si
Si29 1.0000 0.68475 0.09582 0.43157 Biso 1.000 Si
Si30 1.0000 0.35269 0.43497 0.55784 Biso 1.000 Si
Si31 1.0000 0.58809 0.89535 0.55727 Biso 1.000 Si
Si32 1.0000 0.11710 0.65574 0.56235 Biso 1.000 Si

Si33	1.0000	0.12006	0.65919	0.76527	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.58133	0.89075	0.76371	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.35078	0.42968	0.76290	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.92063	0.09334	0.10510	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.92400	0.80137	0.11593	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.22009	0.09348	0.10982	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.11379	0.89093	0.87099	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.82435	0.89585	0.87698	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.11662	0.19293	0.87481	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.58592	0.42741	0.45172	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58829	0.12352	0.46070	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88525	0.42486	0.45390	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.78960	0.23018	0.21774	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48444	0.22789	0.21124	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.78695	0.52582	0.21158	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.25161	0.75547	0.78443	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.25122	0.46080	0.78054	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54937	0.75908	0.77355	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.45396	0.56584	0.54752	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13777	0.54966	0.55424	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.45924	0.86805	0.53287	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.00226	0.30653	0.16370	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.70900	0.66348	0.16391	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35994	0.01586	0.15121	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32957	0.97427	0.82259	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.68174	0.67997	0.83271	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.03413	0.32756	0.83005	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66903	0.64473	0.49385	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35190	0.98263	0.49675	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01809	0.33773	0.49465	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.03544	0.67281	0.83292	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.33282	0.32575	0.82592	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.68697	0.97288	0.82661	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.70867	0.01731	0.16244	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.35352	0.31043	0.15947	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.00205	0.66419	0.16481	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.36869	0.35319	0.48999	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.01774	0.64220	0.49619	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.67828	0.99426	0.49353	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13995	0.23254	0.12302	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.77911	0.87536	0.12647	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.14326	0.87511	0.12479	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.25516	0.11199	0.86353	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.89466	0.74697	0.86637	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89663	0.11513	0.87197	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.80657	0.56837	0.45464	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.43314	0.20804	0.45329	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80981	0.20464	0.44711	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92963	0.44904	0.19377	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.57208	0.09642	0.19063	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56868	0.44849	0.19268	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.47205	0.89999	0.79459	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10647	0.53571	0.77927	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.47155	0.53950	0.78725	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59637	0.78307	0.53903	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.23373	0.42707	0.53229	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.23517	0.76706	0.53261	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.02507	0.26761	0.99548	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75578	0.73049	0.99744	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28012	0.98848	0.98969	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68176	0.58942	0.32797	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.42012	0.05105	0.32038	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.96325	0.34303	0.32849	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35217	0.91564	0.66124	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.08256	0.37675	0.66243	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.62555	0.65949	0.66285	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01919	0.73024	0.99676	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.28509	0.26044	0.99258	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74546	0.98636	0.99499	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67274	0.05594	0.32769	Biso	1.000	O

O68	1.0000	0.95332	0.58550	0.32932	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.42822	0.34348	0.32554	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34857	0.39238	0.65979	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.61409	0.93264	0.66119	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.08594	0.67215	0.66358	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.08789	0.07350	0.41931	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.08959	0.14510	0.45510	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.12523	0.91655	0.46547	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.12059	0.01112	0.48570	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.13916	0.05474	0.57926	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.12681	0.86762	0.52267	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.15582	0.00243	0.62565	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.06496	0.05903	0.60324	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.21166	0.14205	0.58152	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.96333	0.99377	0.38968	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.96216	0.92419	0.35134	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.92372	0.05556	0.32784	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.97511	0.08452	0.26729	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.92892	0.12985	0.36104	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.83511	0.99916	0.30832	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.11009	0.86073	0.37655	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.13906	0.92133	0.32157	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.02072	0.79749	0.36421	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.15735	0.81499	0.37316	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.27218	0.97307	0.48784	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.88232	0.94145	0.46810	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.79540	0.88652	0.44432	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.88165	0.00752	0.50977	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.90474	0.88949	0.51002	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.16809	0.12311	0.33911	Biso	1.000	C
H17	1.0000	0.25421	0.14267	0.35598	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.17260	0.20183	0.31646	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.13933	0.06430	0.28255	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 2-nonene:p; E= -1012.181 eV; ZPVE= 7.312eV;
frequencies =49.0, 59.8, 67.9, 76.8, 90.7, 97.9, 99.9, 121.5, 153.2, 165.5, 180.7,
201.8, 234.6, 242.4, 247.4, 270.6, 287.7, 303.2, 307.7, 321.1, 353.8, 428.2, 459.3,
483.5, 542.5, 605.9, 646.1, 673.7, 679.6, 710.0, 710.8, 739.5, 785.9, 828.2, 842.6,
873.8, 899.8, 940.7, 971.4, 1005.5, 1008.4, 1027.7, 1034.9, 1042.7, 1078.5, 1080.1,
1086.6, 1105.7, 1134.9, 1176.8, 1191.6, 1240.9, 1254.3, 1259.8, 1274.3, 1289.3,
1296.9, 1302.1, 1308.8, 1325.5, 1343.1, 1354.0, 1358.0, 1359.9, 1423.4, 1429.7,
1430.7, 1431.8, 1435.8, 1444.0, 1445.1, 1446.3, 1458.3, 1650.2, 2583.9, 2936.9,
2950.2, 2953.9, 2954.5, 2968.0, 2969.2, 2994.8, 2998.0, 3000.0, 3002.8, 3007.7,
3010.5, 3029.8, 3038.6, 3044.3, 3061.5, 3066.7, 3084.6 cm⁻¹

```

data_image0
_cell_length_a      13.625
_cell_length_b      13.625
_cell_length_c      15.067
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number      1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Si1      1.0000 0.00680 0.20979 0.09620 Biso 1.000 Si

```

Si2	1.0000	0.77674	0.75167	0.09768	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23813	0.98135	0.09440	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23413	0.97946	0.88861	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77516	0.74951	0.89386	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00551	0.20967	0.89069	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67017	0.53990	0.43180	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44691	0.08895	0.42888	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90740	0.31430	0.42850	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90721	0.31760	0.22382	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44513	0.08385	0.22183	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67308	0.54166	0.22371	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.33855	0.87132	0.76763	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.10657	0.41379	0.76203	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.56998	0.64640	0.76201	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57469	0.64908	0.56001	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10544	0.41317	0.55999	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.33906	0.86726	0.55916	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00354	0.75040	0.89140	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23475	0.21024	0.88895	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77460	0.98109	0.89295	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77363	0.98260	0.09567	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.23644	0.21137	0.09516	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00637	0.75525	0.09854	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67261	0.09001	0.22352	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90429	0.54576	0.22483	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44304	0.31659	0.22290	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43687	0.31591	0.42885	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90237	0.54391	0.43109	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67306	0.08734	0.43342	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.33978	0.42332	0.55696	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57495	0.88263	0.55588	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10324	0.64636	0.56123	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10627	0.64674	0.76498	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56833	0.87761	0.76192	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.33785	0.41779	0.76189	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.90643	0.07878	0.10871	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.90935	0.79003	0.11508	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20686	0.08097	0.10884	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10340	0.88019	0.87181	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80685	0.88126	0.88438	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10373	0.17734	0.87144	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.56776	0.41259	0.45150	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.57681	0.11406	0.46522	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88009	0.41634	0.44688	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77605	0.21977	0.21001	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46988	0.21404	0.21172	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77274	0.51049	0.20779	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23780	0.74179	0.78557	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.23867	0.44973	0.77870	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.53788	0.74630	0.76947	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44285	0.55295	0.54508	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12277	0.53957	0.55227	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44522	0.85311	0.53072	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.98907	0.29593	0.15890	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69580	0.65071	0.16483	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34345	0.00105	0.15489	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.31842	0.96124	0.82322	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.66955	0.66763	0.83086	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02306	0.31454	0.82916	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65699	0.63094	0.49288	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34260	0.97408	0.50123	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.00908	0.32760	0.49221	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02174	0.66156	0.83186	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.31945	0.31350	0.82476	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67411	0.95923	0.82469	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69469	0.00302	0.16442	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34009	0.29760	0.15779	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.98736	0.65155	0.16218	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35073	0.33815	0.48913	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00370	0.63404	0.49546	Biso	1.000	O

O36	1.0000	0.66455	0.98114	0.49108	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.12582	0.21890	0.12339	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.75958	0.85923	0.11496	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.12842	0.86248	0.12305	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24667	0.10090	0.86422	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88391	0.73966	0.86305	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88460	0.10043	0.86608	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.78949	0.54794	0.45742	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41646	0.19350	0.45283	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.79827	0.19433	0.45215	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92092	0.43967	0.19918	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55802	0.08330	0.18703	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55386	0.43462	0.19301	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45886	0.88445	0.79605	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09171	0.52282	0.77945	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.45868	0.52709	0.78696	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58575	0.77106	0.54116	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22340	0.42118	0.53303	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22043	0.75835	0.53134	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00966	0.24775	0.99338	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74142	0.70683	0.99598	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27024	0.97681	0.99076	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67013	0.57160	0.32778	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.41356	0.03904	0.32175	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94670	0.31836	0.32595	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34092	0.90038	0.66226	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06926	0.36684	0.66109	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61307	0.64338	0.66163	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00325	0.71801	0.99530	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.26988	0.24837	0.99166	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.73427	0.98641	0.99385	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.66175	0.05531	0.32773	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.93842	0.58271	0.32838	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40924	0.32671	0.32469	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.33646	0.38079	0.65883	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.59913	0.92179	0.65968	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07322	0.66119	0.66329	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.12822	0.98811	0.64356	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.20577	0.02244	0.68404	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.07950	0.89556	0.65190	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.12195	0.95025	0.47879	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.15590	0.02210	0.54847	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.06898	0.85896	0.49178	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.14331	0.98357	0.38273	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.20716	0.11328	0.53513	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.18595	0.94208	0.35068	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.20078	0.07577	0.37684	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.03192	0.94874	0.33362	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.97252	0.01163	0.36698	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.02596	0.10255	0.35107	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.96605	0.00648	0.44007	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.97595	0.85638	0.34093	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.04927	0.96446	0.26203	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.26931	0.97793	0.50757	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.85416	0.96648	0.32800	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.86030	0.96651	0.25521	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.82404	0.02549	0.34454	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.76800	0.84772	0.36050	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.76742	0.84868	0.43361	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.79709	0.78829	0.34182	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.64740	0.80156	0.32578	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.61227	0.85497	0.34614	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.59089	0.71549	0.35068	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.64442	0.79731	0.25309	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.07801	0.02374	0.67173	Biso	1.000	H

Adsorption as pi-complexes of 3-nonene*; E= -1012.156 eV; ZPVE= 7.281eV;
frequencies =20.0, 52.2, 59.6, 60.8, 68.7, 84.3, 91.9, 105.5, 115.2, 124.2, 143.1,
169.5, 213.1, 224.0, 262.0, 275.3, 280.4, 298.0, 314.7, 343.5, 373.5, 421.2, 485.7,
511.7, 565.4, 590.3, 619.7, 699.8, 701.1, 713.0, 720.7, 745.2, 761.7, 794.4, 832.7,

850.6, 871.2, 891.9, 947.4, 964.8, 986.3, 1011.6, 1021.0, 1042.3, 1056.7, 1071.4,
1089.8, 1091.9, 1150.8, 1174.7, 1208.3, 1231.0, 1245.4, 1251.4, 1268.7, 1274.1,
1288.8, 1298.6, 1314.3, 1327.4, 1341.7, 1349.9, 1354.9, 1364.9, 1407.9, 1425.6,
1426.9, 1434.4, 1440.4, 1447.2, 1448.6, 1450.1, 1452.5, 1644.9, 2627.8, 2930.2,
2933.2, 2939.8, 2951.6, 2962.1, 2963.9, 2968.2, 2977.2, 2978.5, 2987.4, 2997.1,
3034.9, 3040.2, 3045.9, 3046.8, 3052.5, 3112.8, 3130.4 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 13.625
_cell_length_b 13.625
_cell_length_c 15.067
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 120

_symmetry_space_group_name_H-M "P 1"
_symmetry_int_tables_number 1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.00957	0.26310	0.09863	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78052	0.80471	0.10178	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.23943	0.03572	0.09517	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23648	0.03173	0.89120	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.77858	0.80179	0.89393	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00588	0.26152	0.89403	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67236	0.59283	0.43200	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44628	0.13936	0.43751	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90710	0.36388	0.43345	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90944	0.36923	0.22752	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44597	0.13490	0.22224	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67682	0.59428	0.22546	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34211	0.92578	0.76955	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11063	0.46744	0.76678	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57307	0.69620	0.76612	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57613	0.70182	0.56210	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11042	0.47016	0.56234	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34178	0.92525	0.56652	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00439	0.79687	0.89624	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23641	0.25853	0.88981	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.77782	0.03094	0.89326	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78052	0.03322	0.10014	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24017	0.26219	0.09615	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.00727	0.80175	0.10005	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67786	0.13812	0.22781	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90876	0.59604	0.22826	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44604	0.37030	0.22586	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.43955	0.37046	0.42753	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90194	0.58968	0.43560	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.67525	0.13795	0.43131	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34430	0.47597	0.56066	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.56823	0.92814	0.56276	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10444	0.69521	0.56656	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10684	0.69366	0.76901	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.56945	0.92708	0.76801	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34259	0.46752	0.76443	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91215	0.13155	0.11541	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91173	0.83739	0.11968	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.20555	0.13145	0.11873	Biso	1.000	O

O4	1.0000	0.10716	0.92669	0.88403	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.80868	0.93158	0.87541	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10660	0.23192	0.88012	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57234	0.46335	0.44889	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58888	0.18474	0.44125	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87089	0.45939	0.45404	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77835	0.26907	0.21533	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.46845	0.26266	0.22430	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77935	0.56721	0.21124	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.23642	0.79707	0.77892	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24082	0.49564	0.77900	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54456	0.79781	0.77831	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44292	0.60781	0.54756	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13969	0.59987	0.54581	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.43305	0.88181	0.54844	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99306	0.34701	0.16502	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69482	0.69903	0.16331	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.34484	0.05191	0.15639	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32289	0.01145	0.83171	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67311	0.71329	0.83350	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02454	0.36419	0.82990	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.65653	0.68085	0.49461	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35975	0.02374	0.50047	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01136	0.38333	0.49656	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02299	0.71050	0.83507	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32259	0.36268	0.82734	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67296	0.01274	0.83166	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69570	0.05513	0.16118	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34620	0.34895	0.15692	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99548	0.70508	0.16901	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35826	0.39431	0.49138	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00392	0.67798	0.49954	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.64630	0.03214	0.49709	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13269	0.27740	0.11866	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76780	0.91280	0.12868	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13160	0.91196	0.11470	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.23978	0.14645	0.85855	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88752	0.79082	0.86672	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88683	0.15132	0.86748	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79278	0.60283	0.45640	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.41448	0.24490	0.44268	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80385	0.23803	0.45352	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92084	0.48876	0.19709	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55986	0.13265	0.19897	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.56096	0.48254	0.19427	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.45706	0.92862	0.80120	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10416	0.57788	0.79682	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46134	0.57767	0.79226	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59325	0.82596	0.54135	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22316	0.46500	0.54030	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.21470	0.81808	0.55219	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00323	0.29859	0.99650	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74702	0.77029	0.99825	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.28043	0.04604	0.99327	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.67170	0.62774	0.32831	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.40138	0.07747	0.32344	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94849	0.37583	0.33029	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.35454	0.97005	0.66840	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.06982	0.43267	0.66448	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61254	0.69426	0.66420	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.99631	0.75590	0.99904	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27746	0.29044	0.99259	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74393	0.03020	0.99700	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.67236	0.09420	0.32871	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94189	0.62394	0.33257	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.41154	0.38857	0.32467	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34727	0.43401	0.66153	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60198	0.96971	0.66571	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.05969	0.68449	0.66830	Biso	1.000	O
H1	1.0000	0.33786	0.99366	0.32333	Biso	1.000	H

C1	1.0000	0.25785	0.82823	0.33787	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.18624	0.86544	0.31515	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.30719	0.77917	0.27474	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.26939	0.65560	0.29878	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.17670	0.60190	0.29435	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.29446	0.64914	0.36703	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.30755	0.62038	0.25381	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.40075	0.82917	0.27751	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.12359	0.90444	0.37406	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.16683	0.86206	0.24462	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.28244	0.78467	0.20608	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.15996	0.92395	0.44112	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.03699	0.83169	0.38141	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.27812	0.82598	0.40768	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.11271	0.00354	0.33718	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.03079	0.02545	0.39181	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.06383	0.04959	0.46009	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.94949	0.94508	0.39770	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.08197	0.98532	0.26806	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.19679	0.08085	0.33496	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.00858	0.11650	0.35281	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.11295	0.23498	0.35198	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.18126	0.23867	0.31077	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.14726	0.26178	0.41930	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.94065	0.11812	0.39151	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.97524	0.09151	0.28471	Biso	1.000	H
H19	1.0000	0.09342	0.29854	0.32582	Biso	1.000	H

others of Propoxide b-H elimination;; E= -910.940 eV; ZPVE= 2.708eV; frequencies
=100.3i, 80.9, 94.4, 132.9, 188.4, 217.3, 284.4, 302.2, 330.4, 357.2, 406.4, 520.4,
592.4, 618.9, 648.7, 661.0, 681.4, 696.3, 865.5, 951.4, 964.1, 986.6, 1088.4,
1132.9, 1179.1, 1224.6, 1246.5, 1357.7, 1375.0, 1430.5, 1449.1, 1477.5, 1769.3,
2979.8, 3006.6, 3053.5, 3069.7, 3079.0, 3182.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
Si1	1.0000	0.01206	0.22195	0.09765	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78430	0.76764	0.09863	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24451	0.99436	0.09332	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23717	0.99097	0.88602	Biso	1.000	Si
Si5	1.0000	0.78265	0.76402	0.89069	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.01040	0.22273	0.89118	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.68007	0.56302	0.42890	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44998	0.09886	0.42952	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.90871	0.32421	0.42949	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90923	0.32805	0.22356	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44655	0.09712	0.22336	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.68107	0.55917	0.22503	Biso	1.000	Si

Si12	1.0000	0.34334	0.88593	0.76417	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11260	0.42599	0.76211	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57504	0.65908	0.76273	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.57899	0.66158	0.55987	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.11313	0.42691	0.56091	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34084	0.88534	0.55589	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00960	0.76098	0.89180	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.24003	0.22226	0.88866	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78306	0.99187	0.88868	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.78090	0.99325	0.09635	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24342	0.22446	0.09542	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01387	0.76820	0.10001	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.68144	0.09772	0.22574	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90978	0.55731	0.22566	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44981	0.32777	0.22319	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44669	0.32902	0.42937	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90449	0.55122	0.43145	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68479	0.09261	0.42703	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34561	0.43202	0.55681	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57480	0.89201	0.55689	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.11032	0.65772	0.56250	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.11264	0.65891	0.76492	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57328	0.89007	0.76220	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34417	0.42921	0.76167	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91212	0.09141	0.11370	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91601	0.80189	0.11635	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21459	0.09438	0.11262	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10679	0.89091	0.86919	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81800	0.89522	0.87044	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10958	0.19171	0.87313	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57445	0.43621	0.44149	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58452	0.12028	0.43554	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.87200	0.42010	0.44566	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77778	0.22998	0.20812	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.48169	0.22914	0.20446	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77863	0.52477	0.21040	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24375	0.75590	0.78326	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24421	0.45993	0.77766	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54306	0.75884	0.77231	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44930	0.56094	0.54349	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.13989	0.55687	0.55621	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44548	0.86286	0.53544	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99391	0.30790	0.16041	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69930	0.65960	0.15810	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35405	0.01528	0.14981	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32394	0.97401	0.82351	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67442	0.67812	0.83144	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02921	0.32873	0.83077	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66691	0.65101	0.49339	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.34823	0.98640	0.49478	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01520	0.34771	0.49157	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02858	0.67163	0.83404	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32609	0.32605	0.82579	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67787	0.97175	0.82645	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69419	0.01636	0.15357	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34809	0.31139	0.15738	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99402	0.66417	0.16386	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35716	0.34734	0.48856	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00656	0.63431	0.49725	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66578	0.98900	0.49187	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13271	0.23260	0.12287	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76843	0.87345	0.12707	Biso	1.000	O
O39	1.0000	0.13588	0.87622	0.12653	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24896	0.11198	0.86200	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88780	0.74579	0.86488	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.89006	0.11437	0.86414	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79633	0.56489	0.45535	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.44142	0.21546	0.46051	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80536	0.20139	0.45605	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92301	0.44988	0.19754	Biso	1.000	O

O47	1.0000	0.55797	0.08509	0.21217	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55942	0.44998	0.20264	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46362	0.89846	0.79264	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.10048	0.53618	0.78020	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46416	0.53922	0.78705	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.58382	0.77988	0.53964	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22753	0.42708	0.53358	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22135	0.77326	0.53102	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.01151	0.25724	0.99464	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.75100	0.73492	0.99499	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27080	0.98861	0.98925	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68650	0.60378	0.32621	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.39029	0.05783	0.32146	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94644	0.32844	0.32625	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34254	0.91713	0.66033	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07357	0.37849	0.66135	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61741	0.65735	0.66181	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.01330	0.73345	0.99665	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27651	0.25802	0.99175	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74766	0.98872	0.99214	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69616	0.05839	0.32441	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94562	0.59146	0.32934	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40719	0.32202	0.32502	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34394	0.39147	0.65904	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60663	0.93267	0.66000	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07576	0.67004	0.66390	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.20963	0.03612	0.33722	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.18545	0.97530	0.28285	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.25683	0.12597	0.32066	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.16621	0.99901	0.42287	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.17301	0.06726	0.46614	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.24215	0.98760	0.45370	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.05947	0.88348	0.43360	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.04847	0.85495	0.50276	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.06334	0.81920	0.39217	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.98442	0.88875	0.41423	Biso	1.000	H

others of Ethoxide b-H elimination;; E= -894.329 eV; ZPVE= 1.955eV; frequencies
=187.5i, 65.6, 100.3, 213.3, 282.8, 293.0, 329.3, 374.1, 461.8, 524.7, 592.0,
609.6, 658.8, 691.3, 697.6, 781.2, 891.6, 957.8, 1085.8, 1167.0, 1206.7, 1249.0,
1314.6, 1420.5, 1490.2, 1694.2, 3004.5, 3085.1, 3100.2, 3194.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	13.625
_cell_length_b	13.625
_cell_length_c	15.067
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	120

_symmetry_space_group_name_H-M	"P 1"
_symmetry_int_tables_number	1

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz	'x, y, z'
----------------------------	-----------

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
Si1	1.0000	0.01018	0.22714	0.10092	Biso	1.000	Si
Si2	1.0000	0.78227	0.77249	0.10268	Biso	1.000	Si
Si3	1.0000	0.24268	0.99968	0.09566	Biso	1.000	Si
Si4	1.0000	0.23576	0.99639	0.88861	Biso	1.000	Si

Si5	1.0000	0.78052	0.76907	0.89488	Biso	1.000	Si
Si6	1.0000	0.00824	0.22756	0.89429	Biso	1.000	Si
Si7	1.0000	0.67710	0.56341	0.43266	Biso	1.000	Si
Al1	1.0000	0.44531	0.10424	0.43351	Biso	1.000	Al
Si8	1.0000	0.91041	0.33140	0.43324	Biso	1.000	Si
Si9	1.0000	0.90730	0.33327	0.22685	Biso	1.000	Si
Si10	1.0000	0.44355	0.10128	0.22696	Biso	1.000	Si
Si11	1.0000	0.67867	0.56292	0.22841	Biso	1.000	Si
Si12	1.0000	0.34202	0.88987	0.76825	Biso	1.000	Si
Si13	1.0000	0.11054	0.43102	0.76484	Biso	1.000	Si
Si14	1.0000	0.57374	0.66389	0.76669	Biso	1.000	Si
Si15	1.0000	0.58126	0.66892	0.56386	Biso	1.000	Si
Si16	1.0000	0.10957	0.43094	0.56331	Biso	1.000	Si
Si17	1.0000	0.34333	0.88709	0.56067	Biso	1.000	Si
Si18	1.0000	0.00734	0.76645	0.89420	Biso	1.000	Si
Si19	1.0000	0.23783	0.22708	0.89095	Biso	1.000	Si
Si20	1.0000	0.78082	0.99740	0.89357	Biso	1.000	Si
Si21	1.0000	0.77927	0.99885	0.10111	Biso	1.000	Si
Si22	1.0000	0.24154	0.22949	0.09789	Biso	1.000	Si
Si23	1.0000	0.01140	0.77308	0.10217	Biso	1.000	Si
Si24	1.0000	0.67941	0.10382	0.23015	Biso	1.000	Si
Si25	1.0000	0.90823	0.56305	0.22833	Biso	1.000	Si
Si26	1.0000	0.44706	0.33237	0.22640	Biso	1.000	Si
Si27	1.0000	0.44157	0.33316	0.43251	Biso	1.000	Si
Si28	1.0000	0.90719	0.56173	0.43436	Biso	1.000	Si
Si29	1.0000	0.68215	0.10247	0.43169	Biso	1.000	Si
Si30	1.0000	0.34593	0.44339	0.55986	Biso	1.000	Si
Si31	1.0000	0.57813	0.89895	0.56161	Biso	1.000	Si
Si32	1.0000	0.10674	0.66431	0.56489	Biso	1.000	Si
Si33	1.0000	0.10997	0.66383	0.76749	Biso	1.000	Si
Si34	1.0000	0.57190	0.89484	0.76686	Biso	1.000	Si
Si35	1.0000	0.34233	0.43538	0.76452	Biso	1.000	Si
O1	1.0000	0.91069	0.09667	0.11808	Biso	1.000	O
O2	1.0000	0.91432	0.80741	0.11992	Biso	1.000	O
O3	1.0000	0.21250	0.09931	0.11542	Biso	1.000	O
O4	1.0000	0.10531	0.89629	0.87242	Biso	1.000	O
O5	1.0000	0.81514	0.90026	0.87589	Biso	1.000	O
O6	1.0000	0.10703	0.19591	0.87631	Biso	1.000	O
O7	1.0000	0.57215	0.43602	0.44518	Biso	1.000	O
O8	1.0000	0.58144	0.12982	0.43878	Biso	1.000	O
O9	1.0000	0.88510	0.43469	0.45191	Biso	1.000	O
O10	1.0000	0.77552	0.23589	0.21115	Biso	1.000	O
O11	1.0000	0.47852	0.23312	0.20879	Biso	1.000	O
O12	1.0000	0.77683	0.52943	0.21303	Biso	1.000	O
O13	1.0000	0.24127	0.76011	0.78632	Biso	1.000	O
O14	1.0000	0.24252	0.46638	0.78079	Biso	1.000	O
O15	1.0000	0.54200	0.76375	0.77599	Biso	1.000	O
O16	1.0000	0.44950	0.57290	0.54788	Biso	1.000	O
O17	1.0000	0.12402	0.55599	0.55573	Biso	1.000	O
O18	1.0000	0.44653	0.86261	0.54074	Biso	1.000	O
O19	1.0000	0.99182	0.31313	0.16350	Biso	1.000	O
O20	1.0000	0.69771	0.66501	0.16289	Biso	1.000	O
O21	1.0000	0.35120	0.01940	0.15327	Biso	1.000	O
O22	1.0000	0.32212	0.97847	0.82634	Biso	1.000	O
O23	1.0000	0.67233	0.68274	0.83598	Biso	1.000	O
O24	1.0000	0.02769	0.33378	0.83379	Biso	1.000	O
O25	1.0000	0.66510	0.65160	0.49771	Biso	1.000	O
O26	1.0000	0.35017	0.98706	0.49828	Biso	1.000	O
O27	1.0000	0.01506	0.34559	0.49387	Biso	1.000	O
O28	1.0000	0.02613	0.67693	0.83653	Biso	1.000	O
O29	1.0000	0.32292	0.33088	0.82764	Biso	1.000	O
O30	1.0000	0.67517	0.97666	0.83190	Biso	1.000	O
O31	1.0000	0.69295	0.02145	0.15945	Biso	1.000	O
O32	1.0000	0.34644	0.31637	0.15954	Biso	1.000	O
O33	1.0000	0.99217	0.66909	0.16572	Biso	1.000	O
O34	1.0000	0.35672	0.35954	0.49042	Biso	1.000	O
O35	1.0000	0.00827	0.65340	0.49789	Biso	1.000	O
O36	1.0000	0.66473	0.00012	0.49747	Biso	1.000	O
O37	1.0000	0.13116	0.23816	0.12538	Biso	1.000	O
O38	1.0000	0.76627	0.87841	0.13045	Biso	1.000	O

O39	1.0000	0.13414	0.88075	0.12766	Biso	1.000	O
O40	1.0000	0.24742	0.11718	0.86396	Biso	1.000	O
O41	1.0000	0.88598	0.75216	0.86736	Biso	1.000	O
O42	1.0000	0.88769	0.11934	0.86747	Biso	1.000	O
O43	1.0000	0.79363	0.56546	0.45825	Biso	1.000	O
O44	1.0000	0.42917	0.21646	0.46463	Biso	1.000	O
O45	1.0000	0.80142	0.21279	0.46036	Biso	1.000	O
O46	1.0000	0.92208	0.45565	0.20155	Biso	1.000	O
O47	1.0000	0.55529	0.08974	0.21602	Biso	1.000	O
O48	1.0000	0.55741	0.45389	0.20476	Biso	1.000	O
O49	1.0000	0.46156	0.90168	0.79783	Biso	1.000	O
O50	1.0000	0.09700	0.54064	0.78207	Biso	1.000	O
O51	1.0000	0.46244	0.54442	0.79110	Biso	1.000	O
O52	1.0000	0.59504	0.79142	0.54323	Biso	1.000	O
O53	1.0000	0.22919	0.44156	0.53759	Biso	1.000	O
O54	1.0000	0.22391	0.77521	0.53602	Biso	1.000	O
O55	1.0000	0.00892	0.26179	0.99780	Biso	1.000	O
O56	1.0000	0.74924	0.73873	0.99911	Biso	1.000	O
O57	1.0000	0.27035	0.99520	0.99178	Biso	1.000	O
O58	1.0000	0.68285	0.60492	0.33024	Biso	1.000	O
O59	1.0000	0.38609	0.06058	0.32500	Biso	1.000	O
O60	1.0000	0.94425	0.33278	0.32940	Biso	1.000	O
O61	1.0000	0.34459	0.92159	0.66414	Biso	1.000	O
O62	1.0000	0.07221	0.38310	0.66414	Biso	1.000	O
O63	1.0000	0.61723	0.66235	0.66615	Biso	1.000	O
O64	1.0000	0.00977	0.73787	0.99892	Biso	1.000	O
O65	1.0000	0.27457	0.26256	0.99409	Biso	1.000	O
O66	1.0000	0.74608	0.99582	0.99703	Biso	1.000	O
O67	1.0000	0.69401	0.06675	0.32968	Biso	1.000	O
O68	1.0000	0.94488	0.59983	0.33150	Biso	1.000	O
O69	1.0000	0.40463	0.32795	0.32785	Biso	1.000	O
O70	1.0000	0.34348	0.40015	0.66138	Biso	1.000	O
O71	1.0000	0.60698	0.93879	0.66512	Biso	1.000	O
O72	1.0000	0.07344	0.67638	0.66665	Biso	1.000	O
C1	1.0000	0.19848	0.99668	0.33292	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.19240	0.93995	0.27960	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.22119	0.08289	0.31445	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.15746	0.95411	0.41795	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.13493	0.00548	0.46001	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.24062	0.96358	0.45586	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.10175	0.86190	0.42255	Biso	1.000	H

1-nonene; E= -148.097 eV; ZPVE= 6.615eV; frequencies =23.9, 47.5, 75.4, 88.1, 113.9, 145.1, 157.9, 189.3, 244.2, 254.2, 307.7, 413.7, 436.5, 474.2, 640.0, 713.3, 719.3, 748.4, 809.5, 880.7, 889.1, 899.7, 915.6, 970.5, 988.5, 995.4, 1011.5, 1027.0, 1040.5, 1052.0, 1058.5, 1106.1, 1155.2, 1178.7, 1194.9, 1222.1, 1241.3, 1260.7, 1275.5, 1282.9, 1288.9, 1290.8, 1293.1, 1323.2, 1343.5, 1347.7, 1358.8, 1400.8, 1423.5, 1427.8, 1429.3, 1434.3, 1442.3, 1444.6, 1450.9, 1456.7, 1654.0, 2923.4, 2924.3, 2925.4, 2931.8, 2939.5, 2942.5, 2944.2, 2952.5, 2953.2, 2963.9, 2973.0, 2983.7, 2993.0, 3020.1, 3029.3, 3038.4, 3053.2, 3139.6 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	20.6471
_cell_length_b	26.6996
_cell_length_c	26.6532
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	90

loop_

_atom_site_label							
_atom_site_occupancy							
_atom_site_fract_x							
_atom_site_fract_y							
_atom_site_fract_z							
_atom_site_thermal_displace_type							
_atom_site_B_iso_or_equiv							
_atom_site_type_symbol							
C1	1.0000	0.49231	0.54080	0.46084	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.45431	0.52066	0.43973	Biso	1.000	H

H2	1.0000	0.53881	0.52965	0.44371	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.48228	0.61319	0.39999	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.48302	0.59749	0.45396	Biso	1.000	C
H3	1.0000	0.44412	0.59638	0.37678	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.52427	0.64475	0.37859	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.52149	0.61788	0.47419	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.52134	0.65441	0.33886	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.56320	0.66221	0.40025	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.43668	0.60834	0.47174	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.49075	0.52433	0.51577	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.52857	0.54473	0.53684	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.44411	0.53565	0.53269	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.50034	0.46799	0.52289	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.46249	0.44761	0.50183	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.54693	0.45673	0.50586	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.49898	0.45133	0.57778	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.53686	0.47167	0.59887	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.45241	0.46260	0.59485	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.50853	0.39495	0.58482	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.47067	0.37475	0.56368	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55507	0.38380	0.56772	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.50705	0.37870	0.63978	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.46042	0.38829	0.65742	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.51403	0.33804	0.64376	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.54545	0.39742	0.66150	Biso	1.000	H

2-methyl-2-octene; E= -148.326 eV; ZPVE= 6.588eV; frequencies =28.6, 54.9, 58.5, 104.1, 136.7, 139.7, 165.8, 201.3, 237.7, 275.8, 300.9, 346.9, 391.6, 425.3, 486.8, 535.2, 713.4, 733.2, 773.5, 826.2, 834.4, 880.7, 928.3, 938.9, 972.2, 990.6, 993.6, 1028.5, 1054.5, 1055.4, 1069.6, 1094.6, 1094.6, 1113.0, 1174.4, 1203.6, 1214.7, 1248.9, 1274.3, 1282.3, 1287.1, 1318.9, 1334.4, 1343.8, 1354.4, 1357.7, 1361.8, 1412.3, 1417.8, 1428.4, 1430.5, 1432.8, 1435.6, 1440.4, 1444.0, 1446.2, 1454.6, 1682.1, 2923.5, 2925.7, 2936.3, 2936.5, 2942.8, 2944.1, 2947.8, 2953.3, 2967.9, 2980.9, 2983.4, 2987.3, 2995.3, 3020.2, 3029.4, 3029.9, 3039.0, 3054.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 27.0404
_cell_length_b 23.3099
_cell_length_c 23.6496
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.59227	0.45356	0.52983	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.56825	0.46743	0.48189	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.64726	0.46224	0.53509	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.65610	0.49120	0.57062	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.51410	0.46260	0.46917	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.59051	0.48569	0.44748	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.66335	0.48044	0.49636	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.49445	0.43887	0.50261	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.50913	0.43728	0.43001	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.48915	0.52127	0.46084	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.43451	0.51695	0.44484	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.41457	0.49236	0.47768	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.43079	0.49176	0.40546	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.50921	0.54552	0.42789	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.49308	0.54647	0.50011	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.66621	0.42132	0.54419	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.56808	0.42874	0.58161	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.52802	0.42291	0.57702	Biso	1.000	H

H12	1.0000	0.57454	0.45664	0.61858	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.58445	0.38673	0.59224	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.40942	0.57523	0.43706	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.35480	0.57048	0.42123	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.33382	0.54741	0.45405	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.34997	0.54681	0.38129	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.42933	0.59971	0.40419	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.41328	0.60033	0.47641	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.33767	0.61295	0.41592	Biso	1.000	H

2334-4-methyl-1-pentene; E= -148.129 eV; ZPVE= 6.585eV; frequencies =45.8, 90.0, 161.8, 191.9, 213.5, 227.4, 238.4, 280.5, 282.2, 312.0, 330.6, 360.2, 378.6, 393.3, 438.4, 474.6, 506.9, 559.6, 650.7, 711.2, 782.3, 878.4, 881.0, 898.8, 906.2, 917.0, 933.4, 942.3, 974.7, 986.6, 1024.2, 1045.5, 1092.1, 1126.2, 1156.0, 1161.4, 1187.2, 1255.3, 1302.2, 1311.8, 1336.7, 1343.9, 1354.4, 1355.6, 1368.0, 1394.1, 1422.6, 1426.2, 1430.9, 1435.4, 1441.0, 1443.7, 1456.6, 1457.5, 1457.9, 1465.7, 1643.1, 2941.3, 2956.7, 2958.3, 2961.7, 2963.0, 2970.5, 3008.8, 3021.1, 3026.0, 3033.5, 3036.2, 3036.5, 3038.6, 3043.1, 3045.3, 3046.5, 3067.2, 3152.9 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.0258
_cell_length_b 23.5146
_cell_length_c 22.9981
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.49051	0.47392	0.48355	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.45366	0.52730	0.48513	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.45921	0.42120	0.50563	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.42246	0.41259	0.47848	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.44500	0.42598	0.55080	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.48606	0.38343	0.50336	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.54446	0.48496	0.52060	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.58643	0.43578	0.51955	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.59892	0.42391	0.47520	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.56994	0.39758	0.54120	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.62444	0.44821	0.54305	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.53134	0.50132	0.58366	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.50175	0.53689	0.58633	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.56963	0.51379	0.60664	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.51316	0.46530	0.60766	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.40022	0.52662	0.50211	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.37915	0.48828	0.51704	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.37542	0.56556	0.50154	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.47947	0.58273	0.46592	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.51277	0.59649	0.49573	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.44809	0.61667	0.46460	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.49841	0.57959	0.42244	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.50671	0.46278	0.41942	Biso	1.000	C
H15	1.0000	0.53481	0.49571	0.40231	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46927	0.46179	0.39189	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.52781	0.42155	0.41479	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.56538	0.52164	0.50005	Biso	1.000	H

4-methyl-4-octene; E= -148.299 eV; ZPVE= 6.600eV; frequencies =40.7, 55.7, 72.7, 73.6, 93.4, 149.1, 194.2, 236.3, 237.5, 283.4, 289.2, 333.9, 360.7, 474.2, 494.1, 566.7, 723.3, 726.6, 770.9, 834.9, 858.2, 866.5, 878.6, 891.4, 966.0, 1005.6, 1010.6, 1032.9, 1036.3, 1076.3, 1079.6, 1083.9, 1116.0, 1186.2, 1212.8, 1224.2, 1247.0, 1262.5, 1276.2, 1279.6, 1320.9, 1322.4, 1341.2, 1354.7, 1356.5, 1364.5, 1415.7, 1421.4, 1431.7, 1436.1, 1437.6, 1440.6, 1443.4, 1443.6, 1451.9, 1452.4,

1674.0, 2916.7, 2923.0, 2946.7, 2948.1, 2950.5, 2952.9, 2953.4, 2968.6, 2972.5,
2990.5, 2993.0, 2995.3, 3021.5, 3022.7, 3027.9, 3028.8, 3029.1, 3052.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 27.2137
_cell_length_b 22.5442
_cell_length_c 23.0906
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.50870 0.48305 0.51770 Biso 1.000 C
C2 1.0000 0.48504 0.50089 0.46954 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.56369 0.49065 0.52286 Biso 1.000 C
C4 1.0000 0.59281 0.43218 0.52343 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.58380 0.40694 0.48389 Biso 1.000 H
H2 1.0000 0.58087 0.40452 0.56021 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.57221 0.51519 0.56317 Biso 1.000 H
C5 1.0000 0.43125 0.49741 0.45596 Biso 1.000 C
H4 1.0000 0.50742 0.52177 0.43561 Biso 1.000 H
H5 1.0000 0.57708 0.51831 0.48675 Biso 1.000 H
H6 1.0000 0.41121 0.47187 0.48908 Biso 1.000 H
H7 1.0000 0.42622 0.47291 0.41486 Biso 1.000 H
C6 1.0000 0.40727 0.55882 0.44939 Biso 1.000 C
C7 1.0000 0.35312 0.55546 0.43225 Biso 1.000 C
H8 1.0000 0.33160 0.53095 0.46481 Biso 1.000 H
H9 1.0000 0.34848 0.53241 0.39053 Biso 1.000 H
H10 1.0000 0.33676 0.59987 0.42793 Biso 1.000 H
H11 1.0000 0.42785 0.58460 0.41677 Biso 1.000 H
H12 1.0000 0.41131 0.58321 0.49053 Biso 1.000 H
C8 1.0000 0.48390 0.45469 0.56898 Biso 1.000 C
H13 1.0000 0.49566 0.40823 0.57452 Biso 1.000 H
H14 1.0000 0.44368 0.45489 0.56573 Biso 1.000 H
H15 1.0000 0.49414 0.47801 0.60921 Biso 1.000 H
C9 1.0000 0.64826 0.44221 0.52707 Biso 1.000 C
H16 1.0000 0.65816 0.46640 0.56685 Biso 1.000 H
H17 1.0000 0.66149 0.46861 0.49008 Biso 1.000 H
H18 1.0000 0.66860 0.40004 0.52714 Biso 1.000 H

233-trimethyl-1-hexene; E= -148.107 eV; ZPVE= 6.591eV; frequencies =50.5, 88.0,
90.8, 163.4, 224.9, 233.7, 244.8, 249.3, 296.2, 300.0, 323.8, 339.7, 388.2, 423.0,
462.7, 473.2, 562.7, 669.6, 706.3, 732.1, 831.5, 855.0, 871.9, 893.9, 917.4, 931.3,
945.0, 978.5, 989.2, 1020.4, 1035.5, 1054.5, 1079.9, 1147.9, 1168.2, 1181.4,
1228.2, 1253.1, 1280.8, 1298.2, 1335.1, 1338.9, 1354.3, 1357.1, 1366.5, 1390.8,
1417.5, 1421.1, 1429.5, 1436.2, 1440.0, 1440.4, 1444.1, 1452.1, 1453.2, 1467.7,
1642.8, 2924.6, 2948.0, 2951.8, 2952.3, 2958.1, 2963.3, 2963.9, 2988.4, 3004.4,
3021.1, 3025.4, 3027.2, 3029.9, 3041.4, 3042.6, 3045.3, 3062.8, 3141.7 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 23.2135
_cell_length_b 22.5504
_cell_length_c 24.1286
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol				
C1	1.0000	0.46836	0.50264	0.44057	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.43524	0.54958	0.45297	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.44111	0.44721	0.41763	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.39415	0.45222	0.41443	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.45009	0.40829	0.44388	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45790	0.43649	0.37611	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53392	0.50307	0.45094	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.56048	0.56244	0.43226	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.54313	0.60019	0.45573	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.55214	0.57047	0.38801	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.60745	0.56181	0.43868	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.56509	0.45350	0.41882	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.54986	0.40890	0.42979	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.61154	0.45528	0.42784	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.55977	0.45898	0.37379	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.38866	0.54823	0.44678	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.45277	0.59072	0.46976	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.54552	0.49603	0.51409	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.52874	0.53598	0.53508	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.59272	0.49628	0.52041	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.52001	0.44140	0.54252	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.53552	0.40064	0.52212	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.47278	0.44186	0.53766	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.53509	0.43895	0.60417	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.51626	0.39975	0.62439	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.51901	0.47851	0.62603	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.58208	0.43719	0.61042	Biso	1.000	H

2344-4methyl-2-pentene; E= -148.022 eV; ZPVE= 6.562eV; frequencies =56.5, 65.8, 113.6, 168.4, 179.3, 216.5, 218.2, 252.5, 297.1, 303.6, 323.4, 354.0, 366.1, 377.7, 421.8, 429.5, 466.3, 523.2, 583.7, 623.1, 782.9, 868.8, 904.6, 907.2, 923.2, 933.3, 937.5, 976.3, 996.1, 1007.5, 1023.4, 1047.8, 1085.0, 1108.3, 1174.1, 1184.1, 1205.1, 1241.9, 1336.2, 1340.9, 1344.7, 1352.0, 1358.6, 1377.6, 1411.3, 1417.9, 1420.9, 1428.9, 1431.5, 1435.8, 1438.1, 1444.9, 1454.1, 1457.1, 1466.4, 1472.5, 1644.8, 2935.2, 2939.9, 2952.2, 2953.4, 2960.4, 2966.0, 2981.0, 2987.8, 2995.0, 3018.6, 3023.2, 3030.5, 3041.9, 3051.9, 3056.2, 3075.8, 3078.7, 3091.8 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.3109
_cell_length_b 23.4115
_cell_length_c 21.8538
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_	_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.49179	0.47860	0.47956	Biso	1.000	C	
C2	1.0000	0.45809	0.52447	0.48560	Biso	1.000	C	
C3	1.0000	0.46907	0.42174	0.45870	Biso	1.000	C	
H1	1.0000	0.42443	0.42229	0.45229	Biso	1.000	H	
H2	1.0000	0.47775	0.38832	0.49291	Biso	1.000	H	
H3	1.0000	0.48780	0.40703	0.41557	Biso	1.000	H	
C4	1.0000	0.55419	0.47895	0.49518	Biso	1.000	C	
C5	1.0000	0.58331	0.42380	0.47366	Biso	1.000	C	
H4	1.0000	0.58029	0.41793	0.42383	Biso	1.000	H	
H5	1.0000	0.56713	0.38524	0.49598	Biso	1.000	H	
H6	1.0000	0.62730	0.42668	0.48517	Biso	1.000	H	
C6	1.0000	0.56244	0.48217	0.56520	Biso	1.000	C	

H7	1.0000	0.54501	0.52113	0.58532	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.60659	0.48092	0.57659	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.54257	0.44550	0.58770	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.39804	0.52409	0.46718	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.38723	0.49123	0.43355	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.38698	0.56575	0.44710	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.37106	0.51843	0.50742	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.47333	0.58204	0.51188	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.44045	0.59636	0.54313	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.47591	0.61470	0.47552	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.51191	0.58295	0.53754	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.58460	0.52820	0.46250	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.57050	0.57073	0.47625	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.57910	0.52473	0.41264	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.62902	0.52574	0.47222	Biso	1.000	H

244-trimethyl-2-pentene; E= -131.675 eV; ZPVE= 5.824eV; frequencies =73.0, 124.7, 172.3, 184.8, 212.1, 230.7, 253.2, 297.7, 302.6, 320.4, 345.5, 367.7, 413.7, 435.4, 489.9, 552.2, 754.4, 810.5, 815.4, 907.7, 909.0, 922.6, 925.7, 934.3, 971.5, 1011.2, 1015.6, 1055.8, 1061.5, 1146.8, 1185.8, 1214.8, 1233.7, 1330.5, 1339.5, 1341.7, 1353.4, 1364.3, 1377.1, 1412.6, 1422.4, 1424.0, 1432.1, 1432.6, 1435.4, 1439.4, 1451.1, 1452.3, 1466.7, 1668.2, 2935.2, 2945.2, 2949.4, 2953.6, 2958.3, 2982.6, 2987.8, 3022.1, 3023.9, 3024.6, 3028.9, 3032.5, 3040.8, 3045.2, 3047.1, 3079.6 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.2028
_cell_length_b 21.8671
_cell_length_c 23.7101
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.54301	0.49200	0.52992	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.51366	0.51017	0.48468	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.60442	0.50329	0.53237	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.61533	0.53136	0.56944	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.45210	0.50456	0.47158	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.53754	0.53284	0.45135	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.61963	0.52673	0.49443	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.44188	0.53374	0.41334	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.46598	0.51032	0.38038	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.45388	0.58232	0.41326	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.62731	0.45990	0.53688	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.52071	0.45996	0.58129	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.47617	0.45144	0.57986	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.52956	0.48699	0.61955	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.54169	0.41559	0.58710	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.39791	0.53090	0.40174	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.43389	0.43702	0.46847	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.45845	0.41210	0.43688	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.39005	0.43391	0.45622	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.43881	0.41326	0.50898	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.41667	0.53930	0.51519	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.37267	0.53722	0.50338	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.42891	0.58771	0.51713	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.42078	0.52022	0.55784	Biso	1.000	H

2-methyl-2-heptene; E= -131.762 eV; ZPVE= 5.843eV; frequencies =41.1, 80.6, 86.2, 121.5, 139.0, 187.8, 236.1, 242.7, 287.7, 313.5, 397.5, 406.3, 473.2, 537.5, 714.0, 752.8, 798.7, 823.9, 886.4, 908.7, 927.3, 973.1, 983.2, 1004.3, 1047.4, 1055.3,

1067.1, 1088.1, 1111.1, 1180.3, 1212.3, 1226.2, 1266.3, 1282.6, 1296.2, 1332.1,
1336.2, 1353.6, 1358.2, 1361.7, 1411.8, 1418.3, 1429.2, 1431.8, 1433.6, 1439.4,
1443.7, 1444.4, 1453.8, 1680.7, 2925.3, 2931.5, 2936.1, 2941.0, 2944.2, 2953.9,
2956.4, 2976.7, 2983.2, 2987.9, 2994.4, 3021.8, 3029.2, 3030.5, 3039.0, 3053.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 26.0361
_cell_length_b 23.0395
_cell_length_c 23.1161
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.57674 0.45884 0.51891 Biso 1.000 C
C2 1.0000 0.55175 0.47298 0.46992 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.63388 0.46742 0.52424 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.64317 0.49668 0.56058 Biso 1.000 H
C4 1.0000 0.49546 0.46830 0.45703 Biso 1.000 C
H2 1.0000 0.57489 0.49137 0.43469 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.65062 0.48576 0.48461 Biso 1.000 H
H4 1.0000 0.47508 0.44432 0.49129 Biso 1.000 H
H5 1.0000 0.49015 0.44277 0.41694 Biso 1.000 H
C5 1.0000 0.46967 0.52775 0.44864 Biso 1.000 C
C6 1.0000 0.41286 0.52351 0.43232 Biso 1.000 C
H6 1.0000 0.39231 0.49868 0.46602 Biso 1.000 H
H7 1.0000 0.40909 0.49794 0.39213 Biso 1.000 H
H8 1.0000 0.49045 0.55226 0.41487 Biso 1.000 H
H9 1.0000 0.47385 0.55324 0.48883 Biso 1.000 H
H10 1.0000 0.65342 0.42593 0.53351 Biso 1.000 H
C7 1.0000 0.55168 0.43381 0.57197 Biso 1.000 C
H11 1.0000 0.51006 0.42793 0.56741 Biso 1.000 H
H12 1.0000 0.55848 0.46207 0.60974 Biso 1.000 H
H13 1.0000 0.56866 0.39130 0.58283 Biso 1.000 H
C8 1.0000 0.38734 0.58271 0.42439 Biso 1.000 C
H14 1.0000 0.40636 0.60781 0.38995 Biso 1.000 H
H15 1.0000 0.38955 0.60860 0.46437 Biso 1.000 H
H16 1.0000 0.34654 0.57849 0.41273 Biso 1.000 H

23-dimethyl-2-hexene; E= -131.764 eV; ZPVE= 5.831eV; frequencies =70.0, 87.9,
104.1, 111.3, 136.6, 154.8, 199.3, 243.0, 294.0, 340.8, 365.9, 401.1, 419.7, 500.4,
566.7, 708.7, 722.6, 843.1, 861.3, 908.1, 927.1, 939.4, 977.2, 1007.5, 1030.9,
1040.9, 1052.8, 1079.2, 1142.5, 1150.1, 1213.9, 1236.6, 1269.2, 1281.9, 1320.6,
1348.9, 1351.0, 1355.1, 1364.2, 1415.7, 1416.6, 1425.8, 1431.0, 1436.3, 1438.5,
1443.9, 1444.3, 1448.4, 1460.4, 1673.7, 2936.4, 2937.7, 2940.5, 2943.6, 2949.8,
2953.1, 2972.3, 2978.8, 2980.3, 2982.0, 2993.3, 3021.1, 3028.1, 3058.1, 3062.2,
3069.2 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.5172
_cell_length_b 23.3419
_cell_length_c 23.1188
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.47555  0.47677  0.47151  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.44895  0.52324  0.45077  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.44886  0.41987  0.48368  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.40437  0.42005  0.47912  Biso  1.000  H
H2      1.0000 0.45831  0.40564  0.52808  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.46521  0.38649  0.45462  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.53572  0.47753  0.48661  Biso  1.000  C
C5      1.0000 0.54700  0.49683  0.54911  Biso  1.000  C
H4      1.0000 0.53172  0.54094  0.55463  Biso  1.000  H
H5      1.0000 0.52301  0.47007  0.57912  Biso  1.000  H
C6      1.0000 0.38917  0.52454  0.43570  Biso  1.000  C
H6      1.0000 0.55895  0.50512  0.45681  Biso  1.000  H
H7      1.0000 0.36806  0.48369  0.44240  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.38364  0.53675  0.38994  Biso  1.000  H
H9      1.0000 0.36775  0.55749  0.46136  Biso  1.000  H
C7      1.0000 0.47633  0.58018  0.44047  Biso  1.000  C
H10     1.0000 0.45747  0.61367  0.46764  Biso  1.000  H
H11     1.0000 0.47060  0.59415  0.39526  Biso  1.000  H
H12     1.0000 0.52019  0.58021  0.44966  Biso  1.000  H
H13     1.0000 0.55246  0.43396  0.48085  Biso  1.000  H
C8      1.0000 0.60739  0.49392  0.56513  Biso  1.000  C
H14     1.0000 0.63206  0.52120  0.53635  Biso  1.000  H
H15     1.0000 0.62310  0.44987  0.56128  Biso  1.000  H
H16     1.0000 0.61459  0.50826  0.60982  Biso  1.000  H

```

```

# 344-3methyl-2-pentene; E= -131.682 eV; ZPVE= 5.827eV; frequencies =58.6, 99.5,
114.8, 170.7, 229.0, 253.2, 263.4, 305.1, 318.2, 326.1, 364.8, 375.7, 386.6, 455.2,
525.2, 540.6, 684.7, 815.1, 823.5, 905.2, 913.1, 922.6, 924.7, 976.3, 996.4,
1013.9, 1015.9, 1020.0, 1065.0, 1137.2, 1182.9, 1199.2, 1243.1, 1316.6, 1336.9,
1341.8, 1358.1, 1358.4, 1371.5, 1418.7, 1424.6, 1425.7, 1428.3, 1434.4, 1440.5,
1442.6, 1453.6, 1455.4, 1469.6, 1666.1, 2945.6, 2954.5, 2954.8, 2956.7, 2961.3,
2987.4, 3012.4, 3025.0, 3025.3, 3030.3, 3033.2, 3035.8, 3037.8, 3043.7, 3054.5,
3081.8 cm^-1

```

```

data_image0
_cell_length_a      24.3109
_cell_length_b      23.4115
_cell_length_c      21.8538
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.49159  0.47596  0.48118  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.46291  0.52304  0.46584  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.46481  0.41788  0.48560  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.42020  0.42075  0.49250  Biso  1.000  H
H2      1.0000 0.48166  0.39256  0.52363  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.47168  0.39275  0.44360  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.55364  0.47788  0.49470  Biso  1.000  C
C5      1.0000 0.58352  0.43213  0.45615  Biso  1.000  C
H4      1.0000 0.57728  0.43972  0.40692  Biso  1.000  H
H5      1.0000 0.56906  0.38874  0.46669  Biso  1.000  H
H6      1.0000 0.62804  0.43340  0.46534  Biso  1.000  H
C6      1.0000 0.56344  0.46542  0.56330  Biso  1.000  C
H7      1.0000 0.54297  0.49768  0.59197  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.60779  0.46641  0.57360  Biso  1.000  H
H9      1.0000 0.54795  0.42313  0.57684  Biso  1.000  H

```

C7	1.0000	0.40278	0.52760	0.45141	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.38028	0.48725	0.45672	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.39658	0.54219	0.40389	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.38282	0.55978	0.48086	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.57968	0.53606	0.48007	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.56255	0.57043	0.50865	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.57385	0.54777	0.43173	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.62420	0.53429	0.48904	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.48499	0.56362	0.46271	Biso	1.000	H

233-trimethyl-1-pentene; E= -131.541 eV; ZPVE= 5.847eV; frequencies =54.0, 113.5, 206.4, 224.5, 239.2, 251.9, 282.0, 302.6, 314.9, 348.9, 386.1, 394.8, 464.5, 473.6, 553.4, 652.1, 697.2, 762.0, 817.9, 873.2, 897.7, 917.8, 937.8, 973.1, 983.7, 996.9, 1018.5, 1041.6, 1054.7, 1150.7, 1168.2, 1184.4, 1242.2, 1287.2, 1312.9, 1339.2, 1349.9, 1356.9, 1366.6, 1390.0, 1417.9, 1421.0, 1429.4, 1436.8, 1440.9, 1446.7, 1453.4, 1456.0, 1468.8, 1641.4, 2938.4, 2953.7, 2958.8, 2962.6, 2965.9, 2981.4, 3005.5, 3026.7, 3030.8, 3031.2, 3035.4, 3042.2, 3043.4, 3047.1, 3065.3, 3143.9 cm⁻¹
1

data_image0
_cell_length_a 23.1408
_cell_length_b 22.5172
_cell_length_c 22.5239
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.46509	0.49891	0.46848	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.43071	0.54541	0.48040	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.43927	0.44248	0.44419	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.39207	0.44623	0.44059	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.44921	0.40390	0.47249	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45648	0.43198	0.39980	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53060	0.50074	0.48080	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.55633	0.56130	0.46305	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.53756	0.59805	0.48871	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.54899	0.57044	0.41567	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.60327	0.56153	0.47114	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.56347	0.45278	0.44561	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.54942	0.40744	0.45637	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.60996	0.45579	0.45553	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.55817	0.45909	0.39746	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.38412	0.54291	0.47305	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.44711	0.58732	0.49791	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.54133	0.49213	0.54851	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.52326	0.53118	0.57151	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.58853	0.49343	0.55584	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.51641	0.43596	0.57662	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.52775	0.43377	0.62400	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.53314	0.39531	0.55564	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.46897	0.43519	0.57353	Biso	1.000	H

4-methyl-3-heptene; E= -131.726 eV; ZPVE= 5.853eV; frequencies =53.5, 63.0, 93.3, 94.6, 140.9, 206.6, 222.2, 236.9, 297.3, 326.6, 365.5, 452.4, 481.8, 564.4, 727.2, 739.4, 804.7, 837.5, 858.2, 879.1, 916.1, 968.7, 1005.8, 1012.5, 1034.1, 1050.5, 1076.6, 1082.6, 1118.7, 1194.2, 1215.4, 1243.4, 1261.7, 1276.1, 1285.7, 1323.4, 1340.7, 1351.1, 1356.5, 1364.6, 1416.2, 1422.9, 1430.9, 1438.0, 1439.5, 1442.3, 1443.4, 1451.3, 1452.3, 1674.2, 2917.8, 2935.7, 2947.6, 2951.4, 2954.1, 2956.5, 2969.1, 2990.9, 2992.9, 2994.3, 3022.3, 3023.8, 3030.0, 3030.2, 3034.1, 3053.5 cm⁻¹
1

```

data_image0
_cell_length_a      25.9903
_cell_length_b      22.4465
_cell_length_c      22.655
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.53413  0.48951  0.54113  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.51127  0.50803  0.49105  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.59011  0.49101  0.55714  Biso  1.000  C
C4      1.0000 0.61234  0.42851  0.56767  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.61036  0.40154  0.52717  Biso  1.000  H
H2      1.0000 0.59059  0.40476  0.60212  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.65280  0.43068  0.58184  Biso  1.000  H
H4      1.0000 0.59485  0.51749  0.59793  Biso  1.000  H
C5      1.0000 0.45366  0.50273  0.48381  Biso  1.000  C
H5      1.0000 0.61281  0.51404  0.52307  Biso  1.000  H
H6      1.0000 0.43780  0.47598  0.52038  Biso  1.000  H
H7      1.0000 0.44507  0.47799  0.44269  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.50915  0.46981  0.57502  Biso  1.000  H
C6      1.0000 0.42506  0.56268  0.48154  Biso  1.000  C
C7      1.0000 0.36684  0.55503  0.47590  Biso  1.000  C
H9      1.0000 0.35116  0.52963  0.51341  Biso  1.000  H
H10     1.0000 0.35678  0.53065  0.43530  Biso  1.000  H
H11     1.0000 0.34693  0.59826  0.47457  Biso  1.000  H
H12     1.0000 0.43942  0.58946  0.44422  Biso  1.000  H
H13     1.0000 0.43422  0.58812  0.52187  Biso  1.000  H
C8      1.0000 0.53948  0.53508  0.43957  Biso  1.000  C
H14     1.0000 0.52875  0.51226  0.39823  Biso  1.000  H
H15     1.0000 0.58145  0.53266  0.44410  Biso  1.000  H
H16     1.0000 0.52916  0.58236  0.43361  Biso  1.000  H

```

```

-----
# 3-methyl-3-heptene; E= -131.728 eV; ZPVE= 5.845eV; frequencies =39.5, 62.7, 82.7,
90.5, 134.7, 204.2, 237.3, 250.8, 284.1, 312.6, 361.4, 461.2, 503.5, 539.5, 716.8,
755.3, 766.4, 836.4, 862.2, 882.1, 922.8, 981.4, 1001.2, 1003.4, 1032.8, 1056.5,
1074.7, 1076.8, 1113.4, 1186.7, 1222.9, 1236.9, 1248.3, 1277.3, 1298.8, 1318.9,
1337.1, 1350.1, 1355.0, 1364.6, 1415.8, 1420.2, 1430.2, 1434.9, 1439.6, 1443.1,
1446.0, 1450.9, 1452.4, 1675.2, 2921.3, 2925.7, 2946.0, 2948.2, 2953.2, 2960.9,
2972.3, 2985.3, 2992.7, 2994.5, 3021.3, 3027.3, 3029.5, 3033.2, 3035.1, 3053.8 cm^-
1

```

```

-----
data_image0
_cell_length_a      26.2044
_cell_length_b      22.5303
_cell_length_c      23.0642
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.52774  0.47927  0.51702  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.50317  0.49747  0.46893  Biso  1.000  C

```

C3	1.0000	0.58500	0.48605	0.52192	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.61412	0.42692	0.52382	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.60624	0.40044	0.48473	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.60339	0.40007	0.56175	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.65554	0.43453	0.52613	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.59399	0.51150	0.56163	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.44718	0.49519	0.45579	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.52655	0.51774	0.43471	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.59897	0.51269	0.48514	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.42615	0.47018	0.48917	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.44128	0.47067	0.41475	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.42323	0.55717	0.44928	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.36684	0.55492	0.43255	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.34432	0.53092	0.46537	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.36142	0.53186	0.39089	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.35050	0.59968	0.42826	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.44481	0.58245	0.41642	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.42802	0.58153	0.49041	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.50193	0.45149	0.56861	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.51376	0.40490	0.57435	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.46016	0.45214	0.56551	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.51287	0.47492	0.60873	Biso	1.000	H

4-methyl-2-pentene; E= -98.543 eV; ZPVE= 4.353eV; frequencies =102.1, 163.6, 196.6, 211.1, 242.1, 285.2, 333.0, 392.5, 429.7, 561.4, 768.9, 803.0, 893.6, 904.3, 942.5, 967.7, 978.8, 1021.8, 1039.6, 1094.0, 1124.2, 1167.6, 1263.7, 1277.5, 1298.6, 1312.5, 1342.3, 1355.3, 1362.4, 1421.4, 1433.6, 1435.2, 1437.6, 1448.3, 1458.1, 1680.1, 2905.6, 2944.4, 2953.6, 2957.2, 2993.5, 3021.3, 3024.1, 3028.2, 3029.0, 3030.3, 3033.7, 3061.4 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	24.0415
_cell_length_b	22.2237
_cell_length_c	21.3715
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.48971	0.49927	0.51096	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.46015	0.54555	0.48852	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.55045	0.49883	0.52848	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.57939	0.55978	0.52206	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.55900	0.59463	0.55054	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.57940	0.57515	0.47304	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.62300	0.55650	0.53730	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.58133	0.45008	0.49092	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.56149	0.40575	0.49634	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.62485	0.44612	0.50641	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.58132	0.46129	0.44073	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.39978	0.54282	0.47146	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.48056	0.58918	0.48186	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.55263	0.48539	0.57837	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.38232	0.49775	0.47958	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.39317	0.55445	0.42184	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.37523	0.57541	0.49890	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.46840	0.45590	0.51708	Biso	1.000	H

3-hexene; E= -98.517 eV; ZPVE= 4.362eV; frequencies =63.9, 118.7, 125.6, 189.0, 231.1, 315.6, 319.3, 464.1, 473.6, 735.8, 771.9, 810.9, 881.8, 890.6, 960.6, 994.7, 1014.7, 1047.4, 1052.9, 1095.4, 1150.6, 1218.8, 1240.0, 1269.4, 1283.0, 1291.9, 1331.8, 1350.8, 1351.0, 1425.4, 1426.5, 1441.0, 1441.0, 1449.5, 1450.0, 1681.2,

2931.2, 2931.8, 2956.1, 2956.6, 2979.8, 2981.1, 3019.7, 3024.5, 3027.7, 3030.0, 3034.4, 3034.7 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 25.1293
_cell_length_b 22.2833
_cell_length_c 21.5781
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.51309 0.49055 0.52520 Biso 1.000 C
C2 1.0000 0.48691 0.50945 0.47480 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.57211 0.49416 0.53481 Biso 1.000 C
C4 1.0000 0.59797 0.43224 0.54291 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.59224 0.40457 0.50121 Biso 1.000 H
H2 1.0000 0.58029 0.40789 0.58225 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.64098 0.43618 0.55158 Biso 1.000 H
H4 1.0000 0.58051 0.52143 0.57648 Biso 1.000 H
C5 1.0000 0.42789 0.50584 0.46518 Biso 1.000 C
H5 1.0000 0.50979 0.53033 0.43711 Biso 1.000 H
H6 1.0000 0.59054 0.51787 0.49543 Biso 1.000 H
H7 1.0000 0.40946 0.48213 0.50456 Biso 1.000 H
H8 1.0000 0.41950 0.47857 0.42351 Biso 1.000 H
H9 1.0000 0.49021 0.46968 0.56288 Biso 1.000 H
C6 1.0000 0.40203 0.56776 0.45709 Biso 1.000 C
H10 1.0000 0.41972 0.59211 0.41775 Biso 1.000 H
H11 1.0000 0.40776 0.59543 0.49879 Biso 1.000 H
H12 1.0000 0.35902 0.56383 0.44841 Biso 1.000 H

3-methyl-2-pentene; E= -98.597 eV; ZPVE= 4.345eV; frequencies =68.5, 110.7, 165.5, 206.0, 226.1, 258.6, 297.0, 386.0, 514.1, 553.8, 733.8, 771.2, 802.3, 898.4, 980.3, 983.2, 1009.4, 1016.7, 1044.7, 1062.1, 1106.1, 1193.1, 1252.5, 1284.2, 1330.9, 1349.7, 1356.3, 1359.4, 1418.0, 1422.6, 1424.4, 1437.7, 1442.1, 1444.0, 1455.7, 1679.9, 2939.2, 2945.1, 2947.3, 2960.7, 2986.4, 2988.8, 2996.7, 3031.8, 3032.9, 3035.6, 3037.5, 3050.4 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 22.0872
_cell_length_b 23.0434
_cell_length_c 23.2155
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.50649 0.45824 0.50764 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.50603 0.44884 0.46115 Biso 1.000 H
H2 1.0000 0.54376 0.43220 0.52598 Biso 1.000 H
C2 1.0000 0.50670 0.56419 0.48035 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.51944 0.52178 0.51832 Biso 1.000 C
C4 1.0000 0.54711 0.53559 0.57598 Biso 1.000 C
H3 1.0000 0.51748 0.60882 0.49323 Biso 1.000 H

H4	1.0000	0.55316	0.58252	0.58216	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.59172	0.51451	0.58063	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.51885	0.51920	0.61164	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.44634	0.43816	0.53429	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.40797	0.46148	0.51486	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.44515	0.44636	0.58097	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.47870	0.55814	0.42190	Biso	1.000	C
H9	1.0000	0.43480	0.58092	0.41989	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.47058	0.51277	0.40959	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.50750	0.57802	0.38848	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.43926	0.39136	0.52761	Biso	1.000	H

44-dimethyl-2-pentene; E= -115.153 eV; ZPVE= 5.082eV; frequencies =80.9, 159.3, 189.3, 204.5, 231.4, 275.8, 291.4, 325.5, 338.8, 341.7, 425.9, 443.8, 526.1, 753.5, 785.4, 875.3, 905.6, 917.6, 925.6, 963.8, 966.2, 1005.1, 1007.8, 1022.3, 1087.7, 1182.9, 1183.0, 1251.5, 1282.1, 1299.8, 1336.6, 1340.4, 1355.1, 1369.8, 1422.0, 1422.4, 1429.4, 1432.8, 1435.1, 1447.6, 1448.3, 1466.1, 1678.5, 2943.9, 2949.0, 2951.2, 2957.3, 2992.1, 3015.2, 3021.1, 3023.9, 3028.5, 3029.2, 3030.6, 3031.8, 3033.5, 3062.8 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.4848
_cell_length_b 22.1379
_cell_length_c 22.5366
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.54417	0.47770	0.53502	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.50768	0.51652	0.51262	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.60135	0.49377	0.55260	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.60875	0.48409	0.59993	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.44943	0.50386	0.49387	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.52036	0.56378	0.50655	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.61005	0.54187	0.54484	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.44354	0.52045	0.42765	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.46992	0.49177	0.39992	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.45500	0.56786	0.41971	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.63153	0.46697	0.52754	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.40099	0.51443	0.41290	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.43295	0.43765	0.50281	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.45889	0.40701	0.47662	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.39039	0.43081	0.48856	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.43587	0.42427	0.54974	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.41118	0.54473	0.53061	Biso	1.000	C
H11	1.0000	0.36845	0.53885	0.51644	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.42189	0.59271	0.52504	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.41390	0.53383	0.57816	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.53247	0.43038	0.54147	Biso	1.000	H

345-methyl-2-hexene; E= -148.261 eV; ZPVE= 6.584eV; frequencies =67.3, 73.6, 101.3, 109.8, 161.5, 216.8, 226.2, 244.8, 262.0, 276.0, 291.6, 318.9, 348.9, 397.6, 414.5, 484.0, 539.5, 605.9, 711.2, 781.0, 828.7, 888.6, 901.7, 917.2, 938.9, 973.7, 989.8, 1005.8, 1008.3, 1015.0, 1031.6, 1106.6, 1111.7, 1127.1, 1167.8, 1190.6, 1245.2, 1280.8, 1315.7, 1321.7, 1332.3, 1343.8, 1349.5, 1357.4, 1364.7, 1367.7, 1423.8, 1424.6, 1431.3, 1431.7, 1434.8, 1443.1, 1443.9, 1454.5, 1456.9, 1458.4, 1673.9, 2895.1, 2943.6, 2944.8, 2950.0, 2953.9, 2958.0, 2968.7, 2987.0, 2996.3, 3021.8, 3024.1, 3027.6, 3033.5, 3034.9, 3039.4, 3043.2, 3046.1, 3073.0 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 25.1324

_cell_length_b 23.5952
_cell_length_c 22.5791
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.51630	0.47302	0.46979	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.48384	0.52711	0.46247	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.48377	0.42082	0.48738	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.45069	0.41412	0.45627	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.46671	0.42459	0.53209	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.50858	0.38248	0.48668	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.56521	0.48311	0.51121	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.60449	0.43347	0.50997	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.61551	0.42200	0.46430	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.58790	0.39546	0.53138	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.64126	0.44447	0.53383	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.54903	0.49756	0.57484	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.52102	0.53337	0.57622	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.58417	0.50885	0.60143	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.52977	0.46124	0.59671	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.43310	0.53141	0.48103	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.58647	0.52020	0.49307	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.41491	0.49418	0.50164	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.53354	0.46403	0.42556	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.51330	0.57551	0.43359	Biso	1.000	C
H13	1.0000	0.53870	0.59831	0.46555	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.48640	0.60689	0.41379	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.53980	0.55985	0.39831	Biso	1.000	H
C9	1.0000	0.39724	0.58206	0.47783	Biso	1.000	C
H16	1.0000	0.38633	0.59653	0.52270	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.35953	0.57146	0.45543	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.41505	0.61830	0.45466	Biso	1.000	H

11-methyl-isopropyl-ethylene; E= -98.527 eV; ZPVE= 4.352eV; frequencies =65.5, 170.3, 214.0, 260.7, 275.5, 303.7, 354.0, 422.0, 483.4, 543.9, 697.5, 735.5, 876.4, 881.8, 897.6, 938.0, 943.2, 977.8, 1017.6, 1083.6, 1102.2, 1143.4, 1223.7, 1271.1, 1324.4, 1342.4, 1352.5, 1358.5, 1393.8, 1422.2, 1431.2, 1435.9, 1442.7, 1451.0, 1460.6, 1654.3, 2910.1, 2948.5, 2958.2, 2961.1, 2998.7, 3025.9, 3030.1, 3037.8, 3042.0, 3044.9, 3064.5, 3146.8 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 23.1654
_cell_length_b 22.2876
_cell_length_c 21.1347
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.46744	0.50024	0.50505	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.43939	0.54643	0.47843	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.43594	0.44361	0.52299	Biso	1.000	C

H1	1.0000	0.38936	0.44757	0.51423	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.44241	0.43312	0.57351	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45186	0.40449	0.49628	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53178	0.50095	0.51923	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.55973	0.56302	0.51559	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.53729	0.59563	0.54592	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.55948	0.58052	0.46686	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.60506	0.56059	0.53092	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.56457	0.45649	0.47646	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.54803	0.41045	0.48078	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.61072	0.45566	0.48882	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.56078	0.47003	0.42652	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.39311	0.54386	0.46883	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.46101	0.58810	0.46535	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.53654	0.48463	0.56847	Biso	1.000	H

tetra-methyl-ethylene; E= -98.619 eV; ZPVE= 4.305eV; frequencies =38.8, 67.8, 119.2, 149.6, 179.2, 298.6, 314.8, 386.2, 410.4, 488.3, 504.5, 685.0, 879.6, 912.3, 925.9, 956.1, 967.9, 1005.9, 1044.4, 1052.3, 1149.5, 1151.7, 1247.5, 1346.0, 1350.6, 1351.0, 1366.3, 1414.4, 1417.7, 1427.6, 1429.0, 1432.4, 1440.0, 1447.6, 1451.6, 1679.1, 2935.1, 2938.3, 2941.1, 2952.6, 2977.0, 2977.7, 2979.5, 3006.2, 3035.3, 3055.4, 3059.7, 3066.2 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 22.9578
_cell_length_b 22.5111
_cell_length_c 19.8886
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.47797	0.49786	0.50049	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.43911	0.55240	0.49978	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.44521	0.57938	0.45409	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.44714	0.58175	0.54313	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.39294	0.53958	0.50154	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.44473	0.44023	0.50216	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.41641	0.43837	0.54698	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.47234	0.40049	0.50248	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.41534	0.43704	0.45837	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53669	0.50210	0.49960	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.56795	0.56095	0.49777	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.53874	0.59948	0.49715	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.59630	0.56378	0.45303	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.59712	0.56551	0.54162	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.57788	0.45006	0.50024	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.55630	0.40664	0.50163	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.60728	0.45265	0.54408	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.60630	0.45096	0.45546	Biso	1.000	H

2-tert-butyl-propylene; E= -115.075 eV; ZPVE= 5.091eV; frequencies =57.7, 165.8, 211.0, 264.6, 273.7, 296.5, 317.9, 344.5, 367.3, 384.6, 459.4, 476.7, 547.2, 670.0, 713.3, 832.7, 880.6, 906.5, 917.2, 925.4, 932.6, 974.8, 1001.1, 1019.7, 1027.0, 1165.7, 1184.5, 1195.5, 1271.5, 1337.3, 1339.4, 1351.3, 1369.1, 1393.8, 1418.1, 1428.2, 1431.3, 1438.7, 1441.9, 1451.9, 1454.8, 1471.7, 1645.7, 2954.5, 2956.0, 2957.3, 2962.1, 3008.0, 3025.8, 3026.8, 3031.5, 3034.4, 3038.0, 3040.9, 3047.1, 3067.0, 3151.9 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 23.1806
_cell_length_b 22.3053

_cell_length_c 22.0672
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.46644	0.49548	0.48020	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.43522	0.54354	0.46398	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.43784	0.43486	0.48435	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.39095	0.43875	0.47836	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.44582	0.41296	0.52830	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45414	0.40408	0.44924	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.53098	0.49872	0.49522	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.55650	0.56093	0.48227	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.53609	0.59587	0.51019	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.55142	0.57343	0.43433	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.60291	0.56100	0.49281	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.56443	0.45212	0.45727	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.55102	0.40599	0.46773	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.61094	0.45551	0.46679	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.55798	0.45975	0.40845	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.38917	0.53931	0.45439	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.45360	0.58829	0.45953	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.53978	0.48480	0.56320	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.51640	0.51730	0.59156	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.58593	0.48742	0.57478	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.52474	0.43957	0.57516	Biso	1.000	H

234-trimethyl-2-pentene; E= -131.723 eV; ZPVE= 5.816eV; frequencies =65.6, 70.1, 110.2, 125.5, 139.6, 205.0, 229.9, 244.4, 263.1, 300.4, 372.0, 388.3, 411.1, 475.1, 493.1, 577.0, 669.3, 827.7, 892.7, 899.2, 926.2, 932.7, 941.5, 962.5, 1005.9, 1040.2, 1052.6, 1089.3, 1100.3, 1143.9, 1173.8, 1246.4, 1285.0, 1306.2, 1337.0, 1348.4, 1350.2, 1360.4, 1366.2, 1414.4, 1420.1, 1425.8, 1429.6, 1434.5, 1437.7, 1444.5, 1444.6, 1455.9, 1459.2, 1664.1, 2937.7, 2942.7, 2948.3, 2952.3, 2958.5, 2981.1, 2981.5, 2982.4, 2999.9, 3020.0, 3029.3, 3031.8, 3034.6, 3055.8, 3062.4, 3070.2 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 23.995
_cell_length_b 23.3759
_cell_length_c 22.4983
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.48645	0.47767	0.49018	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.45986	0.52252	0.46471	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.45693	0.42267	0.50621	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.41178	0.42793	0.51115	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.47267	0.40556	0.54863	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.46407	0.38899	0.47270	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.54830	0.47868	0.50567	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.57879	0.42442	0.48484	Biso	1.000	C

H4	1.0000	0.57265	0.41706	0.43697	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.56431	0.38608	0.50867	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.62384	0.42843	0.49304	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.55750	0.48866	0.57256	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.53852	0.52920	0.58695	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.60230	0.49017	0.58309	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.53900	0.45408	0.59933	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.39914	0.52176	0.44735	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.56784	0.51469	0.48207	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.37926	0.47975	0.45150	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.39440	0.53556	0.40072	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.37501	0.55257	0.47423	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.48677	0.57923	0.45054	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.46260	0.61428	0.47094	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.48629	0.58739	0.40220	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.52988	0.58339	0.46602	Biso	1.000	H

11-methyl-isopropyl-propylene; E= -115.144 eV; ZPVE= 5.078eV; frequencies =34.9, 79.5, 115.7, 169.4, 227.1, 235.4, 283.1, 315.3, 343.1, 361.5, 448.6, 496.3, 566.0, 711.6, 815.9, 863.1, 895.5, 928.1, 941.8, 987.5, 1002.6, 1013.7, 1034.1, 1098.3, 1117.3, 1132.3, 1197.1, 1271.0, 1299.7, 1326.9, 1341.1, 1356.4, 1358.8, 1363.7, 1422.0, 1424.4, 1428.4, 1434.9, 1437.0, 1443.3, 1450.2, 1458.7, 1674.2, 2905.6, 2944.7, 2950.2, 2955.1, 2958.6, 2987.3, 2997.6, 3023.1, 3029.0, 3033.6, 3037.9, 3039.7, 3051.4, 3072.8 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 24.0661
_cell_length_b 22.3039
_cell_length_c 21.4052
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.48636	0.49784	0.51533	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.45886	0.54428	0.48970	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.45895	0.43905	0.53156	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.41359	0.44263	0.53514	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.47463	0.42191	0.57654	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.46801	0.40423	0.49642	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.54828	0.50043	0.52972	Biso	1.000	C
C5	1.0000	0.57478	0.56252	0.52411	Biso	1.000	C
H4	1.0000	0.55307	0.59594	0.55296	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.57468	0.57854	0.47543	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.61837	0.56073	0.53952	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.58077	0.45492	0.48972	Biso	1.000	C
H7	1.0000	0.56552	0.40885	0.49593	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.62515	0.45536	0.50217	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.57716	0.46640	0.43983	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.39863	0.54753	0.47216	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.48234	0.58516	0.47957	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.55272	0.48605	0.57903	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.37490	0.50751	0.48563	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.39382	0.55319	0.42122	Biso	1.000	H
H14	1.0000	0.37855	0.58682	0.49383	Biso	1.000	H

propene; E= -48.710 eV; ZPVE= 2.101eV; frequencies =193.9, 417.5, 568.8, 897.9, 912.5, 913.9, 988.8, 1024.0, 1154.3, 1284.8, 1349.6, 1395.5, 1420.7, 1437.2, 1659.3, 2946.8, 2997.6, 3030.5, 3048.8, 3054.9, 3138.6 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 21.5826

_cell_length_b 19.9313
_cell_length_c 20.5612
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.44546	0.48679	0.52439	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.50720	0.48175	0.52349	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.53011	0.45184	0.56126	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.54892	0.51401	0.47449	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.41754	0.46199	0.56156	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.42056	0.51607	0.48774	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.52257	0.54303	0.43837	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.57666	0.47611	0.44844	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.58228	0.54803	0.49821	Biso	1.000	H

2-methyl-2-hexene; E= -115.195 eV; ZPVE= 5.087eV; frequencies =28.3, 67.2, 102.3, 134.9, 201.0, 226.9, 283.6, 311.2, 343.7, 409.6, 464.5, 537.3, 722.1, 774.1, 826.3, 863.0, 878.0, 928.7, 974.0, 984.1, 1030.6, 1055.5, 1062.7, 1075.6, 1110.2, 1187.4, 1224.6, 1248.1, 1277.6, 1317.1, 1335.2, 1354.6, 1355.9, 1363.0, 1412.4, 1417.8, 1432.0, 1432.5, 1436.8, 1440.9, 1442.1, 1451.2, 1682.1, 2924.5, 2936.5, 2945.3, 2946.0, 2952.8, 2972.4, 2983.6, 2988.8, 2992.8, 3020.9, 3028.9, 3031.4, 3038.3, 3054.8 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 24.8789
_cell_length_b 22.0719
_cell_length_c 23.063
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label	_atom_site_occupancy	_atom_site_fract_x	_atom_site_fract_y	_atom_site_fract_z	_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol
C1	1.0000	0.55703	0.47921	0.51778	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.53079	0.49410	0.46877	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.61681	0.48830	0.52307	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.62653	0.51868	0.55962	Biso	1.000	H
C4	1.0000	0.47186	0.48923	0.45600	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.55492	0.51348	0.43347	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.63423	0.50770	0.48342	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.45061	0.46388	0.49019	Biso	1.000	H
H5	1.0000	0.46617	0.46295	0.41560	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.44477	0.55135	0.44817	Biso	1.000	C
C6	1.0000	0.38538	0.54647	0.43199	Biso	1.000	C
H6	1.0000	0.36257	0.52201	0.46558	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.38009	0.52165	0.39095	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.46654	0.57710	0.41451	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.44937	0.57746	0.48866	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.63737	0.44499	0.53212	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.36685	0.59139	0.42673	Biso	1.000	H
C7	1.0000	0.53089	0.45280	0.57087	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.48733	0.44669	0.56635	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.53807	0.48210	0.60886	Biso	1.000	H

```

H14      1.0000 0.54868 0.40837 0.58151 Biso 1.000 H
-----
# ethene; E= -31.984 eV; ZPVE= 1.346eV; frequencies =805.1, 932.2, 936.5, 1029.0,
1197.8, 1340.2, 1419.7, 1638.7, 3050.9, 3065.0, 3123.5, 3153.2 cm^-1
-----
data_image0
_cell_length_a      20.5873
_cell_length_b      19.2981
_cell_length_c      19.5334
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.46773 0.50290 0.49999 Biso 1.000 C
C2      1.0000 0.53227 0.49710 0.50001 Biso 1.000 C
H1      1.0000 0.55786 0.46677 0.53877 Biso 1.000 H
H2      1.0000 0.56228 0.52238 0.46122 Biso 1.000 H
H3      1.0000 0.43772 0.47762 0.53878 Biso 1.000 H
H4      1.0000 0.44214 0.53323 0.46123 Biso 1.000 H
-----
# n-butene; E= -65.409 eV; ZPVE= 2.847eV; frequencies =178.0, 230.1, 239.8, 269.8,
491.9, 730.8, 854.9, 953.9, 960.7, 1022.5, 1025.4, 1064.1, 1131.9, 1281.6, 1290.3,
1355.8, 1356.1, 1421.1, 1422.0, 1431.6, 1441.0, 1687.8, 2943.7, 2944.0, 2992.4,
2993.2, 3023.1, 3024.4, 3038.8, 3045.4 cm^-1
-----
data_image0
_cell_length_a      19.8057
_cell_length_b      22.5766
_cell_length_c      22.1351
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.49279 0.42723 0.54806 Biso 1.000 C
H1      1.0000 0.45847 0.40439 0.51670 Biso 1.000 H
H2      1.0000 0.53810 0.39939 0.55387 Biso 1.000 H
H3      1.0000 0.46799 0.42933 0.59262 Biso 1.000 H
C2      1.0000 0.48902 0.51223 0.47427 Biso 1.000 C
C3      1.0000 0.51098 0.48776 0.52574 Biso 1.000 C
H4      1.0000 0.45480 0.48641 0.44548 Biso 1.000 H
C4      1.0000 0.50721 0.57276 0.45196 Biso 1.000 C
H5      1.0000 0.54520 0.51358 0.55454 Biso 1.000 H
H6      1.0000 0.53197 0.57067 0.40738 Biso 1.000 H
H7      1.0000 0.54156 0.59558 0.48331 Biso 1.000 H
H8      1.0000 0.46189 0.60061 0.44619 Biso 1.000 H
-----
# 3-nonene; E= -148.223 eV; ZPVE= 6.605eV; frequencies =30.0, 53.4, 61.0, 89.7,
119.1, 135.2, 160.1, 202.8, 235.2, 265.3, 302.5, 329.7, 393.1, 488.6, 511.9, 714.8,
732.4, 750.3, 796.3, 829.8, 880.6, 885.6, 940.0, 961.2, 986.5, 991.8, 1025.1,
1037.9, 1051.1, 1055.3, 1086.8, 1099.9, 1148.4, 1182.8, 1207.1, 1229.3, 1244.8,
1268.4, 1275.7, 1282.4, 1287.7, 1293.2, 1316.8, 1335.6, 1344.8, 1352.1, 1358.3,
1421.2, 1423.6, 1429.0, 1434.6, 1440.8, 1442.1, 1446.0, 1448.7, 1455.1, 1679.6,

```


2921.8, 2924.9, 2931.9, 2935.7, 2942.5, 2948.7, 2953.6, 2956.4, 2963.3, 2976.1, 2978.9, 2990.6, 3020.5, 3021.8, 3026.5, 3029.4, 3030.1, 3034.5 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 28.2789
_cell_length_b 23.8317
_cell_length_c 22.3165
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.56674	0.45840	0.54005	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.54331	0.47560	0.49126	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.61919	0.46222	0.54919	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.64249	0.40460	0.55772	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.63752	0.37823	0.51774	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.62696	0.38212	0.59608	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.68070	0.40870	0.56596	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.62655	0.48822	0.58913	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.49087	0.47198	0.48224	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.56350	0.49499	0.45462	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.63541	0.48411	0.51082	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.47456	0.44974	0.52038	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.48322	0.44653	0.44191	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.54658	0.43896	0.57669	Biso	1.000	H
C6	1.0000	0.46733	0.52965	0.47453	Biso	1.000	C
C7	1.0000	0.41409	0.52617	0.46326	Biso	1.000	C
H10	1.0000	0.39708	0.50336	0.50063	Biso	1.000	H
H11	1.0000	0.40746	0.50064	0.42275	Biso	1.000	H
H12	1.0000	0.48443	0.55217	0.43706	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.47417	0.55509	0.51496	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.39042	0.58347	0.45599	Biso	1.000	C
C9	1.0000	0.33719	0.57960	0.44495	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.31920	0.55829	0.48235	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.32946	0.55559	0.40392	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.40740	0.60619	0.41861	Biso	1.000	H
H17	1.0000	0.39719	0.60888	0.49647	Biso	1.000	H
H18	1.0000	0.32109	0.62137	0.43993	Biso	1.000	H

2-octene; E= -131.667 eV; ZPVE= 5.853eV; frequencies =49.4, 58.0, 93.2, 122.4, 138.4, 182.4, 208.1, 240.5, 279.6, 298.8, 347.1, 458.4, 523.7, 715.2, 734.3, 760.6, 822.8, 876.0, 898.3, 941.3, 959.9, 991.5, 1020.7, 1022.3, 1033.1, 1054.9, 1075.6, 1097.8, 1143.8, 1183.6, 1208.7, 1240.9, 1267.4, 1279.1, 1285.5, 1293.9, 1303.2, 1330.0, 1344.3, 1355.1, 1356.2, 1420.3, 1421.6, 1428.8, 1434.2, 1435.9, 1443.4, 1445.8, 1454.7, 1683.8, 2920.6, 2924.0, 2935.0, 2941.9, 2942.4, 2948.8, 2953.9, 2963.6, 2975.9, 2990.8, 2991.1, 3021.7, 3022.7, 3027.1, 3028.5, 3042.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a 27.0251
_cell_length_b 22.8018
_cell_length_c 22.2254
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_

_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z

_atom_site_thermal_displace_type	_atom_site_B_iso_or_equiv	_atom_site_type_symbol						
C1	1.0000	0.59256	0.43448	0.54459	Biso	1.000	C	
C2	1.0000	0.56837	0.45211	0.49523	Biso	1.000	C	
C3	1.0000	0.64727	0.43876	0.55420	Biso	1.000	C	
H1	1.0000	0.65609	0.46543	0.59420	Biso	1.000	H	
C4	1.0000	0.51353	0.44841	0.48587	Biso	1.000	C	
H2	1.0000	0.58975	0.47178	0.45833	Biso	1.000	H	
H3	1.0000	0.66595	0.45856	0.51519	Biso	1.000	H	
H4	1.0000	0.49626	0.42549	0.52424	Biso	1.000	H	
H5	1.0000	0.50563	0.42152	0.44554	Biso	1.000	H	
H6	1.0000	0.57103	0.41505	0.58145	Biso	1.000	H	
C5	1.0000	0.48898	0.50864	0.47753	Biso	1.000	C	
C6	1.0000	0.43330	0.50494	0.46596	Biso	1.000	C	
H7	1.0000	0.41537	0.48141	0.50361	Biso	1.000	H	
H8	1.0000	0.42649	0.47797	0.42545	Biso	1.000	H	
H9	1.0000	0.50697	0.53188	0.43979	Biso	1.000	H	
H10	1.0000	0.49599	0.53553	0.51796	Biso	1.000	H	
C7	1.0000	0.40859	0.56479	0.45802	Biso	1.000	C	
C8	1.0000	0.35293	0.56075	0.44660	Biso	1.000	C	
H11	1.0000	0.33392	0.53883	0.48423	Biso	1.000	H	
H12	1.0000	0.34501	0.53531	0.40559	Biso	1.000	H	
H13	1.0000	0.42653	0.58821	0.42040	Biso	1.000	H	
H14	1.0000	0.41553	0.59165	0.49849	Biso	1.000	H	
H15	1.0000	0.33616	0.60438	0.44105	Biso	1.000	H	
H16	1.0000	0.66376	0.39518	0.56207	Biso	1.000	H	

1-octene; E= -131.534 eV; ZPVE= 5.866eV; frequencies =52.8, 68.4, 85.8, 105.3, 133.7, 153.5, 227.7, 244.0, 274.2, 373.7, 437.4, 463.8, 637.5, 712.4, 723.4, 774.7, 859.7, 876.6, 901.0, 918.8, 955.3, 993.0, 996.5, 1012.4, 1031.2, 1046.6, 1056.3, 1101.5, 1155.4, 1184.0, 1202.4, 1234.0, 1254.8, 1271.6, 1281.7, 1286.0, 1291.8, 1307.0, 1337.3, 1345.9, 1357.2, 1401.2, 1423.3, 1428.2, 1429.5, 1438.1, 1444.7, 1448.1, 1455.5, 1655.6, 2923.6, 2925.0, 2928.3, 2938.0, 2942.0, 2946.1, 2953.1, 2958.0, 2969.1, 2980.9, 2992.9, 3020.7, 3028.3, 3038.0, 3052.2, 3139.1 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 20.6684
_cell_length_b 25.7589
_cell_length_c 25.6468
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.49258	0.52372	0.47834	Biso	1.000	C	
H1	1.0000	0.45521	0.50269	0.45591	Biso	1.000	H	
H2	1.0000	0.53946	0.51244	0.46110	Biso	1.000	H	
C2	1.0000	0.48312	0.59877	0.41512	Biso	1.000	C	
C3	1.0000	0.48294	0.58244	0.47120	Biso	1.000	C	
H3	1.0000	0.44557	0.58119	0.39053	Biso	1.000	H	
C4	1.0000	0.52528	0.63164	0.39339	Biso	1.000	C	
H4	1.0000	0.52080	0.60374	0.49271	Biso	1.000	H	
H5	1.0000	0.52306	0.64164	0.35207	Biso	1.000	H	
H6	1.0000	0.56363	0.64990	0.41637	Biso	1.000	H	
H7	1.0000	0.43621	0.59340	0.48912	Biso	1.000	H	
C5	1.0000	0.49005	0.50650	0.53535	Biso	1.000	C	
H8	1.0000	0.52725	0.52776	0.55778	Biso	1.000	H	
H9	1.0000	0.44304	0.51796	0.55238	Biso	1.000	H	
C6	1.0000	0.49991	0.44813	0.54276	Biso	1.000	C	
H10	1.0000	0.46267	0.42683	0.52041	Biso	1.000	H	
H11	1.0000	0.54687	0.43666	0.52566	Biso	1.000	H	

C7	1.0000	0.49757	0.43091	0.59981	Biso	1.000	C
H12	1.0000	0.53474	0.45232	0.62204	Biso	1.000	H
H13	1.0000	0.45060	0.44245	0.61678	Biso	1.000	H
C8	1.0000	0.50751	0.37254	0.60690	Biso	1.000	C
H14	1.0000	0.47003	0.35026	0.58611	Biso	1.000	H
H15	1.0000	0.55481	0.36020	0.59145	Biso	1.000	H
H16	1.0000	0.50555	0.36125	0.64824	Biso	1.000	H

trimethyl_ethylene; E= -82.068 eV; ZPVE= 3.583eV; frequencies =113.3, 136.0, 177.9, 257.1, 287.7, 374.5, 436.6, 514.7, 760.8, 794.8, 928.6, 940.7, 974.3, 1015.9, 1035.9, 1055.9, 1102.3, 1203.2, 1318.8, 1352.7, 1359.8, 1362.6, 1413.2, 1421.7, 1424.7, 1433.4, 1438.5, 1440.3, 1685.8, 2935.5, 2943.4, 2947.3, 2982.2, 2987.1, 2990.4, 3032.5, 3037.7, 3049.8, 3054.5 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 22.4371
_cell_length_b 22.5111
_cell_length_c 19.8886
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.46775	0.49589	0.50040	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.44216	0.53741	0.49980	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.43091	0.44045	0.50209	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.40200	0.43959	0.54695	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.45775	0.39967	0.50252	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.40093	0.43818	0.45821	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.52752	0.50082	0.49955	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.55712	0.56081	0.49782	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.52443	0.59717	0.49736	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.58574	0.56540	0.45298	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.58655	0.56700	0.54175	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.57000	0.44914	0.50023	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.54767	0.40579	0.50159	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.59993	0.45177	0.54417	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.59900	0.45010	0.45542	Biso	1.000	H

1-heptene; E= -114.966 eV; ZPVE= 5.122eV; frequencies =63.0, 75.2, 116.7, 128.4, 148.8, 245.2, 270.5, 329.8, 425.7, 448.3, 639.8, 715.0, 742.0, 823.6, 874.4, 900.6, 919.1, 940.6, 991.4, 996.0, 1024.9, 1037.4, 1056.6, 1097.5, 1156.7, 1193.5, 1212.8, 1249.7, 1270.7, 1283.0, 1288.5, 1289.5, 1327.1, 1346.5, 1357.8, 1400.9, 1424.0, 1428.7, 1435.2, 1444.8, 1446.2, 1454.9, 1654.6, 2924.4, 2925.4, 2936.9, 2943.0, 2949.6, 2954.1, 2965.7, 2977.3, 2992.6, 3020.8, 3030.9, 3037.1, 3053.2, 3141.0 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 20.6391
_cell_length_b 24.7291
_cell_length_c 24.9855
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type

_atom_site_B_iso_or_equiv						
_atom_site_type_symbol						
C1	1.0000	0.49101	0.50519	0.49173	Biso	1.000 C
H1	1.0000	0.45223	0.48391	0.46968	Biso	1.000 H
H2	1.0000	0.53699	0.49262	0.47289	Biso	1.000 H
C2	1.0000	0.48114	0.58354	0.42702	Biso	1.000 C
C3	1.0000	0.48261	0.56651	0.48455	Biso	1.000 C
H3	1.0000	0.44217	0.56591	0.40273	Biso	1.000 H
C4	1.0000	0.52333	0.61708	0.40366	Biso	1.000 C
H4	1.0000	0.52184	0.58803	0.50570	Biso	1.000 H
H5	1.0000	0.51979	0.62756	0.36133	Biso	1.000 H
H6	1.0000	0.56305	0.63541	0.42627	Biso	1.000 H
H7	1.0000	0.43679	0.57873	0.50409	Biso	1.000 H
C5	1.0000	0.49020	0.48737	0.55032	Biso	1.000 C
H8	1.0000	0.52881	0.50889	0.57237	Biso	1.000 H
H9	1.0000	0.44410	0.50011	0.56899	Biso	1.000 H
C6	1.0000	0.49890	0.42640	0.55772	Biso	1.000 C
H10	1.0000	0.46027	0.40502	0.53564	Biso	1.000 H
H11	1.0000	0.54492	0.41385	0.53891	Biso	1.000 H
C7	1.0000	0.49821	0.40885	0.61636	Biso	1.000 C
H12	1.0000	0.53739	0.42859	0.63905	Biso	1.000 H
H13	1.0000	0.45209	0.41973	0.63576	Biso	1.000 H
H14	1.0000	0.50453	0.36487	0.62046	Biso	1.000 H

2-heptene; E= -115.102 eV; ZPVE= 5.100eV; frequencies =48.1, 69.8, 105.0, 139.9, 203.8, 230.3, 234.8, 281.9, 326.6, 422.6, 524.0, 716.0, 748.2, 781.3, 869.7, 894.9, 916.6, 962.7, 993.1, 1021.5, 1025.2, 1047.1, 1073.1, 1090.4, 1142.2, 1191.6, 1221.5, 1258.2, 1279.4, 1284.8, 1294.0, 1315.7, 1338.0, 1355.3, 1357.5, 1420.2, 1421.0, 1430.3, 1435.2, 1440.9, 1444.4, 1453.0, 1684.0, 2919.2, 2931.6, 2941.1, 2942.9, 2953.5, 2955.2, 2968.3, 2988.0, 2991.5, 3021.1, 3022.8, 3026.9, 3029.2, 3042.3 cm⁻¹

data_image0

_cell_length_a	26.0675
_cell_length_b	22.5558
_cell_length_c	21.8898
_cell_angle_alpha	90
_cell_angle_beta	90
_cell_angle_gamma	90

loop_

_atom_site_label						
_atom_site_occupancy						
_atom_site_fract_x						
_atom_site_fract_y						
_atom_site_fract_z						
_atom_site_thermal_displace_type						
_atom_site_B_iso_or_equiv						
_atom_site_type_symbol						
C1	1.0000	0.57766	0.43972	0.53787	Biso	1.000 C
C2	1.0000	0.55257	0.45762	0.48779	Biso	1.000 C
C3	1.0000	0.63442	0.44369	0.54745	Biso	1.000 C
H1	1.0000	0.64375	0.47062	0.58801	Biso	1.000 H
C4	1.0000	0.49568	0.45423	0.47849	Biso	1.000 C
H2	1.0000	0.57474	0.47729	0.45020	Biso	1.000 H
H3	1.0000	0.65378	0.46356	0.50778	Biso	1.000 H
H4	1.0000	0.47781	0.43108	0.51750	Biso	1.000 H
H5	1.0000	0.48730	0.42710	0.43756	Biso	1.000 H
H6	1.0000	0.55531	0.42029	0.57539	Biso	1.000 H
C5	1.0000	0.47042	0.51524	0.47013	Biso	1.000 C
C6	1.0000	0.41263	0.51178	0.45852	Biso	1.000 C
H7	1.0000	0.39418	0.48802	0.49678	Biso	1.000 H
H8	1.0000	0.40557	0.48449	0.41748	Biso	1.000 H
H9	1.0000	0.48908	0.53870	0.43177	Biso	1.000 H
H10	1.0000	0.47785	0.54244	0.51113	Biso	1.000 H
C7	1.0000	0.38765	0.57257	0.45060	Biso	1.000 C
H11	1.0000	0.40449	0.59667	0.41170	Biso	1.000 H
H12	1.0000	0.39309	0.60022	0.49157	Biso	1.000 H
H13	1.0000	0.65133	0.39955	0.55546	Biso	1.000 H
H14	1.0000	0.34613	0.56887	0.44238	Biso	1.000 H

3-heptene; E= -115.089 eV; ZPVE= 5.112eV; frequencies =56.9, 90.2, 97.2, 122.7,
209.4, 245.5, 279.0, 306.8, 317.5, 458.2, 515.2, 723.7, 746.8, 796.9, 849.3, 876.7,
895.3, 963.4, 980.3, 1021.5, 1035.1, 1051.0, 1077.6, 1090.2, 1148.6, 1204.0,
1231.5, 1247.9, 1269.3, 1280.3, 1294.0, 1314.9, 1335.2, 1351.5, 1356.2, 1420.8,
1424.5, 1437.3, 1441.2, 1444.8, 1449.9, 1451.8, 1680.3, 2922.0, 2933.3, 2947.1,
2953.0, 2956.0, 2965.3, 2978.5, 2987.5, 3021.8, 3022.6, 3026.9, 3028.5, 3030.8,
3033.6 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 26.0949
_cell_length_b 22.5694
_cell_length_c 21.8573
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.53067 0.48410 0.53145 Biso 1.000 C
C2 1.0000 0.50519 0.50250 0.48179 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.58756 0.48781 0.54048 Biso 1.000 C
C4 1.0000 0.61275 0.42684 0.54859 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.60717 0.39929 0.50760 Biso 1.000 H
H2 1.0000 0.59604 0.40288 0.58768 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.65419 0.43104 0.55683 Biso 1.000 H
H4 1.0000 0.59578 0.51495 0.58142 Biso 1.000 H
C5 1.0000 0.44832 0.49907 0.47283 Biso 1.000 C
H5 1.0000 0.52707 0.52289 0.44433 Biso 1.000 H
H6 1.0000 0.60501 0.51117 0.50137 Biso 1.000 H
H7 1.0000 0.43067 0.47535 0.51164 Biso 1.000 H
H8 1.0000 0.43977 0.47259 0.43146 Biso 1.000 H
H9 1.0000 0.50883 0.46367 0.56892 Biso 1.000 H
C6 1.0000 0.42293 0.56014 0.46559 Biso 1.000 C
C7 1.0000 0.36523 0.55619 0.45436 Biso 1.000 C
H10 1.0000 0.34575 0.53355 0.49248 Biso 1.000 H
H11 1.0000 0.35678 0.53109 0.41232 Biso 1.000 H
H12 1.0000 0.34789 0.60037 0.44954 Biso 1.000 H
H13 1.0000 0.44144 0.58404 0.42747 Biso 1.000 H
H14 1.0000 0.43064 0.58656 0.50703 Biso 1.000 H

2-nonene; E= -148.235 eV; ZPVE= 6.609eV; frequencies =44.9, 61.4, 79.4, 104.3,
131.4, 145.2, 161.5, 206.1, 240.5, 254.6, 278.6, 297.0, 422.9, 447.5, 530.9, 715.3,
725.5, 751.9, 783.1, 858.1, 879.6, 896.9, 959.1, 964.1, 993.4, 1003.5, 1020.7,
1034.5, 1044.5, 1057.2, 1075.2, 1102.2, 1143.3, 1177.2, 1199.2, 1227.8, 1252.5,
1269.4, 1283.5, 1287.4, 1290.9, 1296.2, 1317.4, 1338.2, 1346.2, 1354.9, 1358.3,
1420.7, 1421.6, 1428.9, 1430.9, 1435.8, 1439.4, 1443.7, 1448.7, 1456.1, 1684.2,
2921.1, 2924.0, 2928.3, 2938.2, 2942.0, 2942.4, 2945.9, 2952.1, 2957.4, 2966.8,
2980.3, 2990.7, 2991.6, 3019.7, 3021.6, 3026.6, 3027.6, 3041.0 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 28.2043
_cell_length_b 23.8925
_cell_length_c 22.439
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```

_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.60923 0.41548 0.54901 Biso 1.000 C
C2      1.0000 0.58640 0.43200 0.49974 Biso 1.000 C
C3      1.0000 0.66167 0.41888 0.55871 Biso 1.000 C
H1      1.0000 0.67027 0.44469 0.59801 Biso 1.000 H
C4      1.0000 0.53386 0.42909 0.49023 Biso 1.000 C
H2      1.0000 0.60720 0.45003 0.46304 Biso 1.000 H
H3      1.0000 0.67986 0.43703 0.51989 Biso 1.000 H
H4      1.0000 0.51700 0.40791 0.52846 Biso 1.000 H
H5      1.0000 0.52619 0.40300 0.45063 Biso 1.000 H
H6      1.0000 0.58827 0.39769 0.58564 Biso 1.000 H
C5      1.0000 0.51089 0.48676 0.48095 Biso 1.000 C
C6      1.0000 0.45754 0.48383 0.46919 Biso 1.000 C
H7      1.0000 0.44002 0.46213 0.50672 Biso 1.000 H
H8      1.0000 0.45093 0.45759 0.42947 Biso 1.000 H
H9      1.0000 0.52849 0.50821 0.44335 Biso 1.000 H
H10     1.0000 0.51771 0.51288 0.52062 Biso 1.000 H
C7      1.0000 0.43448 0.54115 0.46028 Biso 1.000 C
C8      1.0000 0.38108 0.53835 0.44870 Biso 1.000 C
H11     1.0000 0.36373 0.51665 0.48630 Biso 1.000 H
H12     1.0000 0.37449 0.51207 0.40907 Biso 1.000 H
H13     1.0000 0.45194 0.56285 0.42272 Biso 1.000 H
H14     1.0000 0.44116 0.56739 0.49997 Biso 1.000 H
H15     1.0000 0.67701 0.37716 0.56720 Biso 1.000 H
C9      1.0000 0.35839 0.59584 0.43984 Biso 1.000 C
H16     1.0000 0.37427 0.61787 0.40160 Biso 1.000 H
H17     1.0000 0.36343 0.62249 0.47940 Biso 1.000 H
H18     1.0000 0.32003 0.59258 0.43161 Biso 1.000 H

```

```

-----
# 1-pentene; E= -81.832 eV; ZPVE= 3.613eV; frequencies =79.2, 98.4, 227.1, 240.8,
374.8, 425.3, 625.8, 728.3, 846.9, 864.8, 898.6, 934.5, 990.2, 1005.4, 1037.6,
1078.9, 1157.3, 1220.5, 1246.0, 1276.1, 1288.1, 1324.4, 1355.1, 1399.8, 1424.4,
1437.0, 1443.0, 1451.2, 1654.3, 2924.4, 2946.9, 2954.2, 2967.4, 2988.9, 3022.9,
3031.0, 3037.6, 3053.7, 3140.9 cm^-1
-----

```

```

data_image0
_cell_length_a      20.6281
_cell_length_b      22.7354
_cell_length_c      23.3577
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.49245 0.46404 0.52718 Biso 1.000 C
H1      1.0000 0.45053 0.44249 0.50660 Biso 1.000 H
H2      1.0000 0.53560 0.44917 0.50335 Biso 1.000 H
C2      1.0000 0.47905 0.54998 0.45929 Biso 1.000 C
C3      1.0000 0.48596 0.53105 0.52043 Biso 1.000 C
H3      1.0000 0.43685 0.53225 0.43644 Biso 1.000 H
C4      1.0000 0.52010 0.58510 0.43117 Biso 1.000 C
H4      1.0000 0.52822 0.55302 0.53998 Biso 1.000 H
H5      1.0000 0.51251 0.59683 0.38635 Biso 1.000 H
H6      1.0000 0.56289 0.60357 0.45219 Biso 1.000 H
H7      1.0000 0.44295 0.54563 0.54492 Biso 1.000 H
C5      1.0000 0.49716 0.44474 0.58970 Biso 1.000 C
H8      1.0000 0.53949 0.46474 0.61085 Biso 1.000 H
H9      1.0000 0.45376 0.45802 0.61395 Biso 1.000 H
H10     1.0000 0.50193 0.39671 0.59345 Biso 1.000 H

```

24-dimethyl-2-pentene; E= -115.222 eV; ZPVE= 5.077eV; frequencies =45.7, 107.9,
144.2, 189.3, 199.7, 218.9, 246.4, 295.0, 385.8, 389.3, 434.8, 486.9, 506.6, 795.0,
832.4, 849.0, 896.8, 925.9, 935.3, 937.7, 973.2, 1047.9, 1055.5, 1089.0, 1104.3,
1158.4, 1201.6, 1275.9, 1282.2, 1337.2, 1337.3, 1351.0, 1359.3, 1362.9, 1412.4,
1426.6, 1429.8, 1430.9, 1432.7, 1437.4, 1445.3, 1453.3, 1680.5, 2936.3, 2944.7,
2948.2, 2950.9, 2961.3, 2983.8, 2988.5, 3015.6, 3016.7, 3023.0, 3033.4, 3035.2,
3039.0, 3054.1 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 23.6619
_cell_length_b 22.3712
_cell_length_c 23.228
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.53669 0.50670 0.52676 Biso 1.000 C
C2 1.0000 0.50889 0.50344 0.47632 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.60026 0.50909 0.52853 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.61502 0.55014 0.55019 Biso 1.000 H
C4 1.0000 0.44626 0.50066 0.46558 Biso 1.000 C
H2 1.0000 0.53458 0.50260 0.43688 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.61888 0.50780 0.48520 Biso 1.000 H
C5 1.0000 0.42687 0.55497 0.43015 Biso 1.000 C
H4 1.0000 0.44871 0.55618 0.38824 Biso 1.000 H
H5 1.0000 0.43621 0.59708 0.45266 Biso 1.000 H
H6 1.0000 0.61758 0.47133 0.55352 Biso 1.000 H
C6 1.0000 0.50894 0.50830 0.58502 Biso 1.000 C
H7 1.0000 0.46264 0.50654 0.58314 Biso 1.000 H
H8 1.0000 0.52100 0.54929 0.60843 Biso 1.000 H
H9 1.0000 0.52356 0.47053 0.61171 Biso 1.000 H
H10 1.0000 0.38111 0.55311 0.42170 Biso 1.000 H
C7 1.0000 0.43061 0.44215 0.43474 Biso 1.000 C
H11 1.0000 0.45260 0.43889 0.39301 Biso 1.000 H
H12 1.0000 0.38486 0.43989 0.42629 Biso 1.000 H
H13 1.0000 0.44261 0.40294 0.46055 Biso 1.000 H
H14 1.0000 0.42362 0.50163 0.50707 Biso 1.000 H

2-methyl-12-butene; E= -81.965 eV; ZPVE= 3.603eV; frequencies =71.0, 173.6,
217.2, 254.2, 389.5, 424.4, 522.7, 699.0, 762.9, 779.3, 876.3, 922.7, 964.8, 999.2,
1013.3, 1057.5, 1075.7, 1229.0, 1268.6, 1299.2, 1352.3, 1353.2, 1393.5, 1416.7,
1429.4, 1439.5, 1446.3, 1454.2, 1657.7, 2933.0, 2947.8, 2963.0, 2991.4, 2998.6,
3034.7, 3038.0, 3044.6, 3054.2, 3137.5 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 23.1547
_cell_length_b 22.2266
_cell_length_c 21.3167
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv

_atom_site_type_symbol							
C1	1.0000	0.46279	0.50101	0.51187	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.44146	0.54363	0.49929	Biso	1.000	H
C2	1.0000	0.43653	0.44959	0.47310	Biso	1.000	C
H2	1.0000	0.45422	0.40555	0.48667	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.44509	0.45607	0.42278	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.38945	0.44760	0.47973	Biso	1.000	H
C3	1.0000	0.52727	0.50806	0.50396	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.55020	0.55738	0.47765	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.45328	0.49292	0.56200	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.59683	0.56255	0.47196	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.52300	0.59426	0.46103	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.56433	0.45714	0.52724	Biso	1.000	C
H8	1.0000	0.55550	0.44771	0.57715	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.61053	0.46724	0.52216	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.55536	0.41511	0.50158	Biso	1.000	H

2-pentene; E= -81.962 eV; ZPVE= 3.598eV; frequencies =79.0, 165.0, 199.1, 210.3, 294.6, 398.1, 480.1, 740.9, 782.5, 861.0, 931.9, 956.9, 1001.9, 1022.8, 1048.4, 1080.2, 1143.3, 1227.3, 1267.9, 1289.1, 1314.4, 1350.2, 1357.6, 1421.3, 1424.9, 1437.4, 1441.0, 1449.3, 1683.8, 2931.0, 2944.4, 2957.7, 2978.5, 2992.6, 3020.8, 3024.5, 3029.3, 3035.3, 3041.2 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 23.8405
_cell_length_b 21.6663
_cell_length_c 21.52
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol

C1	1.0000	0.48867	0.51035	0.52409	Biso	1.000	C
C2	1.0000	0.46278	0.53750	0.47612	Biso	1.000	C
C3	1.0000	0.55071	0.51072	0.53554	Biso	1.000	C
C4	1.0000	0.57643	0.44577	0.53526	Biso	1.000	C
H1	1.0000	0.57074	0.42348	0.48976	Biso	1.000	H
H2	1.0000	0.55647	0.41606	0.57040	Biso	1.000	H
H3	1.0000	0.62164	0.44733	0.54542	Biso	1.000	H
H4	1.0000	0.55927	0.53243	0.58105	Biso	1.000	H
C5	1.0000	0.40089	0.53679	0.46445	Biso	1.000	C
H5	1.0000	0.48847	0.56269	0.44219	Biso	1.000	H
H6	1.0000	0.57150	0.53980	0.50035	Biso	1.000	H
H7	1.0000	0.37839	0.51066	0.50049	Biso	1.000	H
H8	1.0000	0.39099	0.51592	0.41900	Biso	1.000	H
H9	1.0000	0.38355	0.58398	0.46334	Biso	1.000	H
H10	1.0000	0.46317	0.48487	0.55805	Biso	1.000	H

1-hexene; E= -98.399 eV; ZPVE= 4.367eV; frequencies =69.9, 85.5, 127.9, 175.3, 241.0, 349.7, 351.1, 450.8, 634.0, 719.5, 777.9, 881.8, 897.5, 901.2, 921.3, 993.0, 1007.7, 1022.9, 1050.7, 1091.6, 1157.3, 1204.4, 1226.0, 1267.5, 1278.4, 1289.6, 1304.2, 1340.0, 1358.7, 1400.7, 1425.0, 1432.3, 1442.3, 1445.1, 1454.4, 1653.0, 2924.4, 2933.9, 2943.0, 2954.0, 2958.1, 2972.4, 2991.3, 3022.0, 3029.2, 3038.4, 3054.4, 3140.3 cm⁻¹

data_image0
_cell_length_a 20.5667
_cell_length_b 23.7745
_cell_length_c 23.9664
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90


```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.49340  0.48507  0.51256  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.45276  0.46331  0.49149  Biso  1.000  H
H2      1.0000 0.53794  0.47197  0.49037  Biso  1.000  H
C2      1.0000 0.47916  0.56730  0.44659  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.48487  0.54896  0.50620  Biso  1.000  C
H3      1.0000 0.43816  0.54943  0.42324  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.51994  0.60218  0.42036  Biso  1.000  C
H4      1.0000 0.52590  0.57094  0.52632  Biso  1.000  H
H5      1.0000 0.51329  0.61353  0.37660  Biso  1.000  H
H6      1.0000 0.56158  0.62081  0.44193  Biso  1.000  H
H7      1.0000 0.44052  0.56165  0.52910  Biso  1.000  H
C5      1.0000 0.49692  0.46591  0.57340  Biso  1.000  C
H8      1.0000 0.53735  0.48802  0.59435  Biso  1.000  H
H9      1.0000 0.45224  0.47925  0.59527  Biso  1.000  H
C6      1.0000 0.50580  0.40240  0.57958  Biso  1.000  C
H10     1.0000 0.46519  0.37933  0.56023  Biso  1.000  H
H11     1.0000 0.55093  0.38820  0.55922  Biso  1.000  H
H12     1.0000 0.50825  0.38974  0.62369  Biso  1.000  H

```

```

# 2-hexene; E= -98.535 eV; ZPVE= 4.355eV; frequencies =75.6, 96.8, 143.0, 211.7,
242.1, 279.5, 304.3, 381.4, 521.7, 723.1, 755.1, 847.1, 879.5, 901.2, 960.7,
1009.6, 1022.0, 1031.3, 1074.1, 1078.1, 1141.8, 1207.7, 1243.1, 1272.6, 1290.1,
1297.1, 1329.2, 1355.3, 1356.6, 1421.3, 1422.2, 1436.8, 1437.7, 1443.0, 1451.7,
1684.2, 2921.6, 2944.6, 2946.8, 2953.4, 2964.8, 2987.0, 2993.4, 3021.5, 3022.4,
3027.2, 3030.4, 3041.6 cm^-1

```

```

data_image0
_cell_length_a      24.8483
_cell_length_b      21.4157
_cell_length_c      21.8356
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.55707  0.46148  0.53662  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.53091  0.47902  0.48584  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.61648  0.46683  0.54673  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.62560  0.49602  0.58703  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.47136  0.47431  0.47592  Biso  1.000  C
H2      1.0000 0.55423  0.49950  0.44809  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.63685  0.48742  0.50682  Biso  1.000  H
H4      1.0000 0.45252  0.45030  0.51519  Biso  1.000  H
H5      1.0000 0.46323  0.44495  0.43525  Biso  1.000  H
H6      1.0000 0.53358  0.44126  0.57432  Biso  1.000  H
C5      1.0000 0.44417  0.53803  0.46622  Biso  1.000  C
C6      1.0000 0.38378  0.53275  0.45408  Biso  1.000  C
H7      1.0000 0.36301  0.50991  0.49262  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.37570  0.50483  0.41272  Biso  1.000  H
H9      1.0000 0.46389  0.56222  0.42763  Biso  1.000  H
H10     1.0000 0.45145  0.56731  0.50695  Biso  1.000  H
H11     1.0000 0.63473  0.42077  0.55570  Biso  1.000  H

```

```

H12      1.0000 0.36523 0.57892 0.44748 Biso 1.000 H
-----
# 3-methyl-2-hexene; E= -115.174 eV; ZPVE= 5.097eV; frequencies =67.7, 91.9, 109.1,
168.5, 185.1, 237.1, 253.7, 268.4, 347.9, 401.3, 514.2, 545.9, 726.9, 775.8, 803.7,
850.9, 878.7, 943.6, 994.6, 1012.8, 1016.9, 1033.0, 1050.5, 1080.8, 1110.1, 1187.8,
1228.9, 1254.9, 1284.0, 1318.6, 1334.5, 1352.7, 1355.9, 1358.6, 1417.3, 1422.8,
1424.0, 1437.6, 1438.6, 1443.3, 1444.8, 1456.7, 1680.4, 2935.8, 2940.4, 2944.4,
2952.9, 2955.5, 2974.8, 2986.2, 2987.5, 2996.3, 3023.3, 3029.8, 3031.2, 3038.0,
3049.6 cm^-1
-----
data_image0
_cell_length_a      27.2056
_cell_length_b      27.7943
_cell_length_c      23.2496
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   120

_symmetry_space_group_name_H-M  "P 1"
_symmetry_int_tables_number     1

loop_
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
  'x, y, z'

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.51538 0.48748 0.51507 Biso 1.000 C
H1      1.0000 0.51060 0.47791 0.46872 Biso 1.000 H
H2      1.0000 0.53201 0.46206 0.53422 Biso 1.000 H
C2      1.0000 0.56776 0.58872 0.48742 Biso 1.000 C
C3      1.0000 0.55736 0.54819 0.52544 Biso 1.000 C
C4      1.0000 0.58678 0.56143 0.58291 Biso 1.000 C
H3      1.0000 0.59859 0.63144 0.50003 Biso 1.000 H
H4      1.0000 0.61467 0.60635 0.58908 Biso 1.000 H
H5      1.0000 0.61263 0.54117 0.58743 Biso 1.000 H
H6      1.0000 0.55590 0.54572 0.61859 Biso 1.000 H
C5      1.0000 0.45639 0.46875 0.54078 Biso 1.000 C
H7      1.0000 0.43929 0.49339 0.52095 Biso 1.000 H
H8      1.0000 0.46068 0.47878 0.58707 Biso 1.000 H
C6      1.0000 0.41500 0.40681 0.53219 Biso 1.000 C
H9      1.0000 0.43073 0.38142 0.55283 Biso 1.000 H
H10     1.0000 0.40904 0.39595 0.48616 Biso 1.000 H
H11     1.0000 0.37303 0.39435 0.55056 Biso 1.000 H
C7      1.0000 0.54180 0.58281 0.42917 Biso 1.000 C
H12     1.0000 0.51796 0.60527 0.42702 Biso 1.000 H
H13     1.0000 0.51240 0.53938 0.41733 Biso 1.000 H
H14     1.0000 0.57477 0.60111 0.39557 Biso 1.000 H
-----
# 2-methyl-2-pentene; E= -98.623 eV; ZPVE= 4.341eV; frequencies =41.9, 131.8,
154.8, 204.4, 211.0, 302.9, 352.3, 401.0, 469.7, 501.9, 735.9, 807.2, 824.8, 898.0,
929.2, 973.7, 996.0, 1045.6, 1053.6, 1058.2, 1113.7, 1195.6, 1244.4, 1281.5,
1333.5, 1349.0, 1355.7, 1362.5, 1413.2, 1419.6, 1432.5, 1433.7, 1440.4, 1441.7,
1449.7, 1682.1, 2935.1, 2935.9, 2944.3, 2954.6, 2982.5, 2988.1, 2993.1, 3025.5,
3030.3, 3033.1, 3038.0, 3054.2 cm^-1
-----
data_image0
_cell_length_a      23.8687
_cell_length_b      21.825
_cell_length_c      22.5916
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.53841  0.48543  0.50774  Biso  1.000  C
C2      1.0000 0.51118  0.50108  0.45780  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.60074  0.49440  0.51327  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.61090  0.52477  0.55085  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.44981  0.49617  0.44435  Biso  1.000  C
H2      1.0000 0.53642  0.52104  0.42202  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.61897  0.51434  0.47297  Biso  1.000  H
H4      1.0000 0.42749  0.47153  0.47972  Biso  1.000  H
H5      1.0000 0.44427  0.46844  0.40383  Biso  1.000  H
C5      1.0000 0.42239  0.55904  0.43460  Biso  1.000  C
H6      1.0000 0.44355  0.58447  0.39893  Biso  1.000  H
H7      1.0000 0.42496  0.58712  0.47497  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.62206  0.45046  0.52215  Biso  1.000  H
C6      1.0000 0.51106  0.45822  0.56166  Biso  1.000  C
H9      1.0000 0.46561  0.45245  0.55707  Biso  1.000  H
H10     1.0000 0.51881  0.48729  0.60078  Biso  1.000  H
H11     1.0000 0.52934  0.41301  0.57192  Biso  1.000  H
H12     1.0000 0.37795  0.55440  0.42240  Biso  1.000  H

```

```

-----
# 1-butene; E= -65.261 eV; ZPVE= 2.861eV; frequencies =105.5, 215.1, 307.2, 424.1,
634.6, 772.3, 843.2, 899.3, 955.5, 990.7, 1011.1, 1054.5, 1161.8, 1244.0, 1275.5,
1293.9, 1351.6, 1402.3, 1425.5, 1440.3, 1450.0, 1655.0, 2934.5, 2959.2, 2982.4,
3029.9, 3037.1, 3038.3, 3052.2, 3138.8 cm^-1
-----

```

```

data_image0
_cell_length_a      20.6453
_cell_length_b      21.7209
_cell_length_c      22.2777
_cell_angle_alpha   90
_cell_angle_beta    90
_cell_angle_gamma   90

```

```

loop_
  _atom_site_label
  _atom_site_occupancy
  _atom_site_fract_x
  _atom_site_fract_y
  _atom_site_fract_z
  _atom_site_thermal_displace_type
  _atom_site_B_iso_or_equiv
  _atom_site_type_symbol
C1      1.0000 0.49020  0.43754  0.54816  Biso  1.000  C
H1      1.0000 0.44775  0.41506  0.52779  Biso  1.000  H
H2      1.0000 0.53353  0.42046  0.52474  Biso  1.000  H
H3      1.0000 0.49298  0.42272  0.59530  Biso  1.000  H
C2      1.0000 0.47882  0.52964  0.47980  Biso  1.000  C
C3      1.0000 0.48527  0.50788  0.54339  Biso  1.000  C
H4      1.0000 0.43648  0.51229  0.45524  Biso  1.000  H
C4      1.0000 0.52024  0.56698  0.45153  Biso  1.000  C
H5      1.0000 0.52790  0.52964  0.56434  Biso  1.000  H
H6      1.0000 0.51291  0.58092  0.40494  Biso  1.000  H
H7      1.0000 0.56320  0.58509  0.47423  Biso  1.000  H
H8      1.0000 0.44259  0.52342  0.56923  Biso  1.000  H

```

```

-----
# iso-butene; E= -65.439 eV; ZPVE= 2.840eV; frequencies =163.9, 198.4, 371.4,
426.2, 428.7, 676.4, 809.3, 872.3, 927.8, 956.9, 979.2, 1043.9, 1058.6, 1260.4,
1351.8, 1354.2, 1388.0, 1411.4, 1424.3, 1430.8, 1445.2, 1666.0, 2940.8, 2945.5,
2991.6, 2992.8, 3042.4, 3044.5, 3058.6, 3141.7 cm^-1
-----

```

```

data_image0

```

_cell_length_a 19.9014
_cell_length_b 21.9543
_cell_length_c 22.1438
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90

loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
C1 1.0000 0.50296 0.50667 0.50216 Biso 1.000 C
H1 1.0000 0.54730 0.58947 0.53640 Biso 1.000 H
C2 1.0000 0.50425 0.55921 0.54571 Biso 1.000 C
C3 1.0000 0.49844 0.52347 0.43645 Biso 1.000 C
H2 1.0000 0.54130 0.55232 0.42301 Biso 1.000 H
H3 1.0000 0.49767 0.48310 0.40714 Biso 1.000 H
H4 1.0000 0.45273 0.55043 0.42744 Biso 1.000 H
H5 1.0000 0.50762 0.54388 0.59284 Biso 1.000 H
C4 1.0000 0.50567 0.44861 0.52073 Biso 1.000 C
H6 1.0000 0.50895 0.43698 0.56859 Biso 1.000 H
H7 1.0000 0.50467 0.41082 0.48866 Biso 1.000 H
H8 1.0000 0.45874 0.58750 0.54088 Biso 1.000 H